评述

论新材料与制造科学体系在高科技和产业化中的作用

金展鹏*, 蔡格梅, 苏柳梅, 樊星, 郑峰

中南大学材料科学与工程学院, 长沙 410083

* E-mail: jin@csu.edu.cn

收稿日期: 2016-01-13; 接受日期: 2016-06-14; 网络出版日期: 2016-08-22

中国科学院技术科学部和学部工作局咨询项目“突破我国材料制备科学瓶颈的战略举措”(编号: 2011-JS-2-02)、国家自然科学基金和湖南省院士基金资助项目

摘要 当下高科技与产业化正在快速融合, 一方面, 为我们提供着丰富的知识、经验、信息与灵感. 另一方面, 制造业的发展是全球竞争的热点, 材料科学又是制约制造业发展的短板. 本文通过对互相渗透的7个观点进行深层次分析, 论证了走中国道路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, 是独立培育制高点的举措, 是全面贯彻落实五大理念, 建设制造强国的重点工作: 1) 从宏观层面分析全球高科技对材料科学提出的新挑战, 指出材料组织演化理论是迎接这一挑战的共同基础; 2) 从学科内涵的相互联系上揭示了半个世纪以来材料组织演化机理及有关知识单元发展的4个阶段, 并论证了材料组织演化理论及相应的知识工具是新材料与制造业的理论支柱; 3) 阐明了今天的新型产业链是学科交叉和群体性技术革命的产物; 4) 分析了国际上创立新材料制造科学体系对我国的借鉴意义; 5) 提出了走中国道路创立新材料制造科学体系必须全面贯彻落实五大理念; 6) 描绘了新材料制造科学体系的路线图, 并强调了“十三五”期间面临的紧迫任务与拟采取的措施; 7) 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理念, 建设制造强国的重点工作.

关键词 材料组织演化, 知识单元, 材料制造科学体系, 新型产业链

1 高科技对材料科学提出的新挑战

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; 就制备工艺而言, 各自采用了“合金化”、“掺杂”、“杂化”、“混合”、“合成”等不同术语. 虽然这些术语中没有哪一个能够准确地反

映出新材料设计与制造的科学内涵, 但是, 在先进制造业的牵动下, 这三类材料的知识正在迅速融合. 例如, 以钢铁为中心的物理冶金正在与陶瓷和高分子物理化学互相渗透、融合; 对相变的研究, 已经深入到宏观、微观、纳米层次的微结构演化, 如通过人造的位错阵列来控制纳米尺度的亚稳分解, 从而自组装生成量子阱, 通过相分离获得纳米尺度的多相块状聚合

引用格式: 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: 877-893
Jin Z P, Cai G M, Su L M, et al. Strategies of materials development and manufacturing and their effects for Chinese high-tech industries (in Chinese). Sci Sin Tech, 2016, 46: 877-893, doi: [10.1360/N092016-00031](https://doi.org/10.1360/N092016-00031)

物,从而改善其性能等等. 这些例子都是今天金属、无机非金属和高分子材料交叉融合的新成就,是21世纪亚稳相变理论的自然延伸. 从应用和产业化的角度看,对知识融合的要求更加迫切. 例如现在的3D技术已经涉及到金属、陶瓷、高分子乃至生命器官的制造,但还缺乏相应的知识系统和知识工具.

西泽泰二^[1]认为材料科学的最大目标莫过于将金属、陶瓷和聚合物这些分别在各自领域里积累起来的所谓“纵向的”知识和技术,进行“横向的”沟通和整合,进而确立一个统一的科学和技术体系.

高分子材料前景广阔,近些年来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. 然而至今为止尚未出现可以从前沿研究到产业化都融会贯通这三类材料的科学体系,更不用说提供可供现场操作的知识系统和相应的工具. 为了摆脱高分子领域“只见树木不见森林”的研究现状,程正迪^[2]强调了研究高分子材料亚稳相变及组织演化的重要性,指出这是一个有着广阔前景的研究领域. 作为其基础的高分子物理学同样也是凝聚态物理和固态物理化学的核心课程.

因此,理解和掌握金属、陶瓷和高分子中的共性科学规律,构建新的知识系统是一项关乎培育和抢占材料科学制高点的重要任务.

1.2 材料科学正在变革微电子芯片的设计和制造理念

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涉及到界面反应、电子迁移和晶须生长等科学问题.

防止硅片在生产过程中受到卤素污染是提高芯片可靠性的关键. 建立起质量稳定可控的制备技术以防止Cu/Cu₃Sn界面形成有害的微型孔洞,被人们誉为超小型芯片制造技术的里程碑. 为了揭示这些关键技术的科学本质,曾科军和杜经宁^[3]分析了电子封装工艺中的六大技术要点:

- 1) 基板侧无电镀层Ni(P)与焊料的界面反应;
- 2) 芯片侧金属薄膜镀层在熔融焊料中的溶解及反应过程;
- 3) 微型焊点的金脆现象及多层金属间化合物在焊料固态高温时效过程中的生长;
- 4) 芯片和基板间焊点两侧材料通过焊点的长程相互作用;

5) 芯片焊点中原子在高密度电流作用下的迁移现象;

6) 无铅焊料中锡晶须的生长.

在此基础上他们为德州仪表公司(TI)开发了一套可以大幅度提高芯片封装技术可靠性的方法,掌握了该领域的核心技术. 他们的分析清楚地表明: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,并且所有环节都与材料的组织演化这一核心问题息息相关.

1.3 功能微纳器件设计和制造的挑战

从大型构件直到纳米器件的设计、制造和使用,都会碰到的共同问题:一是结构不同的材料结合时,其界面和整体会发生怎样的变化?这些变化对整个器件的性能会有什么影响?二是功能不同的异种材料结合在一起时会产生什么样的新功能或者隐患?这些是我们今后在信息功能、能量转换功能器件以及各种微纳器件的设计、制造和使用过程中不可避免的问题. 如果传感器材料的组织演化失控,就可能使机器人“神经错乱”. 因此南策文^[4]强调,“要研究非常规复合效应产生的内在机制和原理,即如何产生并利用这种非常规复合效应,以达到发展新型材料的目的.”

了解组织演化规律和细节是理解和阐明上述机理的核心. 为了开发薄膜器件,一批青年物理学家曾采用相似的原料和工艺进行界面反应实验,但是他们获得的组织形貌和反应序列却互不相同,引起了争议. 为了找出导致这些实验结果出现巨大分歧的原因,李炳柱等人^[5]分析了相变驱动力与界面反应序列之间的关系,指出这只不过是同一组织演化过程在温度、时间和试样厚度等不同约束条件和不同发展阶段的不同体现形式而已.

1.4 器件组装中微区形貌调控的挑战

作为当今半导体和单晶叶片等器件制造的基础,晶体生长理论的研究在先进制造业中遇到了新的挑战. 为了获得具有特定功能的器件,就要从理论上掌握组装过程中材料形貌的演变规律,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

产品的制造、服役和回收全过程的组织演化规律和细节,并将其应用到生产实践中.这就要求各种各样的制造方法要灵活地适应工艺参数的变化.这是所有先进制造行业都必须面临的共性科学问题之一.

自然界中,对水蒸气的压力和温度等因素十分敏感的雪花可以自组装形成柱状、片状、星状和树枝状等千姿百态的形貌.其他令人惊讶的神奇杰作也数不胜数,如桂林的叠彩山、辽宁的雾凇、湖南的菊花石等等,也都是自然界中材料的自组装现象.

20世纪50年代,郭可信先生在合金钢中观察到由奥氏体和碳化物组成的、呈花瓣状的 δ 相共析转变产物.他从相图和扩散出发,有效地解释了“花瓣”宽度变化的机理,由此受到鼓舞,连续发表了五篇论文^[6-10].到了70年代,Friderberg和Hillert^[11]根据当时最新的计算相图以及实验结果,通过数值方法定量地计算了Fe-Mo-C合金中 δ 相共析转变产物层间距(也就是郭可信观察到的花瓣的宽度)与相变驱动力之间的关系.这些工作引发了后来涌现的一系列材料组织演化的知识单元.

20世纪末,Oikawa等人^[12]在做Fe-Mn-S合金凝固实验时,分别得到了球、棒、方形、树枝状和鱼骨形等形貌的组织.这些组织彼此间的变化对于温度和微量元素极其敏感.他们从理论上给出统一的解释,说明这些现象是稳定相和亚稳相在不同条件下竞相成核和长大的结果.

陈瑶^[13]研究了激光焊接高温耐磨涂层中碳化物结晶形貌与冷却速度之间的关系,指出冷却速度的变化会改变形核与扩散的竞争态势,从而改变沉淀相的析出序列.

在微纳器件组装的不同阶段需要控制不同层次微结构的组合,在理论上涉及到不同的机理.

Michigan大学的Damasceno运用20世纪40年代Onsager^[14]提出的熵力(entropic forces)概念,对多面体自组装成复杂结构进行了模拟、试验和预测,涉及到145种凸多面体的自组装形貌.

张立德发明的制造纳米复合材料的方法,诸如花状的MgO纳米结构^[15]、层错周期分隔的ZnS/ZnO异质结构^[16]、用阶段脉冲电沉积技术制备的Bi/Sb超晶格纳米线^[17],以及目前流行的各种各样的微纳自组装方法,其共同特点都是通过微观尺度上调控晶面、晶向、缺陷等微结构的自由能差别,通过控制各微区中

的温度梯度、对流和原子扩散等参量来控制形貌,从而获得功能器件所需要的组装结果.

致力于从原子尺度对晶界的自由能和组织演化关系进行模拟和计算的麻省理工Carter教授,最近又把目光投向宏观的雕塑与建筑组装领域,他与建筑学教授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,模拟了大型雕塑3D制造技术中的组织演化过程(<http://www.technologyreview.in/computing/39437/>).

在材料的自组装过程中,不可忽视宏观工艺与微观自组装的结合及其在理论和实践上的重大意义.这是材料科学与物理学、化学和制造科学的交叉点,是一片富于创新的土壤.

半导体化合物的成分在化学计量比附近发生微小的波动,就会导致载流子浓度与材料性能发生数量级的变化.陈清等人^[18]将组织演化、相平衡、缺陷化学和半导体性质结合在一起,建立了具有明确物理意义的理论模型,评估和计算了Cd-Te相图.该相图表明,通过调整蒸气压可以将CdTe化合物的成分范围控制在 10^{-5} 左右.该富于想象力的工作的特点在于通过在理论上建立新的物理模型,通过调控宏观参数即可实现控制微观过程的目的.

Hao等人^[19]采用成分为 $\text{Ni}_{41}\text{Ti}_{39}\text{Nb}_{20}$ 的合金,通过真空感应熔炼、锻造和拉丝(剧烈变形)、以及退火等工艺,制备出具有高弹性应变、低弹性模量、高强度等综合性能优异的纳米复合材料,成为宏观工艺与微观自组装结合的又一个范例.

更多的例子还有如通过多道次、多层轧制Ni与Ti的复合板而获得非晶以及纳米钢的制造等.随着材料科学技术的不断发展,今后类似的例子会越来越多.

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

大半个世纪以来,在迎接制造科学的挑战中,材料科学不断地从相邻学科中汲取营养,为我们创建新材料制造科学体系提供了丰富的灵感和素材,正在形成一幅从经典理论到高科技产业链各个学科互相渗透、协同发展、共同提高的生动图画.

材料在不同的条件下具有独特的力、电、磁、热、光、声等功能,涉及到不同层次的组织演化与性

能之间的关系. 这些关系是材料技术科学的主线和核心, 是材料与器件功能多样性的基础, 是各种材料设计与制备的共同基础, 是创新材料制造科学体系的基础. 因为组织演化贯穿在以下3个方面:

- 1) 包括金属、无机非金属和高分子在内的所有材料之中;
- 2) 材料的各种制备、实验和表征方法之中;
- 3) 从建筑、雕塑等大型构件, 直到微纳器件的设计、制造和使用的全过程中.

因此, 组织演化自然也就贯穿在材料和器件的设计与制造以及产业链的全过程中. 所以说, 材料的组织演化规律是材料制造设计的科学基础.

材料的各种制备方法, 譬如铸、轧、锻、焊、粉末冶金、机械合金化、物理/化学气相沉积、溶胶-凝胶法、水热法、氨热法等方法, 实际上就是通过改变外界条件(包括激光成型和爆炸焊接加工等特殊条件)来控制材料组织演化的过程. 建立绿色制造体系, 所面临的正是选择适当的制备方法、工艺路线和外部变量来获得所需的材料组织形貌.

各种先进的实验和表征方法, 例如材料制备过程的原位、实时高通量表征等, 其目的在于能够高效率地获得材料组织随时空演化的信息, 作为发展组织演化理论的依据.

材料组织演化的内涵涉及到物理、化学、材料科学与信息科学的相互交叉渗透, 孕育着不同材料产业化领域在不同发展阶段中的制高点. 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个层次的微结构相互作用机理的认识. 例如, 微电子芯片中的电子迁移现象, 空位、溶质原子及晶界的相互作用对金属弹性变形的影响, 以及所谓晶界超导现象等.

传统的制造科学家通常是从功能需求出发来选用材料, 而今天他们碰到了一系列新挑战, 例如:

- 1) 如何理解和掌握金属陶瓷和高分子的共性科学问题;
- 2) 不同材料耦合时出现的新问题;
- 3) 组装过程中复杂的组织演化问题.

简言之, 材料设计进入了结合材料组织演化与器件的综合性能来进行全局设计的新阶段. 材料科学正在使制造科学的设计理念发生深刻的变革; 融合各类

材料在经典理论和高科技领域中的成果而形成的新材料制造科学将成为群体性技术革命的支柱. 未来的制造科学家也将是材料科学家.

2 材料组织演化轨迹理论及有关知识单元的发展史

材料在不同外界条件下其微结构、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. 它们是各种潜在的轨迹相互竞争所形成的纵横交错的、动态的网络. 合金熔炼过程中出现的凝固通道就是一个很好的例子.

各种先进的设计理念, 如通过微结构控制来获得所需的综合性能, 都要凭借特定的制造方法和工艺路线来实现. 这些方法和参数的设计原理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上. 材料组织演化知识单元的发展经历着环环相扣的四个阶段.

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, 人们尚不能动态地描述合金钢中的相变过程.

20世纪50年代, Cahn^[20-22]提出了自由能密度的概念和Cahn-Hilliard方程.

同时, 麻省理工学院的Cohen教授领导的马氏体小组在动态描述相变过程方面做出了开创性的工作. 当时他的学生师昌绪在低温马氏体相变动力学方面做出了出色的工作. Kaufman则通过相图计算, 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. 半个世纪以后, 在一篇题为“计算材料设计(Computational Materials Design)”的文章中, Kaufman^[23]回忆说, 师昌绪学长启发了他将热力学、物理性质与形核理论结合起来建立新的理论框架.

Hillert^[24]在研究合金钢相变时, 提出了仲平衡(para-equilibrium)概念, 预测了在不同条件下合金钢中各相的成分与结构的演化轨迹.

上述经典的学术思想明确了相变驱动力和相变动力学的相互竞争决定着材料中组织演化的序列, 因此, 它们是组织演化理论的学术思想源.

2.2 第二阶段: 知识单元的发展期

半个世纪以前, 研究人员只能采用简单的计算工具从事材料相平衡计算, 耗费时间. 例如, Chipman用的是计算尺, 西泽用的是中国的算盘. Meijering计算相图的一条结线花了3个月时间; 测定三元相图等温截面的一个角, 按照柯俊先生的说法则需要8个人一年的工作量. 后来的学科发展改变了这些状况: 经典的相变理论碰到了新的边界条件; 各微结构单元及其相互作用, 使得组织演化的内涵更加丰富; 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.

在此阶段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、软件和数据库等. 在新材料的研发过程中, 也涌现了一些突破性的发明创造. 我们把这些元素统称为“知识单元”, 它们能够表达出材料组织演化的规律和细节, 是数量级的提高研发和产业化效率的基础.

现阶段用于预测材料组织演化的知识单元包括:

- 1) Lukas公开的第一个相图计算软件;
- 2) Sundman和Janson开发的相图热力学和多元相图计算软件Thermo-Calc[®]和Poly[®];
- 3) Ågren开发的扩散型相变模拟软件Dictra[®];
- 4) 张永山和陈双林开发的Pandata[®];
- 5) 陈清开发的沉淀相析出过程模拟软件PRISMA[®];
- 6) Khachaturyan、陈龙庆、王云志发展的相场方法;
- 7) Pelton开发的复杂氧化物体系的热力学计算软件FactSage[®]等.

它们构成了动态模拟材料组织演化过程热力学、动力学和形貌学系统的知识, 在生产实践中得到了不同程度的应用, 为材料制备科学的发展作出了各自的贡献.

相图计算(CALPHAD)技术的特点是: (1) 起源于从全局上描写组织演化轨迹的学术思想, 在发展过程中不断吸收各种理论和经验, 从而创立新的实验方法、定律、公式和软件等知识单元, 组成新的体系; (2) 贯穿在材料与器件制造中, 贯穿在产业化的链条中, 能够不断地与现场互动、反馈和迭代.

CALPHAD的运作过程是首先建立与温度、压力、成分等变量有关的Gibbs自由能函数, 并通过该函

数提取信息、处理信息和构成智能信息库, 运作程序的出发点和落脚点都是信息. 概括来讲: (1) 从信息出发, 包括理论的、实验的和经验的; (2) 建立物理背景坚实的各相结构的Gibbs自由能模型; (3) 运用数值方法优化模型中的热力学参数, 这些参数具有逻辑地再现丰富的热力学和动力学信息的功能; (4) 编译成数据库或信息库, 能友好地供新材料研发和制造产业化使用.

2008年美国国家研究委员会在关于增强未来国家竞争和国防安全的一份报告中指出, 在实现集成计算材料工程(ICME)的过程中, CALPHAD软件无疑是最重要的, 甚至可能是唯一成功的通用工具, 对其历史进行简要的考察, 可以清楚地看出集成计算材料工程(ICME)是如何一步一步发展起来的(<http://www.nap.edu/catalog/12199.html>).

Cahn^[25]认为: “由CALPHAD的发展史可见, 它是材料科学计算机模拟领域中最成功的例子, 最后的胜利者是Kaufman”.

现在CALPHAD技术的应用领域正在扩展壮大.

韩志超和Akcasu^[26]用光散射技术系统研究了高分子材料的结构表征、相图和相变过程, 阐明了高分子材料中不同类型亚稳分解相图的机理、分类和应用, 发展了高分子材料物理学. 他的这些工作也是经典理论、高科技与产业化协同发展的范例.

麻省理工学院Ceder教授领导的团队预测了大量化合物结构及其出现的几率, 研究了一系列晶体结构对称性与机械、电子等性能的关系(<http://www.materialsproject.org/>). 他们初步建立了无机材料结构、性能与相稳定性的数据库, 并用于锂离子电池等功能器件的研究和专利技术的开发中. 他们计算了Li-Fe-P-O四元相图, 预测了FePO₄的热分解路线, 并以此作为制备锂离子电池工艺路线的基础.

威斯康辛大学张永山教授领导的团队在相图计算及其在金属、合金、半导体等材料研发和应用方面作了大量的工作, 他们分析了热力学模型和计算方法在相图计算技术发展中的作用, 审核了一系列合金相图, 展示了杨振宁提出的CSA模型的优点^[27].

西北大学的Olson^[28]教授领导的团队提出了由量子到宏观等4个层次的材料设计设想, 在他们的工作中采用了徐祖耀先生关于马氏体相变的研究结果. 同

时他们也认为Cohen和Kaufman的工作是材料基因工程的思想源头。Olson团队的核心技术是采用相图计算技术中的Thermo-Calc[®]和Dictra[®]等知识工具, 仅仅在工艺流程中加上非晶态“中转站”, 就发明了一些复合纳米材料, 他们的成果还包括发明了飞机起落架用的高强合金钢^[29]。2013年12月, 他们获得美国材料基因工程首批资助。但是, 他们在产业化系统知识和功能材料领域还有相当长的路要走。

赵继成^[30]提出的多元扩散节方法即高通量实验方法, 能够在一个试样上获得材料的成分、组织与性能等大量信息, 又能通过亚稳相图解释其中各相的消长机理, 被认为是材料基因工程的一个重要组成部分。

Pandat[®]的主笔陈双林说: “数据不是简单地把实验结果变成一个电子手册, 而应该智能化”(私人通讯)。他强调两点, 一是涉及的科学问题要找到其精髓, 如材料热力学的精髓是Gibbs自由能函数; 二是要学习计算技术的新东西, 在更高的水平上去开发新软件。

Dictra[®]的主笔Ågren指出目前有些数据库比较粗糙, 使其在应用上受到了限制, 要进一步提高数据库的精度和计算效率。

旨在沟通、凝聚、培养、教育更多的年轻人从事科学研究, 夯实计算材料科学基础, Thermo-Calc[®]的主笔Sundman博士建立了开源的Open CALPHAD(开源相图计算)的方法和网站(<http://www.openalphad.com/>), 对如何从博士生培养到建立数学方法的评估和应用提出了一系列切实可行的建议。

PRISMA[®]的主笔陈清强调, 吉布斯自由能函数中的每一项都要有清晰的物理意义, 以此为基础发展起来的第三代CALPHAD技术可以扩展到更宽广的范围中去。

宾夕法尼亚州立大学的刘梓葵^[31]从分析比较“基因变异”与“亚稳相变”两个概念出发, 认为在单相基本模块的基础上构建的数据库具有巨大的应用潜力。他在美国率先注册了“材料基因工程”。结合计算材料科学, 他还在宾夕法尼亚州立大学进行了相关的教学改革。

鲁晓刚^[32]正在研究单相结构与性能的关系, 期待在此基础上进一步理解材料微观组织与综合性能的关系。

总之, CALPHAD技术在不同材料领域的不同发展阶段体现了学科交叉和群体性技术革命的潮流, 体

现了前沿理论高科技与产业化迅速融合的时代潮流。CALPHAD学派的成员们, 从不同的角度描绘出各自所期待的蓝图, 他们的共同点都是在发展材料组织演化理论, 建立起各具特色的材料组织演化轨迹的知识单元或者知识系统。

2.3 第三阶段: 在发展新的知识单元的同时构建新的科学体系

这一阶段的里程碑进展包括以下两个方面。

1) Hillert将组织演化的驱动力和组织演化程度定量地联系起来, 构建热力学、动力学和形貌学的框架。刘梓葵和Olson等将它应用在金属材料领域, 表现出具有破解千年机密和产生成批专利的能力。美国宇航局NASA将它用于优化钛合金增材制造(3D打印)的工艺设计中(参考文献[33])。

2) MIT的Ceder提出从头算起热力学(ab-initio thermodynamic)概念, 将热力学与量子力学进一步融合, 应用到包括锂电池电池等功能材料与器件的研发领域中。

2.4 第四阶段: 前沿理论、高科技与产业链加速融合, 与创建新材料制造科学体系并联进行

此阶段处于群体性技术革命前夕, 材料与制造技术科学及其产业化领域的特点: 一是各类知识单元的发展与知识工具的广泛应用; 二是各材料领域的研发成果迅速增加; 三是新创建的知识系统中的学科内涵更加丰富, 学科交叉发展到更深入的层次。这三方面既相对独立, 又交叉融合。此时制造业与产业化的国际竞争聚焦于争夺学科集成权, 落实于体系创新的总体水平上, 落实于各创新主体及其协调的水平上, 落实于各层次科技人员和全民族的科学素质和道德品质的水平上。这一阶段的核心任务是: 一方面继续创建新的知识单元并将其运用到新材料的研发中去; 另一方面将4个阶段积累起来的科学思想、知识单元和经验, 与新材料研发和产业化进行不断的、及时的反馈协调, 创立知识系统; 这两方面要并联进行。这一阶段也是邓小平关于发展高科技和实现产业化的远见卓识全面落实的阶段。搞科技, 越高越好, 越新越好。各创新主体的任务是准确把握今天高的程度和新的程度, 同时把学科交叉的深度和在产业链中应用的广度提升到新的水平, 具体说来就是以材料的科学知识

为基点,把大数据和信息化的新成果应用到发展包括材料热、电、磁、光、声等性能的系统知识并运用到产业链中去。

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

20世纪30年代末,Guinier^[34]和Preston^[35]从G.P.区的研究中理解了铝合金时效强化机理,发明了硬铝合金。现场工程师参照相图,找到了获得最大溶解度的同时又能够避免出现液相的温度区间。在该温度区间对铝合金淬火,加上随后的时效处理,就得到了强化效果好又不过烧的工艺。在当时,就可以产业化了。在今天,要想提升铝合金产业链的技术水平,则需要以热力学、动力学等信息库为基础,才有可能制定出分阶段热处理等复杂的工艺方案。

20世纪上半叶,人们基于相图的固相线与液相线是直线的假定来计算相变驱动力,从而研究合金的快速凝固组织演化。到了21世纪,为了做出符合实际的预测,则必须以更科学复杂的相图为基础。例如,激光处理突破了原来的组织演化边界条件,出现了一系列亚稳相。要开发这些亚稳相的潜在功能和消除它们的隐患,就需要对多元合金中的相变机理及序列有更深入的理解。

由研发成果到产业化的转化难,就难在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;获得研发成果的时候,往往只是找到了材料性能与工艺关系的某些特殊解,而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,特别是对新型产业链中涉及的丰富科学内涵和广阔创新空间认识不足。

材料的功能涉及到不同层次的微结构变化及其与整体的关系。具体说来,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往往会改变这些微结构的演化序列,从而影响材料的功能性。

热力学提供解扩散方程所需的驱动力和边界条件,扩散改变了各个微结构(包括成分、原子排列与形貌)在空间中的分布,相变热效应改变温度分布,使

得组织演化过程复杂多变,出现一系列亚稳相相互竞争、此消彼长的子过程,通常需要通过迭代来获得合理的工艺参数。

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。其中就包括要建立起强大的智能数据库。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。例如,计算出来的Ti-Nb二元合金的平衡相图虽然只有4条简单曲线,但是从热力学优化而得到的一组为数不多的参数出发,却能够解释和预测不同成分的材料中出现的各种稳定和亚稳相变现象^[36]。

先进数据库中还应包含动力学信息,即合金元素的扩散、对流对组织演化的影响。这样就能够确定特定合金体系中各个物相出现的条件,并通过相场方法把它们的形核长大过程可视化的展现出来。

现在,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的角度研发出来的,基于不同的物理模型,涉及不同的主变量。但是,目前还没有一种工具能单独适应特定产业链整个过程的模拟和控制。例如,Thermo-Calc[®]和Dictra[®]对相变过程中成分分布的模拟可以精确到微米级,已成为一系列发明专利的基础,但在模拟铸件中的宏观收缩现象时则需要结合运用诸如Procast[®]等软件。这些知识工具还在不断发展完善。研发前沿的科学家,特别是青年科学家要充分认识到先进制造业领域中深刻的科学内涵,要有深厚的材料科学功底,虚心学习相邻学科的知识、综合运用各种知识工具,结合自己的经验和灵感做出抉择。

3.2 新型产业链顶层设计的特点

新型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,其中各个环节都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。

全局设计:对材料和器件制备过程中有可能采用的多轨迹的工艺路线进行全局分析,从而得到适用于不同边界条件的、动态的、个性化的方案以供选择

参考. 理论上,要在跨学科的理论 and 现有实验方法的基础上建立新的模型和实验方法来研究材料和器件中各个结构单元的相互作用及其演化规律. 制造上,要根据化学反应途径或者相变序列知识,综合采用各种工艺方法,如分别由气相、多层液相和固相参与的各种物理化学方法,来制备新材料和器件. 运作上,由中心小组进行全局运筹安排,分散到各地进行施工、加工、逐步组装.

动态控制:新材料制造往往由一系列相互关联的工艺环节组成,如果其中一个环节出现了偏差,通常会改变微观组织的演变序列. 一旦出现这种情况,往往可以通过调整后续工艺参数把组织演变序列给“纠正”过来.

个性化设计:所谓个性化设计就是针对不同的现场情况和对产品性能的差异性要求,在计算机上进行各种工艺“试验”,提出合适的多轨迹的工艺方案. 以焊接过程为例,目前,市场上流行的所谓“标准”焊料的说法是不够科学的. 因为焊接过程通常包括焊料与基体的相互反应以及剩余焊料的不平衡凝固过程. 工艺条件例如焊接温度、焊料成分,乃至试样厚度的微小变化都会改变焊件中各个微区扩散通道和凝固通道的轨迹,也就是说会改变焊件组织演化的序列及性能.

目前,在功能器件的研发直到产业化的过程中,成功的单轨迹工艺路线正在不断涌现. 我们要从学科交叉和知识集成的角度出发,逐步建立起包括微纳器件在内的绿色制造体系. 要以产品功能、经济效益和环境友好为目标,综合运用物理学结构知识、化学反应序列知识和信息技术,创建多轨迹的、纵横交错的知识体系来评价可能采用的工艺路线和服役条件.

3.3 新兴产业链是学科交叉和群体性技术革命的产物

物理学家正在不断努力加深对材料各个层次的微观结构与性能之间关系的认识;化学家正在从化学反应的角度设计各个层次的结构演化序列. 在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,即各个微结构与成分在时空中的变化轨迹. 这些工作为设计新型产业链奠定了基础.

将先进的计算技术、大数据和信息学融合到新兴产业链中是材料与制造科学发展的必然要求.

大数据的作用是其能够对大量的经验的、理论

的数据进行采集和鉴别,并作为优化模型的输入量;信息技术及大数据在寻找主变量及表达组织演化规律中还有其他作用:运用统计学、回归方法以及有关物理模型,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、数学方法与物理模型在更高层次上的相互融合以及在产业链中的应用.

随着先进的计算技术和信息技术的快速发展,人们的想象力正在以前所未有的速度从起点贯彻到终点,大大地提高了优化模型和与现场互动的效率,引发了产业链的革命.

4 国际上创立新材料制造科学体系的借鉴意义

材料组织演化的核心理论反映了材料与制造科学的共同规律. 它能够包容材料各个结构层次之间的相互作用及演化细节,内容丰富;能够通过知识单元应用到产业链的各个环节中去,实用性强. 因此它们可以组成一系列纵横交错的知识网络. 这些网络穿插在经典理论、高科技与产业化过程中,构成了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,科学家们从不同的角度构建的知识单元和知识系统,为未来的新材料制造科学体系描绘了一幅逐步清晰的图案. 下面我们引用的实例正是这幅图案中的一些景点,可作为借鉴.

4.1 材料热力学的创新

从20世纪中叶开始,就有一些科学家尝试全面发展材料科学. 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,力求能够客观准确地描述材料体系,对实际问题具有更强的预测、指导和穿透能力,对整个技术科学领域产生重要的推动作用.

今天,他们努力的效果正在逐步显现. 例如,物理化学中的稀溶液模型已经被更合适的亚点阵模型所替代,并且延伸到从金属到氧化物的整个浓度范围中;研发热障涂层要求将描述金属材料的热力学函数扩展到氧化物体系中;要想弄清楚在极端条件下的材料

行为,就必须知道在温度和压力急剧变化的情况下有关热力学函数的准确描述等.目前人们正在将热力学扩展到更宽的金属、合金、无机非金属和高分子材料领域中去.

从理论创新的角度来说,就是要以组织演化的科学本质为依据,通过建立物理模型和函数,创新地表达经典热力学中的变量,创建材料热力学体系.例如在建立吉布斯自由能函数的时候,就要把原子振动、电子自旋等内涵深度融合并贯穿到热力学函数中去.当这些函数没有解析解的时候,就需要寻找和发展新的计算方法.当代先进的计算技术和信息技术已经能大大提高优化模型和与现场互动的效率.

4.2 创新理论体系的实例

Hillert综合热力学与动力学理论,提出的相变驱动力、体系自由能和组织演化程度关系的定律($\Delta G = -\int Dd\xi$),是综合描述在不同外界条件下各种材料中各个物相演变过程的基本框架.

4.3 新材料制造科学中的知识系统

麻省理工学院的Ceder、宾夕法尼亚州立大学的刘梓葵和西北大学的Olson的工作就是将前沿理论、高科技、新材料研发等知识系统化的成功范例.Ceder把自己的工作表达为系综热力学(thermodynamic ensemble),并提出了从头算起热力学的概念(ab-initio thermodynamic).他深刻认识到材料在本质上就是器件,在一篇题为“第一性原理在材料设计及锂离子电池材料应用中的机遇和挑战”的论文中,他分析了薛定谔方程、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个部分之间的关系.目前,大多数通过第一性原理计算得到的结果都是被用作为开发新材料过程中优化技术路线的输入量之一,还没有真正实现从量子力学到宏观各个层次的组织演化规律和细节在制造科学中的深度融合^[37].他在课件中告诫学生要特别注意计算技术、前沿理论和现场实践之间的互动与反馈.

4.4 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^[38]

专利的质量和数量是一个国家研发和产业化水平的重要指标,是知识经济的一种形式,是研究成果

转化为产品的桥梁,是目前知识产权竞争的焦点.

基于经验和灵感的发明是偶然的、令人惊讶的;而基于知识系统的发明则是研究工作厚积薄发的自然结果.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.

核心技术是买不到的,但并不是不可破解的.对大量类似于专利的发明创造进行个案剖析,我们就有可能发现,有些古代发明创造的机密在历经千年之后终于被破解;有些专利可以在较短的时间内被理解;有些专利可以立即进行更新;更好的专利则靠自己创造.创造的水平主要依赖于知识体系的融会贯通和穿透能力,依赖于各个知识单元的质量,依赖于研发方案的体系创新,各知识单元之间的协调.强强联合固然好,强弱搭配适当、整体优化也不失为明智之举.对于这些问题的研究,催生了一系列刊物,诸如“Recent Patents on Nano-technology”,“Recent Patents on Engineering”等.

利用创新的知识系统来破解古代技术机密或产生成批专利的例子.

(1) 例一: 1500年前的“不均匀相纳米结构的自组装”技术^[38]

公元6世纪, Merovingian Fanks和Vikings的铁匠们用手抡铁锤的方法将两种碳含量不同的固态钢焊接在一起,再经过淬火,制成了内韧外硬的利剑.

这些1500年前的铁匠们就是当时的纳米技术专家,他们采用了现在称之为“不均匀相纳米结构的自组装”技术.这是一个技术走在科学前面的例子.利用20世纪的物理冶金知识,可以破解出这种工艺的机理是马氏体相变与碳的再分配;而观察和鉴别出其中的纳米结构则是应用了透射电子显微镜以后的事情.这就是知识系统破解千年机密的一个实例.

(2) 例二: 一个镍基高温合金的均匀化热处理工艺^[39]

下面以一个具有10个组元的镍基高温合金的均匀化工艺为例.

老专利: 在1200℃到1230℃保温24 h.

新专利: 以10℃/min加热到1100℃,保温3 h,再以10℃/min加热到1200℃,保温9 h,风扇吹冷.

新专利的效益: 由于炉温不必超过1200℃,所需电炉可以降低一个规格,这就节省了设备费用,降低了能耗.

新专利的理论价值: 作者按此方法发明出一系列专利, 并用于IN718等一系列高温合金及不锈钢中。

专利发明人必须掌握高温合金相变理论, 并能对铸锭的微观组织进行准确分析; 从中鉴别出铸锭中最薄弱的环节, 即最容易热裂的部位的树枝状晶间距, 确定扩散距离; 确定扩散最慢的元素是钼。

以钼含量为纵坐标, $0\sim 50\ \mu\text{m}$ 的树枝状晶间距为横坐标, 在电脑上进行一系列不同热处理工艺的“试验”, 观察钼含量与扩散距离之间的关系的曲线变化情况, 找出可以接受的曲线变化区域, 这个区域就是现阶段最好的均匀化工艺(图1)。

(3) 例三: 专利US 7967927B2^[36]

Olson的美国专利US 7967927B2是在多元相图的基础上, 设计出由锻造、均匀化退火、固溶热处理、正火、回火、空冷、快冷等十几个环节组成的工艺路线, 发明了制备一系列超高强、耐腐蚀结构钢的典型例子(图2)。

5 走中国道路创建新材料制造科学体系, 必须全面贯彻落实五大理念

在改革开放的条件下, 创建新材料制造科学体系的国际竞争聚焦于争夺学科集成权, 落实在体系创新的水平上, 聪明地重组知识单元可达“寓超于赶”的功效, 这就属于协调创新的范畴, 因此, 必须全面贯彻落

图1 枝晶间Mo含量的变化与均匀化工艺的关系^[39]

实五大理念。

5.1 协调发展是制胜要诀

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诸如提出学术思想、建立物理模型、创立新的函数、发展计算技术等等, 并深入研究它们之间的关系, 找出新的纲目, 创新知识系统。在技术科学领域, 通常是通过反馈、迭代、试错和优化等环节来协调它们之间的关系。由于各科

图2 根据Fe合金相图设计热处理工艺路线^[36]

学团队的视角不同, 他们所创建的科学系统各具特色, 在设计新型产业链和发展理论的时候也要协调好它们之间的关系。

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。

例如在材料组织演化理论和知识工具发展的第三阶段中, Hillert提出的热力学综合定律 ($\Delta G = - \int Dd\xi$), 在理论上创建了材料热力学体系; 在应用上聚焦于材料科学家与工程师们最关注的组织演化程度这一组变量。它的表达形式非常精练, 只包括了互相关联的三类函数: 体系自由能、组织演化的驱动力和演化程度。当这一理论扩展到不同材料领域的时候, 就会涉及到力、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。此时就要建立新的物理模型, 创建新的函数, 引入新的变量。当进入到产业链设计环节时, 为了协调好全局化、动态化、多轨迹和个性化之间的关系, 要把与组织演化有关的函数具体化为知识工具和制造方法中的工艺参数, 以及在服役和回收过程中的环境参数, 这就需要处理海量的信息与数据。

5.2 避免顶层设计中的误区, 准确评价国际动向

国内外不少自发的科研规划, 往往是从短期的目标和个人兴趣出发, 在涉及到研究路线的时候, 采用的是单轨迹的、就事论事的论证方法, 就是说对所涉及的科学问题缺乏周密调查和辩证分析, 没有从全局上布局学科集成, 缺乏培育制高点的竞争力, 这是顶层设计中常见的误区之一。如果没有发挥出社会主义大国的优越性, 就会丢失学科集成权, 已经有例证表明, 它会使得我们在个别项目上的超越转瞬间变成整体上的被超越, 乃至与战略机遇失之交臂。

作为崛起中的大国, 创建新体系必须要有宏大的历史观和全局观, 深刻领悟国家意志, 对各种研发路线要充分展开和全面的评估; 要对大量研发案例进行洗牌式的分析, 挖掘其中关键词的内涵和它们之间的科学联系, 提炼出新概念、新方法, 创建新的科学系统。

以实施材料基因工程为例, 我们要从经典理论、高科技与产业化迅速融合的大背景出发, 从创建新材料与制造科学技术体系的大目标出发, 从科学发展规律和内涵出发, 认真分析和解读有关科学家的见解。也就是说要从学术思想源到知识工具的发展历程, 正

本清源, 前瞻未来, 科学地评估量子力学到各个宏观层次的设计思想, 以及大数据、计算方法和信息学等各个学科要素在各个时间段的相互作用。不能“脚踩西瓜皮, 滑到哪儿算哪儿”。

5.3 落实并联式和非对称性赶超战略思想

欲在2025年之前使我国制造业进入世界前沿, 我们面临的是一场从方法论到科学水平的全方位竞赛。

我国在基础和关键材料领域与国际的差距到底有多大? 怎么赶超? 需要用几年的时间? 采用“外推”和“叠加”方法, 得不到科学的答案, 串联式思维方法也不能科学的回答这一问题。在本文第2节中, 我们揭示了材料组织演化理论和知识单元发展的4个阶段, 为我们全局赶超提供了思路。第一阶段诞生了材料组织演化轨迹的学术思想源。第二阶段涌现了百花齐放的、能数量级地提高材料研发效率的知识单元。第三阶段是综合各结构层次的研究成果, 创立新的知识系统。该阶段产生的知识系统在金属材料领域内已初显了破解千年机密和产生成批专利的能力, 但其理论深度和应用广度还远远满足不了高科技产业化的需求。第四阶段是将材料制造科学与高科技产业化迅速融合, 使整个产业链发生革命性的变革。

一个民族想要站在世界科学的最高峰, 就一刻也不能没有理论的思维。我们虽然面临着赶超全局的艰巨任务, 但是要看到上述每一个阶段中都不乏有国人的贡献。我们要在并联式和非对称赶超战略思想的指导下, 在协调4个阶段的历史全局和当下科技发展态势的基础上, 在迎战实际问题中创新知识单元和知识系统。为此, 我们提出“全面创新、寓超于赶”的方针。

要认识到知识单元是学科交叉的产物, 包含着万众创新的智慧, 具有独立性和灵活性, 在理论、实践、科学、技术和产业化领域中都具有贯穿能力, 是化解难题的钥匙, 是产业链中最具创新的环节, 因此, 在创新材料制造科学体系的过程中, 一要充分发挥各个阶段发展起来的知识单元的作用, 二要在更高更新的起点上进行学科交叉与融合, 满足新兴产业链对材料科学内涵的要求。

5.4 蕴含创新体系的实例

在迎战现实问题中创新科技体系是创新的常态, 我们要以科学规律和中国实情为根据, 以中华崛起为

目标, 富超于赶, 走出有特色、有信心的道路. 添加式制造方法(Additive Manufacturing)或3D打印技术、高通量实验和计算方法以及材料在极端条件下的行为等技术领域蕴含着寓超于赶的素材, 我们要把它充分挖掘出来, 现在我们就以它们作为抛砖引玉的例子加以分析说明.

5.4.1 添加式制造方法(3D打印技术)中的材料科学问题

英国劳斯莱斯公司(Rolls-Royce)和法国空客(Airbus)等企业以追求高效制造为目的, 将3D打印技术用于传统材料^[40]. 通常是通过调整激光沉积过程中的工艺参数, 诸如铺粉层的厚度、间隔时间、浓度梯度、衬底厚度、激光功率、气氛、粉末喂料速度、激光斑点的大小和移动速度等等因素, 来寻找合适的3D打印工艺. 所得到的工艺路线有实用价值, 但缺乏普适性. 因为传统合金的成分是在特定的工艺和技术条件下确定的, 一旦改变合金成分或者体系, 往往又要重新探索适合的工艺参数.

美国航空航天局NASA最近借助Ti合金相图, 设计了Ti-6Al-4V合金3D打印路线图(图3), 探讨了由近两百层金属组成的梯度材料组织与性能的关系, 提高了研发速度^[33]. 但是, 由于目前还处于初试阶段, 自然也有不成功的案例. 因此, 系统地掌握组织演化、性能及其与合金成分以及整个工艺路线的关系是十分必要的.

企业家通常是针对实际问题, 综合运用各种知识

以提高效率; 科学家往往是追求理论的普适性, 从实际问题中寻找合适的切入点; 而总设计师的工作则是要把诸多因素结合起来, 凝练提升, 指明方向. 可以预料, 他们三方迟早都会意识到并且比今天的我们更加关注材料的组织演化问题.

Frazier^[41]在关于AM(additive manufacturing)的一篇综述文章中提到了这一点: 他追溯说, 20年前就有人开始研发3D打印技术.

实际上在半个世纪前就有人从原理上研究了利用3D或者AM方法制造材料时, 其组织在时空中的演化规律: Kennedy^[42]将Fe-Cr-Ni合金靶材, 按照浓度渐变的设计溅射在三角形衬底上, 热处理后却演化成在相区相邻处具有成分突变的图案, 这个结果与以强度变量为坐标的相图的等温截面的结构“恰巧”吻合.

简单的三元扩散偶实验, 也已经充分地显示了材料的组织随时空演化的现象. 例如, 在1100℃, Fe-Ni-V三元扩散偶中的相区分布随着时间变化, 至少经历4个阶段. 在多元多相合金中, 扩散结的组织随温度和时间在三维空间中的变化就更加丰富了.

如今, 3D(AM)打印技术依照数字原图, 数以百万次逐层叠加材料, 形成三维物体. 这数百万叠层之间和内部所发生的物理化学变化及其对器件功能的影响是不能忽视的.

在3D打印过程和每一个后处理工艺环节中, 材料或器件中都会发生一系列组织演化过程. 就是说, 器件中各相的成分、结构及其在空间中的分布是不断变化的. 这就是3D打印技术对材料科学和整个先进制

图3 (网络版彩图)根据Ti-Al-V相图设计梯度材料工艺路线^[33]

造业,包括大型建筑、雕塑一直到微纳器件,提出的最新挑战。

从应用的角度来说,就是要从纵横交错的组织演化轨迹中,找出最好的综合组织出现的窗口条件及途径,即工艺路线。

这方面的活动已经涉及到金属、陶瓷、高分子材料乃至生命器官的制造,这三类材料的前沿发展和理论融合是全面抢占材料先进制造业制高点的基础。

5.4.2 高通量实验方法、计算方法与相图结构和材料组织演化之间的关系

所谓的组合芯片法,其优点是在一个试样上获得大量的材料结构与性能的信息,高效率地丰富了研发新材料所需的素材。有人认为这是发现了所谓连续相图,不是的。在多元扩散结方法中,研究者们就注意到了相图结构和相变动力学是理解组织演化规律,即从理论上把握相变轨迹的基础。因为每一次高通量实验所得到的数据是材料的组织演化规律在特定温度、特定时间中的相变序列的特解。因此,为了阐明扩散偶(扩散节)中的组织演化机理,必须以稳定和亚稳相图为基础。

还应当看到,在研发过程和生产现场中,已经积累了丰富的相平衡和亚稳平衡信息,尽管它们通常是零星的、分散的出现在有关论文、报告和记录之中。只有将这些信息和多元相图评估、多轨迹动力学通道的研究结合起来,才能了解这些相的竞争与彼此消长演化的过程,也就是说要把现场中收集到的零散的信息上升为规律性的认识;在大数据、计算技术和信息学的参与下,将使人们以前所未有的速度和效率来探讨材料相变过程的科学本质,并及时与现场互动、反馈和迭代,设计出更有效的制造方案和工艺参数。

总之,高通量方法的任务,一是高效率地获得材料的结构与性能关系的大量信息,并对所发现的新结构与性能及时的进行准确地鉴别与表征;二是对现场和文献中的大量稳定和亚稳相变数据进行采集,编辑成可以从不同角度应用的数据库;三是在不同的材料和制造领域中,构建高通量方法与材料组织演化的关系的理论框架和细节的信息库。也就是有效地解决高通量方法中材料组织演化的通解和特解的问题。

5.4.3 极端条件下的材料制造理论和技术

极端条件下的材料制造理论和技术,是指材料在

快速凝固(包括激光加工)、高速冲击、重返大气层、核辐照和特殊介质等环境中的组织演化规律,是掌握前沿制造技术的理论基础。美国材料基因组计划列举的九项案例中所提到的经受导弹攻击或强烈撞击的材料、热防护材料、飞机引擎组件材料等,涉及到的就是在温度、压力等外界条件急剧变化的条件下,材料的组织演化问题,这些同时也关联到高温高压等物理学问题。因此,在理论上要建立起能够反映材料物理本质的模型,例如建立绝热过程的新的热力学函数。

我国对材料在极端条件下的行为的研发十分活跃,例如韩杰才^[43]关于ZrB₂-SiC隔热材料在重返大气过程中,微区对流、温差和氧活度对烧蚀过程作用的分析,受到了研究哥伦比亚空难的好几个国家的专家们的关注。

我国西北工业大学在快速凝固领域的工作也有领跑国际的记录。对于材料在极端条件下的服役行为的研究,其重要意义可能超出我们的想象。

上述三大实例都属于在不同外界条件(变量)下材料组织演化的理论问题。深入分析其中的科学联系、找出规律,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,以达到富超于赶的目的。它在高科技领域中辐射能力强,这是青少年科学家面临的新的机会和挑战。

6 创立新材料制造科学体系的战略目标、路线图

基于本文前五节互相渗透的观点,我们在学科结构图的基础上提出了路线图,其方针是:全面创新、寓超于赶。

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,以及对材料与器件的潜力和隐患认识还远远不够。全球至今尚未出现覆盖从基础理论、高科技到产业化全过程的知识体系。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,构建新的知识系统,是抢占全球制高点的新挑战。

我们建议国家拟以重大专项为导向,凝聚全球人

才,建立若干个以材料微结构演化理论和创新知识单元为内容的“国家级创新中心”。以培养人的科学素质为目标,结合学科交叉前沿研发和产业化的实践,对大学教育方法、内容和师资队伍进行结构性的改革。

6.1.2 在2020年之前,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,拟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研发、制造和产业化中;渗透到制造强国绿皮书与材料有关的大专题中。关键材料是指如镍基高温合金、钛合金、特种钢、稀土材料、铝、镁、高温陶瓷、核武、核堆、核废材料;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,可以为我国赢得至少十几年的宝贵时间。

6.1.3 在2020年之前,初步建成具有世界先进水平的无机功能材料和微纳器件的科学体系

先进无机功能材料领域内的新成果正在不断涌现,国际竞争激烈。国内在研发、专利和产业化方面都有所建树,但是总体实力不强。国际上现有的知识系统还满足不了往更深研究领域的需求。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。拟以典型的功能材料为切入点,创立从量子到宏观各个层次相互渗透、融会贯通的新材料制造科学体系。

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

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。操作过程是要以抓铁有痕的精神长期坚持对全球动向和国内形势的调查研究,定期提出真知灼见。建议由制造强国小组领导和统筹创建新材料与科学体系的工作,各部门紧密配合。例如:拟请专利局梳理材料与制造领域中敏感的专利以及其中的科学问题;由各大专项提出具体的需求;拟请自然科学基金委提出项目指南或者指令;请中国科学院、中国工程院、中国社会科学院、科技部和教育

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,担当着完成“十三五”决胜阶段的重任。建议由中国物理学会相图专业委员会运作,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。现在国内有些很好的数据库,例如铝合金数据库国外都在用了,而我们还没有与研发和产业化沟通,这是很可惜的。

中国物理学会相图专业委员会每年都集结了国内数百名从事相图与材料研发的教授、研究员和研究生,他们思想活跃,有能力更有责任担当起重任。目前还没有哪个国家有这样好的人才条件,也没有哪个国家能为他们提供如此宏伟的施展才华的舞台。

具体做法是:拟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。这些问题包含例如Ni基高温合金及某些特种钢的加工工艺分析;热障涂层设计;3D打印工艺中的组织演化过程分析;铝合金热力学动力学数据库的应用;以及就有关单位委托的课题进行联合攻关等等。

要完成上述任务绝非轻而易举,同样重要的是要造就一批扎根国内的新人,提升全民族的科学精神和到的水平,这是落实富超于赶的方针的根本保证;要把理想信念、价值观、辩证唯物主义和中国道路的新理论渗透到创建新材料制造科学体系的全部过程中去,也就是要渗透到创新学术思想、构建知识单元和组成新的科学体系的全链条中去,渗透到课堂、教材和培训的各个环节中去。

7 总结

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理念,建设制造强国的重点工作。

7.1 高科技与产业化是创建新体系的动力和知识源泉

今天高科技与产业化的快速融合对发展材料科学的要求越来越迫切,所积累的知识、经验、信息、灵感越来越丰富,为人们在实践中不断丰富和深化对材料中各个层次微结构相互作用机理的认识提供不

竭的源泉, 也为我们迎接挑战创造了机遇.

材料组织演化理论是所有材料设计和制造的共同基础, 它和有关知识单元的发展, 经历了学术思想起源、知识单元发展、构建科学体系和与产业链融合等4个阶段. 当今的新兴产业链是材料科学、计算技术、信息学与大数据等学科交叉融合以及群体性技术革命的产物. 学科集成和体系创新的作用在第四阶段中更加凸显, 此时要将体系创新、知识单元创新落实到关键战略材料产业链的设计中.

7.2 充分发挥中国创新大格局的优势

创建以材料组织演化理论为核心、以组织演化轨迹的各种知识单元为基石的新材料制造科学体系, 必将使创新协调发展的五大理念具有更坚实的科学

基础, 更丰富的学科内涵和更鲜明的时代特征. 这是迎接全球高科技与产业化竞争的前瞻性战略布局, 是引航制造强国的灯塔. 因此, 我们要充分发挥中国创新大格局的特点与优势, 在国家意志的统帅下, 协调好各管理部门、各部委院所之间的关系, 充分发挥各创新主体(战略科学家的创新、体系创新、知识单元的创新和万众创新)的作用, 形成协同高效的创新格局.

7.3 “十三五”期间的紧迫任务

在“十三五”期间, 拟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研发、制造和产业化中, 这是整个战略的决胜阶段. 圆满完成此阶段的任务, 可以为我们赢得至少十几年的宝贵时间.

致谢 衷心感谢中国科学院技术科学部和学部工作局的指导、鼓励和支持. 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 西泽泰二, 著. 郝士明, 译. 微观组织热力学. 北京: 化学工业出版社, 2006
- 2 Cheng S Z D. Phase Transitions in Polymers-The Role of Metastable States. Amsterdam: Elsevier, 2008
- 3 Zeng K, Tu K N. Six cases of reliability study of Pb-free solder joints in electronic packaging technology. *Mater Sci Eng R*, 2002, 38: 55-105
- 4 南策文. 非均质材料物理—显微结构-性能关联. 北京: 科学出版社, 2005
- 5 Lee B J, Hwang N M, Lee H M. Prediction of interface reaction products between Cu and various solder alloys by thermodynamic calculation. *Acta Mater*, 1997, 45: 1867-1874
- 6 Kuo K. Metallography of delta-ferrite. Part I: Eutectoid decomposition of delta-ferrite. *J Iron Steel Inst*, 1955, 176: 433
- 7 Kuo K. Metallography of delta-ferrite. Part II Formation of delta-eutectoid in 18-4-1-type high-speed steels. *J Iron Steel Inst*, 1955, 181: 128
- 8 Kuo K. Metallography of delta-ferrite. Part III: Isothermal transformation of delta-ferrite in a low-carbon 27-5-1. 5 Cr-Ni-Mo corrosion-resistant steel. *J Iron Steel Inst*, 1955, 181: 131
- 9 Kuo K. Metallography of delta-ferrite. Part IV: Decomposition of delta-ferrite between 650°C and 1000°C in a low-carbon 18-10-3 Cr-Ni-Mo corrosion-resisting steel. *J Iron Steel Inst*, 1955, 181: 214
- 10 Kuo K. Metallography of delta-ferrite. Part V: δ -Eutectoid and the constitution diagram of the Fe-M-C system. *J Iron Steel Inst*, 1955, 181: 218
- 11 Fridberg J, Hillert M. On the eutectoid transformation of δ -ferrite in Fe-Mo-C alloys. *Acta Metall*, 1977, 25: 19-24
- 12 Oikawa K, Ohtani H, Ishida K, et al. The control of the morphology of MnS inclusions in steel during solidification. *ISIJ Int*, 1995, 35: 402-408
- 13 陈瑶. 小平面相凝固理论及TiC增强金属间化合物复合材料涂层组织与耐磨性. 博士学位论文. 北京: 北京航空航天大学, 2003
- 14 Onsager L. the effects of shape on the interaction of colloidal particles. *Ann New York Acad Sci*, 1949, 51: 627-659
- 15 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: 422-428
- 16 Yan J, Fang X, Zhang L, et al. Structure and cathodoluminescence of individual ZnS/ZnO biaxial nanobelt heterostructures. *Nano Lett*, 2008, 8: 2794-2799
- 17 Xue F H, Fei G T, Wu B, et al. Direct electrodeposition of highly dense Bi/Sb superlattice nanowire arrays. *J Am Chem Soc*, 2005, 127: 15348-15349
- 18 Chen Q, Hillert M, Sundman B, et al. Phase equilibria, defect chemistry and semiconducting properties of CdTe(s)—Thermodynamic modeling.

- [J Elec Mater](#), 1998, 27: 961–971
- 19 Hao S, Cui L, Jiang D, et al. A transforming metal nanocomposite with large elastic strain, low modulus, and high strength. [Science](#), 2013, 339: 1191–1194
- 20 Cahn J W, Hilliard J E. Free Energy of a Nonuniform System. I. Interfacial Free Energy. [J Chem Phys](#), 1958, 28: 258–267
- 21 Cahn J W. Free Energy of a Nonuniform System. II. Thermodynamic Basis. [J Chem Phys](#), 1959, 30: 1121–1124
- 22 Cahn J W, Hilliard J E. Free Energy of a Nonuniform System. III. Nucleation in a Two-Component Incompressible Fluid. [J Chem Phys](#), 1959, 31: 688–699
- 23 Kaufman L. Computational materials design. [J Phase Equilib Diffus](#), 2009, 30: 418–428
- 24 Hillert M, 著. 赖和怡, 刘国勋, 译. 合金扩散和热力学. 北京: 冶金工业出版社, 1984
- 25 Cahn R W, 著. 杨柯等, 译. 走进材料科学. 北京: 化学工业出版社, 2008. 381
- 26 Han C C, Akcasu A Z. Scattering and Dynamics of Polymers: Seeking Order in Disordered Systems. Singapore: John Wiley & Sons (Asia) Pte Ltd., 2011
- 27 Chang Y A, Chen S, Zhang F, et al. Phase diagram calculation: Past, present and future. [Prog Mater Sci](#), 2004, 49: 313–345
- 28 Olson G B. Preface to the viewpoint set on: The materials genome. [Scripta Mater](#), 2014, 70: 1–2
- 29 Olson G B. Computational design of hierarchically structured materials. [Science](#), 1997, 277: 1237–1242
- 30 赵继成. 材料基因组计划中的高通量实验方法. 科学通报, 2013, 58: 3647–3655
- 31 刘梓葵. 关于材料基因组的基本观点及展望. 科学通报, 2013, 58: 3618–3622
- 32 鲁晓刚, 王卓, 崔予文, 等. 计算热力学、计算动力学与材料设计. 科学通报, 2013, 58: 3656–3664
- 33 Hofmann D C, Roberts S, Otis R, et al. Developing Gradient Metal Alloys through Radial Deposition Additive Manufacturing. [Sci Rep](#), 2014, 4: 5357
- 34 Guinier A. Structure of age-hardened aluminium-copper alloys. [Nature](#), 1938, 142: 569–570
- 35 Preston G D. Structure of age-hardened aluminium-copper alloys. [Nature](#), 1938, 142: 570–570
- 36 Zhang Y L, Liu H S, Jin Z P. Thermodynamic assessment of the Nb-Ti system. [Calphad](#), 2001, 25: 305–317
- 37 Ceder G. Opportunities and challenges for first-principles materials design and applications to Li battery materials. [MRS Bull](#), 2010, 35: 693–701
- 38 金展鹏, 周尧和, 周国治, 等. 对材料科技发展战略布局的建议. 科学新闻: 2007: 6-7
- 39 Jablonski P D, Cowen C J. Homogenizing a Nickel-Based Superalloy: Thermodynamic and Kinetic Simulation and Experimental Results. [Metall Mater Trans B](#), 2009, 40: 182–186
- 40 Clark D, Bache M R, Whittaker M T. Shaped metal deposition of a nickel alloy for aero engine applications. [J Mater Proc Tech](#), 2008, 203: 439–448
- 41 Frazier W E. Metal additive manufacturing: A review. [J Mater Eng Perform](#), 2014, 23: 1917–1928
- 42 Kennedy K, Stefansky T, Davy G, et al. Rapid method for determining ternary-alloy phase diagrams. [J Appl Phys](#), 1965, 36: 3808–3810
- 43 Han J, Hu P, Zhang X, et al. Oxidation behavior of zirconium diboride-silicon carbide at 1800°C. [Scripta Mater](#), 2007, 57: 825–828

Strategies of materials development and manufacturing and their effects for Chinese high-tech industries

JIN ZhanPeng, CAI GeMei, SU LiuMei, FAN Xing & ZHENG Feng

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

In order to catch up and compare with global competition in fields of industries, we state relevant arguments here as follows. 1) How could materials science meet the challenge of ever-increased development of advanced technologies? 2) The development of basic knowledge for 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. 6) Where is our roadmap? What are tasks of emergency and measures of implementation for the 13th Five Year Plan? 7) Creating knowledge system of novel materials and their manufacturing and fabrication is one of the forward-looking strategies to build a strong state with advanced and powerful manufacturing and fabrication system. Implementing the so-called five development concepts of “innovation, harmony, green, open and sharing” is the key factor.

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

doi: 10.1360/N092016-00031