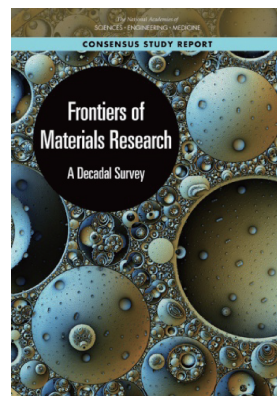


热点追踪

【编者按】美国国家科学院、工程院和医学院 (National Academies of Sciences, Engineering, and Medicine) 为国家提供独立、客观的分析和建议、解决复杂问题, 并为公共政策决策提供信息服务; 同时鼓励教育和研究, 认可知识方面的杰出贡献, 提高公众对科学、工程和医学的了解。

受美国国家科学基金会和能源部委托, 美国国家科学院、工程院和医学院开展了该项研究, 阐明美国乃至全球材料研究的现状和前景。《材料研究前沿: 十年调查》(Frontiers of Materials Research: A Decadal Survey) 是有关材料研究的第 3 次十年期调查, 现将报告内容概括如下, 希望能在我国的材料研发、产业布局及政策制定等方面起到积极借鉴作用。



《材料研究前沿: 十年调查》概要

现代材料科学以物理学、化学、生物学、数学、计算机和数据科学以及工程科学知识为基础, 让我们能够理解、把控和拓展材料世界。虽然材料研究以探究式基础科学为基础, 但仍然致力于发现和生产可靠且经济可行的材料, 从超合金到聚合物基复合材料, 这些材料已被大量应用于当今社会和经济所必需的产品中。

这份报告是由美国国家科学基金会 (National Science Foundation, NSF) 和能源部 (Department of Energy, DOE) 立项并资助, 深入达成一致共识的研究结果, 旨在从全世界相似的研究中, 记录美国材料领域的现状和未来潜在的研究方向。本报告是有关材料研究的第 3 次十年调查。第一份报告(《1990 年代的材料科学与工程: 保持材料时代的竞争力》, 国家学术出版社, 华盛顿)发表于 1990 年, 第二份报告(《凝聚态物质和材料物理学: 我们周围世界的科学》, 国家学术出版社, 华盛顿)发表于 2010 年。2019 年的第 3 次报告回顾了过去 10 年材料研究的进展和成就, 以及材料研究领域的变化; 预测了 2020~2030 年间的投资机会以及材料研究对新兴技术、国家需求和科学的影响, 并预测了企业在未来 10 年可能面临的挑战。

在过去的 10 年里, 材料研究取得了许多突破传统思维模式的进展, 材料发掘的速度也在加快。支撑材料研究的方法(包括材料表征、合成和加工以及计算机模拟的能力)已经取得了相当大的进步, 使得以前无法实现的领域得以实现。科学与工程是令人兴奋的, 创造和控制新材料的前景很乐观, 通往重要应用的道路也十分

鼓舞人心。然而, 这种积极的看法仍受到以下因素制约: 可以预见的许多进步所需的资源得不到保证; 国际竞争正在威胁美国在材料研究方面的领导地位。

某些领域的材料研究尤为重要, 如计算材料科学与工程领域。将计算方法(包括数据科学, 机器学习和信息学)与材料表征、合成与加工方法相结合, 加速了新材料的发现及其在产品中的应用。这种势头将延伸到数字化制造领域, 在增材制造和其他工艺中, 材料合成可以直接与制造相结合。在未来的 10 年里, 量子信息科学材料 (quantum information science, QIS) 也将成为另一个优先的方向。量子信息科学不仅包括量子计算, 还包括存储、量子传感和通信技术, 且已应用到了超导体、半导体、磁体以及二维 (2D) 材料和拓扑材料 (topological materials) 的研究中。

从整个材料的大范围来看, 材料科学与技术对地球环境质量和可持续发展有巨大影响, 例如可以通过设计新型材料来催化一系列重要的化学反应。研究人员已经开展了很多关于表面条件对有效催化作用的研究, 例如采用等离子体辅助热电子催化。未来的研究有望改善材料的可持续制造, 例如, 原材料的选择、节能的制造方法和可回收性。需要大学、国家实验室和工业之间展开密切的合作, 这一需求也在本报告中多次出现。

报告建议, 要持续对各级研究基础设施进行投资, 包括从大学实验室仪器到国家实验室的大型设备, 这些设备对美国材料科学企业的健康发展至关重要。基础设施是美国材料研究的宝贵财富, 为了材料领域的产出和

健康发展,它必须保持世界领先水平。

1. 过去 10 年进展

近 10 年来,材料研究的方方面面都取得了很大进展,几乎涵盖了所有的材料类型。例如,石墨烯在上次的 10 年学科调查中仅仅受到些许的关注,这次却引起了其他二维材料的兴起。更重要的是,石墨烯的发现激发了人们对新物理现象的研究,其在太阳能电池、晶体管、相机传感器、数字屏幕和半导体等许多电子领域具有潜在的应用价值。过去 10 年中另一个意想不到的的是增材制造(additive manufacturing, AM)的发展,虽然这一领域只有几十年的历史,但现在既可以批量生产,也可以根据需要进行一次性生产。其他一些主要材料的发展包括经济实惠的发光二极管(light-emitting diode, LED)照明、平板显示器以及电池的改进等。

材料科学一些重要的进展是纯粹的发现驱动科学的产物(例如拓扑绝缘体),其他则是通过协同技术产生的(例如康宁大猩猩玻璃),还有一些是两者的组合(例如增材制造和新型高性能塑料, vitrimers)。材料基因组计划(Materials Genome Initiative, MGI)和国家纳米技术计划(National Nanotechnology Initiative, NNI)这两项主要的政府举措,在促进美国材料研究方面发挥着重要作用。

在过去的 10 年里,金属、块体金属玻璃、高性能合金,陶瓷和玻璃等领域取得了令人振奋的进展。由于复合材料和杂化材料能够承受恶劣环境以及其对器件的保护性,使得它们具有很高的应用价值。涂层技术的进步提高了可靠性,广泛应用于热保护和环境保护系统。在越来越多的应用中,层状材料体系正在取代先进单片材料,每一层的独特性能和功能都能够显著提高材料的性能和寿命。聚合物、各种生物材料以及软物质(如胶体和液晶)方面也取得了巨大的进展。

超导研究一直是一个多产的领域。对量子材料领域的研究也更加普遍而且发展迅速,主要包括量子自旋(quantum-spin)液体、强相关(strongly correlated)薄膜和异质结构(heterostructures)、新型磁体、石墨烯和其他超薄材料以及拓扑材料等。

2. 未来研究机会

在上述最新进展的基础上,该报告还发现了许多预计将在未来 10 年出现的材料研究机会。这些机会将涵盖几乎所有材料类别,承载了许多有价值的应用。

未来对金属和合金的基础理论理解将通过日益耦合的实验和计算建模来推进,并随着条件和行为的变化对

材料进行原位表征。新机遇还将来自设计、组合、加工和制备方法等方面的创新,以及先进设施等。高熵合金(由近等摩尔比的五种或更多元素组成的合金)在未来 10 年会有相当大的前景。这种合金材料有望克服传统合金所面临困境和障碍,例如强度和延展性无法同时提升的问题。其次是纳米金属合金,这个非传统金属领域预计也会取得进展,合金的形态和复杂结构可以在纳米尺度控制(例如,纳米孪晶金属)。

信息和计算技术行业将继续推动半导体和其他电子材料的研究,朝着日益复杂的单片集成器件、功能更强大的微处理器以及充分利用三维(3D)布局的芯片发展。这些材料应用于新器件,以及其他具有节能架构的设备,这些新器件结合了内存和逻辑功能,能够执行机器学习和其他算法,而这些算法与传统的计算机逻辑和结构有很大的不同。该研究将在多级功率和电压范围内实现更高效的电力管理,也成为了一个各界关注的焦点。

二维材料(包括石墨烯)为探索表面电子态的性质提供了机会。通过对这些材料进行分层,通过叠加这种材料,层之间的弱相互作用及缺陷设计带来了广阔的探索空间,为在电子和光学领域的应用提供潜在机会。拓扑材料的性质由其激发光谱的拓扑性质决定,同样具有很大的应用潜力。

在陶瓷领域,将主要围绕节能化的生产工艺,使致密和超高温陶瓷的生产成为可能。此外,表征和加工能力的提高为玻璃的研究开辟了新的机遇,可能会使得其作为固体电解质用于能量储存和非线性光学器件。

复合材料将越来越适用于更先进的应用,远远超出传统材料的结构作用。未来有望引入生物材料,开发出能够以期望的和可预测的方式调控性能的材料。在杂化材料领域,钙钛矿将继续引起人们的极大兴趣,主要是因为其对单结太阳能电池具有潜在的优势。杂化纳米复合材料由于其组成粒子具有良好的光学性能和高载流子迁移率,在光电子学和光电转换技术中具有较好应用前景。

人工材料和超材料之所以受到关注,主要是因为它们微米或纳米级别的结构设计极大增强了所制器件的功能。通过复合成分分布设计达到材料轻量化,为航空航天、运输和能源生产等领域的一系列技术提供了机遇。多功能材料,例如既提供结构又提供热管理、增强通信或传感能力的材料,是此类材料中的重要部分。超材料是另一个重要的类别,其结构提供特定的功能响应,并且为许多技术应用提供了机遇,如节能光源、传感应用、热工程和微波技术等。

主要发现:对金属、合金和陶瓷继续进行原子尺度

的研究,探究材料合成——微结构——性能关系。有了这种理解和最先进的合成、表征和计算工具,新型合金和具有特殊性能的微/纳米结构正在被实现。传统材料研究领域也有惊人的新进展,例如在多组分、高熵合金和无机玻璃方面。

主要建议:美国联邦机构(NSF、DOE、DOD)应维持稳健的项目,以支持在某些情况下会扩大并长期存在的领域的基础研究,如金属、合金和陶瓷等。

主要发现:量子材料科学与工程,包括超导体、半导体、磁体和二维及拓扑材料,代表了一个充满活力的基础研究领域。对材料科学的新理解有助于未来在计算、数据存储、通信、传感和其他新兴技术领域实现变革性的应用。这包括超越摩尔定律的新计算方向,例如量子计算和神经形态计算,对传统处理器的低能耗替代品至关重要。美国国家科学基金会(NSF)的两个“十大创意”专门确定了对量子材料的支持(参见《量子跃进:引领下一次量子革命和中尺度研究基础设施》)。

主要建议:美国国家科学基金会(NSF)、能源部(DOE)、美国国家标准技术研究院(NIST)、国防部(DOD)和情报先进研究计划局(IARPA)的重大投资和合作将加速量子材料科学与工程的进步,这对美国未来经济和国土安全至关重要。在美国能源部科学办公室和国家核安全局实验室以及国防部研究实验室(陆军研究实验室 ARL,海军研究实验室 NRL,空军研究实验室 AFRL)的领导下,与先进计算有利益关系的机构应在接下来的 10 年中支持研究新计算范例的基础材料科学。为了保持国际竞争力,美国材料研究界将继续在这些领域发展壮大。

3. 最终应用方面的需求

广泛的材料研究领域与工业部门的需求和利益之间存在着根本性的联系。仅以国家安全为例,材料研究已经开发出能够提供更轻装甲的新材料,为战场上的作战人员提供多动力电池,以及能更好地承受极端条件的材料,例如用于高超声速飞行的超高温材料,其所在推进系统的工作温度超过 2000 °C。

在与能源相关的行业中,对能够在各种极端操作环境下保持高性能的材料的需求不断增长。例如用于航空航天和地面运输的轻质、高强、高韧性材料,以及用于抵抗高辐射剂量的高级裂变或聚变能量系统的结构材料和燃料系统。一般来说,能源方面的挑战涉及生产、分配、转换和利用。诸如光伏电池和先进电池等材料的改进从根本上对能源做出了贡献。能源利用率也可以通过开发更好的催化剂等材料来提高。

另一个广泛的需求是移动、储存、泵送和管理热量所需的材料。人类用于发电、加热和冷却以及运输的能源,90%以上来自热过程。因此,即便是控制和转换热能力的小幅提高,也会对世界的能源使用产生重大影响。

材料研究界普遍希望大学、私营企业和国家实验室之间能够加强互动,特别是加强材料科学和技术创新领域之间的合作和信息交流。应加强基础科学的理论与技术的相互联系,以理论指导技术的进步,以技术促进新理论的突破,将会产生极大的经济效益。全球都需要将基础理论发现转化为实用技术。新的激励机制旨在鼓励教师、学生、科学家和工程师进行亲密的团队合作。

主要发现:材料研究中的许多现实挑战和机遇发生在传统学科之间的交叉点上,以及基础研究和应用研究之间的交界处。不同学科之间以及学术界、工业界和政府实验室之间的协作和信息传递将极大地增加成功应对挑战并利用机遇的可能性。

主要建议:由美国科技政策办公室(Office of Science and Technology Policy, OSTP)牵头的政府机构应高度重视,通过对跨学科研究的支持,以及建立大学、私营企业(包括初创企业)和国家实验室之间更自由流动互动的模式,促进材料研究者之间的沟通。

主要建议:美国科技政策办公室(OSTP)应在资助政策制定方面发挥领导作用,使各种资助机构能够在需要时协同工作,促进大学和行业研究人员之间的合作。

主要建议:美国国家科学基金会(NSF)应建立材料研究转化中心(Discovery to Translation Materials Research Center, DTMRC),使学生、教师、科学家和工程师能够并肩工作。这项工作也应得到相关 NSF 部门的支持,并至少持续 10 年。

DTMRC 的理念是补充 NSF 现有促进基础研究的“材料科学与工程研究中心”,以及促进技术发展的“工程研究中心”,并使两者实现功能性协同。基础材料的研究一直十分重要,将基础材料研究与技术更紧密地联系起来并不意味着减少投入高风险项目。

主要发现:材料科学和技术对地球环境质量和可持续发展有着巨大的影响,这是大学、国家实验室和工业合作的一个重要机会。

主要建议:迫切需要从多个方向开展研究,以改善材料的可持续制造,包括原料选择、能源效率、可回收性等。科学基金会、能源部和其他机构应提出创新的方案,为这方面的研究提供资金。

4. 对基础设施的需求

过去 10 年,材料研究的许多进展得益于对基础设

施建设的持续投资和研究工具的改进。面向更多新机会,该报告确定了许多必要的结构性步骤,以促进美国材料研究的最大效益。

在过去的10年中,材料研究人员在表征、合成和加工以及计算能力方面取得了重大进展,从而使以前无法实现的材料研究成为可能。特别是通过诸如透射电子显微镜、原子探针层析成像(atom probe tomography, APT)、扫描探针显微镜、超快探针以及3D和4D表征能力(其中3D是我们常见的具有长度、宽度和深度的三维空间,4D增加了时间维度)等工具,使得表征技术得到了提高。精准合成有望以革命性的方式改变材料科学。许多方法和工具也正在实现精确合成的新功能。现有技术允许研究人员以高保真度和精确度控制原子、分子和缺陷的位置和排列,而缺陷不容忽视,它们通常控制着材料特性。

在计算能力方面,研究人员在多尺度上对材料建模进行改进,能够以高保真度计算材料特性。这些计算结果被用于预测多种材料结构与性质的关系、发现新结构,并能够加强对实验数据的解释。除了基于物理模型,由数据驱动的机器学习还被用于探索材料的组成、识别新结构、发现量子相位以及识别相位和相变。

另一个主要的进步是对材料性能的计算设计、纳米到微米控制的制造工艺以及具有同样精准分辨率的实验表征方法的融合。这些功能的集成使得通过结构控制来开发高性能新型体相材料成为可能。与拱门、柱、梁和扶壁革命性地改变了建筑、塔和桥梁的建造方式一样,材料界正在开发“材料建筑”,将材料设计空间扩展到多个维度,独立处理当前材料的特性,开发出比现有固态物质具有更优越性能的材料。在美国,一些主要材料设施产出的大量数据引起了人们将这些数据与建模相结合的浓厚兴趣。一些机构已经开发出先进的计算工具,这在功能材料的预测建模以及跨越多个长度尺度连贯地理解材料方面起到重要作用。

材料研究的核心是评估和表征、加工和合成材料以及建立模型和模拟其性能。为研究人员提供仪器和设施网络(从个人研究人员到中型仪器设施和科学研究中心,再到国家级设施),是支撑整个材料研究事业的基础。

过去10年,材料研究几乎所有领域都对基础研究设施有巨大需求,购买和维护最先进基础研究设备的成本不断上升,加上缺乏足够的仪器设备融资渠道,使得美国的材料科学与工程研究面临着严峻挑战。

多数情况下,为大学研究提供资金的联邦机构、私人基金会和企业都没有为所需的仪器提供足够的资金。美国国家科学基金会(NSF)通过主要研究仪器(Major

Research Instrumentation, MRI)计划赞助科研仪器。但该计划规模不足以满足当前需求。美国国防部(DOD)的国防大学研究仪器项目(Defense University Research Instrumentation Program, DURIP)原则上可以提供帮助,但其资助水平也较低。能源部(DOE)运营着许多尖端的散射设施。正如美国国家标准与技术研究所(National Institute of Standards and Technology, NIST)中子研究中心和美国国家航空航天局(National Aeronautics and Space Administration, NASA)的部分国际空间站(International Space Station, ISS)支持关键材料研究一样,这些散射设施也支持一些领域的材料研究。然而,这些国家设施不能满足大学基础研究设施的最前沿需求。因此,在校园内配备仪器至关重要。例如,涉及新材料合成的研究项目通常需要在合成、结构和性能测试之间进行持续且及时的反馈与循环测试,依靠远程设施进行这种研究是不可行的,但大多数材料研究都是如此。

因此,支持研究仪器的资金负担主要转移到了大学。大学支持研究新的仪器以吸引年轻的实验员,但这种模式下仪器仍然缺乏资金来维持和升级,还会导致雇用年轻人的下行压力。

主要发现:从大学和国家实验室到大型研究中心,采购成本为400万美元到1亿美元的各级基础设施,如同步加速器光源、自由电子激光器、中子散射源、高场磁体和超导体等用于材料表征、合成和加工的中等规模仪器,对美国材料科学界的健康发展至关重要。尤其是中规模基础设施近年来被严重忽视,使得维护成本和聘用专业技术人员的成本大幅增加。

主要建议:所有对材料研究感兴趣的美国政府机构都应实施国家战略,以确保大学研究小组和国家实验室能够在当地开发并持续使用材料研究所需的先进中型仪器以及实验室基础设施。该基础设施包括材料生长和合成设施、氦液化器和回收系统、无制冷剂冷却系统和先进的测量仪器。这些机构还应继续支持大型设施,如橡树岭国家实验室、劳伦斯伯克利国家实验室、阿贡国家实验室、SLAC国家加速器实验室、国家同步辐射光源II(布鲁克海文国家实验室)、国家标准技术研究所的设施,并且对现有设施升级及更换的长期规划进行参与并投资。

主要发现:三维(3D)表征、计算材料科学以及先进制造和加工技术的进步使材料研究领域的数字化程度不断提高,在某些情况下,大大缩短了新产品从发现到使用的时间。

主要建议:联邦机构(包括NSF和DOE)应在2020年前扩大对自动化材料制造的投资,其任务应与增材制

造和其他数控制造模式的发展保持一致。增加的投资应支持跨越自动化材料合成和制造的多个学科。从最基础的研究到产品实现,包括通过计算技术的进步实现的实验和模拟能力,达到 2030 年美国在该领域处于领先地位的目标。

主要发现:材料基因组计划和早期的集成计算材料工程方法,让我们认识到了集成和协调计算方法、信息学、材料表征以及合成和加工方法的潜力,以加速产品中所设计材料的发现和部署。将这些方法转化到特定的行业已经产生了许多成功的应用,这些应用也通过相应的成本节约缩短了开发时间。

主要建议:美国国家科学基金会(NSF)、国防部(DOD)和能源部(DOE)的配合下,应支持开发探索新的计算方法和先进的数据分析方法,发明新的实验工具来探测材料的特性,设计新的合成和加工方法。当前政府机构的投资力度应当加大,并在未来 10 年继续努力,以保持美国的竞争力。

5. 美国材料研究的国家竞争力

材料研究对一个国家的经济福祉和安全的重要性不言而喻,世界各国都在寻求国家项目来支持材料研究,并促进材料研究向市场的过渡。作为研究进展的一部分,该报告就材料研究对世界经济的贡献、材料项目以及若干国家的投资情况进行了调查。许多国家的项目比美国的项目更注重经济发展,更直接地与经济发展挂钩。与美国和欧洲国家相比,亚洲国家,尤其是中国和

韩国,目前在材料研究方面的投资占其国内生产总值(GDP)的比例更大。

主要发现:发达国家和发展中国家之间在现代经济驱动力(包括智能制造和材料科学)领域的激烈竞争将在未来 10 年持续增长。

主要建议:在支持材料研究的机构的投入下,美国政府应从 2020 年开始采取协调措施,全面评估全球竞争加剧对美国在材料科学、先进智能制造领域领导地位的威胁。评估计划应建立在永久性基础上,并应在 2022 年前确定一项应对这种威胁的战略。

材料研究是经济增长、国家竞争力、财富与贸易、健康与福利以及国防的重要基础。世界上许多较大国家和经济体已经认识到这种关系。最近的趋势表明,许多国家已制定并明确了国家投资战略,以确保在材料研究方面取得有力进展、增强在全球经济中的国家竞争力。到目前为止,材料研究对新兴技术、国家需求和科学的影响非常重要,随着美国在数字和信息时代的发展,面临着全球当前和未来的挑战,预计这种影响将会更大。

(原报告 Suggested citation: National Academies of Sciences, Engineering, and Medicine. 2019. *Frontiers of Materials Research: A Decadal Survey*. Washington, DC: The National Academies Press. doi: <https://doi.org/10.17226/25244>.)

(西北有色金属研究院

贾豫冬 刘 凡 朱宏康 编译整理,编辑 张雨明)