

## 材料基因组工程——推动材料创新的引擎



16世纪以来,世界科技先后发生了5次革命。第6次科技革命有可能是一次“新生物学和再生革命”,将主要发生在生命科技、信息科技和纳米科技的交叉结合部,表明材料科学必将成为未来科技革命的重要组成部分。

材料科学一直是物质进步的基础,石器时代、青铜时代、铁器时代都以材料来命名。而今天,正处于微电子和信息革命的时代,随着创新的不断发展,新材料的产生孕育过程也正逐步加速,新一

代的材料革命也许并不遥远。

传统的材料科学是一门实验科学,以试错为特征的传统材料研究方法耗时费力,极大地制约了材料创新的速度。例如“爱迪生模式”——爱迪生尝试了3000多种材料,才找到合适的灯丝材料。现有经验来看,新材料从发现到商业化大概需要18年,这迫使材料科学领域不断寻找更高效的方法。

20世纪70年代,美国科学家Hanak在研究超导材料时就提出了旨在提高实验通量的组合材料实验概念。20世纪80年代以来,材料科学-物理学-计算科学的交叉融合,发展了微观-介观-宏观尺度,包括第一原理计算、分子动力学和蒙特卡罗模拟、计算热力学/动力学、微结构演变模拟、跨尺度材料模拟、以及工程仿真等多种材料和系统的计算方法。而诞生于2011年的“材料基因组计划”的概念,则是指利用现有的材料数据库平台,根据材料学原理,通过数学计算来预测要达到某种材料所需要的组成与结构,然后再通过实验进行合成,并检测是否符合要求。这就把传统的“产品研发”过程翻转了过来,即从应用需求出发,倒推符合相应结构功能的材料。这种把理论计算、实验和数据库有机结合起来的方法,可以大大加快材料从发现到研发直至应用的周期,从目前的10~20年缩

短为5~10年;同时有利于深刻揭示物质构成、不同元素排列与材料功能之间的关系,进而实现有目的地设计新材料。

材料创新一直是各种颠覆性技术革命的核心,新型材料是新型制造业的基础。目前中国关键材料的对外的依存度极高。为实现材料产业的跨越式发展,专家建议加快实施“材料基因组计划”,推进新材料研发由传统的、相对较低效率的“经验指导实验”转向新型的、相对高效的“理论预测、实验验证”模式,加速新材料的研发和应用,为创新驱动战略提供持续动力。

因此,《科技导报》特别邀请工程院院士、中国科学院物理研究所研究员陈立泉,与国家“千人计划”专家、中国建筑材料科学研究总院教授汪洪担任本期客座编委,组织出版“材料基因组计划专题”,重点总结材料基因组计划的基本思想及在国内外的发展现状,回顾了多尺度材料计算方法、高通量材料实验方法、数据库等3项技术要素,系统介绍了组合材料芯片技术,并列举出材料基因组思想在热电材料合成和在镍基高温合金材料的研发中应用的成功案例。本期封面图片为用于分立样品组合材料芯片制备的4元分立掩模示意图。本期封面由王静毅设计。

(文/田恬)

### · 读 ·

#### P13 材料基因组——材料研发新模式

介绍了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与未来发展,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。

#### P31 材料的高通量制备与表征技术

回顾了材料高通量实验的发展历程,介绍了代表性的高通量制备与表征技术,以及一些具有重要应用前景的新思路和技术,例如基于同步辐射、散裂中子源等大科学装置发展新一代材料高通量实验技术、原位统计映射表征技术等。阐述了高通量实验在材料基因组技术中的地位与作用,分析了高通量实验的应用局限、面临的挑战和发展趋势。

#### P64 组合材料芯片技术在新材料研发中的应用

结合组合材料芯片技术涉及微电子材料、磁性材料、光电材料、能源材料、介电材料、催化材料、合金材料等15个领域中较为成功的应用案例,展示了该技术在加速新材料发现、材料和器件性能优化、基础物理研究中的突出作用及效果。

#### P7 国际合作,互利共赢

国际合作在当代科学研究中占据越来越重要的角色。本文将向读者介绍以国际合作为基础,粒子物理学和天文学研究取得的最新成果,同时简要论述国际合作的意义。

#### P123 像博物学家一样生存

如何让人类与自然和谐相处,共存共生,是现代人无法回避的问题。越来越多的学者呼吁:人类应该重新审视自己与自然的关系。我们需要更多的博物学著作唤醒对自然的了解与亲近。刘华杰的《檀岛花事》便是这样一部充满博物情怀的著作。

#### P125 摩尔定律已经接近物理极限了吗

1965年4月19日,摩尔预言:半导体芯片上集成的晶体管数量和电阻数量将每年增加一倍,当时的人们包括摩尔自己都不认为这是科学上的定律。后来,摩尔定律又得以修正。半个世纪以来,半导体芯片业的发展基本符合摩尔定律,但随着晶体管电路逐渐接近性能极限,这一定律是否将要走到尽头?本文对此做了阐述。