

美国材料基因组战略的进展及我国的对策建议

王同涛

(中国科学技术交流中心, 北京 100045)

摘要: 新材料是新技术革命的基础, 主要发达国家都高度重视新材料的开发和应用。美国通过材料基因组计划等着力推进材料科学与工程领域的数字化和智能化。本文介绍了美国材料基因组战略的有关情况, 总结了其特点和最新进展情况, 为我国推进新材料战略提出了建议。

关键词: 美国; 材料基因组战略; 新材料

中图分类号: G321.2; F113 **文献标识码:** A **DOI:** 10.3772/j.issn.1009-8623.2020.02.003

新材料是现代各种颠覆性技术革命的基石, 是体现一个国家科技发展水平的关键标志之一。进入 21 世纪以来, 世界主要发达国家加大力度开展新材料的研发和应用, 美国尤为突出。继美国总统奥巴马在 2011 年提出“材料基因组计划”(Materials Genome Initiative, MGI) 后, 2014 年白宫又颁布《材料基因组战略规划》(MGI Strategic Plan), 反映了近年来美国在材料科学与工程领域数字化、智能化的趋势。材料基因组是未来先进材料开发模式的探索, 对中国新材料发展有着重要的借鉴意义。

1 美国材料基因组战略概况

1.1 战略的目标及意义

为重塑全球制造业领导者地位, 奥巴马于 2011 年 6 月提出了“先进制造业伙伴关系”计划。作为该计划的重要组成部分, 美国于 2011 年底推出了“材料基因组计划”, 提出要通过材料领域的创新满足制造业对高性能新材料越来越高的需求, 推动先进制造业发展。2014 年 12 月, 美国国家科学技术委员会(NSTC) 发布《材料基因组战略规划》, 进一步明确了材料基因组的目标、研究内容、重点方向以及组织实施。

材料基因组战略的目标是实现材料研究文化的转变, 整合先进的实验、计算工具和理论, 增加

材料数据库资源的可获取性, 培养世界级的材料工作者, 最终使新材料的研发周期缩短一半并降低研发成本到现有的几分之一, 从而加速美国材料技术的进步, 保持美国在核心科技领域的优势和全球竞争力。

美国将新材料放在产业发展和技术突破的重要位置, 将材料技术的发展提升到国家战略的高度。传统材料科学研究主要依赖“试错”实验方法, 从研发一种新材料到最终应用需要 10~20 年, 已远远不能满足工业发展的迅猛需求, 迫切从研究方法的变革突破材料科学的发展的瓶颈。材料基因组技术是全球新材料研发模式与方法的变革, 倡导“计算建模、实验工具、数据库”一体化研究方法, 研发思路是建立成分、工艺、微结构、性能之间的内在联系, 在此基础上根据材料对性能的需求, 设计符合要求的微结构。MGI 在缩减材料开发时间和成本的目标一旦实现, 将对美国的各个领域产生重要影响, 可大大提升美国经济和国防实力。

1.2 主要内容

美国材料基因组战略包括以下 3 方面内容:

一是要建设材料创新的基础设施。基础设施主要包括材料分析计算工具、材料实验工具以及数据库。计算工具要建立准确的材料性能预测模型、开放的平台, 实现所有源代码共享。实验工具意在补

作者简介: 王同涛(1980—), 男, 工学博士, 副研究员, 主要研究方向为科技管理、科技政策。

收稿日期: 2020-01-28

充基础的材料物理、化学和材料学的数据，利用实验数据修正计算模型，加速新材料的筛选及高效确定。构建不同材料基础数据库和材料创新合作平台，推动数据标准化及共享，将科学家与工程师联合起来高效开发新材料。

二是通过先进材料达到国家目标。美国目前面临的国家安全、人类健康和福祉以及清洁能源等相关方面紧迫挑战的解决都有赖于先进材料的研发和应用。

三是培育下一代材料工作者。建立沟通、共享与协作机制，强化材料学家、实验学家、计算机人才和工程师之间的密切合作。加强针对企业员工的材料设计与模拟软件和相关程序的再教育。针对高校本科生和研究生课程，增加交叉学科设置，培养复合型材料人才。

1.3 重点研究领域及方向

《材料基因组战略规划》公布了9大关键材料研究领域的63个重点方向，其中树脂基复合材料、关联材料、电子和光子材料、能源材料以及轻质结构材料这5类材料涉及到的37个重点方向对国家安全有重要作用。

(1) 生物材料。主要包括人体组织和器官可再生生物活性材料、仿生材料、生物构造材料和生物系统新材料等。《材料基因组战略规划》列出了生物材料的8个重点发展方向。

(2) 催化剂。催化剂对美国许多产业起关键作用，包括能源、化工和药品。例如，催化剂将有效裂解水，以廉价的商业规模彻底改变能源行业。《材料基因组战略规划》列出了催化剂材料的7个重点发展方向。

(3) 树脂基复合材料。树脂基复合材料通过成分设计和结构设计，实现特殊应用，这种功能定制设计能实现如电、热、光和/或磁性性能等特定功能。《材料基因组战略规划》列出了树脂基复合材料的9个重点发展方向。

(4) 关联材料。高温超导体、自旋电子材料、磁性材料、巨磁阻材料、拓扑绝缘体等材料行为的理解和预测，需要超越传统模型和单一实体的模型。《材料基因组战略规划》列出了关联材料的7个重点发展方向。

(5) 电子和光子材料。改进电子和光子材料

以及产品的制造工艺，以持续改进性能和保持美国国内技术领先优势。《材料基因组战略规划》列出了电子和光子材料的7个重点发展方向。

(6) 能源材料。能源材料应用广泛，工厂和住宅、电动汽车和便携式设备、医疗设备等的能源需求各不相同。快速、高效、稳定的充电是先进能源系统的特征。《材料基因组战略规划》列出了能源材料的8个重点发展方向。

(7) 轻质结构材料。航空航天、舰船、汽车、重型机械、铁路、家电和建筑业领域的发展和竞争力提升，都依赖于不断改进的和可负担得起的轻质结构材料。《材料基因组战略规划》列出了轻质结构材料的6个重点发展方向。

(8) 有机电子材料。众多碳基、可扫描的柔性电子材料将影响到照明、显示、传感、能量转换和储存、医疗诊断、生物相容电子、环境监测等许多领域。《材料基因组战略规划》列出了有机电子材料的6个重点发展方向。

(9) 聚合物。聚合物几乎应用在所有依赖高分子材料的关键部件或加工步骤的工业领域，一体化方法开发出的新的复杂结构聚合物分子将能够超越任何生物系统。《材料基因组战略规划》列出了聚合物材料的5个重点发展方向。

2 美国材料基因组战略的特点

2.1 以国家战略为导向，全面布局

通过制定国家战略进行部署和推动。联邦政府通过制定MGI从国家层面推动实施“材料基因组计划”，将从材料领域着手，推动整个工业领域的改造升级。多个联邦政府部门共同投资支持，借助官产学研用通力合作，突破限制高端制造业发展的新材料瓶颈。

加强分工协调，有关部门各负其责。美国总统科技顾问委员会(PCAST)和美国国家科学技术委员会总体协调推进，开展跨部门全面合作，使“材料基因组计划”与“国家纳米技术计划”等对接。国家安全与防御能力提升的基础和应用计算材料研究由国防部(DOD)负责，计算材料与设计化学计划由能源部(DOE)、美国国家科学基金会(NSF)负责，先进材料设计计划由标准化科学与技术研究院(NIST)负责，能源效率和可再生能源

下一代材料计划由能源部负责，下一代劳动力计划由国家科学基金会和国防部负责。

将国家安全和民生健康等相关材料明确为重点发展领域。《材料基因组战略规划》明确将3个领域作为材料基因组的发展重点，分别是国家安全相关材料、人类健康和福祉材料及清洁能源材料。国家安全相关材料主要是用来保护和武装军事力量的轻质保护材料、电子材料、储能材料、稀土材料等。人类健康和福祉材料包括生物相容性材料、防受伤保护材料等。清洁能源材料主要有光伏材料、生物催化剂材料、动力电池材料等。

2.2 以合作共享为基础，实现协同创新

通过加强高校、机构等创新主体间的合作加强联合研发、构建共享机制。威斯康星大学麦迪逊分校（UW-Madison）、乔治亚理工学院（Georgia Tech）、密歇根大学合作建立的材料创新学院一直致力于材料创新加速网络的研发。劳伦斯伯克利国家实验室（LBNL）、麻省理工学院（MIT）和分子间有限公司致力于开发预测材料性能的软件，并通过劳伦斯伯克利国家实验室向用户开放。

通过创新中心建设集中优势力量，开展合作研发。国家增材制造创新中心由位于俄亥俄、宾夕法尼亚和西弗吉尼亚科技带的制造业领域的多方产学研政机构构成，重点研究可用于国防、航空、汽车和金属制造领域的增材制造。数字化制造和设计创新中心、轻质化现代金属研发创新中心、下一代电力的研发生产创新中心，均整合了各领域国家实验室、企业、高校的优势力量，共同合作研发。

2.3 以应用为导向，加速新材料的产业化进程

材料基因组计划以支撑美国制造业复兴为出发点，不断加速新材料的应用及产业化。制造业企业不仅在新材料的创新研发中发挥着重要作用，还为新材料的产业化提供转换平台，加快新材料的推广应用进程，并以此带动企业的发展。如3D打印材料的深入研发显著拓宽了3D打印的应用领域，打印品扩展至零部件和各种制造成品，造就了斯塔西公司等一批著名3D打印企业。

3 美国材料基因组计划的最新进展

材料基因组计划启动以来，联邦主要执行机构

组织相关高校、国家实验室、企业、科研院所等积极行动，先后在基础平台搭建、数据共享、教育培训等方面展开具体工作，取得了不俗进展。

3.1 联邦机构积极搭建研发平台

国防部负责涉及国防安全的有关计划。建立轻质和现代金属工艺研究院，致力于研究用于加速风涡轮机、医药设备等的轻质铝的生产，加强金属工艺制造，开展基础项目研究。指导数字化制造和设计创新研究院、下一代动力电子制造创新研究院的研发活动，研究院作为地区分管中心，负责搭建公司、大学、学院等机构基础研究与产品研发间的桥梁。支持约翰霍普金斯大学建设极端材料研究所，整合学术界、工业界和陆军研究实验室，力争解决极端动态环境中材料的基础科学问题。

能源部主要聚焦在研究国家先进能源材料。投入1200万美元整合集成计算工具、实验工具和数据于一体，研发高性能材料，并开展基础能源项目，以大学和国家实验室为平台，致力于预测理论和仿真建模。斥资1.2亿美元建成关键材料创新中心（CMI），致力于新型清洁能源技术研发。委托阿贡国家实验室牵头完成能源储存联合研究中心（JCESR）建设，并在2018年宣布在未来5年继续投入1.2亿美元。另外，能源部还建成新能源创新中心，专注于研究先进的电池和储能技术。国家自然科学基金会支持基础科学和工程研究以及人才培养。启动实施“设计材料——彻底改变未来”（DMREF）计划、21世纪空间基础设施建设计划（CIF21）以及先进大数据科学与工程的核心技术等。支持应用材料公司和南加州大学等多家单位共同成立功能材料组合方法工作平台，通过高通量实验来实现《材料基因组战略规划》的目标。

标准化科学与技术研究院通过先进测量科学、标准和技术促进美国创新和行业竞争力。斥资2500万美元，用5年建成分级材料设计中心。中心由西北大学等牵头，芝加哥大学、阿贡国家实验室等多家参研单位协力合作，研发与部署下一代计算工具、数据库和实验技术，包括材料性能数据库和计算仿真。标准化科学与技术研究院还与美国国家航空航天局（NASA）合作，在国际空间站建立了材料实验室，通过实验室研究加速高性能材料的研发及在地球和太空中的应用。

3.2 研发主体强化协同创新

在先进材料领域和《材料基因组战略规划》的扶持下，康涅狄格大学和康涅狄格州投资 1.7 亿美元建成了先进工业园，为先进制造、材料科学、网络基础设施等领域合作伙伴的协作研发提供支持，已吸引赛默飞世尔、惠普、通用电气等数十家跨国公司进行研发合作。

威斯康星大学麦迪逊分校投资 500 余万美元建立材料创新研究所，目标是为不同的材料团体提供基础设施。乔治亚理工学院耗资 1 000 万美元建立多学科相互融合的研究所，为生态系统材料的研究和教育工作提供平台。密歇根大学投资 2 000 万美元建设致力于研究集成计算材料工程的新密歇根大学中心（UM 中心）以及软物质建模与仿真组装实验室，并与威斯康星大学麦迪逊分校和乔治亚理工学院共同建设全国材料创新加速网络。

国家能源研究科学计算中心、劳伦斯伯克利国家实验室和麻省理工学院三方合作完成一个关于材料行为预测的项目，旨在为科研和工业人员提供一款预测能力更强的工具。此项工作将大大加快新材料从发现到转变成实际应用的速度。

3.3 材料基础数据库建设不断扩展

数据库的建设是《材料基因组战略规划》实现的一个基础组成部分，美国各机构都在此领域开展了不少工作。标准化科学与技术研究院与美国材料信息学会（ASM）共同建立了开放数字存储库，为研究人员通过数据分析进行创新研究创造条件，并且获取更多数据来应对材料数据管理识别的挑战并为其提供解决方案。

能源部资助的加州大学伯克利分校材料工程项目，将其通过高性能计算和最先进的理论工具确定的材料属性储存在开放数据库中，包含超过 6.6 万种晶体化合物、50 万种纳米多孔材料、7 万种电化学相图、4.3 万种电子能带结构、0.29 万种全弹性张量等资源。目前用户已经超过 2 万人，每天有成百上千的研究人员在使用数据。能源储存联合研究中心的电池联合中心发布了 2 组主要的电池数据集。一组数据集包含了将近 1 500 种可能使功率翻倍的电极材料化合物，另一组数据集包括超过 21 000 种与网格蓄电池的液体电解质相关的有机分子以及其他研究应用的数据。

标准化科学与技术研究院创建了材料数据知识库（MDR），存储了大约 50G 的高度异构数据和几个 T 的额外数据，横跨了 80 个独立研究机构，有来自学术界、政府和产业部门的 123 个不同组织的参与，这些材料数据可公开获取。

高校、国家实验室和学术出版商等团体机构筹建国家数据服务中心，以实现数据便捷输入与共享。此外，精通高通量技术的大学和公司正致力于收纳与存储来源于学术研究的数据。麻省理工学院和劳伦斯伯克利国家实验室开放公众数据库，数据库拥有相关材料 1.5 万多种。军队研究实验室（ARL）建立了材料选择与分析工具（MSAT），包含胶黏剂数据库和复合材料数据库。

3.4 下一代材料学人才教育培训稳步推进

国家科学基金会投入近 600 万美元设立科研培训项目，支持材料科学与工程培训的数据开发。宾州州立大学和南密西西比大学的项目正在开发学生培养的新模式。“设计材料——彻底改变未来”项目通过联合培养和交换等方式为研究生和博士后研究人员提供教育平台，还通过开设新课程来推动材料科学的发展。据统计，已有千余名学生得到了应用《材料基因组战略规划》方法的相关学术训练。国家科学基金会还资助了综合计算材料教育暑期班，从 2011 年起每年举办 1 次，向本科生讲授计算材料科学与工程（CMSE）专业课程。美国材料研究学会通过发放白皮书着力描述高通量材料科学面临的重大机遇。以大学材料委员会（UMC）为首的 33 家高校致力于为培养新一代材料科学家和工程师探寻新方法，有针对性地对材料领域学员进行有关《材料基因组战略规划》的知识教育培训。麻省理工学院推出大规模开放式在线课程（MOOC），着眼于材料科学创新和商用化，将《材料基因组战略规划》缩短材料研发周期的思维模式通过课程进行普及。杜克大学等多个高校宣布发展新的学位课程、设施以及教学工具支持《材料基因组战略规划》劳动力培训。

3.5 有关项目取得进展

俄勒冈州立大学与加州大学圣克鲁斯分校合作，研发出了一种新型无机化合物，其晶体结构能够维持被称为量子自旋液体的新物质状态，是可用于下一代量子计算机的关键材料，其下一步计划是

探索用钨制备出各种完美有序的晶体结构。华盛顿大学和通用汽车联合研发新种类复合材料，用于将废弃热能转化成可用电能，进而使得下一代汽车发动机更高效节能。密歇根大学软件中心研发一款软件工具用于预测镁合金行为，进而改进优化其在轻质车辆上的使用性能。威斯康星大学麦迪逊分校的研究团队发现和设计出一种多功能材料，它同时具有金属和反极化特性，可以在未来设备中同时展现电、磁、光的功能，成功实现了实验和计算之间的迭代。由康涅狄格大学主导的跨学科大学研究计划，通过高通量计算筛选、信息论、综合实验的结合，测试开发出一组新的有机聚合物电介质，与现有材料相比，其属性得到增强。该团队研究的成功是《材料基因组战略规划》协同设计新材料典型案例。

纳米多孔材料基因组中心开发了最先进的预测建模工具，并用来加快材料研发步伐，探索发现了多微孔和介孔的金属有机化合物结构材料及与能源相关的矿物材料。可再生能源国家实验室能源前沿研究中心的下一代材料设计项目，通过使用能源部的材料工程数据库，在识别和测试钙钛矿太阳能材料替代品时，研究效率提高了20%。能源储存联合研究中心研发了最优锂电系统，充分证明《材料基因组战略规划》实施的高效性。此系统的目标是未来5年内将现有研发成本降低4/5，并提供现有5倍的能量存储。

关键材料创新中心利用激光金属打印技术，研发出了一种用于优化永磁材料的技术，可用于替代昂贵的稀土钕铁硼磁体。劳伦斯伯克利国家实验室和麻省理工学院应用计算机仿真技术快速设计新功能电子材料，如光催化、光伏、透明导电体等材料。来自空军研究实验室、阿贡国家实验室、卡内基梅隆大学等机构的研究人员开发了一种新测量方法，可在材料弯曲、压缩或拉伸时使用高强度X射线测量详细结构，为解释材料失效提供了新视角，对预测和改善轻质、高强度飞机和汽车材料性能至关重要。

4 对我国的启示

我国新材料产业发展迅速，但仍处于从材料大国向材料强国升级的关键时期，存在高端产品依赖进口、关键技术受制于人等问题。我国应抓住此次

材料基因组带来的材料领域变革机会，大力实施中国材料基因组计划，推动新材料创新，使材料创新和新材料产业成为我国经济社会发展、国防建设的重要支撑。

第一，将新材料发展作为国家战略加大统筹力度。从国家战略层面指定长期发展规划，提升新材料的基础战略性地位，选择代表性、前瞻性的关键材料，从基础理论、创新链和产业链等方面进行一体化部署。强化官产学研用的沟通和协调，加大不同部门、领域和地区之间的协同创新，加快新材料的研发和产业化速度。

第二，加强数据标准化建设，优化材料创新环境。建立和完善材料数据标准体系，加强材料基础数据的可接入性和可用性，建立数据标识和可追溯制度以保护数据和源代码，防止共享数据的盗用和滥用，加大力度鼓励基础数据共享和成果转化应用，破除数据分享顾虑。通过完善相应数据法律法规和规章制度，不断强化对基础数据知识产权的保护，优化材料创新环境。

第三，积极培育和引进材料领军人才。打通分散学科之间的通道，大力培养复合型材料创新人才。构建国际化的材料创新平台，通过加强国际交流与合作吸引国际一流的科学家来进行合作研究和学术交流。与国际先进的实验室开展合作，建立联合实验室或研究中心，培养材料研究领域的创新型领军人才，形成多学科交叉融合的协同创新队伍。■

参考文献：

- [1] National Science and Technology Council. Materials Genome Initiative Strategic Plan[R]. Washington DC: Federal Register, 2014
- [2] SMGI. About the Materials Genome Initiative[EB /OL]. [2020-01-06]. <https://www.mgi.gov>.
- [3] U.S. Department of Energy. About Us[EB /OL]. [2020-01-06]. <https://www.energy.gov>.
- [4] U.S. Dept of Defense. About the DOD[EB /OL]. [2020-01-06]. <https://www.defense.gov>.
- [5] NSF. About NSF[EB /OL]. [2020-01-06]. <https://www.nsf.gov>.
- [6] NIST. About NIST[EB /OL]. [2020-01-06]. <https://www.nist.gov>.

(下转第45页)

Research on Science and Technology Innovation Cooperation between China -Maldives

XU Hong

(Yunnan Academy of Science and Technology Development, Yunnan 650011)

Abstract: In order to strengthen science and technology cooperation between the P.R. China and Maldives , this paper gives a brief introduction of the basic situation , scientific and technological development, international cooperation of Maldives as well as bilateral cooperation between the P.R.China and Maldives. Particularly, the paper studies cooperation mode and key fields between two sides, analyzes the demand for advantageous and competitive science cooperation for both sides. Suggestions for further promotion of the cooperation in science ,technology and innovation fields are also proposed.

Key words: China; Maldives; scientific and technological innovation; scientific and technological cooperation

(上接第20页)

- [7] A Strategy to Accelerate Cutting-Edge Materials Innovation.[EB/OL]. [2020-01-17]. <http://www.whitehouse.gov/blog/2014/12/04/strategy-accelerate-cutting-edge-materials-innovation>.
- [8] The National Nanotechnology Initiative Supplement to The President's 2019 Budget.[EB /OL]. [2020-01-17]. <https://www.whitehouse.gov/wp-content/uploads/2018/08>.
- [9] White A. The materials genome initiative: One year on[J]. MRS Bulletin, 2012, 37(8): 715-716.
- [10] De Pablo J J, Jones B, Kovacs C L, et al. The materials genome initiative, the interplay of experiment, theory and computation[J]. Current Opinion in Solid State and Materials Science, 2014, 18(2): 99-117.
- [11] 李茜等. 美国材料基因组计划对我国的启示 [J]. 新材料产业, 2014 (6) : 1-12.
- [12] 刘俊聪等. 材料基因组计划及其实施进展研究 [J]. 情报杂志, 2015, 34 (1) : 61-67.

Advances of Material Genome Strategy in US and Suggestions

WANG Tong-tao

(China Science and Technology Exchange Center, Beijing 100045)

Abstract: New material is the foundation of new technology revolution, major developed countries attach great importance to the development and application of new material.The United States has intensified efforts to promote digitalization and intelligentization of materials science and engineering through the materials genome project.This paper introduces the material genome strategy of the United States, summarizes its characteristics and the latest progress, and puts forward some suggestions for China to promote the new material strategy.

Key words: the United States; materials; genome; strategy