

材料基因组——材料研发新模式

汪洪¹, 向勇², 项晓东^{1,2}, 陈立泉³

1. 中国建筑材料科学研究总院, 北京 100024
2. 电子科技大学能源科学与工程学院, 成都 611731
3. 中国科学院物理研究所, 北京 100190

摘要 依赖于科学直觉与试错的传统材料研究方法日益成为社会发展与技术进步的瓶颈。革新材料研发方法、加速材料从研究到应用的进程成为世界各国共同的需求。作为“先进制造伙伴计划”(Advanced Manufacturing Partnership, AMP)的重要组成部分, 美国总统奥巴马在2011年6月宣布了“材料基因组计划”(Materials Genome Initiative, MGI), 通过整合材料计算、高通量实验和数据库, 全面提高先进材料从发现到应用的速度, 降低成本。MGI提出了材料研发的崭新模式, 为美国发展高端制造业, 保持并强化其在核心科技领域的优势奠定了创新基础。中国材料科学界在1999年6月召开主题为“发现和优化新材料的集成组合方法”的第118次香山科学会议, 寻找加速发现新材料的有效途径。2011年12月, 中国科学院和中国工程院主办主题为“材料科学系统工程”的第S14次香山科学会议, 研究中国应对MGI的策略, 并在随后3年中, 多次组织以材料基因组计划为主题的研讨会、报告会, 使得中国材料界对材料基因组技术的认识不断深入, 形成基本共识。2014年, 中国科学院和中国工程院分别向国务院提交咨询报告, 建议尽快启动实施中国材料基因组计划。本文简要介绍材料基因组计划的主要内容、技术内涵、科学本质、国内外最新动向及其未来发展趋势, 并根据中国的实际需求特点与现有条件, 对实施中国版材料基因组计划的发展战略、技术路线、政策措施等提出建议。

关键词 材料基因组; 材料基因组计划; 高通量材料实验; 高通量材料计算; 材料数据库

中图分类号 TD324

文献标志码 A

doi 10.3981/j.issn.1000-7857.2015.10.001

Materials genome enables research and development revolution

WANG Hong¹, XIANG Yong², XIANG Xiaodong^{1,2}, CHEN Liqun³

1. China Building Materials Academy, Beijing 100024, China
2. School of Energy Science and Engineering, University of Electronic Science and Technology of China, Chengdu 611731, China
3. Institute of Physics, Chinese Academy of Sciences, Beijing 100190, China

Abstract Materials research and development today still depends primarily on scientific intuitions, experiences, as well as trial-and-error experiments. This process is time-consuming and costly, and has increasingly become the bottleneck for technological and social advancement. In June 2011, President Obama of the United State announced Materials Genome Initiative (MGI) as part of Advanced Manufacturing Partnership, aiming to accelerate process from materials discovery, development, manufacturing, and deployment process and cut the cost at the same time by integrating computational materials design, high-throughput experimentation, and data management. China began to show great interest in more efficient materials research and development as early as June 1999 by organizing the 118th Xiangshan Science Forum on Integrated Combinatorial Approaches for Materials Discovery and Optimization. In December 2011, The S14 Xiangshan Science Forum on System Engineering in Materials Science was jointly sponsored by Chinese Academy of Sciences (CAS) and Chinese Academy of Engineering (CAE), in response to the MGI. In addition, a series of conferences and forums were held across the nation from 2012 to 2014, to discuss MGI and China's strategy. A consensus has been reached among Chinese materials community including universities, industry, and research institutions. Both CAS and CAE submitted Strategic

收稿日期: 2015-04-02; 修回日期: 2015-04-20

基金项目: 国家高技术研究发展计划(863计划)项目(SS2015AA034204)

作者简介: 汪洪, 教授, 研究方向为建筑节能与新能源材料, 电子邮箱: hongwang2@cbmmail.com.cn

引用格式: 汪洪, 向勇, 项晓东, 等. 材料基因组——材料研发新模式[J]. 科技导报, 2015, 33(10): 13-19.

Consultation Report on Materials Genome to the State Council of China in 2014, respectively, proposing to launch China's Materials Genome Program as soon as possible. In this article, we introduce the basic concepts of MGI, review the global progress and trends, and make recommendations on the national policy, strategy and technological pathways of China's Materials Genome Program.

Keywords materials genomics; Materials Genome Initiative; high-throughput experimentation; computational materials design; materials data management

材料是社会发展的物质基础,材料创新是各种颠覆性技术革命的核心,以至于人类文明的进程经常以所使用的材料的类型作为一个时代的标志,如石器时代、青铜器时代等。新材料技术是体现一个国家科技发展水平的关键标志之一。

1 材料研发新模式

1.1 变革传统材料研发模式是国际新材料研究的趋势

长期以来,欧美发达国家在新材料领域从未停止发展的脚步,一直处于领先地位。进入21世纪以来,他们越发地意识到依赖于科学直觉与试错的传统材料研究方法,已跟不上当今技术快速发展的需求,成为限制社会进步的瓶颈。革新材料研发方法,加速材料从研究到应用的进程成为各国共同的需求。作为美国政府“先进制造伙伴计划”(advanced manufacturing partnership, AMP)的重要组成部分,美国总统奥巴马在2011年6月提出了“材料基因组计划”(materials genome initiative, MGI),其目的是利用近年来在材料模拟计算、高通量实验和数据挖掘方面取得的突破,将材料从发现到应用的速度至少提高一倍,成本至少降低一半^[1],发展以先进材料为基础的高端制造业^[2-4],从而继续保持美国在核心科技领域的优势。MGI展现了未来先进材料开发的崭新模式。材料基因组(materials genome)这个名词的出现有感于人类基因组计划的成功^[5],但迄今为止并无特定的科学定义,仅作为这种新型材料研发模式的代称。

根据MGI白皮书^[2],在过去的数十年中,美国持续对于先进材料实验技术和方法的研究作了巨大投入,发展出一系列先进材料研发实验工具,包括高通量材料制备和表征设备与技术。MGI意在对美国已有的材料研究设备和力量进行有效整合,充分利用超级计算机和大数据技术,对材料研究的模式进行全面改革,使这些先进的实验工具发挥更大的效能。MGI的具体措施包括:1) 发展计算工具和方法,减少耗时费力的实验,加快材料设计和筛选;2) 发展和推广高通量

材料实验工具,对候选材料进行筛选和验证,快速、大量、准确地取得材料计算所需的关键数据;3) 发展和完善材料数据库/信息学工具,有效管理材料从发现到应用全过程数据链;4) 改革多年来材料界形成的一家一户式的封闭型工作方式,培育开放、协作的新型合作模式。MGI的终极目标是通过理论模拟和计算完成先进材料的“按需设计”并实现全程数字化制造。

MGI是近年来美国发展先进制造技术数字化、智能化趋势在材料科学与工程上的具体体现。2008年,美国国家研究理事会出版的一份报告^[6]中,提出要建立一门新学科——集成计算材料工程(integrated computational material engineering, ICME),通过将材料计算工具与其他工程领域中计算与分析工具获得的信息相集成,使材料预测进入产品设计流程,从而解决材料开发周期日益赶不上产品开发周期的矛盾。而MGI将ICME的理念扩展到了整个材料科学、技术与工程链条,贯穿于从新材料发现到应用的全部过程。MGI力图打破材料科学与材料工程长期脱节的现状,改变材料行业数据信息相互封闭的传统。这些传统文化被视为造成新材料从发现到应用耗时冗长的重要原因。应该说,MGI在文化转变方面所面临的挑战丝毫不亚于技术层面。

美国MGI的核心内容是由数家联邦机构牵头构建新材料创新基础设施,包括高通量材料计算平台、高通量材料制备与检测平台和材料数据库。将这些基础设施与现有的集成计算材料工程无缝衔接,实现多学科交叉和融合,从而加速新材料从发现到应用的进程。MGI实施3年以来,获得了美国材料界的积极响应,取得了较快的进展。截至2014年6月,美国联邦政府用于材料创新基础设施建设的财政投入累计已达2.5亿美元,地方政府、大学、企业及其他非政府机构累计资金投入已超过3亿美元,新建MGI协同创新中心逾20个,大型协同创新合作计划近10项^[7]。在2014年12月出版的一份报告^[7]中,白宫正式将MGI定义为“战略计划”,充分表明MGI在美国国家发展战略中的地位及作用(图1)^[2]。

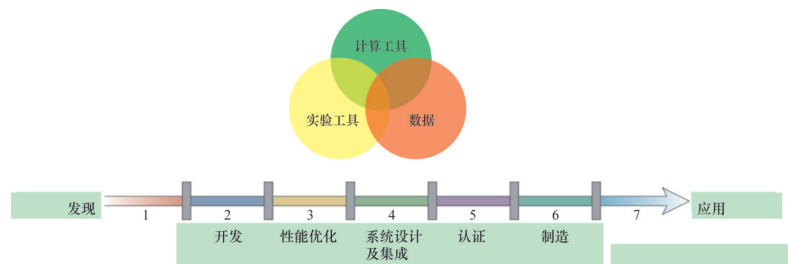


图1 材料基因组技术三要素协同融合贯穿材料从发现到应用的各个环节

Fig. 1 Materials genome combines three collaborative efforts from materials discovery to development

在美国启动MGI的同时,欧盟以轻量、高温、高温超导、热电、磁性及热磁、和相变记忆存储六类高性能合金材料需求为牵引,于2011年启动了第7框架项目“加速冶金学”(accelerated metallurgy, ACCMET)计划。考虑到计算材料学目前尚不具有预测所有材料性能的能力,项目组织了包括材料需求与制造企业、仪器设备商、政府机构、大学、大科学装置(如欧洲同步辐射光源 ESRF)等几十家单位参与,共同开发以激光沉积技术为基础的适用于块体合金材料研发的高通量组合材料制备与表征方法,对数以万计的合金成份进行自动化筛选、优化与数据积累,旨在将合金配方研发周期由传统冶金学方法所需的5~6年缩短至1年以内^[8,9]。2012年,欧洲科学基金会又推出总投资超过20亿欧元的2012—2022欧洲冶金复兴计划^[9],将高通量合成与组合筛选技术列为其重要内容,以加速发现与应用高性能合金及新一代其他材料。

日本等国也启动了类似的科学计划。如日本计划建立玻璃、陶瓷、合金钢等领域材料数据库、知识库^[10,11],还尝试通过专家系统的建立促进其协同创新能力。俄罗斯联邦纳米技术研发中心 Ulnanotech,通过引进美国 Intermolecular 公司完整的高通量研发技术平台^[12],较快地完成了其高通量材料研发能力的建设。

1.2 中国新材料领域面临形势严峻

中国的新材料产业虽然在多年攻关中取得了令人瞩目的成绩,但是起步较晚、起点较低,与先进国家相比,整体水平仍存在较大差距。一些急需的新材料找不到,能找到的又做不出,能做出的又做不好,核心竞争力令人堪忧。国家相关机构对30余家大型骨干企业调查结果显示:在所需的130种关键材料中有32%国内完全空白,54%国内虽能生产,但性能稳定性较差,只有14%左右国内可以完全自给^[1]。关键新材料的缺乏长期成为中国国防、能源、信息、环境、交通、医药等重大战略领域发展的软肋,对国家安全和社会经济发展构成巨大风险。例如,中国高性能航空发动机的发展受到高温合金材料的严重制约,大飞机、大型舰艇和尖端武器的制造依赖特种钢材与合金的进口,在新能源领域,功率电子器件、太阳能电池和储能等先进技术的发展也受限于关键核心材料。中国2012年在进口半导体芯片上的费用接近2000亿美元,超过进口石油的花费近一倍。

改革开放30年来,中国在很多行业广泛采取了“引进—消化吸收—再创新”的策略,使得一些通用及民用技术在短期内上了一个台阶,较快地缩短了与国外的差距。而那些国家安全和经济发展所亟需的核心材料仍长期受到西方发达国家的封锁,无法通过市场渠道来获得。英国《经济学人》杂志在一篇文章中提到:“在有些情况下,西方公司会把一部分生产转包给正试图提升自己工业能力的国家的公司;但有些东西是不可能共享的,因为它们对于维持一个产品的竞争优势太重要了。”^[13]事实证明,要打破核心技术封锁,只能自力更生,自行研发。然而现代技术发展具有“一代材料,一代产业”的特点,材料的每一次更新换代,都会对原先的制造体

系,包括设备、技术、标准等造成颠覆性的改变。因此如果按部就班地发展,从零起步,即使一切顺利,经过10~20年即便研发出了某种高端材料并达到了应用水平,那时国外很可能已经发展出更先进的材料。中国的材料可能依然落后,不得不进入新一轮的追赶。

1.3 中国开展材料基因组计划迫在眉睫

在此国内外背景之下,中国材料界面临双重挑战:一是如何在较短的时间内对先进国家进行追赶,缩小现有差距;二是在欧美突然发力加速的情况下,不被落下更远。因此尽快启动中国版的“材料基因组计划”非常有必要,变革以“炒菜法(试错法)”为基础的材料研发传统模式,实现新材料领域的超常规速度发展。

实际上,中国材料界一直在关注加速材料研发的新方法。1999年6月,召开了主题为“发现和优化新材料的集成组合方法”的第118次香山科学会议。此后,国内数家单位也尝试了高通量组合材料实验研究工作,但由于多种原因,并未得到普及开展。美国宣布材料基因组计划后,中国科学家立即敏锐地捕捉到该计划所释放出的重要信息。在多位专家学者建议下,中国科学院和中国工程院于2011年12月21—23日在北京联合主办了以“材料科学系统工程”为主题的香山科学会议。中国工程院与中国科学院分别设立了重大咨询项目,并在2014年向国务院提交了各自的咨询报告。自2012—2014年的3年中,中国工程院、中国科学院,中国硅酸盐学会,许多大学、研究所等单位组织了多次以材料基因组计划为主题的研讨会、报告会。经过充分广泛的研讨咨询活动,中国材料界对材料基因组技术的认识不断深入,已形成基本共识。

材料基因组技术是材料科学技术的一次飞跃,是新材料研发的“加速器”。在中国实施材料基因组计划,就是要根据国情构建将先进实验工具、模型计算手段与数据无缝衔接的新型材料创新技术框架体系,用高通量并行迭代替代传统试错法中的多次顺序迭代,逐步由“经验指导实验”向“理论预测、实验验证”的材料研究新模式转变,以加速中国关键新材料的“发现—开发—生产—应用”进程。这是中国新材料产业实现跨越式发展的必然选择。也只有这样,才能实现习近平主席提出的“推动中国制造向中国创造转变、中国速度向中国质量转变、中国产品向中国品牌转变”的目标。

实施中国版材料基因组计划为中国材料领域快速追赶并超越国际先进水平提供了机遇。抓住了这个机遇,就有望在短期内突破一系列国防和国民经济发展亟需解决的材料技术瓶颈,较快地降低中国关键新材料的对外依存度。随着计划的实施,中国先进材料科学技术将日趋成熟,为中国中长期实现在新材料产业领域及其支撑的先进制造业跨越式发展,赶超美、欧等发达国家提供坚实基础和有力支撑。如果把握不住这一机遇,就可能会被甩得更远。在材料基因组技术方面,欧美各国已经走在了前面。因此,尽快制定并实施中国版材料基因组计划不仅极其必要,而且异常紧迫。

2 材料基因组计划的内容

2.1 材料基因组计划的实质

材料基因组是以市场与应用为导向的材料研发新理念,根本上是要通过“多学科融合”实现“高通量材料设计与试验”,其实质在于“加速”。值得强调指出的是材料基因组理念的运用范畴不仅适用于材料的发现与性能优化,也适用于制造工艺开发和产品设计阶段,并需要在材料“发现—研发—生产—应用”的过程中有意识地强化各阶段之间的信息交流与协同,以总体缩短时间,降低研发总成本。

2.2 材料基因组计划的三要素及其协同关系

材料基因组技术包括高通量材料计算、高通量材料实验和材料数据库3个要素,每一要素都可以在特定阶段起到加速材料研发过程的作用,应根据实际情况不拘一格,灵活地组合使用,才能得到最好的效果。它们之间的协同关系如图2所示。

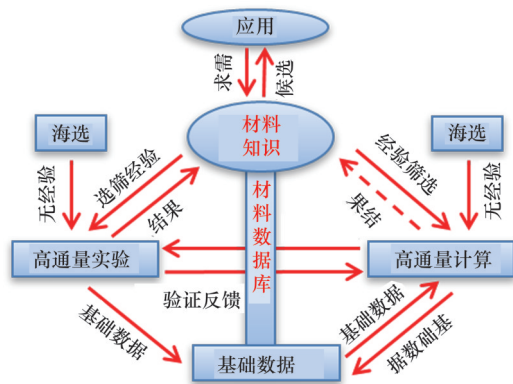


图2 材料基因组技术三要素间的协同工作流程

Fig. 2 Workflow showing collaboration of the three elements in materials genome

以材料筛选过程为例,材料基因组技术面向应用需求,以已有的材料知识为起点,可通过高通量材料实验和高通量材料计算两条路径来丰富材料知识,积累材料基础数据。一般而言,无论是实验还是计算,其筛选过程是在既有材料知识(理论或经验)指导下进行。实验获得的结果可以直接丰富材料知识,而计算获得的结果在现阶段通常还需要经过实验验证才能进入材料知识库。计算结果对实验设计具有指导作用,有助于大大降低实验工作量,提高实验效率。实验获得的基础数据可以验证计算的结果,有助于提高计算的准确性,丰富材料数据库。三要素协同工作,可以使得材料研发过程中的理论与实验结合更加紧密,迅速排解不确定因素,更快地得到结果^[4]。因此,三要素的有机融合和协同工作对加速材料的研发至关重要;组织相应的跨学科的研发团队,协同攻关,是加速材料研发的重要保障。

2.3 材料基因组计划的核心内容

材料基因组计划的关键在于由研究理念的变革带来的思维与工作模式的转换。带给人类文明迄今辉煌的传统方法经由成百上千年发展形成,已在材料业界深入人心,根深蒂固。因此新理念新文化的树立与普及面临重大考验,成为

推行材料基因组计划的首要难题。

建立适应新型研究理念的新型材料研发基础设施是材料基因组计划的核心内容。如果说理念的变革是一场革命,它反映了人类对自然认识积累到一定程度而孕育着升华,即将进入更为主动、可控地改造自然的新阶段,新型平台设施,包括高通量材料计算、制备、表征平台等的建立过程则更像是一次维新,它主要由对既有技术在新理念下的重新集成整合而来,并根据需要在此基础上进行方法与功能的拓展以满足新形势下的新需求,保证新理念在实际工作中得以实施。大量技术层面工作,包括对各要素平台技术和工具的研究正有待开展。1) 多尺度材料计算软件及高通量计算驱动引擎的自主开发,如基于第一性原理和分子动力学的原子分子尺度计算,基于热力学/动力学参数的微观尺度计算(应用于化学反应、相变),基于有效介质理论的介观尺度计算(材料混合、复合),基于经验公式、半经验公式的宏观尺度计算,以及高通量计算作业生成、提交、监控算法,计算与实验数据集成等^[15-19];特别需要指出的是材料计算不仅限于基于基本原理的理论计算,也应包括材料的发现、研发、生产和使用过程中的经验公式、半经验公式的计算。实际上,每个研究单位和企业都有这样的技术秘诀,特别是在工程设计和应用阶段,这些经验、半经验计算公式及专用计算软件起到了理论计算与实际应用间的桥梁作用;2) 高通量材料制备及表征方法、技术、仪器装备的自主设计、开发和制造,如基于不同材料形态的高通量组合制备技术及装备,针对材料成分、结构的高通量表征技术及仪器装备,针对材料各种性能的高通量测试技术及仪器装备,以及针对材料工艺过程的高通量原位实时表征测试技术及仪器装备等^[20-22];3) 材料数据库及材料信息学技术的自主开发,如数据标准制定,数据共享协议制定,数据内容建设,数据分析与数据挖掘技术,以及数据库管理和使用机制等^[23,24]。

3 中国版材料基因组计划的一些思考

3.1 面向国家战略需求,围绕加速新材料应用

一个国家的科学计划,应当立足于其实际国情,针对其战略需求和发展目标。美国MGI计划建立在其先进的材料研发实验技术与相对成熟的多尺度材料计算工具的基础上,因而提出以发展先进模拟计算工具、先进材料数据库为主导,通过融合高通量材料实验工具的综合应用,力图实现材料“按需设计”,以保持其全球领先的地位。欧盟的ACCMET计划则聚焦于高性能合金这一有限目标,采用更为现实的高通量组合材料实验方法,期望在短期内获得一些有实际效益的成果。

与欧美国家相比,中国在材料基因组技术3个要素方面的基础都比较薄弱,差距是宽谱的、全方位的。根据这个实际情况,中国开展材料基因组计划,需要首先做好5项工作:1) 建设最基本、最必要的要素平台;2) 尽快研发自主的软硬件技术与工具;3) 大力传播材料基因组技术提出的高效率研究方法、文化和理念;4) 通过国家级科研项目进行有导向性

的推广;5) 加快培养材料基因组技术领域专业人才。

缩短新材料的“发现—研发—生产—应用”周期是实施材料基因组计划的根本目的,也是中国实现新材料领域非常规发展的内在需求,因此中国版材料基因组计划必须围绕“加速应用”来开展。选择能源与环境材料、海洋工程材料、军用材料和生物医学材料等事关国家安全、能源安全和人民健康福祉等国家急需,又有一定基础的关键材料进行示范,尽快取得成果,为进一步推广普及到整个材料领域积累经验。

鉴于中国在诸多关系到国家安全和工业发展的核心材料方向已设立了专项,中国版材料基因组计划应立足于积极为这些项目提供技术与基础设施支持,协助其更快、更好地完成项目设定的目标。建议在涉及材料研发的原有专项中增加材料基因组技术研究内容,并相应追加经费,从而及早受益于材料基因组新理念、新方法。

3.2 发挥高通量实验技术优势,向“计算引领模式”过渡

中国在计算模型、算法和软件方面与国外差距很大,软件几乎全部来自于国外,高通量计算引擎的研究刚刚开始,在基础数据积累方面更是远远不足,数据库的建立和完善也需要一个过程,因此在材料研发中大规模开展高通量材料计算、设计尚需时日。即使在美国,限于当前材料计算模拟技术的发展水平,其在材料研发中发挥的实际作用从短期来看仍将十分有限。正是出于这个考虑,欧盟选择高通量组合材料实验方法作为 ACCMET 项目的技术基础。

华人科学家在高通量材料实验技术方面曾做出过重要贡献。例如,组合材料芯片技术是由项晓东等于 20 世纪末在美国国家实验室工作期间首先提出并发展完善的^[25],通用电气公司的新一代高温合金也是由赵继成等采用多元扩散结技术开发出来的^[26]。近年来,一批具有高通量组合材料研究和产业化经历的留学人员先后通过“千人计划”等途径回国发展,使中国在这一领域具有较好的人才基础,具备了开展相关工作的条件。因此,在中国版材料基因组计划实施初期,高通量材料实验技术可以先行,发挥重要的作用。

从长期的发展来看,中国应同时加快发展材料计算与高通量平行计算技术,逐渐向“计算引领模式”过渡,使得材料研发成本更低、速度更快、效率更高,实现与美、欧同步。

3.3 协力建设材料基因组平台和基础设施

中国版材料基因组计划是整个中国材料业界的大事,影响到每一个有关的机构、单位和研发人员,应得到整个行业的广泛参与。材料基因组平台与基础设施是中国未来先进材料的重要创新基础,应围绕材料从研发到应用全链条加速这一中心目标进行建设。在规模上应有多个层次,讲求实效,避免贪大求全,力求充分利用资源。资源投入应注意发挥多方面的积极性,不应由国家大包大揽。中央政府的引导作用非常重要,地方政府的经费支持和政策激励不可或缺,科研院所、大学和企业的自主性更为关键,因为他们才是实施材料基因组计划的主体。

实施材料基因组计划需要建立的大型硬件平台,所需资源超出某一单位自身的力量所及,必须由国家投入,建成国

家级公共设施,向全社会提供服务。此类国家级设施包括高通量材料超级计算中心、基于大科学装置的高通量材料实验设施、国家材料数据中心等。这些设施的建设应充分利用现有条件,循序渐进,逐步升级,不追求一次到位。例如,高通量材料计算中心和数据中心可依托中国现有的超级计算资源,按照高通量材料计算与数据库的特点和要求,有所扩展和加强。再如,对上海同步辐射光源等大科学实验装置,国家已投入巨资进行建设,只需追加有限投入新建专用线站,或在适当的既有线站上加载一些专用装置,即可具备高通量实验能力,满足材料基因组计划研究要求。总之,可通过国家较少的投入,引导多方面集资,整合现有设施,使之发挥更大作用。其中各级政府的投入起到催化剂的作用,而利益相关方如大型企业、国家实验室、研究所也应积极参与。

3.3.1 材料基因组技术研究中心的建设

材料基因组技术研究中心应形成高通量材料计算平台、高通量材料实验平台和材料数据库三位一体,以满足实施材料基因组研究理念所需的技术条件。其中,大型计算平台硬件应尽量依托现有高性能计算中心,避免重复建设。初期的计算平台软件可以通过购买一系列国外商业软件和基础数据以迅速形成高通量材料计算模拟能力,同时应尽快发展具有自主知识产权的材料计算软件与高通量并行计算算法并充实基础数据库,力争在中长期内逐步替换国外商业软件和基础数据,可以依据下列分类建立研究平台。1) 国家级材料基因组技术研究中心是材料基因组计划所需的大型软硬件平台。围绕已建、在建或将建的大科学装置,采用先集成现有资源,再逐步发展完善的方针,争取以较低投入,在较短时间内建成,达到示范性地展示全新的材料研发模式,推动全国范围内的材料研发理念的变革的目标,引导并指导各地方、各单位建立符合自身要求的平台。同时利用其背靠大科学装置的独特优势,为材料基因组技术研究提供高通量工具技术服务;2) 地方级材料基因组研究中心依托各地著名大学和中科院分院或研究所以及大型企业研究院(所),由政府、依托单位和企业共同投资,根据依托单位专业特长建立,旨在利用材料基因组技术理念,使得依托单位专业优势得到更快的发展;3) 积极倡导大型实验室自筹资金,根据自身研发需要,建立小型实验室级材料基因组研究中心。

3.3.2 国家级材料数据库的建设

在现有的两个大型数据库(材料科学数据共享网和复合材料工程数据库)基础上,分别建立国家级通用材料数据库和军用材料数据库。

国家通用材料数据库服务于民用材料研究与开发对材料基础数据的需求,可在现有材料科学数据共享网、全国材料环境腐蚀与老化站网、国家材料服役安全科学中心以及其他中国积累的材料数据库的基础上,建设数据库公共平台。

军用材料数据库服务于军事、国防、航空航天等与国家安全相关的敏感材料研发对材料基础数据的需求,可协调整合国内现有航空材料数据中心及其数据库、军用武器装备材料数据库以及其他军用材料数据库资源。

国家级数据库的任务除提供材料数据服务外,还包括:1) 制定国家材料数据库体系的顶层规划和发展战略,确立建库的指导思想及总体框架,建立相应的管理模式、运行机制、共享准则,负责系统日常运行管理、升级更新,保证国家材料数据库的高效利用;2) 重点确立 MGI 框架下的数据库平台的标准体系,包括材料数据质量评估标准、模型标准、元数据标准、软件的相关标准等;3) 研究与确立适用于 MGI 的材料数据组织体系,整合不同格式、不同类型的数据资源(包括计算和表征平台生产的数据),对录入数据质量和可靠性进行评估;4) 构建开放、模块化的库结构,使用户可以按需进行拼装,形成专用库。构建材料数据公共服务平台,集成、开发材料科学数据挖掘分析软件,建设材料科学数据服务云;5) 积极开展国际合作,参与国际数据库的建设与标准制定,协调中外材料数据标准的差异与格式的转换,促进国际材料数据的交流与利用。

3.3.3 高通量材料研发和产业化示范基地的建设

以各地新材料科技城或新材料产业园为依托,采用灵活的“官办民助”或“官助民办”体制、结合团队负责管理的民营企业运营机制,组建若干示范、推广材料基因组技术的工业研究院,引入成熟的材料基因组平台技术,形成高通量材料研发和产业化示范基地。瞄准有急迫需求和明确市场前景的目标材料,加速核心材料技术的研发和成熟材料技术产品的应用开发并推动其产业化,并形成示范效应(图3)。

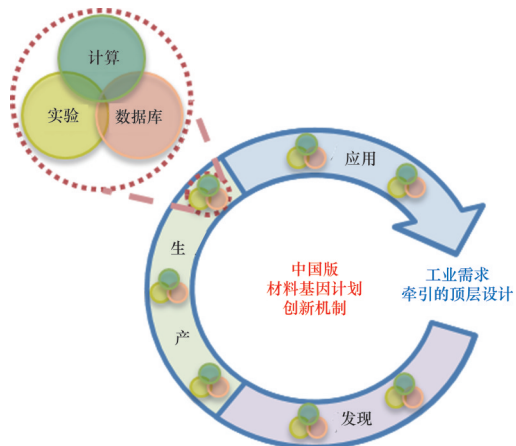


图3 中国版材料基因组计划的协同创新机制

Fig. 3 Collaborative innovation mechanism in China's Materials Genome Initiative

3.4 建立协同创新机制

材料基因组计划的内涵决定了实验、计算、数据库三要素的融合与协同是加速材料研发的关键;材料基因组计划又要求材料“发现—研发—生产—应用”各个环节的融合与协同。也就是说,材料基因组计划既要求材料科学研究中多领域跨学科的协同创新,又要求新材料产业中全产业链的协同参与。

在平台建设及其运行机制的筹划中,应通过体制机制创新,营造有利于不同学科、不同领域、不同环节充分交流的氛围。材料基因组计划需要科学家和工程师们了解制造业的

实际问题,也要求国家相关部门的领导和制造业的专家参与科学计划的顶层设计,组织需求牵引的官、产、学、研、用交融的材料研发计划,从根本上改变科研、开发与生产长期脱节的局面,使材料基因组技术充分发挥出“材料加速器”效能。

3.5 国家级科研项目的引导作用

为尽快推广普及材料基因组技术理念,引导中国材料研发人员采用高通量平台技术,加强协同创新,建议国家科技重大专项、国家自然科学基金委项目、国家国防科技工业局等涉及材料研发项目的组织部门在发布项目指南时明确建议申报单位和承担者应尽可能采用基于材料基因组技术的加速材料研究方法与协同方式,促使研究人员主动将先进的研发理念和工具技术与具体的材料研发工作进行结合。

建议国家自然科学基金委员会(及其他相关部委)通过设立专项、重点项目等方式,引导研究人员积极投身通用材料计算软件、计算模块、算法源代码的自主研究与开发(包括自主开发与国外商业软件功能类似的软件);通过科学仪器专项支持高通量材料制备与表征仪器设备的开发;使中国开展材料基因组研究的基础设施早日摆脱对国外软硬件(特别是软件)的依赖。这是关系到国家安全的大事。

建议国家自然科学基金委员会和中华人民共和国科技部设立材料基因组计划示范项目群,为材料基因组技术的推广积累经验。

3.6 建立国家层面的协调机构

材料基因组计划对中国的国家安全与社会发展具有重要战略意义。建议成立由科技部牵头,由工业和信息化部、国家自然科学基金委、教育部、中国工程院和中国科学院等相关部门领导和专家组成的“国家材料基因组计划协调小组”,围绕国家战略需求,凝练共性问题,制定技术路线图,进行顶层设计,组织实施“中国版材料基因组计划”。

3.7 人才培养和文化理念传播

实施中国版材料基因组计划的核心是推广新型的高效率材料研究理念和方法,以材料基因组技术的思维代替传统的试错法思维,以高通量并行迭代方法代替顺序迭代方法。目前,材料基因组技术的观念仍属新鲜事物,必须通过教育、推广使其受到材料业界的广泛接受与认可。因此,中国科学院、中国工程院、国家自然科学基金委、科技部、工业和信息化部 and 教育部等国家相关部委以及材料领域或与之相关的协会和学会应定期组织研讨会、学习班、报告会、讲座等各种形式的活动,引导材料界和相关人士不断地交流、研讨,理解其科学内涵,使业界逐渐培养起新的文化和理念,自觉地在实际工作中运用。

材料基因组计划是材料研究方法的变革,是思维和理念的转变,其最终成败的关键是人才培养。建议各大学的材料类院系从现在开始改革本科生、研究生的课程设置,培养具有材料基因组技术基础知识的新一代材料科学工作者。特别要培养具有计算机软件开发能力的材料科学家,以适应未来行业转型的需要。

4 结论

材料创新一直处在各种颠覆性技术革命的核心。近年来,依赖于科学直觉与试错的传统材料研究方法,已跟不上当代工业的快速发展。革新材料研发方法,加速新材料从发现到应用的进程已成为国际新材料研发的趋势。“材料基因组计划”是先进材料开发的崭新模式。力图通过高通量材料计算、高通量材料合成和检测实验以及数据库的技术融合与协同,将材料从发现、制造到应用的速度加快,成本降低。

中国的新材料产业与先进国家相比,整体水平仍存在较大差距。在此背景之下,中国材料界对材料基因组技术已形成基本共识,即必须顺应国际新材料研发的趋势,尽快启动中国版的“材料基因组计划”,变革以“炒菜法(试错法)”为基础的材料研发传统模式,实现新材料领域的超常规速度发展。

材料基因组计划是以市场与应用为导向的材料研发新理念,是新材料研发的“加速器”。中国版材料基因组计划必须根据国情,面向国家战略需求,围绕加速新材料应用。与欧美国家相比,中国的差距是宽谱的、全方位的。因此,需要首先做好5项工作:1)建设基于材料基因组技术的先进材料创新基础研发平台;2)尽快研发自主的软硬件技术与工具;3)大力传播材料基因组技术提出的高效率研究方法、文化和理念;4)通过国家级科研项目进行有导向性的推广;5)加快培养材料基因组技术领域专业人才。

材料基因组技术是材料科学技术的一次飞跃,在中国实施材料基因组计划,就是要构建将先进实验工具、模型计算手段与数据无缝衔接的新型材料创新技术框架体系,用高通量并行迭代替代传统试错法中的多次顺序迭代,逐步由“经验指导实验”向“理论预测、实验验证”的新模式转变。在前期充分发挥中国在高通量实验技术上的相对优势,逐渐向“计算引领”过渡,以加速中国关键新材料的“发现—开发—生产—应用”进程,推动中国新材料产业跨越式发展。只有这样,才能实现习近平主席提出的“推动中国制造向中国创造转变、中国速度向中国质量转变、中国产品向中国品牌转变”的目标。

参考文献(References)

- [1] 王兴艳, 宋显珠. 我国新材料产业自主创新能力建设反思[J]. 新材料产业, 2014(4): 60-62.
Wang Xingyan, Song Xianzhu. Thoughts on building the innovation capability for the chinese materials industry[J]. Advanced Materials Industry, 2014(4): 60-62.
- [2] Holdren J P. Materials genome initiative for global competitiveness[R]. Washington, DC: NSTC, 2011.
- [3] Holdren J P. Report on the president on ensuring american leadership in advanced manufacturing[R]. Washington, DC: PCAST, 2011.
- [4] Holdren J P. A national strategic plan for advanced manufacturing[R]. Washington, DC: NSTC, 2014.
- [5] 刘梓葵. 关于材料基因组技术的基本观点与展望[J]. 科学通报, 2013, 58(35): 3618-3622.
Liu Zikui. Perspective on materials genome[J]. Chinese Science Bulletin, 2013, 58(35): 3618-3622.
- [6] Allison J, Collins P, Spanos G. Proceedings of the 1st World Congress on Integrated Computational Materials Engineering[C]. Hoboken: John Wiley & Sons, Inc, 2011.
- [7] The White House: Office of Science and Technology Policy. Fact sheet: The materials genome initiative—three years of progress[R]. Washington, DC: OSTP, 2014.
- [8] Accelerated metallurgy: The accelerated discovery of alloy formulations using combinatorial principles[EB/OL]. [2015-01-31]. <http://www.acemet-project.eu/index.html>.
- [9] Jarvis D. Metallurgy Europe: A renaissance programme for 2012-2022 [R]. Strasbourg: EFS, 2012.
- [10] NIMS Materials Database[EB/OL]. [2014-12-11]. http://mits.nims.go.jp/index_en.html.
- [11] JST Database[EB/OL]. [2012-10-11]. <http://sti.jst.go.jp/en/database.html>.
- [12] ULNANOTECH & Intermolecular[EB/OL]. [2013-09-29]. <http://www.ulnanotech.com/en/component/k2/item/62-intermolecular.html>.
- [13] Manufacturers are increasingly working with new, game-changing ingredients[N]. The Economist. 2012-04-21.
- [14] Potyrailo R, Rajan K, Stoewe K, et al. Combinatorial and high-throughput screening of materials libraries: Review of state of the art[J]. ACS Combinatorial Science, 2011, 13(6): 579-633.
- [15] Yildirim T. Strong coupling of the Fe-spin state and the As-As hybridization in Iron-pnictide superconductors from first-principle calculations[J]. Physics Review Letters, 2009, 102(3): 037003.
- [16] Evans W J, Hu L, Keblinski P. Thermal conductivity of graphene ribbons from equilibrium molecular dynamics: Effect of ribbon width, edge roughness, and hydrogen termination[J]. Applied Physics Letters, 2010, 96(20): 203112.
- [17] Kim S M, Al-Rub R K A. Meso-scale computational modeling of the plastic-damage response of cementitious composites[J]. Cement and Concrete Research, 2011, 41(3): 339-358.
- [18] Geers M G D, Kouznetsova V G, Brekelmans W A M. Multi-scale computational homogenization: Trends and challenges[J]. Journal of Computational and Applied Mathematics, 2010, 234(7): 2175-2182.
- [19] Curtarolo S, Hart G L W, Nardelli M B, et al. The high-throughput highway to computational materials design[J]. Nature Materials, 2013, 12(3): 191-201.
- [20] Xiang X D. High throughput synthesis and screening for functional materials[J]. Applied Surface Science, 2004, 223(1): 54-61.
- [21] Yoo Y K, Xiang X D. Combinatorial Material Preparation[J]. Journal of Physics: Condensed Matter, 2002, 14(2): R49.
- [22] Zhao J C. Combinatorial approaches as effective tools in the study of phase diagrams and composition-structure-property relationships[J]. Progress in Materials Science, 2006, 51(5): 557-631.
- [23] Rajan K. Informatics for materials science and engineering: Data-driven discovery for accelerated experimentation and application[M]. Oxford: Butterworth-Heinemann, 2013.
- [24] Krein M P, Natarajan B, Schadler L S, et al. Development of materials informatics tools and infrastructure to enable high throughput materials design[C]//MRS Proceedings, Cambridge: Cambridge University Press, 2012.
- [25] Xiang X D, Sun X, Briceno G, et al. Combinatorial approach to materials discovery[J]. Science, 1995, 268(5218): 1738-1740.
- [26] Zhao J C, Jackson M R, Peluso L A, et al. A diffusion multiple approach for the accelerated design of structural materials[J]. MRS Bulletin, 2002, 27(4): 324-329.
- [27] 中国科学院北京综合研究中心. 北京怀柔北京综合研究中心大科学装置简介[EB/OL]. 2011. <http://www.basic.cas.cn/dkxzz/>.
- [28] 上海应用物理研究所. 上海同步辐射光源概况[EB/OL]. 2006. <http://ssrf.sinap.ac.cn/1/jianjie.htm>.
- [29] 中国科学院. 中国散裂中子源工程概况[EB/OL]. 2007. <http://csns.ihep.ac.cn/intro/intro1.html>.
- [30] 中国科学院云计算产业技术创新与育成中心. 中国科学院云计算中心简介[EB/OL]. 2012. <http://www.casc.ac.cn/Trend/184.html>.

(编辑 田恬)