

走中国道路 创建新材料制造科学体系

——论材料科学与新兴产业链的全方位发展^{*}



金展鹏^{1,2} 蔡格梅² 苏柳梅² 樊星² 郑峰²

1 中国科学院 北京 100864

2 中南大学材料科学与工程学院 长沙 410083

摘要 文章从全球高科技对材料科学提出的新挑战,材料组织演化理论及有关知识单元的发展史,新兴产业链是学科交叉和群体性技术革命的产物,国际上创立新材料制造科学体系的借鉴,走中国的道路创立新材料制造科学体系的路线图和“十三五”期间的紧迫任务与措施6个层面论证了创建新材料制造科学体系是迎接制造业全球竞争的前瞻性战略布局,是全面贯彻落实五大发展理念,建设制造强国的重点工作。

关键词 材料设计,组织演化,知识单元,材料制造科学体系,产业链

DOI 10.16418/j.issn.1000-3045.2016.11.008

在落实中国制造宏伟蓝图的时候,人们痛感材料制造是块短板,是制约综合国力提升的瓶颈。经过对学科发展规律和态势的研究,就会认识到创新的材料与制造科学理论、知识系统和有关知识单元,正是全面发展技术科学的重要支柱^[1]。本文在解读其要点的基础上,进一步讨论顶层设计问题。

1 高科技对材料科学的新挑战

1.1 理解金属、陶瓷和高分子材料中的共性科学规律

从历史上看,金属材料、无机非金属材料和高分子材料是分别发展起来的,就其制备工艺而言,就采用了“合金化”“掺杂”“杂化”“混合”“合成”等不同术语。虽然这些术语没有一个能准确反映出新材料设计与制造的科学内涵,但是,在先进制造业的带动下,这3类材料的知识正在迅速地融合。以钢铁为中心的物理冶金正与陶瓷和高分子材料物理化学互相融合,对相变的研究则深入到各层次微结构的演化。比如,通过人造的位错阵

^{*}资助项目:中科院学部咨询项目

预出版日期:2016年10月18日

列控制纳米尺度的亚稳分解、自组装生成量子阱；再比如，通过相分离获得纳米尺度的多相块状聚合物，使其性能大大改善。这些例子都是金属材料、无机非金属材料和高分子材料交叉融合的新成就，又是 20 世纪亚稳相变理论的延伸。

高分子材料的前景广阔，其研发活动和产业化比金属和无机材料更加活跃，进展更快。为了摆脱在高分子材料研究中出现的“只见树木不见森林”的现状，美国工程院院士、高分子物理学家程正迪强调了研究高分子材料亚稳相变及组织演化的重要性，指出这是一个有广阔前景的研究领域。而作为其基础的高分子物理学则是凝聚态物理和固态物理化学的核心。

最近，添加式制造（Additive manufacturing，例如 3D 打印）的研发和产业化活动已经扩展到金属、陶瓷、高分子材料乃至生命器官，然而全球至今尚未建立从前沿研究到产业化融会贯通的 3 类材料的科学体系，更未能提供可供现场操作的知识系统和相应的工具，在这样十分尖锐的矛盾后隐藏着丰富的创新机遇。

因此，理解和掌握金属、陶瓷和高分子材料中的共性科学规律、构成新的知识系统是一项关系占领科学制高点的重要任务。

1.2 材料科学正在使微电子芯片的设计和制造理念发生变革

在微电子芯片制造、组装和封装过程中，高效电阻、电容、电感和天线的微型化与集成化，必然会涉及到界面反应、电迁移和晶须生长等科学问题。

多种微结构之间的相互作用贯穿在材料选择、工艺设计、可靠性预测、失效机制分析、抗冲击和防污染等一系列环节中，每一环节都离不开材料组织演化这一核心问题。

1.3 功能微纳器件设计和制造的挑战

从大型构件到纳米器件的设计、制造和使用，遇到的共同问题是：（1）结构不同的材料结合在一起时，其界面和整体会发生怎样的变化，以及这些变化对整个器

件的性能会有什么影响？（2）功能不同的异种材料结合在一起的时候会产生什么样的新功能或隐患？这是今后在信息功能、能量转换功能器件以及各种微纳器件的设计、制造和使用全过程中不可避免的两个问题。传感器材料的组织演化失控，就可能使机器人“神经错乱”。

1.4 器件组装中微区形貌调控的挑战

作为半导体和单晶叶片等器件制造的基础，晶体生长机理的研究在先进制造业中遇到了新挑战。为了使器件功能化，就要从理论上掌握其在组装过程中组织演化的规律，也就是说要掌握从自然界的自组装到微纳器件和大型雕塑各个尺度产品从制造、服役直到回收等整个过程中的组织演化规律和细节，并应用到多种多样的制造方法以及灵活多变的工艺参数的实践中去。这是所有先进制造业所面临的共性科学问题。

例如，张立德发明的制造纳米复合材料的方法，诸如花状 MgO 纳米结构^[2]、层错周期分隔 ZnS/ZnO 异质结构^[3]、阶段脉冲电沉积技术制备 Bi/Sb 超晶格纳米线^[4]，以及目前多种多样的微纳自组装方法，其共同特点是通过在微观尺度上调控晶面、晶向、缺陷等微结构的自由能差别，以及在各微区中温度梯度、对流和原子扩散等参量变化来控制形貌，从而获得器件的功能所需要的组装结果。

在宏观雕塑与建筑的组装领域，麻省理工的 Carter 教授^[5]一方面从原子尺度对晶界的自由能和组织演化的关系进行模拟和计算，另一方面又与建筑学教授 Oxman 从热力学和动力学出发，利用类似于油和醋的液相分层原理，模拟大型雕塑 3D 制造技术中的组织演化过程。

在自组装的过程中，不可忽视宏观工艺与微观自组装的结合在理论上的和实践上的重大意义。化合物半导体的成分在化学计量比附近发生微小的变化，就会使载流子浓度及材料性能变化几个数量级。陈清等^[6]将组织演化、相平衡、缺陷化学和半导体性质结合在一起，建立起具有物理意义的模型，评估和计算了 Cd-Te 相图，该相图指出通过调整蒸气压可以将 CdTe 的成分波动控制在

10^{-5} 范围左右。这一工作的想象力在于：在理论上建立新的物理模型，在实践上通过宏观参数控制微观过程。

1.5 材料组织演化理论是迎接高科技挑战的共同理论基础

组织演化贯穿在包括金属、无机非金属和高分子在内的所有材料之中；贯穿在材料的各种制备、实验和表征方法之中；贯穿到从建筑、雕塑、大型构件，直到微纳器件等各种尺度器件的设计、制造和使用的全过程中；自然也就贯穿到材料和器件的设计与制造及产业链的过程中。因此，材料组织演化规律是材料制造设计的科学基础，是迎接高科技挑战的共同理论基础。

材料组织演化的内涵孕育着不同材料产业化领域在不同发展阶段上的制高点。材料组织演化的内涵具有开放性和包容性，使得人们能够在实践中不断地丰富和深化对材料中各层次微结构相互作用机理的认识。材料的力、电、磁、热、光、声等功能，涉及到不同层次的组织演化与性能的关系，这些关系是材料技术科学的主线和核心，是材料与器件的功能多样性和综合性的基础，是各种材料设计与制备的共同的基础，是创新材料制造科学体系的基础。

2 材料组织演化轨迹理论及有关知识单元的发展史

不同外界条件下，材料的微结构、成分和性能在时空中的演化序列体现为材料组织演化轨迹。它是各种潜在的轨迹相互竞争共同组成的纵横交错的、动态的网络。

为实现各种先进的设计理念，如通过微结构控制获得具有特定综合性能的器件，采用的制造方法和工艺路线的设计原理就集中体现在组织演化轨迹以及基于此而建立起的直接服务于产业链的知识单元。材料组织演化的知识单元经历着四个发展阶段。

2.1 第一阶段：学术思想起源

在物理冶金史上，铁合金相图系统地表述了成分、

温度和相区之间的关系。但是在与热力学、动力学和计算技术结合起来之前，人们尚不能了解甚至于单相区内的复杂扩散现象，不能动态地描述合金钢中的相变过程。

20 世纪 50 年代，Cahn^[7-9]提出了自由能密度的概念和 Cahn-Hilliard 方程。同时，麻省理工 Cohen 教授的学生师昌绪、Kaufman 和 Hillert 在动态描述相变过程方面作了开创性的工作。其中师昌绪先生在低温马氏体相变动力学方面作了很出色的工作。Kaufman 通过相图计算，阐明了 Fe-Ni 相图的高温相变与低温马氏体相变之间的关系。Kaufman 在发表的文章中回忆说“师昌绪学长启发他将热力学、物理性质与形核理论相结合建立新的理论框架”^[10]。Hillert 预测了合金钢在相变过程中各相的成分与结构的演化轨迹^[11-12]。

上述经典的学术思想，就是所谓的“材料基因工程”思想起源，几十年来得到了长足的进展。

2.2 第二阶段：知识单元发展期

半个世纪以前，Meijering 计算相图的一条结线花了 3 个月，而测定三元相图等温截面的一个角，柯俊先生认为需要 8 人·年的工作量。后来组织演化的内涵随着技术科学的发展日益丰富，经典的相变理论又碰到了新的边界条件。学科交叉特别是计算技术的发展，以前所未有的速度实现了理论与实践的互动和反馈。在此背景下涌现出了一系列以材料组织演化规律和信息为核心的概念、公式、模块、软件、数据库等，现在我们把这些元素统称为“知识单元”。它们能表达出材料组织演化的规律和细节。

2.3 第三阶段：发展新的知识单元的同时，构建新的科学体系

这一体系的核心是将组织演变的驱动力和组织演化的程度定量地联系起来，构建热力学、动力学和形貌学的框架，并与新的知识单元组成材料制造科学体系。这一体系具有开放性和包容性，它在金属材料领域表现出破解千年机密和产生成批专利的能力，但对整个材料领

域来说,工作才刚刚开始。

2.4 第四阶段:在创建新材料制造科学体系的过程中 加速前沿理论、高科技与产业链的融合

当今的新兴产业链是物理、化学、材料学与信息学、大数据等学科交叉和群体性技术革命的产物,纵横交错的多轨迹知识系统是其灵魂。**第四阶段是跨越式发展的时机,体系创新的作用将会更加凸显,应当充分发挥知识单元在落实非对称赶超战略中的作用。具体来说是将前3个阶段积累起来的方法、知识和经验,灵活、准确地落实到关键战略材料产业链的设计中,使创建体系与材料研发和产业链设计协调进行。**

相图计算的新动向体现了当下前沿理论高科技与产业化迅速融合的时代潮流。从文献1中所列举的10多位研究者最近的研发活动中可以看出,他们处于不同的材料领域和不同的发展阶段,依据自己的经历,从不同的角度描绘出各自所期待的蓝图。他们的共同点都是以材料组织演化理论为基础,建立起各具特色的材料组织演化轨迹的知识单元。

知识单元是在群体性技术革命中学科交叉的产物,具有百花齐放的多解性、灵活性和普适性,可以根据需要组装到不同的体系中,是构建材料设计与制造科学体系各个环节的基石,是产业链中最活跃的创新环节,是总设计师的战略创新与万众创新之间的桥梁,是战略性新兴产业的科学支撑,是将“三级跳”变为“短道速滑”过程中的最活跃因素。

3 新兴产业链是学科交叉和群体性技术革命的产物

3.1 设计产业链需要掌握材料组织演化的规律和细节

为什么由研发成果到产业化的转化难?这是因为材料的组织演化过程与性能的关系复杂多变,对工艺参数十分敏感;而获得研发成果的时候,往往是只找到了材料性能与工艺关系的某些特殊解,对于材料组织演化的规律和细节缺乏细致的、定量的知识体系。

材料的不同功能涉及到不同层次的微结构变化及其与整体的关系。具体来说,由于相、相界、位错、空位、化学反应直到核反应等各微结构层次之间的相互作用机理不同、能量差别各异,外界条件即工艺参数的波动会改变组织演化的序列,这是热力学因素竞争的结果。而在相变过程中,包含着一系列亚稳相相互竞争的子过程,使得组织演化过程更加复杂多变,因而对工艺条件即外部变量十分敏感。

为了准确地制定产业链中各环节的工艺参数,必须围绕产业链部署创新链,掌握组织演化的规律和细节。其中包括要有强大的智能数据库,这些数据库是用坚实的物理模型和先进的计算方法武装起来的,不是“杂物间”更不是“垃圾堆”。

目前,在组织演化轨迹理论的基础上,已经创建了一系列知识工具。它们是组成整个材料知识体系的知识单元,是由不同背景的科学家从不同角度研发出来的,基于不同的物理模型,涉及不同的主要变量。但是,目前还没有一种工具能适应特定产业链整个过程的模拟和控制。

3.2 新兴产业链顶层设计的特点

新兴产业链具有人才密集、知识密集、技术密集、全局化、动态化、多轨迹和个性化的特点,其中各环节具有深刻的科学内涵和广阔的创新空间。在设计产业链工艺路线时离不开核心科学思想,离不开信息的处理和传播,离不开实验方法、计算技术和数字化的支持。

3.3 新兴产业链是学科交叉和群体性技术革命的产物

物理学家不断深入对各层次结构与性能关系的认识,化学家从化学反应的角度设计各层次结构演化的序列。20世纪中叶,材料学家开始综合运用热力学、动力学和形貌学来研究材料的微观组织演化过程,即各微结构及成分在时空中变化的轨迹。

先进的计算技术和信息技术能使人们的想象力以前所未有的速度贯彻到终点,并迅速传播,大大提高了优化模型和现场互动的效率,引发了产业链的革命。

大数据能对大量的、经验的、理论的数据进行采集和鉴别,并作为优化模型的输入量。此外,信息技术及大数据在寻找主要变量及表达演化规律时还发挥着其他作用。例如,它们能运用统计学、回归学以及相关的物理模型甚至于“无模型”的方法对大量的亚稳相变数据、关键词进行分析,找出主要变量,设计工艺路线,并在互相反馈的过程中理解其科学内涵,进而实现信息学、数学方法和物理模型在更高层次上的融合以及在产业链中的应用。

4 国际上创立新材料制造科学体系的借鉴

材料与制造科学的核心理论反映了材料组织演化的共同规律;能包容材料各结构层次的相互作用及演化细节,内容丰富;并能通过知识单元应用到产业链的环节中,实用性强。因此,穿插在经典理论、高科技与产业化过程中的,由材料与制造科学核心理论组成的一系列纵横交错的知识网络是材料和器件制造的路线图,是引航制造强国的灯塔。

半个世纪以来,科学家们在从不同角度构建知识单元和形成知识系统的过程中,已经为未来的新材料制造科学体系描绘了一幅逐渐清晰的图画,可以作为我们创建新材料制造科学体系的借鉴。

4.1 材料热力学的创新

从20世纪中叶开始,就有一些科学家进行了全面发展材料科学的工作。他们在物理学前沿的基础上,用热力学的观点将材料科学的成就系统化,旨在建立起更加逻辑、自洽、精炼的新的理论体系,以便对实际问题有更强的穿透能力,并期待对整个技术科学领域产生重要的推动作用。

从理论创新的角度来说,就是以组织演化的科学本质为依据,通过建立物理模型和函数,创新表达经典热力学中的有关变量,创建材料热力学体系。

4.2 创新理论体系的实例

Hillert^[11]提出的相变驱动力、体系自由能变化和组织

演化程度的关系定律($\Delta G = -\int Dd\xi$),综合了热力学与动力学理论,是综合描述材料在不同外界条件下各相消长演变过程的基本框架。

在此基础上,已经建立了以相图计算为代表的理论体系和知识单元,并在阐明金属材料组织演化过程、开发新材料和进行产业化中获得了显著成就,正在向无机和高分子材料领域扩展。

4.3 新材料制造科学中的知识系统

目前,第一性原理计算的结果,多数作为在开发新材料的过程中优化技术路线的输入量,真正的突破要待量子力学到宏观各层次的组织演化规律和细节在制造科学中深度融合。

麻省理工学院的Ceder、宾州大学的刘梓葵和西北大学的Olson的工作就体现了将前沿理论、高科技、新材料研发等知识系统化。Ceder通过相图计算预测 FePO_4 的热分解路线,系统地分析了薛定谔方程、密度泛函、VASP、相图计算、研发路线的设计和锂电池材料开发的整个链条中各部分之间的关系。

相当多的实例表明,创新的知识系统具有破解千年机密和产生成批专利的能力。

5 走中国道路,创建新材料制造科学体系

5.1 避免顶层设计中的误区

现在不少自发自愿的科研规划,往往是通过锁定单一目标,采用单一方法“外推”“叠加”而来,对所涉及的科学问题缺乏周密调查和辩证分析,以致于丢失了学科集成权,削弱了培育制高点的竞争力,这是顶层设计中的误区。没有发挥社会主义大国的优越性,容易使在个别项目上的超越变成整体上的被超越,与战略机遇失之交臂。因此,创新体系必须以顶层设计作为指导思想,从国家战略需求出发,使创新的理论更具有普适性,才能使全民族的科学素质在创新过程中得到提升。

(1) 顶层设计要建立在全局观和历史观的基础上。

在技术科学发生群体性革命和互联网信息畅通的当下,全

球的资源分配是由科学规律和经济规律来决定的。如果把创新知识系统的顶层设计按照现有的学科目录、行业名称和媒体热点来分配资源和进行派工，这就无异于刻舟求剑。今天要特别尊重科学的历史性和时代性，整个技术科学的结构与内涵也是与时俱进的，这就要求我们要以实际问题为导向，从历史上、全局上关注学科交叉，把握与本领域有关的学科发展总态势；对各种研发路线充分展开和全面评估，对前沿技术和大量知识单元进行洗牌式分析，挖掘它们之间的科学联系，聪明的调用各种知识单元，在此基础上提出完整的、系统的、创新的顶层设计。

（2）顶层设计要具有前瞻性。整个科学技术领域是一个完整的统一体，前瞻能力会启发我们敏锐发现和及时培育新的知识单元，抓住灵感的瞬时性、方式的随意性、和路径的不确定性蕴藏着的对问题具有多解的机遇，充分发挥材料科学对整个技术科学领域全面协调发展的支撑作用。例如在第二次工业革命中，由于滥用资源造成了人类生存环境的严重破坏，其深层次的原因，在于对能量转换过程中熵增量及其对环境的影响缺乏前瞻性的科学认识。今天，在能源技术科学、生态文明和绿色工程等领域中，为了从众多的候选工艺路线中优选出最佳者，就更加要以科学规律为基础，对各种设计方案作出定量评估，并建立相应的知识系统。

（3）要动态协调顶层设计中各部分之间的关系。创新知识系统的核心部分要体现前瞻的学术思想和坚实的科学基础。创新知识系统的过程也是在实践中不断进行学科交叉、与实践反馈、不断完善顶层设计的过程。在它的发展过程中，某些链条暂时只能用经验和试错来弥补。这就是说，整个创新知识系统的各个环节之间以及它们与产业链之间必须具有协调、反馈、迭代和优化的功能，并由相应的人才来操作。

5.2 理解科学规律是制定路线图的基础

欲在 2025 年使我国制造业进入世界前沿，就要对先进制造业中的共性科学问题进行理论创新和系统创新。

我国在基础和关键材料领域内与国际的差距到底有

几年？我们不这样提出问题，而是要从根本上寻找赶超途径。在掌握 4 阶段的全局的基础上，针对具体问题，创建新的知识单元和科学体系，才有可能得到多种解决方案，发现具体问题的赶超捷径。这就要落实并联式和非对称赶超战略新思想，统筹协调一系列的关系，例如以下 4 个方面：

（1）协调科学体系中各创新环节之间的关系。创建科学体系的过程包括提出学术思想、建立物理模型、创立新的函数、发展计算技术等，并进一步将这些创新环节连贯成知识系统。在这一过程中，需要将这些环节与相关的知识单元进行反复的试探、迭代和优化。

（2）协调科学体系中精练的理论框架与产业链中海量信息之间的关系。材料组织演化的公式是精练的框架，包括了互相关联的 3 类函数：体系自由能，组织演化的驱动力和演化程度。在进入到不同材料领域时，涉及到力、电、磁、热、光、声等功能，也就是涉及到不同层次的组织演化与性能的关系，此时就要通过创建不同的物理模型，创建新的函数。在设计产业链时，为了协调好全局化、动态化、多轨迹和个性化之间的关系，就要把与组织演化有关的函数具体化为制造方法中成百上千的工艺参数，以及在服役和回收过程中的环境参数，其中包含了海量的信息与数据。

（3）协调科学体系中各门学科之间的关系。要进行理论系统创新，必须找准例如针对先进的计算技术、大数据和信息学等学科之间的结合点。

（4）“协调发展是制胜要诀”。要创新协调好上述种种关系，就必须动态地协调好中国创新大格局中各创新主体之间，也就是国家意志、总设计师的战略创新、体系创新、知识单元创新与万众创新之间的关系；协调好科技创新、体系创新和管理创新之间的关系。这是中国特色创新大格局的特点和优势。走中国的道路是历史的必然，在具体领域内中国道路的科学内涵，必然是丰富多彩的。

五大发展理念以及非对称赶超战略、并联式战略这

些新思想必将使我们在协调种种关系、创建体系、制定路线图的过程中,视野宽、办法多、信心足。同时也使得五大发展理念具有更坚实的科学基础,更丰富的学科内涵,更鲜明的时代特征,同时焕发出更强大的力量。

5.3 蕴含创新体系的实例

添加式制造、高通量实验和计算方法以及材料在极端条件下的行为三大研究领域,都涉及到材料的组织在不同外界(变量)条件下演化的理论问题,这表明材料的组织演化在高科技和产业化中的辐射能力很强。深入分析其中的科学联系、找出规律,并建立起新的理论体系和知识单元,既发展了理论,又能解决较为广泛的实际问题,这是对青年科学家的智慧和勇气的新挑战。

6 创立新材料制造科学体系的战略目标和路线图

6.1 战略目标和路线图

6.1.1 着手制定金属、陶瓷和高分子三大材料组织演化

科学体系的顶层设计工作

目前人们对金属、陶瓷和高分子材料中的共性科学规律以及对这类材料及器件的潜力和隐患的认识还远远不够。全球至今尚未出现贯穿从基础理论、高科技到产业化过程的知识体系。因此理解和掌握金属、陶瓷和高分子材料中的共性科学规律、构成新的知识系统,是抢占全球制高点的新挑战。

6.1.2 至2020年,使先进基础材料和关键战略材料的科学

技术水平进入世界前沿

在“十三五”期间,将国内外具有世界先进水平的知识单元创造性地渗透到先进基础材料、关键战略材料和前沿新材料的制造、研发和产业化中,渗透到制造强国绿皮书和材料有关的大专项中。关键材料是指镍基高温合金、钛合金、特种钢、稀土材料、铝、镁、高温陶瓷、核武器、核反应堆、核废料等;关键技术是指快速凝固技术、热障涂层材料制备技术以及晶体生长、形貌控制和自组装技术等。这是在实践中培养视野比较开阔的人才、提升通观全局的能力、创建材料制造科技体系

并使之扎根中国的关键环节,是整个战略的决胜阶段,圆满完成此阶段的任务,可以为我国发展赢得10余年的时间。

6.1.3 至2020年,初步建成具有世界先进水平的无机功能

材料和微纳器件科学体系

在先进无机功能材料领域新成果不断涌现,国际竞争异常激烈。我国在研发、专利和产业化方面都有成果,但总体实力不强。国际上现有的知识系统尚不能满足材料领域的发展需求。因此,创立具有世界先进水平的,从经典理论、高科技到产业化融会贯通的知识单元和科技系统将是当下国际竞争的热点。建议我国以典型的功能材料为切入点,创立从量子到宏观各层次沟通的新材料设计科学体系。

6.2 措施及操作

6.2.1 有关领导和管理部门围绕大局密切配合

正如本文第5部分所述,创建新材料与科学体系要走中国道路,协调好各创新主体之间的关系。而操作过程要长期坚持对全球动向和国内形势的调查研究,建议由国家制造强国建设领导小组领导和统筹创建新材料科学体系的工作,各部门紧密配合。例如,请国家专利局梳理材料与制造领域中敏感的专利及其中的科学问题,由各大专项提出具体的需求,请国家自然科学基金委提出项目指南或指令,请中科院、工程院、社科院和教育部提供咨询服务。

6.2.2 “十三五”期间的紧急措施

改革开放以来所培养的人才队伍,应担当完成“十三五”决胜阶段的任务,建议由中国物理学会相图专业委员会提出运作方案,该单位每年都集结了数百名研究生,具有国际优势的研究人员数量。现在国内有些很好的数据库还尚未与研发沟通,尚未进行产业化尝试。中国物理学会相图专业委员会,可通过与有关单位联合举办基础知识学习班、知识工具的培训班和典型案例剖析班,学习和掌握破解某些重要问题的学术思想、基础知识和知识工具。例如镍基高温合金及某些特种钢

的工艺分析、热障涂层设计、3D 工艺中的组织演化过程分析、铝合金热力学动力学数据库应用以及有关单位委托的课题等。以期, 由该单位将国内外具有世界先进水平的知识单元创造性地应用到先进基础材料、关键战略材料和前沿新材料的制造、研发和产业化中。

致谢 衷心感谢中科院技术科学部和学部工作局的资助和支持。衷心感谢朱静、都有为和祝世宁院士对本文的结构和修改所作的指导。

参考文献

- 1 金展鹏, 蔡格梅, 苏柳梅, 等. 论新材料与制造科学体系在高科技和产业化中的作用. 中国科学: 技术科学, 2016, 46(9): 877-893.
- 2 Fang X S, Ye C H, Zhang L D, et al. Direct observation of the growth process of MgO nanoflowers by a simple chemical route. *Small*, 2005, 1(4): 422-428.
- 3 Yan J, Fang X S, Zhang L D, et al. Structure of individual ZnS/ZnO biaxial nanobelt heterostructures. *NanoLetters*, 2008, 8(9): 2749-2799.
- 4 Xue F H, Fei G T, Wu B, et al. Direct electrodeposition of highly dense Bi/Sb superlattice nanowire arrays. *Journal of the American Chemical Society*, 2005, 127 (44): 15348-15349.
- 5 Kevin Bullis. The art of 3-D printing. [2012-1-11]. <http://www.technologyreview.in/computing/39437/>
- 6 Chen Q, Hillert M, Sundman B, et al. Phase equilibria, defect chemistry and semiconducting properties of CdTe(s)-thermodynamic modeling. *Journal of Electronic Materials*, 1998, 27(8): 961-971.
- 7 Cahn J W. Free energy of a nonuniform system - interfacial free energy. *Journal of Chemical Physics*, 1958, 28(2): 258-267.
- 8 Cahn J W. Free energy of a nonuniform system II - thermodynamic basis. *Journal of Chemical Physics*, 1959, 30(5): 1121-1124.
- 9 Cahn J W, Hilliard J E. Free energy of a nonuniform system III - nucleation in a two-component incompressible fluid. *Journal of Chemical Physics*, 1959, 31(3): 688-699.
- 10 Kaufman L. Computational materials design. *Journal of Phase Equilibria and Diffusion*, 2009, 30: 418-428.
- 11 Hillert M. 合金扩散和热力学. 赖和怡, 刘国勋, 译. 北京: 冶金工业出版社, 1984.
- 12 Hillert M. Phase equilibria, phase diagrams and phase transformations — their thermodynamic basis (Ed.2nd). Cambridge University Press, 2008.

Chinese Strategies of Materials Development and Their Manufacturing and Fabrication

——Comprehensive Development of Material Science and Its Emerging Industry Chain

Jin Zhanpeng^{1,2} Cai Gemei² Su Liumei² Fan Xing² Zheng Feng²

(1 Chinese Academy of Sciences, Beijing 100864, China;

2 School of Materials Science and Engineering, Central South University, Changsha 410083, China)

Abstract Six perspectives, from which materials and their manufacturing and fabrication system are demonstrated, are as follows. (1) How could materials science meet the challenge of ever-increased development of advanced technologies? (2) The stories of basic knowledge of microstructure evolution. (3) Newly-developed and developing industry chains are output of multidisciplinary integration occurred in advanced technologies. (4) What could we learn from global experience of novel materials and their manufacturing and fabrication? (5) Designing Chinese knowledge system of novel materials and their manufacturing and fabrication. And (6) where is our roadmap? What are urgent tasks and implementation measures for the 13th Five-Year Plan? In order to catch up and be comparable with global competition in fields of industries, we propose that the creation of novel materials and their manufacturing and fabrication system is one of the forward-looking strategies. In order to build a strong state with advanced and powerful manufacturing and fabrication system, it is then one of the key factors to fulfill the so called five development concepts of “innovation, harmony, green, open, and sharing”.

Keywords materials designing, microstructure evolution, knowledge base, materials and their manufacturing and fabrication system, industry chain

金展鹏 材料科学技术专家，中科院院士，中南大学教授。1938年11月出生于广西荔浦，1960年毕业于中南矿冶学院，1963年中南矿冶学院金属学专业研究生毕业，2003年当选为中科院院士。主要从事相图热力学与相变动力学研究。发展了结构特点不同的相的热力学模型和相图优化计算方法，构筑了一系列金属合金、氧化锆基陶瓷及人工晶体材料的相图。发展了研究相图等温截面和等温四面体的多元扩散偶方法，实现用一个试样获得三元相图等温截面及无扩散亚稳相转变区等信息。建立了阶段性亚稳相转变理论，揭示了某些铁合金中依次出现各种亚稳相的相变机制。以不同热力学变量为坐标的相图为背景来研究各类动力学通道，建立了模拟材料组织演化过程的理论框架，并用于预测和阐明合金的非晶形成区、复合材料的界面反应过程及热腐蚀产物的形成条件。E-mail: jin@mail.csu.edu.cn

Jin Zhanpeng Academician of Chinese Academy of Sciences (CAS) and professor of Central South University (CSU). He is an expert in materials science and technology. His research mainly focuses on thermodynamic of phase diagram and kinetics of phase transformation. He has developed thermodynamic models for many phases of different structures as well as methods for phase diagram optimization. Out of these, he has constructed a series of phase diagrams and thermodynamic databases for alloys, ZrO₂-based ceramics, and synthetic crystals. He has also developed diffusion triple method capable to obtaining ternary isothermal phase diagram and diffusionless phase transition regions with use of only one sample. In addition, he has established staged phase transformation theory, revealed the mechanism of metastable phase transition for multi-component systems. Furthermore, he has established the framework of simulation of microstructure evolution, and predicted and clarified the formation areas of amorphous alloys, the interface reaction process of composites and the formation conditions of hot corrosions. E-mail: jin@mail.csu.edu.cn