

从跨尺度集成计算到人工智能设计新材料

——计算材料学分论坛侧记

文/北京航空航天大学 缪奶华



计算材料学作为一门涵盖了材料、物理、化学和计算机等的新兴交叉学科，已经成为材料科学研究的必要组成部分，在新材料研发中发挥着愈加重要的作用。作为“2019新材料国际发展趋势高层论坛（IFAM2019）”重要的系列活动之一，计算材料学分论坛引起了众多参会者的浓烈兴趣。会议由孙志梅、杜勇、汪洪和宋晓艳4位教授主持。论坛邀请了15位计算材料学领域知名专家学者与会作报告，报告涵盖了高通量筛选、集成计算、微介观模拟、机器学习及数据库等先进技术，囊括了合金、玻璃和陶瓷等结构材料以及光伏转换、信息存储、复合催化等功能材料体系。

报告精彩瞬间



北京航空航天大学孙志梅教授 分享了其在材料基因工程加速存算一体化相变存储材料方面的研究成果，介绍了自主研发的高通量集成计算材料软件平台ALKEMIE Matter Studio。该平台具有多尺度集成功能、高通量自动流程、可视化易扩展和移植等优点。基于该平台，将材料计算与实验验证相结合，获得了新型存算一体化相变存储材料。

上海交通大学汪洪教授 以“太阳能光热转换材料的理性设计优化与工程应用”为题，介绍了其团队通过理论模拟与实验结合在太阳能集热器的关键材料——太阳能吸收层材料的选择和设计方面的最新进展及实际生产应用。

中南大学杜勇教授 介绍了Co-Ni-Al复合粘结相在硬质合金中的应用背景；简述了Co基高温合金最新研究成果和有序相沉淀强化粘结相硬质合金的性能特点；分析了集成计算材料工程在复合粘结相开发上的应用；总结了WC-Co-Ni-Al硬质合金在制备、显微结构表征及性能方面的研究进展。

北京工业大学宋晓艳教授 分享了团队构建的Sm-Co多元合金数据库及材料知识信息解析、关联与管理信息系统以及其在开发具有优良磁性能的Sm-Co基多元永磁合金中的应用。

北京科技大学宿彦京教授 以高熵合金研发、相分类及多服役性能协同优化为例，介绍了机器学习在新材料研发和设计中的应用，其成果表明通过机器学习指导材料设计和实验制备，可提高新材料研发的效率。

北京应用物理与计算数学研究所宋海峰研究员 分享了在辐照结构损伤中，通过微观模拟认识材料微观缺陷结构成核机理，结合介观相场建模及模拟研究微结构生长及演化过程，对锆材料核电应用具有积极推动作用。

华中科技大学徐明教授 介绍了其发现的非晶材料Ge-Sb-Te“八面体”局部结构规律；并利用C掺杂对二元Ge-Sb进行基因改良，大大提升器件的稳定性和寿命。

北京航空航天大学王鹏教授 通过采用低秩矩阵、压缩感知等计算数学方法，提出了一种全新的高性能计算框架来预测异质材料之间的互扩散系数；并以三元系统为例，进行数值验证；通过对样本选取优化设计，可降低数据成本。

哈尔滨工业大学(深圳)刘兴军教授 介绍了将材料学知识和机器学习算法相结合开发的新型Co基高温合金多性能优化设计系统，及其在高温合金设计工作中的应用。

武汉理工大学赵焱教授 分享了其团队在泛函方面的研究进展及将量子力学方法用于研究多硫化锂结构和强亲和材料中，如 Co_3S_8 、 TiO_2 和TiN等正极材料，并将计算结果与实验的充放电性能进行比较。

上海大学刘轶教授 通过机器学习辅助第一性原理计算，提出了“中心环境”描述符模型，设计了一系列多组元的镍基高温合金，并表示由大数据和人工智能驱动的材料设计具有高效率和高准确度等特点。

华中科技大学单斌教授 针对高效复合催化材料的原子尺度设计及制备，基于第一性原理和微反应动力学计算，发展了一种负载型贵金属-稀土氧化物原子层沉积制备新方法，实现了亚纳米级贵金属团簇在氧化物表面的原子尺度可控制备，攻克了稀土表面贵金属纳米颗粒的高分散性和抗烧结难题。

武汉理工大学刘韩星教授 提出了一种使用形成能作为中间变量对钙钛矿材料的带隙进行预测的机器学习模型，并利用该模型在大量未知材料库中搜索新型高性能钙钛矿材料。

武汉理工大学李能教授 以水泥、玻璃、陶瓷等功能结构陶瓷材料原子与电子结构计算为主题，研究了功能陶瓷材料的热/动力学参数与形貌、结构和性质的关系，表征了材料原子局域结构，阐释了相变的原子与电子尺度机制，为功能结构陶瓷材料功能升级及可控制备与应用提供理论依据。



2019 IFAM

3D打印技术作为第三次工业革命的重要标志之一，引发了研究人员对3D打印的持续高度关注。3D打印材料的制备与成形技术一直是3D打印技术的关键，经过近四十年的研究，3D打印材料基本形成了金属、聚合物、陶瓷三大类材料及其复合材料，与这些材料相关的成形技术也得到了充分的发展。对3D打印的研究方兴未艾，关于4D打印的研究如日方升。4D打印是近几年兴起的颠覆性制造技术，它是一种制造智能构件的技术，和3D打印同属于增材制造技术，并且已然成为增材制造技术的重点研究方向。3D打印和4D打印都是材料、力学、机械、仿生等多学科交叉的技术，在航空航天、生物医疗、汽车、电子以及日常生活领域都具有十分广阔的应用前景。

增材制造技术前沿：从3D打印迈向4D打印

——3D打印材料制备与成形技术前沿分论坛侧记

文/华中科技大学 伍宏志 吴甲民

2019年9月26日，“2019新材料国际发展趋势高层论坛——3D打印材料制备与成形技术前沿分论坛”在武汉国家会议中心成功召开。论坛由华中科技大学材料成形与模具技术国家重点实验室、中国工程院“中国3D打印材料发展战略咨询研究项目组”、南京工业大学3D打印中心、金属多孔材料国家重点实验室、陕西科技大学机电学院和《中国材料进展》杂志社承办。北京航空航天大学王华明院士、华中科技大学史玉升教授、金属多孔材料国家重点实验室汤慧萍教授、南京工业大学常辉教授担任论坛主席，论坛由华中科技大学史玉升教授和闫春泽教授主持。



刘咏教授和史玉升教授



李锋教授



伍尚华教授和闫春泽教授



冷劲松教授



林峰教授和闫春泽教授



顾冬冬教授

加拿大西安大略大学杨军院士、华中科技大学史玉升教授、哈尔滨工业大学冷劲松教授就4D打印技术原理、特点、研究和应用进展及前景作了3个精彩的前沿报告。华中科技大学同济医学院附属同济医院的李锋教授和华中科技大学协和医院的张志才主治医师报告了增材制造技术在骨科肿瘤治疗中的最新研究及应用进展。还有西安交通大学田小永教授、广东工业大学伍尚华教授、中南大学刘咏教授、清华大学林峰教授、湖南大学刘继常教授、南京航空航天大学顾冬冬教授、湖北三环锻造有限公司陈天赋高工、中国航空工业成都飞机设计研究所柏林研究员8位专家展示了纤维复合材料、陶瓷材料、金属材料、聚合物材料、仿生结构多材料的增材制造制备技术进展和最新成果。

精彩报告

史玉升教授作了题为“材料-结构-功能一体化增材制造技术：4D打印”的学术报告。史教授指出，“4D打印”刚提出来时，它的概念是“3D打印+时间”，时间就是新增加的一个维度，即3D打印成形件的形状在外界环境的刺激下，随着时间的推移而发生变化。他认为这个概念是片面的，不能阐述4D打印的内涵。史教授强调，相对于传统3D打印“静止”的特点，即3D打印成形件的性能是稳定的、是静止不变的，4D打印重点在变化，变化不仅是随时间变化，应当还随空间变化；变化不仅仅是形状，更包括成形件的性能和功能的变化。目前研究的最大问题是4D打印只关注形状的变化，未深入研究性能、功能的变化；而且变化不能是随意的，应当是可控的。报告最后史教授分享了对4D打印技术在“智能构件设计”、“材料与制造工艺”和“智能构件功能评价”方面的思考和团队探索研究成果。报告引发的思考和合作将积极推动4D打印从“现象演示阶段”到“各领域实际应用”发展。



李锋教授作了题为“增材制造技术在脊柱肿瘤治疗中的应用”的报告。他们团队应用增材制造技术对骨科植入物进行多孔仿生结构制造，micro-CT的结果表明所成形的骨科植入物骨整合能力理想，生物力学测试显示其屈服强度和可承受最大载荷性能优异，弹性模量和人体骨骼相近，满足人体的应用要求。并开展了临床应用，根据患者脊柱肿瘤的原始影像学资料，利用工程软件重建以病灶为中心的三维结构模型，同时自主设计了完美匹配该患者生理结构的人工椎体假体，通过3D打印技术进行快速制造。并结合MR（混合现实）技术，将患者病灶的虚拟3D影像投射到手术区域中，实现虚拟世界和现实世界信息互通。他补充说，这种个性化定制的人工椎体的形态结构与正常人体椎体相近，具有自稳定设计，可提供更优异的即刻稳定性，其内部梯度孔隙构造还可以诱导成骨和骨长入，临床使用及初步随访结果较满意。报告展示了增材制造技术在骨科治疗领域应用的成功案例和巨大前景。

冷劲松教授作了题为“4D打印形状记忆聚合物及其生物医学应用”的报告。他首先介绍了形状记忆聚合物材料作为一种典型的激励响应性可变形材料的工作原理以及其区别于形状记忆合金的特点，重点展示了基于形状记忆聚合物材料的复合材料设计实现材料性能提升和实现电驱动、热驱动、磁驱动、光驱动、选择驱动等的实例。还分享了近些年他们研制的4D打印形状记忆聚合物在我国航天领域的应用，如空间展开结构、柔性可展开电池、变形模具等。最后冷教授介绍了团队基于4D打印形状记忆聚合物的可变形性、可降解性和可设计性，设计、研制的血管支架、气管支架、器官修补组织、心脏封堵器等针对生物医用领域的相关研发。“巧妇难为无米之炊”，冷教授最后指出，未来人工智能时代，不光是大数据和计算，材料和结构仍是基础，4D打印技术前景广阔，希望以后多多交流、多多合作。



史玉升教授总结发言：本次“3D打印材料制备与成形技术前沿分论坛”是我国增材制造领域专家学者的一场盛会，各位专家的报告内容丰富、精彩纷呈，参会代表们交流十分热烈，激发了3D打印和4D打印研究的新思路，这是一个多学科交叉的领域，希望各位研究人员会后继续深入交流、共同合作，推动增材制造领域的发展。

2019 IFAM

数据驱动材料智能制备 助力产业转型升级

——材料智能制备加工分论坛侧记

文/上海交通大学 汪东红

材料的制备决定未来。当今信息化和智能化时代，材料智能热加工技术已成为材料科学与工程学科发展的前沿方向，对驱动传统产业转型升级，助力中国智造具有重要的意义。“2019新材料国际发展趋势高层论坛——材料智能制备加工分论坛”于9月26日在湖北武汉顺利召开。分论坛邀请了来自上海交通大学、哈尔滨工业大学、华中科技大学、北京科技大学和国家智能铸造创新中心等单位的14位先进制备加工领域知名专家作报告。论坛围绕材料智能设计、智能铸造、智能热处理、智能注射成形等专题展开研讨，涉及人工智能、材料基因组、集成计算材料工程、高通量计算与表征、数字孪生等材料加工领域的热点方向，聚焦于材料智能设计与加工制造的基础理论与关键技术。

分论坛开幕致辞



上海交通大学孙宝德教授 新材料制备与加工未来最前沿方向是人工智能与材料科学的结合，引起了各国高度重视，成为必争领域和未来竞争制高点。以智能化设计与过程控制方法取代传统加工过程中的经验+试验、设计与工艺控制方法，实现材料组织性能和产品质量的精确设计与加工过程的精确控制。材料智能制备加工的关键技术与技术路线要形成明确可行的方案，为材料智能设计与加工制造提供基础理论与关键技术。此次会议的举办，对于精准把握全球新材料与智能制造产业的发展趋势、对接国家战略需求具有重要意义。

高校院所，前沿研究

上海交通大学过敏意教授 解读了人工智能技术与算法对材料科学发展的意义，探讨了人工智能技术在材料设计与制备中应用的案例。明确指出人工智能遇见材料科学，是新材料设计与成形技术未来最重要的方向。

华中科技大学高亮教授 介绍了团队近年来围绕几何拓扑优化的拉胀超材料优化设计研究成果。采用下一代数字化设计技术CATO的技术路线，构建了自主可控的HAD-CAE软件。

北京科技大学尹海清教授 对Materials 4.0材料智能化设计与制造关键技术及基础问题进行了阐述。材料4.0集理论分析、计算模拟、实验表征及数据科学于一体，成为材料智能制造的方法论，实现了跨工序的协同、全生产链的优化及性能的准确预测。

华中科技大学周华民教授 研发了成形收缩的逐级协同调控技术、取向结构的在线感知与精确调控技术、成形装备偏载抑制与强化迭代学习控制等，大幅提高了产品精度和性能，并在航空侦察窗、精密手机透镜等的成形制造中成功应用。

上海交通大学顾剑锋教授 介绍了集成计算材料工程理念、发展途径及其在热处理领域的研究进展，认为热处理工艺过



过敏意



高亮



顾剑锋



尹海清



陈瑞润



龚攀

程的数值模拟是实现智能热处理的重要手段。对典型大型锻件从材料和热处理工艺角度找出关键科学问题和工程控制要素，通过新工艺、数值模拟和设备优化，达到控制冷却、调控组织、避免开裂、保证性能等效果，实现稳健制造。

哈尔滨工业大学陈瑞润教授 报告了一种利用电磁冷坩埚定向凝固技术高通量制备成分梯度TiAl合金的方法，其梯度通过熔池大小及添加合金成分来控制。借助成分梯度对高Nb-TiAl合金的成分和组织进行优化，通过组织及不同截面上试样的综合性能分析，获得了室温力学性能与高温蠕变性能优异的Ti-47Al-6Nb-0.1C合金。

华中科技大学龚攀副教授 采用多靶磁控溅射法在短时间内制备包含大量不同成分合金的材料库，利用其可同时得到大量不同成分的合金。针对合金的各种性能，设计了不同的高通量表征方法。

东北大学管仁国教授 针对高性能有色金属材料的迫切需求，提出剪切/振动耦合凝固组织细化与流变成形方法，自主研制了连续流变挤压设备，实现了难加工材料、超细晶与纳米材料的短流程加工，解决了高Mg含量Al-Mg合金的加工难题，为5G基站滤波器壳体的流变铸造技术提供了支撑。

北京科技大学张立峰教授 围绕如何“看穿”连铸过程中高温钢液的流体流动，介绍了测量钢渣界面流动速度和测量连铸结晶器内钢液流动状态的简单方法，得出了决定结晶器内理想流动状态的主要因素，找到了吹气量和通钢量之间的临界关系，为生产出高质量连铸还提供了指导。

上海交通大学疏达研究员 阐述了基于知识驱动与集成计算的高温合金复杂铸件智能铸造。采用集成计算材料工程方法，结合人工智能数据模型，构建了“组织—缺陷—力学性能”预测模型。以铸造工艺设计参数为输入，铸件工艺出品率、凝固缺陷与尺寸精度为输出，实现铸造软件自动流程计算与数据自动传递，融合机器学习算法，形成智能铸造软件系统，将加速航空发动机高温合金复杂铸件研发与应用。

北京科技大学付华栋副教授 以数据驱动的机器学习建模，揭示合金成分—工艺—性能的内禀关系，实现新材料成分理性设计与工艺快速优化。以高强高导铜合金为例，重点介绍机器学习方法在合金成分设计与工艺优化方面的探索性工作。

企业精英，产业实况

国家智能铸造产业创新中心杨军高级工程师 从“点、线、面、体”四个层次介绍了3DP技术在铸造领域基于智能制造环境下的研究与实践成果。以行业领先的万吨级铸造3D打印成型数字化工厂为例，从虚拟制造、智能生产、数字化管理3个维度，分析3DP技术在传统铸造领域的产业化应用研究成果，为其产业化应用和铸造业转型升级提供借鉴和帮助。

华中科技大学周建新教授 介绍了华铸软件中心在数字化、智能化、绿色化铸造技术的研发及应用。采用实验研究与数值模拟相结合的方法探索复杂钛合金铸件缩孔缺陷从凝固过程“形成”至热等静压过程“湮灭”的演变机理。实现缩孔演变过程的定量研究，指导铸造和热等静压工艺的优化设计，为复杂钛合金铸件缩孔缺陷量化控制提供理论和技术支撑。

聚焦热点，思想碰撞

• 材料智能制备加工智能化关键技术有哪些？如何实现材料制备的智能化？

华中科技大学周华民教授 重点突破材料成形智能化的关键技术有：模型驱动与数据驱动的协同技术，材料成形过程在线感知与调控技术，多源异构产品全生命周期大数据应用，生产过程智能计划、监控与调度技术，高效云服务平台。



周华民



管仁国



疏达



周建新



杨军



付华栋

超材料是世纪之交诞生的一个新的科学概念,跨越了材料科学、物理学和信息科学等多学科的研究前沿。基于这一概念,在过去近20年中发展出了一系列具有奇异特性的新型人工材料系统,可望在诸多领域产生颠覆性技术。超材料这一重大科学价值及其革命性的应用前景已经得到世界各国科技界、产业界、政府以及国防部门的密切关注。美国国防部将其列为“六大颠覆性基础研究技术”之一,欧盟和日本也都相继出台了超材料的重大研究计划并给予高强度经费支持。经过多年的发展,超材料已涵盖电磁学、光学、声学、力学、热学等多个学科领域,并在光学、通信、国防等应用领域崭露头角。为众多的新型超材料以及基于超材料与常规材料融合的新型材料相继出现,已经形成了新材料的重要生长点,给电子、信息、能源、航空航天等相关领域带来新的机会和变革。

多学科交叉前沿开辟材料学发展新方向

——超材料分论坛侧记

文/清华大学 文永正



范润华教授和周济院士



徐卓教授

2019年9月26日,“2019新材料国际发展趋势高层论坛——超材料分论坛”在武汉拉开帷幕。本次“超材料分论坛”是继2018年之后,第二次在“新材料国际发展趋势高层论坛”上举办。上一年度的分论坛取得了很好的交流效果,与会专家反响热烈、好评如潮。在此基础上,本年度超材料分论坛进一步扩大了规模,周济院士、陈延峰教授、邓龙江教授和彭华新教授作为主席,邀请的15位报告人均均为国内超材料及相关领域的知名专家或长期从事超材料研究的资深学者,代表了本领域国内研究的较高水平。分论坛由刘正猷教授、陈延峰教授、徐卓教授、邓龙江教授和朱锦涛教授主持,报告内容涵盖了聚合物光子晶体、电磁超材料、超透镜和超表面、非线性超材料等多个方面的前沿进展。本次超材料分论坛的召开,提供了一个分享国内外超材料领域最新发展、促进国内高校和科研院所之间交流合作的平台。论坛现场报告精彩纷呈,讨论交流热烈,学术气氛浓厚,与会代表纷纷表示收获颇多。



周济院士发表致辞: 本届超材料分论坛是第二次在IFAM上举办,相比上届,本届分论坛规模更大、时间更长,与会专家学者可以进行更充分的交流和讨论。经过近20年的发展,超材料已经成长为涉及电磁学、光学、热学、力学、声学等多学科交叉的前沿新材料,在多个重要应用领域呈现出颠覆性的发展前景。本届论坛不仅邀请到了许多国内已经取得突出成绩的知名专家学者,更有许多已经崭露头角的青年学者参加,涉及基础科学和工程应用等多个领域。相信在各位中青年学者的共同努力下,我国的超材料学科发展一定会取得更大的进步。

报告精彩瞬间

上海交通大学张荻教授介绍了自然分级构型化材料的探索研究。张教授从仿生学出发,将自然生物结构直接与人工组分耦合,构建了多种具有人为赋予特性的新材料,在光拉曼增强、光捕集增强和传感材料等领域均有突破性进展,为高性能材料创制提供了全新的理论依据和实现途径。

中国科学院化学研究所宋延林研究员介绍了基于光子晶体结构色的新型“绿色印刷”技术。他们开发的系统化加工工艺,已经可以实现大面积、高可控、精细化、低成本的结构色光子晶体的制备,并可以在色彩印刷的同时实现多种化学成分的检测,为新一代印刷技术的规模化应用奠定了基础。

华中科技大学杨振宇教授通过将多个不同超表面构成的超透镜阵列,可以利用综合协同分析,实现对多个光学参量信息的同时探测,发挥了超材料的集成化优势,可用于集成光学和微纳光学等领域。

东南大学蒋卫祥教授介绍了数字编码和可编程超材料方面的研究进展。通过将超材料与集成电路控制芯片相集成,可以实现对电磁波信号的相位、波束等性质的多重复杂控制,为下一代天线技术提供了有力支持。

电子科技大学韩天成研究员介绍了超材料在热流控制方面的概念和进展。他们基于变换光学演进而来的变换热动力学,实现了多种基于超材料的热流人工控制,包括热隐身、热集中、热幻象等,在能源和热管理等领域有重要应用前景。

上海大学肖诗逸教授建立了一套严格的物理机制,描述了光学开放系统的物理行为,并利用其对此类系统的光谱响应线形实现了有效的预测。

武汉大学邱春印教授报告了声子晶体的拓扑态的前沿成果,包括声谷霍尔相变、声谷涡旋态、声子赝磁场等多种声学拓扑新现象和新机制。

武汉理工大学李维副研究员介绍了超材料与吸波材料的智能复合方法,通过将传统材料和超材料有机结合、形成互补,在增强电磁吸波特性的同时,实现了光学透明、耐高温、智能化等多种工程应用特性。

华中科技大学朱锦涛教授基于超分子聚合物实现了多种光子晶体弹性体,实现了具有自修复、无角度依赖、机械变色响应的光子晶体材料,赋予了结构色更为优异的性能和广阔的应用方向。

西安交通大学徐卓教授采用碳纤维构筑超表面,研究了新型的隐身复合材料。该材料对电磁波有很好的吸收散射特性,设计自由度大,而且具有很好的共形性,可拓展到异形曲面结构。

浙江大学秦发祥教授报告了在可编程微线条超复合材料方面的最新成果,通过基元和序构的调控,实现了材料和结构一体化,在负介电常数、等效电导率、电磁损耗等方面均可有效人工调制。

杭州电子科技大学张雪峰教授介绍了高性能微波吸收材料,特别是跨尺度多重损耗耦合的复合吸收体和多场耦合协同的微波吸收材料,有望成为发展微波吸收材料的新方法和新理论。

清华大学文永正副研究员介绍了基于超材料的人工光学非线性,通过超材料结构耦合,实现了谐波产生、光电直接转换等多种非线性特性,摆脱了对传统材料的依赖,是一种全新的物理机制。

光启高等理工研究院周添博士从工程化角度介绍了电磁超材料目前国际发展趋势和主要的市场应用需求,并展示了光启在相关领域的应用研究进展和成果。



张荻教授



秦发祥教授



邱春印教授



张雪峰教授



朱锦涛教授



文永正副研究员

多学科交叉，共话智能材料

——智能材料前沿分论坛侧记

文/西安交通大学 肖安冬 马天宇

2019年9月26日，“2019新材料国际发展趋势高层论坛——智能材料前沿论坛”在武汉国际会议中心成功举办。本次论坛由西安交通大学前沿科学技术研究院、西安交通大学金属材料强度国家重点实验室、国家自然科学基金委“铁性玻璃”重点项目群及《中国材料进展》杂志社共同承办。南京大学祝世宁院士、清华大学南策文院士和西安交通大学任晓兵教授担任分论坛主席。

任晓兵教授在开幕式上谈到，希望以此论坛为契机，为国内从事铁性智能材料研究的学者构筑一个高水平的学术交流平台，推动铁性智能材料研究及应用，并希望通过与会专家深入充分的交流讨论，共同探索突破铁性材料性能瓶颈的新原理和新技术。

智能材料是一种能感知外场并产生驱动的重要功能材料。近年来，国际上智能材料的研究日趋活跃，出现了一批可能导致全新应用的新原理和新材料。包括我国在内的世界主要国家均设立了智能材料相关的重大项目，期待加速该重要领域的研究。

在为期一天的论坛上，与会学者围绕“智能材料前沿”这一主题进行了热烈的讨论和交流。北京科技大学王沿东教授，北京航空航天大学蒋成保教授、赵新青教授、李岩教授，哈尔滨工业大学蔡伟教授、冷劲松教授，东北大学高建荣教授，中国科学院物理研究所王文洪研究员，中国科学院上海硅酸盐研究所李国荣研究员、王根水研究员，中国科学院金属研究所李昂研究员，武汉理工大学董丽杰教授和西安交通大学任晓兵教授、丁向东教授、杨森教授、李飞教授共16位智能材料专家分别在铁性玻璃、形状记忆合金、磁性材料、铁电陶瓷、柔性薄膜、智能聚合物和固态制冷材料等领域进行了专业报告。专家们的新成果和新思想激发了参会代表的热烈讨论与深入交流。

铁性玻璃正成为新方向

近年来，形状记忆合金、压电材料、磁致伸缩材料等铁性智能材料的性能提升遭遇瓶颈，亟待发展新原理和新思路。西安交通大学任晓兵教授团队等基于这三类材料从序参量、畴结构到宏观性能层次的物理平行性，提出了“铁性玻璃”这一概念，并在这类以纳米畴为特征的铁性玻璃中发现了标准铁性材料从原理上无法实现的奇异性能。任晓兵教授在报告中详细介绍了“铁性玻璃”概念提出的科学背景、物理原理与潜在应用，展示了铁性玻璃所产生的重要发现和应用成果，并展望了铁性玻璃的研究方向和发展前景。

智能金属：形状记忆合金

北京科技大学王沿东教授在他的报告中分享了受限马氏体合金的宽温域零滞后超弹性行为，并深入探讨了这一新功能的微观机制和物理原理。哈尔滨工业大学蔡伟教授介绍了几类典型形状记忆合金在空间带电粒子辐照后的微结构与性能变化，并对如何提高这些材料的空间服役性能进行了展望。北京航空航天大学赵新青教授介绍了具有应变玻璃转变的零膨胀和恒弹性模量合金，并探讨了这些合金材料的应用。北京航空航天大学李岩教授围绕TiZr基形状记忆合金的马氏体相变行为，探讨了该类材料中的特殊现象和相应的新性能。



智能磁体：大应变磁性材料

北京航空航天大学蒋成保教授分享了他们团队基于相变和磁性调控思路所设计的大磁致应变新材料，并讨论了进一步提高性能的思路与方法。中国科学院物理研究所王文洪研究员主要介绍了他们探索磁性功能材料的新思路，以及所发现的室温斯格明子，并探讨了在磁性存储器件中的潜在应用。

东北大学高建荣教授分享了他们在稀土磁制冷材料领域中的研究进展，重点介绍了元素掺杂对磁热材料相变和性能的影响机制。西安交通大学杨森教授以应变玻璃为主题，重点介绍了在铁磁应变玻璃中发现的低场大磁致伸缩效应，并探讨了纳米应变畴对磁场的响应机制。



智能陶瓷：弛豫铁电体

中国科学院上海硅酸盐研究所李国荣研究员介绍了他们对弛豫铁电体结构与性能关系的研究成果，并分享了提高铁电性能的改性方法。中国科学院上海硅酸盐研究所王根水研究员分享了钛酸铋钠（BNT）基铁电体和PMN-BNT铅基弛豫铁电体在储能应用中的研究进展。西安交通大学李飞教授讨论了PMN-PT高压电性能的起源，介绍了压电性能优于传统PZT的新体系，并分享了他们提高压电性能的新方法。

更多精彩报告

西安交通大学丁向东教授分享了他们在应变玻璃研究中获得理论成果，从介观尺度理解应变玻璃的形成机制，并给出形成应变玻璃的统一判据。武汉理工大学董丽杰教授介绍了基于量子点的柔性荧光薄膜研究。哈尔滨工业大学冷劲松教授作了题为“智能聚合物复合材料结构：材料、力学设计、4D打印及其应用”的报告，展示了一些尚属世界首例的智能结构。中国科学院金属研究所李昂研究员主要介绍了具有庞压卡效应的固态制冷材料，并探讨了对固体制冷技术的发展所带来的新机遇。



任晓兵教授总结发言：通过本次分会，我们看到了各式各样的智能材料和各方面的新进展，可以说我国智能材料领域很多方向走在了国际前沿。分会场上很多年轻学者们目光如炬，从头到尾听得很认真，我很受感动，感受到我们这个领域后继有人。希望若干年后，我们的年轻学者在国际会议上也作出如此精彩的报告。

融百家所思，成生物医学之言

——生物医用材料分论坛侧记

文/武汉理工大学 侯袁婧 李智

生物医用材料 (Biomedical Materials) 是用来对生物体进行诊断、治疗、修复, 替换其病损组织、器官或增进其功能的材料。它是研究人工器官和医疗器械的基础, 已成为当代材料学科的重要分支之一。生物材料的发展不仅强调改善材料自身理化性能和生物安全性、可靠性, 而且更强调赋予其生物结构和生物功能, 使其在体内调动并发挥机体自我修复和完善的能力, 重建或康复受损的人体组织或器官。随着社会经济的发展和水平的提高、人口老龄化、新技术的注入, 生物医用材料正成为世界经济的支柱产业。第三次产业革命和现代医学的发展, 对生物医用材料科学技术提出了新的挑战和机遇。

IFAM2019生物医用材料分论坛由武汉理工大学湖北省生物材料工程技术研究中心和《中国材料进展》杂志社承办。旨在研讨国内外生物材料科学与工程前沿研究的进展和发展趋势, 以及生物医用材料临床研究与应用进展, 致力于促进生物医用材料科学领域的交流与发展。分论坛邀请了国内生物医用材料领域13位知名专家, 围绕心血管材料、修复材料、生物材料研发与应用转化方面作了精彩报告, 所有报告均为领域内前沿技术和成果, 代表了国内外生物医用材料的重点研发方向和较高水平。

主持人王欣宇教授在总结致辞中表示, 感谢各位专家们带来了精彩的报告, 也要感谢所有与会人员, 在大家的支持下, 我们圆满完成了此次会议的各项议程。”

报告精彩瞬间

四川大学王云兵教授以“用于心血管疾病治疗的微创介入心脏瓣膜与血管支架材料前沿研究进展”为题, 介绍了各种现有心脏瓣膜的局限性, 包括过程繁琐、无法紧急应用、戊二醛残留醛基加速钙化和炎症反应。同时介绍了自由基聚合交联的心脏瓣膜, 防周漏技术、预装干瓣膜技术, 研究转化和心血管支架的发展历程。

于振涛教授Q:“瓣膜是什么材料做的高分子? 是否可以实现自膨胀?” **王云兵教授A:**“我们使用的是猪心包, 不用金属, 因为很难加工, 自膨胀是瓣膜的支架自膨胀。”

华中科技大学杨祥良教授以“抗肿瘤靶向纳米药物的研究与转化”为题, 通过提出5类抗肿瘤纳米药物靶向策略, 介绍抗肿瘤靶向纳米药物的研究与转化的进展: ① 抗肿瘤纳米药物靶向输送“五得”原则, 发展了非PEG化亲疏水快速反转策略, 增强智能纳米凝胶的肿瘤组织靶向性与治疗效果; ② 发展基于肿瘤再生细胞来源的微颗粒 (MPs), 揭示MPs软硬度对纳米药物PK/PD行为的影响, 特别是对肿瘤干细胞的杀伤作用; ③ 通过HBO改善肿瘤缺氧微环境, 降解肿瘤胞外基质, 增加纳米药物在肿瘤部位的蓄积与穿透, 同时提高肿瘤细胞药物敏感性, 发现HBO并不会增加DOX的心毒性等不良反应; ④ 发展了基于HES的RES阻断靶向技术、共输送纳米药物和共价偶联纳米药物等; ⑤ 发展温度、pH敏感的PIB纳米凝胶, 实现肿瘤毛细血管和供血动脉的完整栓塞, 同时抑制肿瘤组织血管新生, 并通过负载化疗药物实现肿瘤化疗与栓塞的协同治疗。

华中科技大学张胜民教授以“微纳多级3D仿生结构生物材料用于界面多组织再生”为题, 通过评估制备的CaP生物活性纳米粒子生物安全性, 进一步构建了微纳生物活性微球和仿生梯度组织支架。用同一个组织支架实现两种和多种组织的再生, 提出组织工程第四要素: 物理因子。



王欣宇

王云兵

杨祥良

于振涛

张胜民

更多精彩内容

暨南大学于振涛教授 报告题目为“外科植入物用特种医用钛合金材料研发与思考”, 从医用钛合金材料的特点、分类、材料加工、组织与性能调控等诸方面进行综述, 重点介绍了研发团队在钛合金特种管丝箔材方面的最新研究进展, 探讨了微纳结构对细胞的影响。

东南大学顾宁教授 以“生物医用微纳气泡”为题, 概要介绍了生物医用微纳气泡目前的主要发展状况, 重点结合团队的部分工作, 介绍了响应性微气泡、包膜气泡的主要制备方法, 以及自由微纳气泡、磁性微气泡的设计, 讨论了理论研究向应用转化过程中亟需解决的一些问题。

南开大学孔德领教授 在题为“基于细胞外基质的组织再生材料”的报告中介绍了动物组织脱细胞产品, 制备了结构尺寸可控的ECM支架材料, 实现了组织的整合和再生。

华南理工大学杜昶教授 报告题目为“受生物矿化启发的仿生组织修复材料研究”, 基于对生物矿化组织中有机基质调控磷酸钙矿物形成的基础研究, 利用有机基质介导矿化, 对无机材料成分、晶体形貌、多级结构进行调控, 制备仿生无机材料及有机无机复合材料, 研究并评价仿生材料与细胞和组织的相互作用。

四川大学樊渝江教授 以“用于抗肿瘤药物输送的高分子胶束载体材料”为题, 聚焦高分子胶束, 从材料设计、胶束的组装和药物装载、药物可控释放、以及抗肿瘤研究等方面, 介绍了高分子胶束纳米载体在肿瘤治疗中的研究现状和进展, 分析其面临的挑战和应对策略。

浙江大学高长有教授 以“软骨修复与再生材料及组织再生自适应性”为题, 介绍了软骨修复与再生材料的背景和现状和自适应性材料。通过材料结构的设计与优化, 可以原位募集细胞, 实现软骨组织的原位诱导再生, 避免软骨组织工程中使用细胞时面临的诸多限制问题。

武汉理工大学樊李红教授 以“生物医用材料的研发及产业化”为题, 以负压封闭引流生物海绵和根管修复生物陶瓷材料为例, 介绍了生物医用材料的研发及产业化。

大连理工大学王锦艳教授 介绍了“一种生物医用材料——新型杂环高性能聚合物及其生物相容性”, 系统介绍了该类新型杂环聚合物的结构调控及其生物力学性能的关系。该类材料既可以采用与羟基磷灰石共混改性热成型加工, 还可以采用表面化学键合骨形态发生蛋白 (BMP-2) 赋予其生物活性, 避免由于BMP-2过度释放引起的并发症。

中山大学全大萍教授 以“去细胞神经基质材料的基础研究”为题, 介绍了神经缺损修复两方面的基础应用研究, 包括脱细胞神经产品——“神桥”以及去细胞神经基质材料的组分分析、生物功效和可加工性。

上海曼恒数字技术股份公司刘海贝博士 介绍了“3D生物打印应用研究进展简介”, 包括打印原理、打印材料, 着重介绍了其在组织工程、药物载释和再生医学中的应用。



顾宁

樊渝江

高长有

孔德领

樊李红

王锦艳

杜昶

刘海贝

全大萍

2019 IFAM



打破传统合金化理论，走进“合金新世界”

——高熵合金与非晶材料分论坛侧记

文/燕山大学 吕敬旺

高熵合金与非晶合金材料作为一种新兴的重要结构和功能材料，不仅具有高强度，高硬度，优良的耐磨损、耐腐蚀性能，还表现出了优异的磁学性能以及催化性能等。由于高熵与非晶合金独特的微观结构而使其相较于传统的金属材料具有更优异的综合性能。因此，在核工业、航空航天、石油化工、生物医学、精密机械、电子信息等领域具有广泛的应用前景。这广泛引起了材料研究工作者的研究热情，使得越来越多的材料人投入到高熵与非晶合金材料的研究领域中，同时也促进了这一研究领域的进一步发展。随着对高熵与非晶合金材料研究的深入，它们的应用前景越来越广，对各行各业的影响也變得越来越大。

2019年9月26日，由燕山大学亚稳材料制备技术与科学国家重点实验室、中国科学院物理研究所极端条件物理重点实验室、钢铁研究总院纳米材料工程技术研究中心、中国科学院金属研究所沈阳材料科学国家研究中心、北京科技大学新金属材料国家重点实验室、《中国材料进展》杂志社共同承办的“2019新材料国际发展趋势高层论坛——高熵合金与非晶材料分论坛”在美丽的江城武汉拉开帷幕。本次论坛由刘日平、周少雄、张海峰、柳林等知名专家教授担任分论坛主席，同时邀请了国内高熵与非晶材料相关领域的17位知名专家参会，各位专家详细介绍了有关高熵合金与非晶材料的物理化学性质研究、制备工艺原理以及实际应用领域的相关问题。此次论坛几乎涵盖了高熵与非晶合金材料的所有重要研究领域。

论坛主席刘日平教授对各位专家、代表的积极参与和支持表示感谢，他指出，目前高熵与非晶合金作为新型合金材料具有无限潜力，希望诸位材料人能够不懈努力、勇攀高峰，不断推动这一领域的蓬勃发展。



精彩报告

材料基因工程是近年来以加速材料研究和材料探索为主要目标的新理念。中国科学院物理研究所柳延辉研究员在报告中介绍了材料基因工程和独特的高通量实验方法在非晶合金材料探索中的应用。结合材料结构和性能的高通量表征，材料基因工程可在短时间内筛选出具有预期特性的新材料，大幅提高新材料研发的效率。非晶合金固有的本征室温脆性及难以加工性一直是这类材料工程应用上的难点。针对这一问题，燕山大学马明臻教授指出，在非晶合金的铸造过程中，液固界面扩散、铸型的器壁效应、熔体快速冷却热传输的界面阻力、熔体形核动力学等因素都会对锆基块体非晶合金的玻璃形成能力和凝固行为产生重要的影响。重点介绍了锆基块体非晶合金在铸造过程中各影响因素的作用机理和作用规律。无独有偶，针对非晶合金难以加工的问题，华中科技大学柳林教授介绍了团队近年来在非晶合金成形与加工方面的研究进展，包括：非晶合金在过冷液态区的热塑性微成形、激光3D打印成形以及超音速热喷涂成形。重点介绍了成型工艺对非晶合金微结构及性能的影响，分析了各成型技术存在的问题和拟解决途径。中国科学院金属研究所李毅研究员作了非晶合金的回春及其极限的相关报告，提出非晶合金会发生由低能态向高能态转变的过程，即“回春”或“年轻化”。回春处理可以有效提高非晶合金的能态，引入更多流变单元和自由体积进而显著改善其室温变形能力，获得极高能态非晶合金。中国科学院宁波材料技术与工程研究所王军强研究员介绍了非晶合金的弛豫与晶化动力学之间的内在联系，并使用闪速差示扫描量热仪研究了非晶合金能量状态及弛豫模式对晶化的影响，建立了非晶合金在升降温过程中玻璃态、液态、晶态之间的相转变图。还介绍了非晶合金与过冷液体之间存在遗传特性，可通过调控非晶合金的状态来控制过冷液体的晶化行为。此外，非晶合金在高频通讯器件方面具有巨大的应用潜力，东南大学沈宝龙教授在报告中详细介绍了软磁性块体非晶合金的制备及其塑变行为，解释了非晶结构与塑性之间的关联性，为开发大塑性磁性块体非晶提供了新的方向和理论依据。

中国科学院金属研究所张海峰研究员提出了一类新型快速凝固亚稳合金催化材料，指出这种亚稳合金催化材料不同于常规催化材料，不受合金平衡相的限制，可以获得过去一般方法所不能获得的新型组分和结构，不仅具有高的催化活性，而且还具有优异的选择性和稳定性。目前，具有优异性能的高熵合金材料不断被研发出来，燕山大学李工教授对高熵合金材料的显微结构演化与结构性能的关联作了介绍，同时总结了基于成分设计及微结构调控获得多尺度性能优良高熵合金的研究现状，并对高熵合金及其复合材料的潜在应用作了展望。西北有色金属研究院电子材料所操齐高所长提出了一种新型气溶胶辅助石墨烯载高熵合金纳米材料的制备方法，采用该方法制备的高熵合金纳米材料性能优良，展现出了巨大的研究价值和应用前景。强度和塑性作为金属结构材料重要的力学性能指标通常呈倒置关系，如何同步提高金属材料的强度与塑性是国际学术界重要的科学问题。中国科学院金属研究所张哲峰研究员以高熵合金、铜合金、孪生诱发塑性钢等面心立方金属材料为研究对象，通过改变上述金属材料的合金成分、应变速率及变形温度，开展了系统的拉伸实验与微观组织及变形机制的研究。通过合金设计、降低应变速率和变形温度均可实现上述金属材料强度与塑性的同步提高，而微观组织或晶粒尺寸改变无法打破强度与塑性之间的倒置关系。北京科技大学张勇教授介绍了高熵合金柔性材料，如高熵合金薄膜、纤维以及高熵合金箔等具有可弯折特性的材料，并综述了这一方向的研究现状和未来的发展。



张海峰 研究员



张哲峰 研究员



操齐高 高工



2019 IFAM

可研可用 纳米材料绽放光彩

——纳米材料分论坛侧记

文/武汉理工大学 郭瑞婷 张媛媛

纳米材料是指在三维空间中至少有一个维度处在纳米尺度范围(1~100 nm)或由它们作为基本单元构成的材料。从著名物理学家、诺贝尔奖获得者理查德·费曼最早提出纳米尺度上的科学和技术问题开始,科学家们便开始了对该领域的广泛关注和研究。如今,为应对全球范围的能源危机、环境污染、温室效应等问题,新兴纳米材料和纳米技术的研究开发已成为纳米科技领域中最富活力和研究内涵的科学分支,并逐步呈现全球化、多元化、多学科融合的特点。纳米材料因具有体积效应、量子尺寸效应、表面与界面效应、量子隧道效应和介电限域等五大特性,在能源转化与储存、绿色减排、环境检测、生物、医学等领域有良好的应用前景。“2019新材料国际发展趋势高层论坛——纳米材料分论坛”不仅介绍了该领域的前沿进展及工程应用中的重大成果,同时研讨了纳米材料在能源、环境、生物等领域的发展趋势,促进了各领域专家的合作交流。

精彩报告

浙江大学彭笑刚教授指出量子点近年来在工业上已经有了一些应用,但远低于其预期的潜力。光致发光和电致发光均基于激发态的产生和弛豫,因此激发态的性质应该是发射器设计、合成、理解和应用的关键。具体而言,作为有前途的发光材料,胶体量子点在很大程度上依赖于其激发态特性,而不仅仅是基态特性。彭笑刚教授指出理想激发态的实现应该是合成胶体量子点的最佳目标。

加州大学洛杉矶分校Bruce Dunn教授提出在锂离子电池中,锂离子在纳米维度的电极材料中存在赝电容型储存机制,并以二氧化钨(MoO_2)、锰酸锂(LiMn_2O_4)和二硫化钼(MoS_2)为例,介绍了纳米材料的外在赝电容行为,以及如何从薄层电化学方面考虑它们的快速动力学和赝电容响应。Bruce Dunn教授认为,赝电容材料同时具有电池材料的能量密度与电容材料的功率密度,填补了能源存储领域的一个空白。

苏州大学李亮教授介绍道,压印平面有序阵列光栅结构可提高光捕获,窄带隙材料复合拓宽光谱响应范围的同时也降低了载流子的复合。通过发展梯度带隙电子传输层可提高载流子在界面的分离效率,当构筑铁电/钙钛矿体相异质结平面阵列时,则可同时提高载流子的分离和传输效率。最后,李亮教授指出,采用三维有序导电阵列电极和等离子体处理电极的策略可提高载流子的收集效率。

华南理工大学崔志明教授指出电催化剂是决定燃料电池效率、稳定性及成本的主要因素。铂基金合金是目前燃料电池中广泛使用的催化剂。常规的合金是无序结构,合金元素在电池运行中易析出流失,造成催化剂活性衰减。有序结构催化剂如金属间化合物具有有序的原子分布,因此具有确定的表面组分和规则的活性位分布,并且经过高温热处理使结构更稳定。此外,崔教授还介绍了其课题组在有序结构催化剂研究方面的进展,包括:结构稳定机理,可控合成技术,在燃料电池、金属空气电池等电化学能源器件的电催化反应中的应用。

国家纳米科学中心李国栋研究员介绍了超粒子的构筑在催化方面的最新进展,讨论了如何选择各种功能性的构建基块,调整装配单元的空间分布,以及如何改变构建基块之间的电子或能量耦合,以实现具有高性能的光电催化、电催化或热催化的超粒子。



彭笑刚



Bruce Dunn



李亮



崔志明

武汉大学付磊教授介绍了在液态金属上精确合成2D原子晶体的最新工作。液态金属中的原子倾向于剧烈移动并以非晶态和各向同性的方式排列,液体表面光滑且各向同性,流体液相中的空位使杂原子的嵌入成为可能。从液体到固体的相变将促进对传质路径的独特控制,这可能会触发新的生长机制。此外,液态金属的优异流变特性使研究者能够探索在表面生长的2D原子晶体的自组装,这可以基于派生的集体特性(例如集成设备)激活新的应用。

湖北大学王贤保教授指出,突破太阳能光热应用的关键瓶颈是将低品位、分散不连续的太阳能转换成高品位的热能,以便最大限度地利用太阳能。介绍了具有高效稳定光热转换性能的碳基纳米复合材料的设计合成,开发出的太阳能蒸汽技术可以直接将低品位的太阳能转换成高品位的、应用价值大的热能和蒸汽能。这种技术可以将超过90%的太阳能转化成蒸汽能,与当前蒸汽轮机(24%)和太阳能电池光伏发电(15%)相比,具有重要的科学研究价值和巨大的市场开发前景,为简捷高效地利用太阳能资源提供一个全新的技术,初步探明了太阳能蒸汽技术在污水处理、海水淡化等领域的应用前景。

清华大学张如范教授详细介绍了宏观长度碳纳米管的可控制备、单根碳纳米管的光学可视化及极致性能研究、高强度碳纳米管管束的制备、纳米环保材料的开发等。展望了该领域的发展方向,认为超长碳纳米管的研究还有很长的路要走,除了进一步深入了解增长机制外,还要做到更精确地控制其加工合成,实现结构可控的批量生产。

武汉理工大学尤雅教授针对钠离子电池存在工作温度区间较窄的问题,设计合成了具有碳纳米管串联普鲁士蓝晶体颗粒结构的复合材料,碳纳米管优异的电子传导能力及形成的相互交叉的导电网络可以保证每个颗粒之间以及颗粒内部到集流体之间有效的电子传输,材料在低温下的电荷转移阻抗显著下降,低温下动力学特性得到明显提高。

清华大學程虎虎博士介绍了从化学修饰到微结构控制,从形态设计的宏观组件到其在能源和环境系统中的功能性应用等方面石墨烯调控的相关工作。这些合理调控的石墨烯片和结构合理的组件在功能性储能材料和设备以及清洁水生产系统中具有广阔的应用前景,该报告将促进石墨烯基础研究在新型应用上的进一步发展。

清华大学程新兵博士梳理了金属锂电极和固态电解质匹配过程中存在的材料和界面化学问题,提出了复合固态电解质、界面修饰和混合导体金属锂网络等策略。指出为了获得长循环、高容量和高安全的金属锂电极,固态电解质和金属锂界面处的扩散和反应行为、稳定界面构建、界面阻抗降低、与正极的兼容性、工作状态下电池的表征、高通量筛选、电池整体考虑等还需要进一步设计。通过化学、工程、能源材料、机械和电池管理等的协同合作,固态金属锂电极的实际应用也会发生在不久的将来。



麦立强 教授

法国洛林大学Jean-Jacques Gaumet教授、华中科技大学周军教授、复旦大学董安钢教授、四川大学林紫锋研究员、华侨大学魏展画教授、武汉理工大学徐林研究员及华中科技大学甘霖副教授都作了精彩报告,提出了各自对纳米材料在储能等相关领域应用的深刻见解。最后,武汉理工大学麦立强教授对分会进行总结,感谢了各位专家的莅临及精彩报告,在让大家畅快地交流学术思想的同时也给科研工作者带来极大的帮助和震撼,会议取得了圆满成功。



王贤保



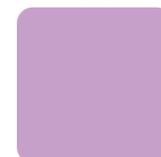
张如范



尤雅



Jean-Jacques Gaumet



林紫锋

群策群力谋发展 继往开来展宏图

——功能晶体材料与晶体生长分论坛侧记

文/西北工业大学 程渊博 于晖

功能晶体材料是光电功能材料的主体，经历了从天然晶体到人工晶体、从体块晶体到薄膜、从自组装到人工微结构、从大晶体到微纳米晶体制备的发展历程。通过精确的成分设计和精细的结构控制获得具有特殊的物理、化学、力学，乃至生物学的性能，已成为微电子、光电子等现代科学技术发展的基础材料和核心技术。功能晶体材料通过晶体生长技术获得，20世纪50年代以来，以单晶硅为代表的半导体材料的发展推动了晶体生长理论研究和技术的发展。近年来电子材料、光电子材料、非线性光学材料、超导材料、铁电材料、金属单晶材料的发展引出一系列理论问题，并对晶体生长技术提出了越来越复杂的要求，推动了人工晶体生长技术的快速发展。我国在功能晶体材料及晶体生长技术领域的研究工作发展迅速，取得许多国际先进乃至领先水平的研究成果。

2019年9月26日，“2019新材料国际发展趋势高层论坛（IFAM2019）”中首次设置的“功能晶体材料与晶体生长分论坛”在武汉国际会议中心成功举办。分论坛由西北工业大学、天津理工大学、山东大学、中国科学院上海硅酸盐研究所、中国科学院福建物质结构研究所、中国科学院新疆理化技术研究所和《中国材料进展》杂志社承办，共邀请了14位国内功能晶体材料和晶体生长领域的高校和研究所的专家作了本领域最前沿的学术报告。本论坛由介万奇教授、陶绪堂教授以及于浩海教授、苏良碧研究员主持。

激光与非线性光学晶体

山东大学王继扬教授介绍了高质量RECOB系列晶体的生长方法，提出了寻找最大有效非线性系数的创新思维。通过优化设计及10W级钕离子掺杂热管理技术，利用四场耦合，拓展波长达到半导体激光管的黄光区。天津理工大学胡章贵教授基于阴离子基团理论，在硼酸盐体系中发现具有 B_3O_7 基团的LBO、CBO和CLBO系列非线性光学晶体。介绍了采用助溶剂生长体系，得到低粘度、低挥发和高稳定性的LBO晶体；通过Al掺杂解决了CLBO晶体易潮解的问题，并生长得到超大尺寸晶体。中国科学院福建物质结构研究所叶宁研究员分享了新型非线性光学晶体的探索和新材料设计的思路。通过调节金属硝酸盐的pH值，得到倍频系数较高的非线性光学晶体。将探索体系由无机共轭体系拓展到有机共轭体系，得到多种氰尿酸盐体系新材料。山东大学于浩海教授介绍了蓝光半导体直接泵浦掺镨激光晶体及器件的相关研究，提出了“三套准则”：镨离子掺杂可见波段激光晶体筛选准则、可见波段调Q光开关材料的筛选准则和可见波段超短锁模脉冲元件筛选准则。中国科学院新疆理化技术研究所张方方研究员指出，深紫外非线性光学晶体设计的关键科学问题是实现带隙-倍频-双折射率三要素平衡。报告介绍了“通过增大轨道间杂化作用或降低电荷转移能”提高非线性光学效应、人工蜂群算法结合DFT进行材料结构预测的设计策略，以及氟化硼酸盐系列晶体结构、性质、生长及应用之间的关系规律。中国科学院上海硅酸盐研究所苏良碧研究员利用稀土离子掺杂 CaF_2 、 SrF_2 晶体中自聚集效应，在低浓度下实现高效率的中红外激光输出，实现了长期以来中红外激光晶体必须高浓度掺杂的现状。发展了一种高通量制备单晶光纤的方法，高效率获得激光。中国科学院理化技术研究所林哲帅研究员介绍了基于功能基元探索高性能非线性光学晶体，发现NLO晶体是一种重要的功能材料，建立了基于第一性原理的大规模计算搜索筛选系统。



半导体晶体

西北工业大学介万奇教授介绍了晶体生长过程的控制和数值模拟。通过改进的常压熔体定向凝固，可以生长得到大尺寸高质量的晶体。晶体结晶质量严重制约着晶体探测性能，通过调控不同元素分压及后续退火工艺，得到探测器级单晶体。对线阵探测器电场进行模拟优化，得到Narrow Guarding结构，开发出单元、线阵和面阵探测器。山东大学陶绪堂教授介绍了电阻率可控稳定性好的大尺寸 β - Ga_2O_3 单晶体的近平界面快速高效生长，并分析其光学热学各向异性。研究发现，Ti掺杂“日盲”探测器具有较高开关比和较小上升时间，制备的肖特基二极管理想因子达到1.1，处于领先水平。华南理工大学李国强教授指出我国自主核心芯片技术的重大发展意义。分析了第三代半导体材料及芯片的优异性能、发展瓶颈及硅基芯片的战略意义和技术难点。吉林大学姚明光教授利用高压，以低维碳为构筑单元，获得长程有序非晶碳簇结构、V碳等新型碳材料。利用高压原位光谱方法实现高压原位压缩强度的测量，发现了单轴应力驱动的新结构相变。湖北大学何云斌教授介绍了氧化物半导体薄膜的外延法生长和厚度依赖属性。



铁电晶体

中国科学院上海硅酸盐研究所罗豪魁研究员提出偶极缺陷模型，阐明了PMNT晶体介电性能的调控机理，通过交流极化，大幅度提高 d_{33} ，最高达到4635pC/N。相较于传统PZT铁电陶瓷，弛豫铁电单晶根据自身特点进行材料和结构优化可制备出高性能器件。清华大学李强教授介绍了PLZST反铁电单晶的相变和畴结构，在正交相中获得了增强的负电热反应，在四方相中观察到相变畴记忆效应，实现薄膜、陶瓷和体单晶之间的衔接。



介万奇教授

这次会议具有专业性、高水平、年轻化的特征，有很多新的东西、新的思路值得我们学习。这是高层论坛首次设置“功能晶体材料与晶体生长分论坛”，我们设立这样一个分论坛，通过这样一个材料大家庭的盛会，让我们和广大材料届的同行结合得更加紧密。从晶体到器件是一个很复杂的过程，通过与大家广泛的交流，探讨新的晶体、新的思路，实现学科交叉，让更多的晶体在更多的领域实现应用，引领晶体材料向前发展。

——分论坛秘书长介万奇教授



王继扬教授

晶体生长作为材料中的一个分支，我们还有很多工作要做，我们要继续推动、解决面临的深层次问题，实实在在从应用出发，为将来的发展指出方向。最后，勉励年轻一辈以学术为重，不管遇到多大的难题，都要携手共渡。希望今后在年轻一辈的带领下，晶体生长事业长青。

——分论坛秘书长王继扬教授

2019 IFAM

光电材料：站在物质、能源、信息交汇的前沿

——光电材料国际论坛侧记

文/武汉理工大学 肖俊彦

武汉东湖新技术开发区，是武汉市乃至湖北省科技创新的中心，是国家自主创新示范区。这里诞生了中国第一根光纤、第一个光传输系统，拥有国内最大的光电子信息产业集群，同时也是中国光电子领域基础研究的重要基地，有着“中国光谷”的美誉。本次在武汉举办的“2019新材料国际发展趋势高层论坛”，首次将光电材料作为一个分论坛主题方向。

本次“光电材料分论坛”由武汉理工大学、华中科技大学等高校以及《中国材料进展》杂志社承办，邀请了15位国内外光电材料领域的知名学者作特邀报告。其中包括澳大利亚科学院、澳大利亚技术科学与工程院双院士、中国工程院外籍院士、现任上海理工大学校务委员会执行主席的国际著名光学专家顾敏教授，欧洲科学院外籍院士、现任香港城市大学副校长的国际著名有机高分子光电材料与器件专家Alex Jen（任广禹）教授，国际著名纳米碳材料专家、美国凯斯西储大学戴黎明教授，国家万人计划科技创新领军人才、华中科技大学唐江教授，多次创造钙钛矿太阳能电池效率记录的中科院半导体研究所游经碧研究员，有机太阳能电池效率记录保持者、中南大学邹应萍教授等。报告内容丰富，涵盖了光电信息材料与器件、光电能源材料与器件、激光加工技术、模拟计算以及对未来新应用的探索等。分论坛吸引了众多的专家学者、研究生观众，中国工程院资深院士、哈尔滨工业大学教授赵连城先生也亲临现场，听取了光电信息材料与技术相关的报告和讨论。程一兵院士作为分论坛主席主持了分论坛的开幕和总结，并参与了报告和讨论。

亮点内容&热烈讨论

新型太阳能电池材料与器件，一直是光电材料领域的研究热点。**程一兵院士**讲授了柔性钙钛矿太阳能电池的机遇与挑战。**Alex Jen院士**介绍了新型MOF材料在钙钛矿电池中的应用。**游经碧研究员**报告了高效钙钛矿电池中界面调控的研究。**邹应萍教授**介绍了高效有机太阳能电池中新型非富勒烯受体的研发历程。**袁明鉴研究员**报告了准二维钙钛矿薄膜的生长调控。**叶轩立教授**介绍了半透明太阳能电池的光学建模计算和调控技术。

报告人及参会代表都极为关注新型太阳能电池的现状和前景，并就此展开了深入的讨论。关于器件的能量转换效率上限，**程一兵院士**在回答**Alex Jen院士**的提问时，表示

单结钙钛矿电池最终可从25%达到接近30%；在回答程一兵院士关于无机钙钛矿材料体系的能量转换效率上限的提问时，**游经碧研究员**认为可以超过20%。

材料和器件的稳定性问题受到了更多的关注。**程一兵院士**认为，在钙钛矿材料稳定性不够好的现阶段，不宜与晶硅太阳能电池进行两端叠层，否则会影响晶硅的稳定性。**游经碧研究员**认为，低温工艺制备出的无机钙钛矿材料，具有比高温工艺更好的相稳定性，但是仍然没有表现出相对于有机无机杂化钙钛矿材料的优势。在有机太阳能电池的稳定性方面，**程一兵院士**对**邹应萍教授**开发出的Y6分子很感兴趣，**邹应萍教授**认为Y6材料有序度高而且具有含F端基，稳定性优于常规的ITIC分子；而**Alex Jen院士**则从分子结构的角度指出，Y6材料在湿度环境中的稳定性还有提升的空间，需要通过测试来加以验证。

报告精彩瞬间

上海理工大学顾敏院士介绍了激光在纳米尺度图案加工中的应用。基于钻孔、双光子激发等机理的激光3D直写技术，可以加工硬质激光晶体、聚合物、石墨烯等材料体系。在信息储存方面，激光纳米加工技术可以实现超大容量的五维光信息存储，还可以利用双光束超分辨原理突破衍射极限，实现低能耗、长寿命的信息存储。通过激光直写还原氧化石墨烯，可以调控折射率来实现以光控制光，在3D显示、彩色大角度全息显示以及全光学机器学习等前沿方向有着极大的应用潜力。

华中科技大学唐江教授介绍了课题组近年来在非铅双钙钛矿材料方面的研究进展。采用无机钙钛矿铯银溴，通过低温溶液法制备高质量单晶并通过后处理等流程降低缺陷密度。由此得到的半导体型X射线探测器，综合性能达到甚至部分超过目前商用的非晶硒X射线探测器的水平。此外，制备的发光效率达86%的单基质白光荧光粉，因其工作和环境稳定性优异，有望实现绿色照明产业化应用。

武汉理工大学程一兵院士介绍了钙钛矿太阳能电池的发展。他认为钙钛矿光伏技术目前所面临的主要挑战是电池所用的材料在强光下稳定性差，大面积制备薄膜质量不高以及相对于传统的晶硅光伏技术尚无明确的应用。对此，提出需要结合钙钛矿太阳能电池的实际应用场景解决其光照-暗态循环的稳定性问题，利用核化/晶化调控来制备大面积高质量的薄膜，以及优先选择晶硅技术不能和不擅长的领域进行示范应用。

香港城市大学Alex Jen院士主要介绍了有机金属框架材料（MOF）在钙钛矿电池中的应用。包括2D结构的新型多功能半导体MOF作为钙钛矿太阳能电池中的界面修饰层，含硫醇基团结构的MOF材料固定化钙钛矿中Pb元素等。还介绍了其团队及合作者们，在免掺杂空穴传输材料、非富勒烯电子传输材料、可交联电荷传输材料、Pb/Sn合金钙钛矿材料、有机/钙钛矿杂化太阳能电池、叠层太阳能电池等方面的研究工作。

中南大学邹应萍教授介绍了本体异质结型有机太阳能电池的器件结构和工作机理，并重点讲解了其中非富勒烯结构受体材料的研究进展。开发的Y系列分子受体材料，可以减小有机太阳能电池中的光电压损失，在不同的给体材料系统中具有普适性，成功创造了多项认证效率的世界记录。



戴黎明 教授



徐加良 研究员



酒同钢 研究员



马淑芳 教授

分论坛主席程一兵院士：

点评了当前光电材料的热点方向，呼吁本专业领域的研究生和青年教师们，要自信也要肯吃苦，才能坚持到做出国际领先的成果。

2019 IFAM