

## 附件 12

# “材料基因工程关键技术与支撑平台”重点专项 2017 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 2017 年度项目申报指南。

本重点专项总体目标是：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、高通量制备与表征和专用数据库等三大示范平台；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个重点研究任务，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启动了13个研究任务。2017年，拟在材料基因工程关键技术和验证性示范应用方向启动16个研究任务（其中，由于金属基、陶瓷基和高分子基复合材料的设计方法和制备工艺差别较大，故将任务16分成3个子任务列出，即指南16.1、16.2和16.3），拟支持18-36个项目，拟安排国拨经费总概算为3.24亿元。凡企业牵头的项目须自筹配套经费，配套经费总额与国拨经费总额比例不低于1: 1。

除任务16外，项目申报统一按指南一级标题（如1.）的研究方向进行，任务16按指南二级标题进行申报（即指南16.1、16.2和16.3）。除特殊说明外，拟支持项目数均为1-2项。项目实施周期不超过4年。申报项目的研究内容须涵盖各指南所列的全部考核指标（但对于任务16，涵盖其中一个子任务所列考核指标即可）。各研究任务或子任务所列考核指标，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

量表表征与评价的理念与方法，其中任务9-16的研究还必须体现从应用基础研究、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.高通量并发式材料计算算法和软件**

研究内容：发展多组元材料体系从微观到宏观的结构、物性和服役行为仿真的全链条多尺度集成计算方法及计算软件，发展材料结构预测软件、计算热力学与动力学软件等。建立通用的驱动软件环境，研究并发式计算中的数据关联和提取规律，发展实现复杂数据分析与管理的软件，集成专用格式的高通量数据信息，开发可实现高通量并发式材料计算的软件。针对单晶高温合金等结构材料开展验证性应用，研究制备过程中的成分-工艺-组织-性能之间的定性与定量关系。

考核指标：开发出材料基因工程并发式专用算法和标准算法，将现有单线程算法的计算效率提高 30%；研制出具有自主知识产权的高通量并发式集成计算软件系统，作业数  $\geq 5 \times 10^3$ （对应于化学组合及体系结构设计），部署于超级计算中心，10 个以上用户试用，并取得明显效果；通过并发式高通量计算，预测 1~2 种满足国家重大需求、具有特定性能的新材料，提出实现其性能的组合优化设计方案并进行验证性应用；申请软件著作权登记 5 项以上。

## 2.高通量自动流程材料集成计算算法和软件

研究内容：将第一性原理计算、热力学模拟、微介观动力学等计算模型和方法进行模块化耦合，开发高效率、易扩展、可移植的跨尺度高通量自动流程材料计算软件系统；开发高通量自动流程计算所需的底层计算工具和自动驱动引擎软件，建立自动流程算法软件，发展具有知识表示、数据挖掘、机器学习和推理、专家系统等智能技术的软件。在支撑高端制造业和高新技术发展的典型功能材料领域开展验证性应用。

考核指标：开发出材料基因工程自动流程专用算法，研制出具有自主知识产权的自动流程集成计算材料预测系统，部署于超级计算中心，实现开放和共享，获得 10 个以上用户的验证性应用；针对 2 种及以上具有国家重大需求的典型材料实现  $10^4$  级候选材料结构的全流程自动筛选，确定范围

小于 1%的可行域，并进行实验验证；申请软件著作权登记 5 项以上。

### 3.基于材料基因工程的传统制备加工工艺优化原理与方法

研究内容：研究基于高通量计算的制备加工全流程建模和模拟方法，发展多尺度耦合组织结构模拟算法，开发材料成分-工艺-组织-性能等多场耦合模拟软件，揭示典型材料设计、加工、使用 and 损毁全过程的规律，实现对材料宏微观结构的精确调控；研发基于特征参数的组织表征方法，及基于组织-性能定量关系的多尺度模型，实现对材料性能场的准确预测；建立基于材料热力学/动力学计算与实验测试数据关联的材料和工艺数据库平台，建成有效支撑制备加工全流程模拟的专用数据库；研究加工工艺与缺陷和使用性能的关系，建立含缺陷材料在典型服役环境下的性能评价方法及准则，提出优化工艺并进行示范应用。

考核指标：针对 2~3 种典型材料体系，实现制备加工全流程、多尺度（ $10^{-3}$ - $10^3$  mm）、多场耦合的集成化高通量计算；建立材料成分-工艺-结构-性能关系及缺陷与服役性能关系模型，提出评价准则，并实现在大型构件上的示范应用；研发出典型大型构件微观组织调控技术 $\geq 2$ 项，材料加工工艺高通量模拟仿真技术 $\geq 3$ 项；典型大型构件研制周期和成本降低 30%以上；申请发明专利 5 项以上，软件著作权登记 3 项以上。

#### 4.基于大科学装置的高通量材料表征技术与装置

研究内容：设计研发基于先进光源或中子源的组合材料样品微结构高通量表征装置；研究基于大科学装置的硬件设计以满足高通量表征所需的分辨率和时间分辨率等要求，开展材料微结构、热力学和动力学过程的综合表征研究，实现以成分、温度、动力学过程可控等为基础的高通量原位表征技术，突破材料研发中表征速度的瓶颈问题，实现材料基因工程设计和应用示范。

考核指标：建成基于大科学装置的组合材料样品微结构高通量表征装置，开发出相应的数据处理、挖掘与分析技术及软件，实现基于大科学装置的样品快速分析效率 $\geq 5000$ 点/样品，单点表征时间 $\leq 60$ 秒，单点检测尺寸 $\leq 50 \times 50 \mu\text{m}$ ，测温精度 $\pm 1^\circ\text{C}$ ；建立结构参数-组织形态-性能相关性模型和特征数据库；申请发明专利3~5项，软件著作权登记2~3项。

#### 5.材料性能的多场耦合与跨尺度关联评价技术

研究内容：研发多物理化学场耦合环境作用下工程结构材料微缺陷和损伤多时空尺度演化的原位或冻结实验理论和方法，建立多场耦合条件下材料微损伤演化跨时空尺度关联的高通量评价实验技术，获取损伤演化物理图像和规律；研究工程结构材料与多物理化学场交互作用及其耦合机理，建立材料损伤演化与破坏行为的多时空尺度理论模型，以及

多场耦合环境作用下损伤演化与材料组成和微观结构的多层次、跨时空尺度关联关系；在典型材料中实现验证性应用。

考核指标：建立多场耦合环境下材料损伤演化的跨时空尺度关联高通量评价技术 $\geq 3$ 项，空间尺度范围 $10^{-4}$ - $10^3$ mm，应变率 $10^{-6}$ - $10^6$ s $^{-1}$ ，在3种以上的典型材料中实现多场作用下的跨时空实验测试；揭示不同时空尺度层次典型材料与环境交互作用和损伤演化，以及跨时空关联物理机制，建立多场耦合条件下工程结构材料与环境交互作用模型 $\geq 3$ 个；申请发明专利3~5项，软件著作权登记3~5项。

#### 6.材料环境失效过程的高通量计算模拟与高通量实验技术

研究内容：研究工程结构材料环境失效的多尺度计算模拟模型与算法，开展材料环境失效演化过程的高通量计算模拟研究；研发多因素耦合作用下材料环境失效过程的等效加速模拟实验方法与技术，开展典型环境失效的实验研究；研发材料环境失效的高通量实验评价技术，开展材料环境性能的评价研究；研发材料环境失效数据的高效处理和利用技术，建立以材料基因工程为基础的环境失效过程的高效评价方法。

考核指标：建立材料环境失效演化过程的高通量（ $10^2$ 以上）多尺度计算模型与算法 $\geq 3$ 个；建立材料环境失效的高通量实验技术和多因素耦合作用下环境失效过程的等效加速模拟实验方法和技术 $\geq 4$ 个，等效加速模拟所需时间缩短一

半，在 2 种以上的典型材料上实现示范应用；申请发明专利 3~5 项，软件著作权登记 3~5 项。

### **7.材料服役行为的高通量评价与预测技术**

研究内容：针对长输管线、海洋工程或核电等国家重大工程关键材料服役安全与寿命预测的重大需求，研究应力/环境交互作用下材料失效规律，开发复杂环境条件下材料服役性能的高通量评价方法与技术；基于材料服役行为的高通量多尺度计算模拟、数据挖掘和实验研究，建立重大工程关键材料安全性评价、失效评估和寿命预测模型与评价技术；研发基于服役行为和数据挖掘的结构材料逆向设计技术。

考核指标：研发基于高通量 ( $\geq 10^2$ ) 模拟和大数据分析挖掘的重大工程材料失效规律预测技术  $\geq 2$  项；开发多环境因素 ( $\geq 3$ ) 作用下材料寿命预测软件  $\geq 2$  个，并在  $\geq 2$  个重大工程关键材料部件上获得示范应用；申请发明专利 2~3 项，软件著作权登记 2~3 项。

### **8.高通量材料实验与计算海量数据采集和数据库融合技术**

研究内容：研发面向典型高通量材料实验和计算的海量数据实时采集与规范化处理加工技术，材料高精度图像处理、分析及检索技术，以及基于机器学习的材料高通量实验和计算数据的分析技术；研发高通量材料实验与计算数据的认知与知识提取算法和技术，以及数据库的自动存储技术；



研发高通量实验和计算与材料基因工程数据库的数据自动传输技术。

考核指标：开发出典型高通量材料实验和计算数据实时采集与处理技术 $\geq 3$ 项，建立高通量材料计算跨集群调度与计算数据自动采集系统，部署于 $\geq 3$ 个超算平台，自动采集 $\geq 200$ 万条的算例数据；发展3~4种材料非结构化数据的分析与处理技术，形成3~4项数据与知识的传递和反馈技术；申请发明专利2~3项，软件著作权登记2~3项。

### 9. 基于高通量设计与模拟的新型核燃料和核结构材料

研究内容：利用材料基因组思想，运用高通量计算方法，开展不同材料组分金属型和陶瓷型核燃料设计和筛选，开展高温高压、辐照肿胀和应力腐蚀开裂等行为预测分析；建立高热导核燃料材料设计的理论模型与热物理、辐照性能数据库；根据计算模拟的筛选结果，开展高能耗、高本质安全性核燃料的高通量制备和表征研究，获得更高能耗和事故容错安全性的核燃料制备方法和性能参数；采用高通量设计与制备方法，研究并获得金属和陶瓷等抗辐照、耐腐蚀且力学性能良好的新型核燃料包壳等结构和功能材料，利用离子加速器、先进光源或中子源等研究平台高效表征材料的结构与评估其服役性能，为核电升级换代和国产化奠定基础。

考核指标：构建核燃料及结构材料的高通量、多尺度计算平台，实现 $\geq 10^2$ 级的并发式高通量计算，计算筛选候选材

料样品数 $\geq 10^4$ ；材料制备/表征实现 $\geq 100$  样品数/批次；发展 2 种以上具有自主知识产权的先进核燃料材料，完成制备及堆外考核试验并评估服役性能，热导率较标准型  $UO_2$  芯块提高 50%以上；获得 2 种以上耐辐照性能优异且在高温及辐照环境下与核燃料及冷却剂相容性良好的新型包壳等结构材料；申请发明专利 2~3 项，软件著作权登记 2~3 项。

#### 10.血管支架材料的构效关系及高通量制备与评价技术

研究内容：发展适用于动态血流条件下血管支架材料的仿真模型、计算方法和材料设计软件，开发多尺度层状仿生高通量制备技术，研究材料化学组成、加工工艺、结构设计、表面混合电荷组成、界面硬度及微纳拓扑结构等材料学因素对支架物理化学性能、血管内皮竞争生长、抗凝血和抗钙化等关键功能的影响机制，构建血管植入材料专用数据库，建立新型血管材料的计算设计和可靠性验证评价体系，研制新型全降解血管支架材料及产品。

考核指标：实现 $\geq 10^2$ 级的并发式高通量计算，计算筛选候选材料样品数 $\geq 10^4$ ；材料制备和表征实现 $\geq 100$  样品数/批次；发展出材料仿真软件 $\geq 2$ 套，血流动力学模拟结果符合体内实验结果；开发出高通量实验装置 $\geq 2$ 种，研发 2 种以上具有自主知识产权的全降解血管支架植入材料产品，完成大规模动物实验和产品标准化型式检测，获得临床试验许可，开

展临床试验 $\geq 10$ 例；申请发明专利 10 项以上，其中获得授权 2 项以上。

### 11. 基于高通量筛选的肿瘤精准诊治材料研制

研究内容：针对肿瘤术后的肿瘤抑制和缺损修复，利用高通量计算和实验技术，研究材料学因素对肿瘤细胞发生、增殖、凋亡的影响机制，探索肿瘤多模态诊治材料的成分-结构-疗效之间的关系。开展具有抗肿瘤作用的组织再生修复材料的设计、制备、功能评价和临床研究，建立相关肿瘤诊治材料数据库。研发兼具优良抗肿瘤作用和组织诱导性的新型材料及产品，应用于临床。

考核指标：实现 $\geq 10^2$ 级的并发式高通量计算，计算筛选候选材料样品数 $\geq 10^4$ ；材料制备和表征实现 $\geq 100$  样品数/批次；研发出 2 种以上具有抗肿瘤作用的新型修复材料，其中至少 1 种完成临床研究，完成产品注册证申请受理；修复材料可凋亡或抑制肿瘤细胞增殖，肿瘤复发率显著低于商品化修复材料；申请国际和国内发明专利 10 项以上，其中获得授权 2 项以上。

### 12. 基于材料基因工程关键技术的稀土磁制冷材料研究

研究内容：基于材料基因工程关键技术，运用热力学计算、复合热导模型、多尺度模拟等方法，构筑强磁晶耦合体系，开展磁热、压热及耦合热效应研究，获得增强热效应、高导热率和小磁滞后的新型高性能稀土磁制冷材料；研发高

高通量制备和表征磁制冷材料的方法，解决磁制冷工质在应用中的关键制备技术；构建磁、热、流动多物理场耦合下的一体化流体力学理论模型，研制出环保高效的新型制冷材料及技术并得到示范应用。

考核指标：实现 $\geq 10^2$ 级的并发式高通量计算，计算筛选候选材料样品数 $\geq 10^4$ ；材料制备/表征实现 $\geq 100$ 样品数/批次；开发出室温附近 40K 温区，磁转变温度间隔为 3K 且偏差 $\leq 1$ K，1T 磁场下绝热温变高于 2K，磁熵变 $\geq 10$ J/kgK 的系列室温稀土磁制冷材料；在 20K 以下温区获得 1T 磁场绝热温变 $\geq 2.5$ K，磁熵变 $\geq 10$ J/kgK 的系列低温稀土磁热材料；制备出 3 类以上具有自主知识产权的磁制冷材料，在室温和液氮温区磁制冷机上得到应用示范；申请发明专利 3~5 项。

### 13. 基于材料基因工程关键技术的新型催化材料探索

研究内容：针对涉及国家可持续发展战略领域的新型高效催化材料需求，从材料基因工程理念出发，研究催化材料高通量计算方法和筛选方案，包括电子结构、分子结构、物化性能、活性毒性等多级构效关系，开发具有自主知识产权的相应软件；开发高通量高精度制备模型催化材料技术和表征技术；构建新型催化材料数据库；研究高效催化材料按需设计和调控原理；发展出具有自主知识产权的新型高效催化材料，并实现工业化应用示范。

考核指标：实现 $\geq 10^2$ 级并发式高通量计算，催化材料模型计算样品量 $\geq 10^5$ ；实现 $\geq 128$ 个/批次的规模组合式制备；催化材料专用数据库中含多层次、多组分、多尺度的材料数据量 $\geq 10^5$ 条；开发出3类以上具有自主知识产权的新型高效催化材料，催化选择性 $\geq 95\%$ ，催化转化率 $\geq 85\%$ ，催化性能全面达到同期同领域的国际先进水平，并实现工业规模装置上的应用示范；申请发明专利5项以上。

#### 14.新型高温结构材料的理性设计与集成制备

研究内容：针对未来先进航空发动机和燃气轮机等航空和能源领域所需，以新型钴基/铌硅基高温结构材料为对象，探索新型高温结构材料的高通量计算设计、高通量制备与表征方法等材料基因工程关键技术；结合多层次模拟计算方法，开发高温结构材料多组元合金热力学和动力学数据库；研究高温结构材料成分-制备工艺-合金相-显微组织-关键性能（高温力学性能、高温腐蚀与氧化）的定量关系，以及基于模拟计算的制备工艺优化，建立新型钴基/铌基高温结构材料的成分与制备工艺集成设计方法。

考核指标：建成新型钴基/铌硅基高温结构材料热力学和动力学数据库，构建成分-制备工艺-显微组织-性能的关系模型，形成基于材料基因工程的新型高温结构材料设计系统，开发出2种以上具有自主知识产权的新型高温结构材料，新型钴基高温合金的承温能力比现用 FSX414 合金提高 50~

100℃，铌硅基高温结构材料的承温能力 $\geq 1200^\circ\text{C}$ ；申请发明专利 5 项以上。

### 15. 基于理性设计的高端装备制造用特殊钢研发

研究内容：以高端装备制造用关键特殊钢材料为主要研究对象，对典型的材料制备加工、检测评价、环境行为进行全流程研究。基于材料基因工程的思想和方法，进行高通量的合金体系设计、工艺模拟、环境失效行为仿真、性能检测与评价、极端条件下的物理模拟考核试验，揭示特殊钢材料的成分、工艺、微观组织、性能、环境损伤行为和失效机理之间的内在规律和协调性，实现高端装备关键构件短流程、低成本和性能可控的高效制备和应用。

考核指标：实现 $\geq 10^2$ 级的并发式高通量计算，计算筛选候选材料样品数 $\geq 10^3$ ；实现 $\geq 30$ 个/批次规模制备与测试；建立特殊钢材料的成分设计、制造工艺、显微组织、检测与评价方法、材料性能和环境失效行为与失效机理的数据库；建立材料微观组织特征与物理性能的耦合关系模型，以及材料物理性能的多尺度检测与评价方法；开发出 2~3 种高性能特殊钢材料，性能比现有水平提高 20%以上，并在典型构件上示范应用；申请发明专利 5 项以上。

## 16. 复合材料高通量制备研发和示范应用

### 16.1 金属基复合材料高通量制备研发和示范应用

研究内容：基于材料基因工程的思想，围绕复合材料研发成本高、实验周期长、原材料消耗大等难点问题，探索钛、铝等金属基复合材料高通量制备与评价新方法；测试和采集金属基体与增强相界面物理化学数据，并建立界面物性数据库；研究以成分-结构-工艺-性能交互关联为特色的高通量集成计算技术；开展金属基复合材料高通量制备过程组织与性能演化的多尺度建模与工艺设计研究；研究金属基复合材料及构件微观缺陷的评价与预测方法。

考核指标：建成钛、铝等金属基复合材料基体与 5 种以上增强相界面化学、热力学和动力学数据库；建成金属基复合材料成分-结构-工艺-性能关系预测模型与工艺设计软件平台；研发金属基复合材料高通量制备技术，制备能力 $\geq 100$  样品数/批次；复合材料强度比基体提高 20% 以上，钛基复合材料承温能力提高 100℃ 以上，铝基复合材料大型构件投影面积大于 2 平方米；典型金属基复合材料构件在航空航天等领域获得示范应用；申请发明专利 5 项以上。

### 16.2 陶瓷基复合材料高通量制备研发和示范应用

研究内容：基于材料基因工程的思想，围绕复合材料研发成本高、实验周期长、原材料消耗大等难点问题，探索陶瓷基复合材料高通量制备与评价新方法；测试和采集陶瓷基

体与增强相界面物理化学数据，并建立界面物性数据库；研究以成分-结构-工艺-性能交互关联为特色的高通量集成计算技术；开展陶瓷基复合材料高通量制备过程组织与性能演化的多尺度建模与工艺设计研究；研究陶瓷基复合材料及构件的微观缺陷的评价与预测方法。

考核指标：建成陶瓷基复合材料基体与 5 种以上增强相界面化学、热力学和动力学数据库；建成陶瓷基复合材料成分-结构-工艺-性能关系预测模型与工艺设计软件平台；研发陶瓷基复合材料高通量制备技术，制备能力 $\geq 100$  样品数/批次；陶瓷基复合材料界面剪切强度提高 50%，断裂功提高 $\geq 2$  倍，强度提高 $\geq 40\%$ ；典型陶瓷基复合材料构件在重大工程领域获得示范应用；申请发明专利 10 项以上。

### 16.3 高分子基复合材料高通量制备研发和示范应用

研究内容：基于材料基因工程的思想，围绕复合材料研发成本高、实验周期长、原材料消耗大等难点问题，探索高分子基复合材料高通量制备与评价新方法；测试和采集高分子基体与增强相界面物理化学数据，并建立界面物性数据库；研究以成分-结构-工艺-性能交互关联为特色的高通量集成计算技术；开展高分子基复合材料高通量制备过程组织与性能演化的多尺度建模与工艺设计研究；研究高分子基复合材料及构件微观缺陷的评价与预测方法。



考核指标：建成高分子基复合材料基体与 5 种以上增强相界面化学、热力学和动力学数据库；建成高分子基复合材料成分-结构-工艺-性能关系预测模型与工艺设计软件平台；研发高分子基复合材料高通量制备技术，制备能力 $\geq 200$  样品数/批次；高分子基复合材料强度提高 50%以上，预测误差 $< 15\%$ ；典型高分子基复合材料构件在重大工程领域获得示范应用；申请发明专利 5 项以上。