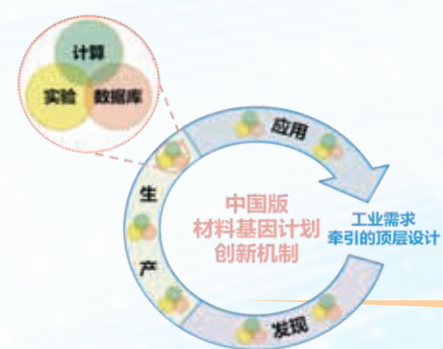




材料基因组计划 (MGI) 是用高通量并行迭代替代传统试错法的多次顺序迭代, 逐步由“经验指导实验”向“理论预测、实验验证”的材料研究新模式转变, 最终实现材料“按需设计”。MGI 包括高通量材料计算、高通量材料实验和材料数据库 3 个要素, 是材料创新的基础设施, 是 MGI 的核心。

中国材料基因组计划 如何跨出第一步?



材料基因组研究进展专题由王崇恩院士 (右二) 和屠海令院士 (右一) 主持。中国科学院物理研究所陈立泉院士 (中)、中国科学院理化研究所吴以成院士 (左二) 和西班牙马德里材料研究所崔予文研究员 (左一) 分别作了题为“中国 MGI 如何跨出第一步?”、“紫外非线性光学材料分子设计”和“钢铁及形状记忆合金中马氏体组织形貌的集成朗道模型”的报告。

“一个整体, 多个层次, 协同创新”地开展中国 MGI 结合美国“材料基因组计划” (MGI) 的本质、具体措施及进展, 陈立泉院士在报告中指出, 我国关键新材料的自给率很低, 在当前发达国家对材料研发突然发力、加快速度的背景下, 我国开展材料基因组计划迫在眉睫。“一个整体, 多个层次, 协同创新”的战略措施主要包括: 一个整体即选择几项国家急需的、国内有良好基础的关键材料进行示范, 尽快积累经验及成果, 以便进一步推广普及到整个材料领域; 组建全国性的“材料基因组研究中心”; 打造全国性的“材料创新基础设施”。多个层次是指联合发挥中央政府引导作用和地方政府的主导作用。协同创新包括计算、实验、数据库三要素协同、材料的“发现-研发-生产-应用”各个环节的协同、跨学科的研发团队的协同和“官产学研用”的协同。

非线性光学领域采用阴离子基团理论结合第一性原理方法研究的新优势 不同频率激光获得的基础是非线性光学晶体和非线性光学效应。吴以成院士的报告首先介绍了阴离子基团理论以及基于这一理论开展的硼酸盐体系非线性光学晶体探索。指出基于 BO_3 基团的新型非线性光学晶体 KBBF 突破了直接倍频深紫外激光壁垒, 以 KBBF 晶体器件深紫外光源为核心研制成功了多种深紫外科学仪器前沿装备。我国科学家应用该系列装备在诸多领域获得了一系列重要研究成果。报告最后简要介绍了在非线性光学领域采用阴离子基团理论结合第一性原理方法的优势及取得的计算流程等成果。

定量描述合金的结构、组织和性能是集成计算材料工程的核心内容 崔予文研究员在报告中展示了马氏体晶体学和微弹性相场两类马氏体微观组织模型以及外在技术集成的方法及实例。详细介绍了基于群的不可约化表示的拉格朗日动力学马氏体微观组织模型 (集成朗道模型), 分析了该模型与前两类模型的异同及三者的内在集成。通过基于朗道模型开展的多晶钢铁和形状记忆合金马氏体相变规律及组织演化的探索研究工作, 指出朗道模型可以减少传统模型中不具有明确物理意义的模拟参数, 能有效地揭示相变过程中多场耦合在物理本质上的异同。

院士点睛:

材料数据库应该是多个层面的, 每个实验室、研究团队需要有自己的数据库, 但也应该建设国家层面大的数据库。建议应该成立国家层面的技术小组, 制定数据库对接标准、共享原则等指导意见, 以引导数据库的高效建立、有效应用; 另外, 当前数据库应该适应材料研究的特点, 分为敏感材料军用数据库和民用数据库。

——陈立泉院士



热烈讨论:

