

## “材料基因工程关键技术与支撑平台” 重点专项 2018 年度项目申报指南

为落实国务院《中国制造 2025》、《“十三五”国家科技创新规划》等提出的任务，国家重点研发计划启动实施“材料基因工程关键技术与支撑平台”重点专项。根据本重点专项实施方案的部署，现发布 2018 年度项目申报指南。

本重点专项的总体目标是：围绕新材料“研发周期缩短一半、研发成本降低一半”的战略目标，融合高通量计算（理论）/高通量实验（制备和表征）/专用数据库等关键技术，变革材料研发理念和模式，实现新材料研发由“经验指导实验”的传统模式向“理论预测、实验验证”的新模式转变，显著提高新材料的研发效率，增强我国在新材料领域的知识和技术储备，提升应对高性能新材料需求的快速反应和生产能力；培养一批具有材料研发新思想和新理念，掌握新模式和新方法，富有创新精神和协同创新能力的高素质人才队伍；促进高端制造业和高新技术的发展，为实现“中国制造 2025”的目标做出贡献。

本重点专项的主要研究内容是：构建高通量计算设计、高通量制备与表征和专用数据库等三大协同创新平台；研发多尺度集

成化高通量计算方法与计算机软件、高通量材料制备技术、高通量表征与服役行为评价技术，以及面向材料基因工程的材料大数据技术等四大关键技术；在能源材料、生物医用材料、稀土功能材料、催化材料和特种合金等支撑高端制造业和高新技术发展的典型材料上开展验证性示范应用。共部署 40 个研究任务，专项实施周期为 5 年（2016-2020 年）。

2016 年本重点专项在材料基因工程关键技术和验证性示范应用方向已启动 13 个研究任务的 14 个项目。2017 年本重点专项在材料基因工程关键技术和验证性示范应用方向已启动 16 个研究任务的 19 个项目。2018 年，在材料基因工程关键技术、验证性示范应用、新技术和新材料探索，以及协同创新示范平台建设等方向启动 11 个研究任务，拟支持 11-22 个项目，拟安排国拨经费总概算为 2.20 亿元。验证性示范类项目（指南 3），如企业牵头，须自筹配套经费，配套经费总额与国拨经费总额比例不低于 1:1。协同创新平台建设类项目（指南 6-11）的国拨经费属于引导性资金，需要充分调动社会资金和现有的国家重大科技设施资源进行建设，指南 6 和 9 的配套经费总额与国拨经费总额比例不低于 4:1，指南 7，8，10，11 的配套经费总额与国拨经费总额比例不低于 2:1。

项目申报统一按指南标题的研究方向进行，申报项目的研究内容须涵盖各指南所列的全部研究内容和考核指标。除特殊说明

外，各指南方向拟支持项目数均为 1-2 项，项目实施周期不超过 4 年。各研究任务所列考核指标，除发明专利和软件为预期性指标外，其余指标均为约束性指标。所有任务研究均必须突出高通量计算/高通量制备/高通量表征与评价的理念与方法，其中指南 3-5 的研究还必须体现从基础研究、关键技术研发到规模制备的全链条、协同创新研究的特点。所有研究项目结题验收前，均须完成数据汇交。项目下设课题数原则上不超过 4 个，项目参研单位总数原则上不超过 10 个。项目设 1 名项目负责人，项目中每个课题设 1 名课题负责人。

指南中“拟支持项目数为 1-2 项”是指：在同一指南研究方向下，当出现申报项目评审结果前两位评价相近、技术路线明显不同的情况时，可同时支持这 2 个项目。2 个项目将采取分两个阶段支持的方式。第一阶段完成后将对 2 个项目执行情况进行评估，根据评估结果确定后续支持方式。

### **1. 高通量材料制备新原理与新方法研究**

研究内容：以提升材料成分-工艺-组织-性能间关联关系的研究效率为目标，研发基于物理法、化学法、生物法或多种方法相融合的材料高通量制备新原理和新方法；发展面向无机非金属、有机高分子、金属与合金、生物质等材料体系，或两者以上的复合材料体系的多组元材料成分与组织结构高通量可控制备新技术，研发高通量制备新技术的装置原型，并进行示范应用。

考核指标：开发出 2 种以上、国内外文献未见报道的高通量制备新技术（物理法、化学法、生物法或多种方法相融合）；样品成分控制精度优于 1%；与相应的已有高通量制备方法相比，效率改善一个数量级以上；组合芯片类高通量制备技术一次制备样品数 $\geq 1000$  个，块体和粉体类材料一次制备样品数 $\geq 100$  个；开发出相应的具有自主知识产权的高通量材料制备装置，可控化学组分 3 种以上，在 3 种以上典型材料体系中获得验证性示范应用；申请发明专利 10 项以上。

## 2. 高通量材料表征新理论、新技术和新装备

研究内容：研发与高通量材料制备技术有机融合的高通量表征新理论和新技术，重点解决热学、电学、光学、磁学、力学等物理性能高通量表征的关键技术，研制相应的新装备；探索材料基本物理化学参数及微观、介观组织结构表征的新原理，开发材料成分与组织结构跨尺度的高通量表征新技术，高效构建材料成分-结构-性能间的关联关系。

考核指标：开发出 2 种以上、国内外文献未见报道的高通量表征新方法，研制出表征物理参数 5 种以上、具有自主知识产权的高通量表征新装备；通过基本物理化学性质的表征，构建成分-结构-性能间关联关系模型 3 种以上；薄膜及阵列类样品一次表征样品数 $\geq 100$  个，单点表征区域 $\leq 200\mu\text{m}$ ，单点表征时间 $\leq 1\text{s}$ ；块体材料样品一次表征样品数 10 个以上；申请发明专利 10 项以上。

### 3. 新型高性能热电能量转换材料高通量设计制备与应用示范

研究内容：发展热电材料电、热输运性质的高通量计算设计方法，建立基于数据分析与机器学习的热电材料构效关系预测方法，并应用于新热电材料体系的设计、筛选与性能优化；研究适用于热电材料的高通量制备以及多参数快速微区测量方法与技术；研究新型环境友好、低成本的高效热电材料，研制热电器件，并开展示范性实证系统关键技术研究；建立热电材料物理化学性质和服役行为关键参数的数据库。

考核指标：实现 $\geq 10^2$ 级的并发式高通量计算，计算的样品数 $\geq 10^4$ ；实现样品数 $\geq 100$ 个/批次的高通量制备；单点表征区域 $\leq 200\mu\text{m}$ ，单参数表征时间 $< 1\text{s}$ /样品，筛选出3种以上新型热电材料，在2种以上新材料中实现热电优值 $\geq 2.0$ ；热电器件转换效率 $\geq 15.0\%$ ，完成 $\geq 1000$ 瓦发电示范；建立热电材料与器件设计方法、软件平台及数据库。

### 4. 基于材料基因工程技术的前沿性新材料探索与发现

研究内容：利用材料基因工程的先进理念、方法和技术，开展具有新组分、新结构和新特性的前沿性、颠覆性新材料的探索与发现研究；开展材料成分、微观结构、物性和服役行为的相关性和预测方法研究，融合材料基因工程高通量计算、高通量实验和材料数据技术，采用纳观、微观、介观和宏观尺度等材料集成设计方法，探索材料新特性、新机制，实现新材料的设计与性能

预测，新器件/构件的设计；鼓励与有明确前沿新材料需求的单位或部门开展合作研究。

考核指标：探索 and 发现 2-3 种具有新组分、新结构和新特性的前沿性或颠覆性新材料；突破 3 项以上前沿新材料设计和制备的新原理、新方法和新技术；开发的新材料在 2-3 个行业或领域实现典型示范应用，或在权威学术刊物上发表原创性研究论文 10 篇以上；申请发明专利或著作权登记 10 项以上。

### **5. 材料基因工程关键科学和技术问题协同创新研究**

研究内容：选择 2 种以上高端制造业或战略新兴产业有重大需求的典型材料，利用材料基因工程的先进理念、方法和技术，开展高通量计算/高通量制备和表征评价/材料数据库和数据技术等协同融合技术研究，提出开展协同创新研究的新理念、方法和途径，重点解决材料基因工程计算、实验和数据等技术和平台高效协同的机制问题，开展示范应用，大幅度提高研发效率、降低研发成本。

考核指标：开展材料基因工程关键科学和技术问题协同创新研究，提出协同创新的新理论、新方法，建立 1 个以上协同创新平台，建立 2-3 条协同创新的技术路线，大幅度提升 2 种或 2 种以上现有材料的品质和性能，综合性能提高 30%以上，研发成本降低 20%以上。

### **6. 高通量材料计算应用服务平台**

研究内容：依托国家超级计算中心，建设支持大规模、高通

量材料计算的硬件系统和运行环境；集成材料计算软件、前后处理和数据可视化模块，研发面向材料计算的全链条算法工具集成和统一接口技术，支持多组元材料体系从微观、介观到宏观的结构、物性和服役行为的多尺度计算仿真技术；开发高效率任务调度和工作流的软件系统，满足多用户、多任务的高通量计算需求，实现材料计算设计的全流程自动控制，以及海量数据的高效传输和积累，支持数据库的建设。

考核指标：集成从电子尺度到宏观尺度材料计算软件 50 个以上，软件功能支持 3 组元及以上材料体系的成分、结构、性能和服役行为等关联的全流程多尺度计算；平台计算能力大于 3000 万亿次/秒，支持云服务模式和 10PB 级以上数据存储管理，支持多用户（100 以上）和多任务（ $10^3 \sim 10^4$  量级）的并发式计算任务；申请软件著作权 5 项以上，获得 10 个以上单位用户的应用验证。

## 7. 高通量多尺度材料模拟与性能优化设计平台

研究内容：依托超算网格资源，集成材料计算模拟软件和高通量自动流程软件，利用云计算和云服务技术，建设具有强大高通量计算和高效计算结果分析能力的材料模拟计算与性能优化平台；研发任务调度软件，支持多个高性能计算系统间的大规模资源管理、负载均衡与任务调度，实现网格资源的高效利用；发展材料计算数据自动采集、智能分析技术，支持多尺度全流程材料

计算设计和数据库建设；研究适用于材料基因工程发展的计算平台运营模式，针对典型材料，开发材料设计、计算和筛选全流程的工作系统。

考核指标：建立 2 个以上区域级高通量材料计算平台，各平台具备 500 万亿次/秒以上计算能力，支持云服务模式和 PB 级以上材料计算数据的存储管理；集成材料计算软件 20 种以上，支持 3 组元及以上材料体系的  $10^3$  级以上并发式高通量计算；申请软件著作权 5 项以上，获得 3-5 类材料的应用验证。

## 8. 高通量材料制备技术平台

研究内容：围绕薄膜、纤维、粉体、流体、块体等典型材料的制备，构建覆盖模板选控、化学前驱物喷射、扩散多元节及梯度结构、凝固控制等方法、技术和装置的高通量材料制备平台；开发高通量制备平台的数据自动采集、传输与存储关键技术；建立开放共享的国家级高通量材料制备技术平台，支撑多组分新材料体系的发现、快速筛选和性能优化；开展示范应用研究，形成新材料快速研发能力，满足高端制造业与高新技术发展的需求。

考核指标：拥有 4-5 种高通量材料制备技术和相应的装置，组合芯片材料样品单元密度  $\geq 200$  个/ $\text{mm}^2$ ，粉体/流体样品单元数  $\geq 100$  个，块体材料制备方法与传统技术相比单个样品的制备速度（单位时间样品数）与成本比值提高 50 倍以上；高通量材料制备装置的可控化学组分不少于 3 种；样品单元适用于表征检测的

性能 $\geq 3$ 个，样品单元性能稳定性误差 $\leq 10\%$ 。

### **9. 基于先进光源的高通量材料表征平台**

研究内容：研究材料高效综合表征方法，依托国家先进光源资源，研发覆盖先进光源衍射、散射、成像及谱学等研究手段的高通量材料表征技术和与之配套的试验装置，实现材料的原位实时表征；建立面向薄膜、纤维、粉体或块体等材料合成-加工-服役过程的高通量表征平台，实现材料成核、结晶、取向，以及缺陷和应力等的多层次、多维度、多尺度演化的原位无损分析和表征；高通量获取材料成分、结构、物理化学性质及动力学规律，建立材料结构和性质数据库。

考核指标：研制出 3-4 个具有自主知识产权的原位、实时、无损的高通量综合表征技术和与之配套的实验装备；表征技术涵盖先进光源衍射、散射、成像和谱学的研究手段，表征参量涵盖材料成分、结构、物理和化学性质等 9 种以上，并满足服役环境下材料表征的需求；实现表征区域 $\geq 200\mu\text{m}$ ，空间分辨率 $\leq 100\mu\text{m}$ 的原位无损表征；形成包含 9 个以上材料体系的数据库；申请发明专利 3-5 项，软件著作权登记权 3-5 项。

### **10. 国家材料基因工程数据管理与数据服务技术平台**

研究内容：面向材料基因工程发展的需求，建设多源异构数据自动采集、汇交管理、分析挖掘和应用服务等标准化描述方法和技术；研发大规模材料基因工程数据存储、管理的关键技术，

以及高效运行服务和开放共享的运行环境；研发材料基因工程数据关联、集成、检索和推送方法，融合机器学习、挖掘分析等材料数据技术，建成开放共享的国家材料基因工程相关科技计划项目的数据汇交、管理和应用技术平台。

考核指标：提出多源异构材料基因工程数据的汇交管理、分析挖掘、应用服务的标准化描述方法，建立相关标准 5 项以上；建成大规模材料基因工程数据高效存储、管理的运行环境，支持 1 亿条以上数据资源的管理和服务，实现 40 家以上材料基因工程数据的规范化汇交，支持面向新数据资源的动态汇交和发展，并开放共享；申请发明专利或著作权登记 10 项以上。

### **11. 材料基因工程专用数据库平台**

研究内容：针对新材料发现、高端装备先进材料研发以及国防关键材料性能提升的需求，研发典型材料数据积累、整合的专用技术，建设专用数据库；面向材料设计、制备、表征及服役等全链条应用，研发满足一站式、批量化数据积累的数据库技术，以及与数据管理平台的接口技术；在材料基因工程数据库统一架构的基础上，融合材料数据挖掘和机器学习技术，实现特色鲜明的材料计算、实验与生产数据全流程集成，材料数据的自动采集、积累、整合与应用。

考核指标：研发出材料计算、实验与生产等数据自动采集和筛选技术 2-3 项，建成成分-工艺-组织结构-性能等计算、实验和

生产等数据较为完备的材料基因工程专用数据库 2-3 个，数据总量达到 30 万条以上；研发出支持数据库共享和应用的数据传输和专用接口技术 2-3 项，实现数据的协同与共享，满足新材料发现、工艺优化和性能提升的需求，实现在 1-2 种材料研发上的示范应用；申请发明专利 5-8 项，软件著作权 4-6 项。