



上海交通大学材料基因组联合研究中心研究进展报告



上海交通大学材料科学与工程学院

2016 年 12 月 22 日

上海交通大学材料基因组联合研究中心于 2015 年 4 月 20 日在上海交通大学闵行校区正式成立，中心主任由汪洪教授担任，并聘请美国材料基因组建议人、交大访问讲习教授 Gerbrand Ceder 教授担任联合研究中心首席科学家，筹建 Materials Project 的亚洲中心“Asia Hub”，标志着上海交通大学材料基因组联合研究中心工作的全面启动。中心网站 magic.sjtu.edu.cn 于 2016 年 5 月 1 日上线运行。

全面的学科覆盖和优秀的人才资源是上海交通大学开展材料基因研究的最大优势。而组织学科交叉、发挥校内学科综合优势是上海交通大学材料基因组联合研究中心的最重要的使命之一。中心成立一年多来，我们逐渐明确了作为校级交叉学科服务平台的定位。中心的具体职责可以归结为 5 点：1) 发掘校内的相关技术优势——做星探；2) 组织跨专业、跨领域的团队组合——做红娘；3) 拓展研究新领域和新方向——做教练；4) 支持预研培育未来国家项目——做风投；和 5) 以及组织联合校内外团队申报国家和地方科研项目——做经纪。从而为不同专业和背景的教授专家提供帮助，使上海交通大学在材料研究上的整体优势得到充分发挥，在发展中建立起新的交叉技术群体，形成强劲的学科增长点。

通过对与材料基因组研究直接相关的人才挖掘，目前中心拥有成员 50 名，其中材料学院 32 名，其他学院 18 名，分别来自物理、数学、电信、化学化工、机械动力、密西根学院、自然研究院、高性能计算中心等单位。根据现有的人才基础和研究特长，我们设置了高通量计算、高通量实验、数据库与数据挖掘、集成计算材料工程等四个技术平台，确立了先进高温合金、先进高强钢、轻质高强金属及复合材料、生物医用材料、清洁能源材料等五个主要应用方向。今后，还将本着积极拓宽、稳健发展的原则，不断扩展研究领域与合作对象，加速发展材料基因组研究。

迄今，我们开展了第一性原理计算、扩散多元节设计新型高温材料、镁合金板材温热变形机制、高通量光电催化表征装置、锂电池固体电解质材料、成分空间连续分布的材料芯片制备、材料高通量计算对热电材料性能预测、复合材料的结构建模和力学性能研究、以及材料基因组数据库建设等项目研究。其中有近十个非材料专业的团队参与到实质性的跨学科合作研究当中。中心在校科研院的支持下，为材料基因组技术相关的预研提供了部分资金支持，使一批有想法、有基础、有希望、有潜力的项目得以尽快启动。2016 年，我们资助了 14 个项目，总金额达到 215 万元，并较快地取得了一些初步成果。在高通量计算方面，材料基因组联合研究中心于 2016 年 4 月 1 日在我校高性能计算中

心的超级计算机上成功运行了 Materials Project-Asia Hub 高通量计算软件系统，成为全国最早实现高通量自动计算的单位之一，2016 年 10 月 1 日，又成功运行了第二代高通量计算代码 MatMethod。中心成员将第一性原理计算以及几何建模技术运用于能源材料以及结构材料的研究，为结构和组成设计提供了思路；高通量实验方面，中心成员成功研发了高通量光电催化表征系统样机，可用薄膜样品的光电催化以及电催化性能的高通量表征；基于大科学装置利用组合材料芯片快算测定三元相图的等温截面取得了阶段性突破，2016 年 3 月，中心成员在美国 Argonne 同步辐射光源首次完成组合材料芯片高通量表征实验，实现每秒 1 个数据点，高出之前发表数据一个数量级，大大提升了三元相图的研究效率，同时运用机器学习技术，初步建立了大批量 X 光衍射谱图自动识别归类流程，数据处理速度与数据获取速度相匹配，识别准确度超过人工。在数据库方面，中心成员建立了铝基复合材料的结构-性能关系的数据库及其共享平台，形成系统的数据积累和具体应用，预期可实现该类铝基复合材料的设计引领和加速，并在我国若干重大工程领域实现应用验证。在 2016 年内，研究中心成员已经发表了包括 Science, Adv. Mater. 等在内的 39 篇学术论文，申请国家发明专利一项。

为了加强与国内外材料基因组领域的同行的交流和学习，中心举办了以材料基因组研究为主题的上海交通大学材料学年会，联合研究中心在 2016 年定期举办了材料基因组专题系列讲座 8 次，邀请了加州大学伯克利分校的 Gerbrand Ceder 教授和 Persson 博士、清华大学王崇愚院士、上海大学鲁晓刚教授、密歇根大学的齐月副教授、北京航空航天大学孙志梅教授、马里兰大学高铁仁博士、美国麻省理工的王琰博士等材料基因组相关领域的专家就材料基因的研究理念和研究方法展开学术交流和讨论，有力增强了对国际材料基因研究前沿的认识，增进了国内外学术合作。8 月 29 日，中心成员在上海成功主办第三届堆积问题国际会议。10 月 24 日，中心成员主办的第四届国际分子模拟大会在上海顺利召开。

2016 年内，中心成员积极参加了一系列国内外的学术会议。9 月 21 日，中心成员参加“中国科学仪器设备与试验技术发展高峰论坛—材料基因组工程高通量合成与表征学术报告会”，中心成员介绍了由我校材料学院和物理系教授组成的同步辐射高通量表征团队通过国内外合作，采用高通量同步辐射 X 射线衍射对铁钴镍三元合金材料芯片进行成分结构表征，初步实现了 X 射线对晶体结构相组成的快速表征以及基于机器学习的自动分析，得到了与传统方法相同的三元系相图的等温截面，与会者反应十分热烈；报

告了透射电镜中使用软件控制的纳米束衍射图谱的高通量扫描以及自动数据采集与分析的结果，获得广泛好评；还首次报告了由我校材料基因组联合研究中心支持建设的高通量光电催化表征装置的运行实况以及初步材料研究结果，引起了听众的极大兴趣。反映了我校在近一年中高通量实验方面所取得的切实进展，充分体现我校在材料基因组研究上的务实风格，也展示了我校材料基因组联合研究中心的出众实力。9月26日，中心成员参加2016年国际材料趋势高峰论坛，在材料基因组论坛分别作关于高通量相图构建与铝合金微通道管材挤压成形中的材料集成计算工程特邀报告，此外，11月26日-12月2日，中心成员参加了在美国举行的MRS秋季会议，作了关于高通量相图构建与钙钛矿太阳能电池的报告，引起了广泛关注。

由上海交通大学材料基因组联合研究中心组织策划，由材料科学与工程学院以及其他相关学院与单位的骨干参与，积极申报和参与了国家十三五材料基因组重点研发专项的申请。今年7月11日，科技部2016年材料基因组工程国家重点研发专项公布评审结果，其中由上海交通大学作为项目牵头单位，联合浙江大学、大连理工大学等17家单位，申请“材料基因工程关键技术与支撑平台”重点专项“轻质高强镁合金集成计算与制备”，获批经费2000万元，执行周期2016-2020年。同时参与中国航空工业集团公司北京航空材料研究院牵头的“新型镍基高温合金组合设计与全流程集成制备”项目以及由北京科技大学作为牵头单位负责申报的国家重点研发计划项目“材料基因工程专用数据库和材料大数据技术”。这些都为材料基因研究的进一步发展提供了坚实的经费支持与合作基础。在2016年11月18日截止的科技部2017年材料基因组工程国家重点研发专项申报中，中心共组织牵头申报三项，参与四项。此外，中心还积极参与了上海材料基因工程研究院牵头的上海市材料基因组平台建设项目。

总体而言，上海交通大学材料基因组联合研究中心在学术合作交流，项目开展支撑、重大项目申请上已经开展了诸多富有成效的工作。鉴于前期项目在理论研究以及高通量实验方面已经取得了初步成果，我们拟在后期项目设计中加强理论研究成果与高通量实验的衔接，加快材料创新研究速度，同时提升机器学习暨数据挖掘等大数据技术对材料基因组研究的支持作用。针对目前存在的不同领域之间的研究内容以及方向的沟通和理解困难的问题，拟加强研究中心的成员之间的内部交流与沟通学习，积极开展引智工程，邀请国内外知名专家来访交流，切实提升材料基因组研发方法对材料研究的引擎功能，加速从材料的研发到产业化的进程，为中国材料产业的跨越发展探出一条新路。

在未来三年内，将通过外引内联的方式初步打造装备一流、管理一流、创新能力一流、人才队伍一流的材料基因组深度研究与合作平台。上海交通大学材料基因组联合研究中心将结合上海交通大学张江校区建设，广聚贤才，引领材料发展方向，协同发展基于材料基因组理念的材料学理论与计算、实验和数据技术，以加速发展材料研究与运用创新，为先进材料产业以及高端制造技术的发展夯实基础，为上海市材料基因组研究院的整体发展添砖加瓦，共同为上海市建设具有国际影响力的科技创新中心做出贡献。