



顾秉林,吉林德惠人,中国科学院院士,瑞典皇家工程科学院外籍院士。清华大学原校长,现任清华大学高等研究院院长、中国科学院技术科学部主任、北京市科协主席。长期致力于材料物理和计算材料科学的研究和高层次人才培养。

## 卷首语 Foreword

科技导报 2015 ,33(10)

# 材料科学系统工程： 建立我国新材料产业体系的关键

进入21世纪以来,依赖于科学直觉与试错的传统材料研究方法,已严重滞后于当今技术快速发展的需求。革新材料研发方法,加速材料从研究到应用的转化进程,成为各国材料研究的最新发展战略。

2011年6月24日,美国总统奥巴马宣布了一项超过5亿美元的先进制造业伙伴关系计划,而材料基因组计划是其重要的组成部分之一。材料基因组计划是通过高通量的跨尺度材料计算,结合大量可靠的实验数据,用理论模拟去尝试尽可能多的真实或未知材料,建立其化学组分、晶体和各种物性的数据库,并利用信息学、统计学方法,通过数据挖掘探寻材料结构和性能之间的关系模式,为材料设计提供更多的信息: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进程;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。此项计划的发展目标是整合新材料研究过程中的团队,使其在新材料研制周期内各个阶段相互协作,加强官产学研用相结合,注重实验技术、计算技术和数据库之间的协作和共享,最终将新材料研发时间缩短一半、成本降低到现有的几分之一,以期加速美国在清洁能源、国家安全、人类健康与福祉及下一代劳动力培养等方面的进步,加强美国的国际竞争力。通过材料基因组计划,实现通过理论模拟和计算完成先进材料的按需设计和全程数字化制造的终极目标。2014年12月4日,美国白宫网公布了《材料基因组战略规划》,将其提升到了新的战略高度。在新的规划中提出了当前材料科学与工程和材料基因组计划实施过程中所面临的4大关键挑战:1)材料研发与部署的文化转变;2)实验、计算和理论的整合;3)数字化数据的访问;4)世界一流的材料人才。该战略规划首次提出了生物材料、催化剂等9个重点材料领域的61个发展方向作为材料基因组计划重点发展方向。世界其他科技先进国家,如欧盟、日本、加拿大、俄罗斯等国也已经启动了类似的科学计划。

我国在20世纪末已经开始研究提高材料研发效率的先进方法,如高通量组合材料芯片实验技术。目前我国先进材料的研发、产业技术水平与发达国家仍有较大差距,在国家重大需求及国家安全方面急需的高端制造业关键材料或部件大部分仍需依赖进口,关键材料自给率只有约14%。为了加速我国新材料的研发过程,发展国家重要领域急需的关键先进材料,并为我国的新材料产业化体系提供技术和人才储备,必须要以全球视野谋划和推动材料科学研究的创新,抓住这次机遇,变革材料传统研究领域的思维方式和研发模式,进一步整合和完善我国的材料研究和产业化体系,从而实现振兴我国的高端制造业的战略目标。

为应对美国提出的材料基因组研究计划,对我国如何规划、开展实施自己的科学计划提出建议并进行深入的研讨,在中国科学院和中国工程院的推动下,于2011年12月21—23日在北京召开了S14次香山科学会议。在此前召开的由两院部分院士参加的筹备会上,大家认为:材料科学研究成分、结构、性能之间的关系,从新材料的发现、合成、性能优化、制备、应用、回收再利用,既有基础科学,又有工程科学,是一个系统工程。因此,一致同意把那次会议定名为材料科学系统工程香山科学会议。

结合我国的国情,材料界的专家学者提出建设发展符合中国材料领域的材料科学系统工程,具体包含如下建议:

1) 共用平台协同建设。建立几个集理论计算平台、数据库平台和测试平台三位一体的材料科学系统工程中心,结合国家大科学工程设施,集中国内材料计算与模拟领域优势力量,通力合作,跟上并引领国际材料领域新一轮发展的浪潮。

2) 重点材料示范突破。选择几项国家急需的、战略需要的、国内有良好基础的结构材料和功能材料作为示范突破,通过与平台建设相结合,进行演示示范,为更大范围的推广积累经验。

3) 产业链条协同创新。成立一个包括政府机构、科学家和产业代表在内的指导协调委员会,全面协调从材料基础研究、软件开发、数据库建立、测试平台直至产业化的各项工作,以充分发挥我国社会主义制度在统筹科学研究和产业化革命的优越性,建议有条件的教育机构开设相关课程。

鉴证历史,新材料的发现以及材料研发技术的变革往往会成为影响人类文明进程的重大历史事件。展望未来,发展符合中国材料领域的材料科学系统工程,对实现快速、低耗研发新材料和先进技术,对促进建立我国新材料产业体系具有极其重要的意义。发展材料科学系统工程,需要选择几项国家急需的、战略需要的、国内具有优良基础的代表性材料作为突破口,建立示范作用,同时为大范围地推广奠定基础。系统的材料科学工程需要在材料的发现、开发、制造和服役的全过程中,强调理论计算与实验研发紧密结合,实现材料创新的全程数字化,进行多学科协同创新。可以预见,中国材料领域的材料科学系统工程的建立,必将引导中国的先进材料产业在世界上占据有利的竞争地位。

(清华大学 北京 100084)

(责任编辑 李娜)