

一个整体 多个层次 协同创新

——材料基因组计划研究进展论坛侧记

文/西北工业大学 范晓丽



2014年9月21日，“2014新材料国际发展趋势高层论坛——材料基因组计划研究进展论坛”（以下简称材料基因组分论坛）在西安都市之门一楼多功能厅如期举行，300余人的会场座无虚席。材料基因组分论坛由中国工程院化工、冶金与材料工程学部和中国材料研究学会主办，由中国工程院材料科学系统工程咨询项目组承办。论坛得到了中国科学院数学与系统科学研究院、中国科学院物理研究所清洁能源中心、西北工业大学材料基因组国际合作研究中心、绿色建材国家重点实验室、南京工业大学先进金属材料研究院材料计算所的大力支持。材料基因组分论坛共邀请了上海大学张统一院士、中国科学院数学与系统科学研究院崔俊芝院士、绿色建材国家重点实验室项晓东研究员、电子科技大学向勇教授、厦门大学刘兴军教授、上海大学材料科学与工程学院施思齐教授、中国科学院宁波材料所陈亮研究员、中国科学院物理研究所肖睿娟研究员、中国工程物理研究院北京计算科学研究中心刘利民研究员等9位报告人。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，实施中国版MGI的核心是推广MGI理念和方法，以MGI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，其最终成败的关键是人才培养。



▶▶1 张统一院士的报告《上海大学材料基因组研究进展》，从材料研究的规划、组织和实施诸方面较为系统地介绍了上海大学材料基因组研究的进展以及刚刚成立的上海大学材料基因组研究院的建院思路，包括高通量集成计算和模拟平台、高通量实验和快速材料测试表征平台、大数据和数据库平台以及服役可靠性和失效分析平台等4个研发平台的建立。

▶▶2 崔俊芝院士在其《新材料研发的集成化信息平台》报告中指出，集成化信息技术是支撑“材料基因工程”目标实现的关键技术之一，为了给新材料研发人员提供一个集成化、网络化，集计算资源、数据资源、实验检测和材料科技信息资源共享的研发平台，他建议建设“新材料研发的集成化信息平台”。该平台既是材料科学研究和新材料研发者的工具和环境，又是材料科学研究前沿科学问题的发源地，以及部分研究成果的归宿地。使材料物性预测的新模型、新算法、新软件和新的材料数据，可以快速集成于“平台”的软件库和数据库之中，加速新材料研发的进程。“平台”将基于云计算和移动互联网模式构建，以分布和集中并存的虚拟模式，集成来自不同单位和公司的计算材料科学软件、材料数据库、试验检测设备和材料科技信息资源；为跨领域和跨地区的新材料研发团队提供方便、有效和合理付费的计算服务、数据服务、实验检测服务、材料科学信息服务。

▶▶3 项晓东研究员在其《原位实时高通量组合材料实验技术》报告中首先介绍了高通量组合材料实验的起源，以及原位实时高通量组合材料实验技术的需求与发展现状，同时报告了其研究小组基于同步辐射大科学装置发展的普适性原位实时高通量材料成分/结构表征技术，该技术基于可调脉冲红外激光和同步辐射微束白光X射线，可探明涵盖时间、温度、环境气氛等工艺参数的材料结构-成分-工艺相关性。基于其它微区表征探针或谱学测试工具，还可发展一系列功能丰富的原位实时高通量表征技术，从而充分发挥高通量组合材料制备与表征技术作为“新材料搜索引擎”的潜力。

▶▶4 向勇教授报告的题目为《高通量组合材料芯片制备技术及装备技术》，介绍了一种自主开发的掩模镀膜法组合材料芯片制备技术及相应的高真空离子束溅射系统。该技术通过连续移动的掩模来精确控制叠层薄膜的厚度梯度，从而实现多元素组合和材料组分梯度，可以完整地覆盖三元材料相图的组分空间。此技术制备的叠层薄膜经过低温扩散和高温成相两个热力学步骤处理即可获得高质量的组合材料芯片。

▶▶5 刘兴军教授的报告《基于计算/实验一体化研究高性能Co基高温合金的设计与开发》以Nb-Si基和Co基高温合金的计算/实验一体化研究为例，阐明材料计算在新材料开发中的应用，以及计算和实验的相辅相成、相互促进的关系，进一步深化材料设计的理念，改变利用传统的“尝试法”研究和开发新材料的定式思维。

▶▶6 施思齐教授的报告《材料计算和实验结合推动锂离子电池的研发》阐述了与锂离子电池材料相关的计算材料学，包括第一性原理计算与实验手段、机器学习方法的结合等。介绍了将计算材料学和实验有机结合起来研究锂离子电池所涉及的基础科学问题的几个实例，报告展望了今后计算材料学在锂离子电池研发中扮演的角色和未来重点研发方向。



▶▶7 陈亮研究员作了题为《基于第一性原理的相图计算在材料设计中的应用》的报告，指出相图可以揭示多元体系在热力学条件下的反应以及相变过程，从而为实验提供有益的指导，随着计算机运算能力大幅提高以及相关程序的开发，相图计算在新型功能材料，如锂离子电池材料和光催化材料等研发方面做出了很大的贡献。介绍了其团队结合第一性原理、集团展开和蒙特卡洛等方法，研究“智能催化剂”Pt-CaTiO₃等体系不同条件下的相平衡以及热力学变化过程方面的研究工作。

▶▶8 肖睿娟研究员的报告《高通量计算在锂离子电池材料筛选中的应用》介绍到，电动汽车与规模储能的发展需要开发大容量锂离子电池并显著提高电池安全性，采用固体电解质的全固态锂电池是公认的重要技术途径。报告重点介绍了其研究小组以2013版无机晶体学数据库为基础，通过高通量计算、第一性原理分子动力学方法来寻找合适的电解质材料的研究工作。

▶▶9 刘利民研究员的《绿色功能材料设计中的第一性原理设计》报告指出光催化材料的光催化反应发生在固体-液体界面，对其界面结构、微观反应过程的理解认识非常重要。报告介绍了采用第一性原理研究水对光电催化材料结构和电子性质的影响及新型催化剂设计方面的前沿研究成果。

