

材料基因组技术前沿进展

向勇, 闫宗楷, 朱焱麟, 张晓琨

(电子科技大学能源科学与工程学院 成都 611731)

【摘要】材料基因组技术是近年来兴起的材料研究新理念和新方法,是当今世界材料科学与工程领域的最前沿。材料基因组技术的实质是通过融合高通量材料计算设计、高通量材料实验和材料数据库三大组成要素,构建材料设计研发的协同创新网络,加速新材料从发现到应用的全过程。其中,高通量材料实验经过20多年的发展,目前已面向多种形态材料和多种服役性能形成了一系列成功案例,高通量材料计算模拟和材料数据库近几年也取得了较大进展。该文简要回顾了材料基因组技术的主要内容和发展历程,总结了具有代表性的高通量实验技术,以及高通量材料计算和材料数据库的应用案例,并介绍了电子科技大学在材料基因组技术方向取得的成果和工作基础,希望可以为我校在该领域的进一步发展规划和“一校一带”战略提供一定的参考。

关键词 高通量材料实验; 材料计算模拟; 材料数据库; 材料基因组

中图分类号 O4-33 **文献标志码** A **doi:**10.3969/j.issn.1001-0548.2016.04.016

Progress on Materials Genome Technology

XIANG Yong, YAN Zong-kai, ZHU Yan-lin, and ZHANG Xiao-kun

(School of Energy Science and Engineering, University of Electronics Science and Technology of China Chengdu 611731)

Abstract Materials genome is an emerging technology to accelerate materials discovery, development, and deployment. In the past two decades, high-throughput materials experimentation tools have been developed and applied successfully to the discovery of a number of materials, ranging from advanced catalysts, dielectrics, electrodes, to high-temperature alloys. Materials computation and database technologies have also made remarkable progresses, particularly represented by the integrated computational materials engineering (ICME) developed in the past decade. Materials genome research integrates high-throughput computation and simulation, high-throughput experimentation, and materials database, throughout the materials discovery-to-deployment process, targeting to cut the materials development time and cost significantly. This review, is trying to give a brief and comprehensive introduction to materials genome technologies, with emphasis on high-throughput materials experimentation, as well as applications of materials computation and database. University of Electronics Science and Technology of China is one of the most active institutes in China in the filed of materials genome research, and some progresses are also highlighted in this review.

Key words high-throughput materials experimentation; materials computing and simulation; materials database; materials genome

纵观人类历史,材料科学的变革往往带来文明进程的跨越式进步。材料科学是一门以实验为基础的系统科学。传统材料科学研究主要依赖“试错”实验方法,按照“提出假设-实验验证”的方式顺序迭代,不断逼近目标材料,这种方法耗时费力,通常一种新材料从研发到应用需要10~20年^[1],已无法满足工业快速发展对新材料的需求,急需通过变革研究方法推进材料科学的加速发展。

材料基因组技术是近年来兴起的材料研究新方法和新理念,是材料科学研究方法的一次革命与飞

跃,是当今世界材料科学与工程领域的最前沿。其灵魂是通过“多学科融合”实现“高通量材料设计与试验”,其核心目标在于通过“高通量计算、实验和大数据分析”技术加速材料“发现-研发-生产-应用”全过程,缩短材料研发周期,降低材料研发成本,引发新材料领域的科技创新和商业模式的变革^[2]。

材料基因组技术包括高通量材料计算模拟、高通量材料实验和材料数据库三大组成要素;其中材料计算模拟是实现“材料按需设计”的基础,可以帮助缩小高通量材料实验范围,提供实验理论依据;

收稿日期: 2016-05-15

基金项目: 国家自然科学基金面上项目(51472044); 国家863项目(SS2015AA034204)

作者简介: 向勇(1977-),男,博士,教授,主要从事材料基因组技术和高密度电源方面的研究。

高通量材料实验起着承上启下的角色, 既可以为材料模拟计算提供海量的基础数据和实验验证, 也可以充实材料数据库, 并为材料信息学提供分析素材, 同时还可以针对具体应用需求, 直接快速筛选目标材料^[3]; 材料数据库可以为材料计算模拟提供计算基础数据, 为高通量材料实验提供实验设计的依据, 同时计算和实验所得的材料数据亦可以丰富材料数据库的建设。本文基于作者及合作者前期在《科技导报》撰写的材料基因组技术相关综述^[3-5], 简要回顾材料基因组技术的发展历程, 重点总结了材料基因组技术的进展, 并介绍我校在材料基因组技术方向取得的工作基础和未来发展趋势。

1 材料基因组技术的发展历程

1965年, 文献[6]首次采用成分梯度分布技术一

次实验快速完成三元合金相图的制备, 由于基片表面薄膜分布不均匀, 造成三元相图各成分化学配比和物相结构与传统方法所制备相图有所偏差, 但该方法首次提出的“多样品”的实验思想, 是高通量组合材料实验技术的雏形。随后, 文献[7-9]采用连续成分分布的材料制备技术分别研究了Au/SiO₂中Au含量对电阻率的影响、晶粒尺寸对过渡金属合金超导体的影响和Gd₃Fe₅O₁₂材料体系等科学问题。1970年, 文献[10]采用多成分拼接靶共溅射方法对二元和三元成分连续分布的超导材料进行了筛选。上述方法可以快速和系统地完成二元或三元材料体系性能研究, 但由于受计算机技术和表征技术分辨率等支撑性技术水平的限制, 此后该方法只被少数材料学家所尝试, 并未得到广泛推广^[11]。

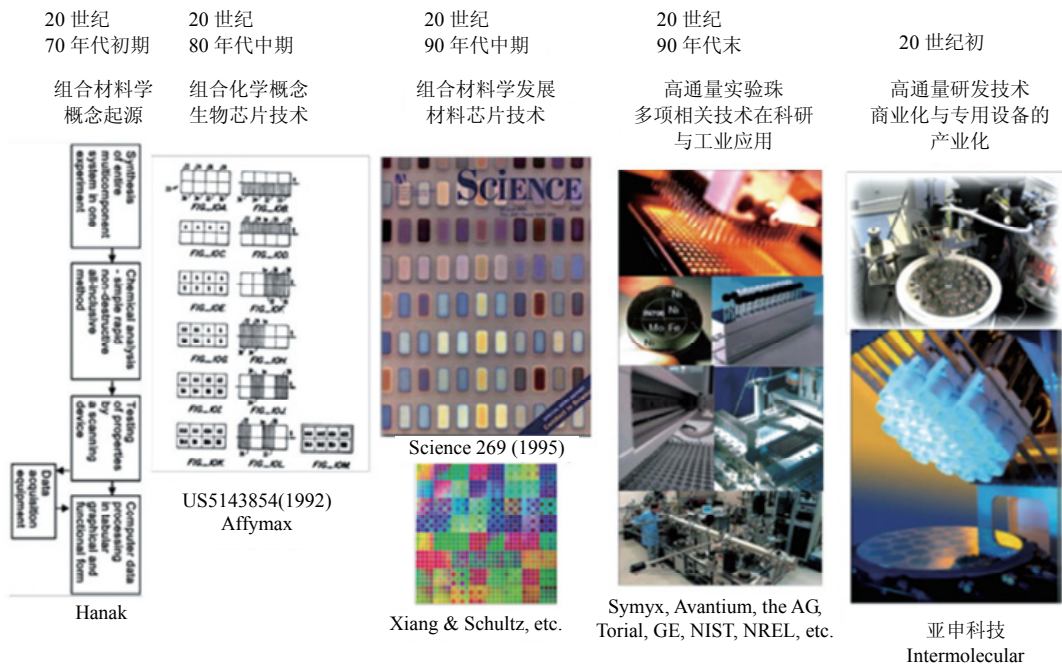


图1 材料基因组技术发展历程^[3]

20世纪80年代, 生物化学和制药工业在药物、催化剂等有机物的研发中引入组合化学方法, 极大地提高了相关化合物的研发效率, 在前驱体样品产出效率提升825倍的前提下, 每个前驱体成本降低了625倍^[12]。

20世纪90年代, 集成电路技术有了较大发展, 受组合化学和生命科学“基因芯片”等技术的影响, 美国劳伦斯伯克利国家实验室重新将“多样品组合”思想引入材料研究, 发展了一套基于掩模镀膜的高通量组合材料实验技术, 并很快在巨磁阻材料^[13]、超导材料^[14]、荧光材料^[15]、介电/铁电材料^[16]等新材

料领域取得了一系列成果, 引起了材料科学界的高度重视。随着高通量组合材料实验技术逐渐被材料科学工业领域接受和应用, 产生了一系列涵盖薄膜、液体、块体、粉末等不同材料形态的新材料高通量研发-商业应用案例。如美国Intematix公司应用高通量技术成功开发出突破日本Nichia公司专利封锁的应用于固态发光器件的荧光材料^[17], 通用电气公司(GE)找到了高性能的高温合金材料^[18]等。

2000年以后, 亚申科技研发中心(上海)有限公司^[19]、美国Intermolecular^[20]和宁波英飞迈材料科技有限公司^[21]等专门提供商业化的高通量组合材料实

验仪器设备与高通量组合材料实验研发服务的公司诞生,将高通量组合材料技术由实验室推向商业化。

2011年6月,美国奥巴马政府启动“材料基因组计划”(MGI)^[22],旨在通过融合发展高通量计算、高通量材料实验、材料数据库等三大技术加速新材料的研发和应用,在短期内将材料从发现、制造、到应用的速度至少提高一倍,成本至少降低一半,保持并强化美国的高科技在全球的绝对优势地位。其中,“材料基因组”一词借用了“人类基因组”的概念^[23],如图2所示。“人类基因组”技术是通过高通量测序装置对生物基因芯片上的几十万到几百万条DNA分子进行并行快速序列测定,并将结果储存在

生物基因大数据库中,通过进一步的数据分析和计算解析生命密码;与此类似,“材料基因组技术”也是通过高通量实验装置对组合材料芯片上的 $10\sim 10^6$ 个样品单元进行高通量表征,并将所获得的材料性能数据储存在数据库中,通过数据挖掘等技术得到材料“成分-结构-性能”的构效映射关系,最终改变传统材料研究方法,加速材料研发进程。类比“生物基因芯片”,“材料基因芯片”^[24]能够快速测定组成材料的原子、分子的种类和比例及其组成方式,并表征其结构和功能特性,用以构建材料基因数据库,寻找材料科学规律,筛选高性能新材料。

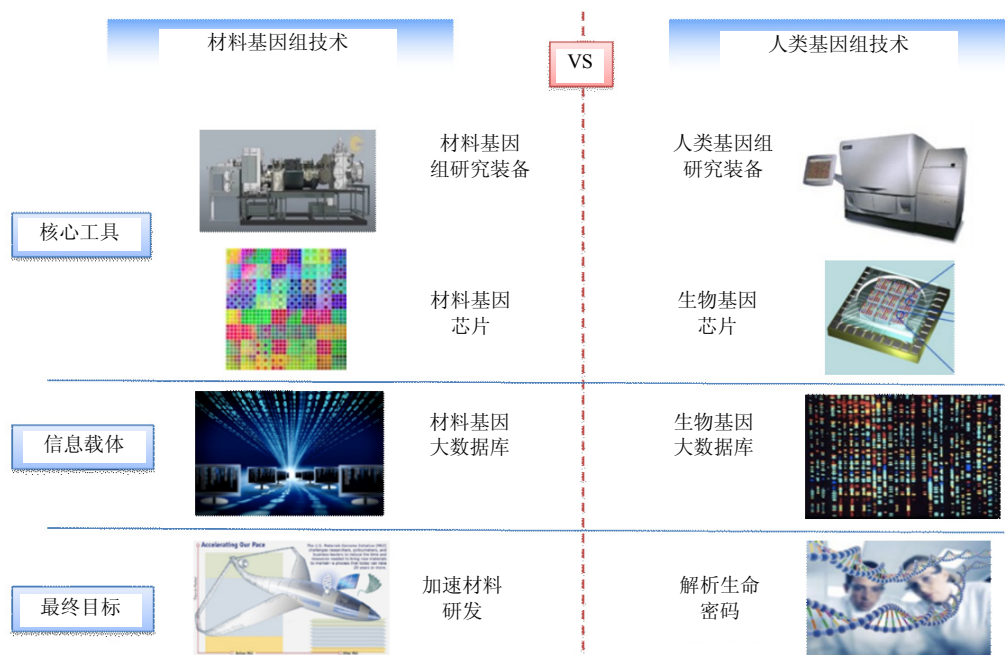


图2 材料基因组技术与人类基因组技术对比^[22]

2 高通量材料实验技术进展

经过20多年的发展,高通量组合材料实验技术已取得较大进展,目前已形成覆盖薄膜^[25-35]、块体^[36-38]、粉体^[39-40]等多种材料形态高通量制备和满足热学^[41-42]、电学^[43]、光学^[44]、电磁学^[45]、电化学^[46]、物相^[47]等各类材料性能高通量表征的完整实验技术体系。尤其是近年来,随着电子信息技术的发展,一批具有更高实验通量、更快实验速度和更高时/空分辨率的制备与表征装备得到发展,并在催化剂^[48-58]、半导体^[59-65]和合金^[66-70]等领域取得较好示范验证。

2.1 高通量制备技术

高通量组合材料样品按照维度从低到高可分为

粉体材料、薄膜材料和块体材料,其制备过程通常可概括为“组合”和“成相”两步^[71],其中前者实现了高通量样品的成分可控分布,后者实现了高通量样品的物相结构可控分布。

2.1.1 薄膜材料

基于薄膜形态的组合材料芯片是目前发展最为成熟的高通量材料制备技术,该技术可基于磁控溅射、电子束蒸发、磁控溅射等传统薄膜制备方法实现。其“组合”步骤按照分布可控程度由低至高可分为共沉积法和物理掩模法,物理掩模法又可以分为分立掩模法和连续掩模法。

1) 共沉积法

共沉积法是指利用多个沉积源同时工作,共同完成单一样品的制备,所形成的样品材料成分渐变连续分布,且通过改变沉积源的出射角度或相对位

置等制备参数, 可调整高通量样品的成分分布^[6]。如图3所示, 文献[72-73]利用三靶磁控共溅射装置在并行纳米量热器件阵列上单次实验完成25种不同成分的Cu-Au-Si玻璃态合金材料样品库制备; 并且通过改变溅射靶相对垂直方向的倾斜角度和溅射功率, 可进一步改变所制备样品的成分分布。该方法

无需额外的物理掩模即可获得不同成分连续分布, 并可实现不同材料原子级的均匀混合, 而无需额外扩散热处理, 可直接对样品进行高温结晶成相, 材料制备工艺和制备装备相对简单, 但该方法无法实现多元材料组合的精确可控分布和多元成分空间的完整覆盖, 限制了该方法的应用范围。

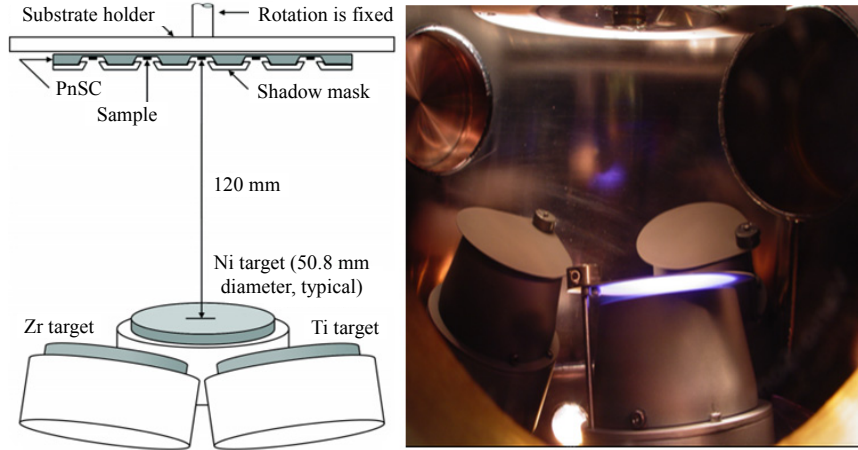
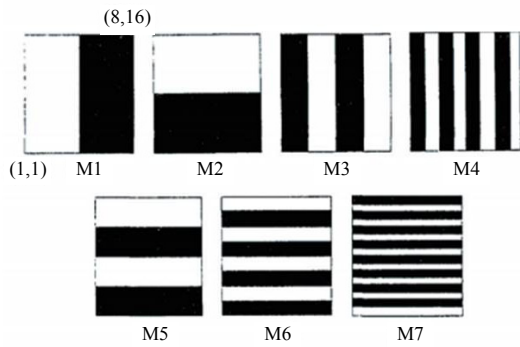
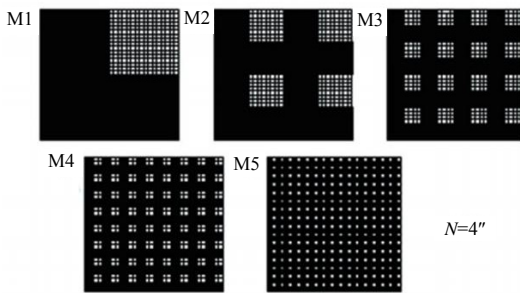


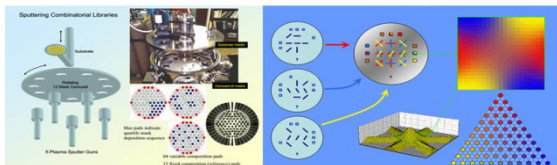
图3 共沉积法示意图



a. 二元分立掩模^[74]



b. 多元分立掩模^[75]



c. 多元分立掩模^[76]

图4 分立掩模法

2) 物理掩模法

物理掩模法是实现高通量样品可控“组合”的

方法, 可分为分立掩模法和连续掩模法。

分立掩模法将物理掩模技术和薄膜材料沉积技术相结合, 单层材料沉积使用一块掩模板和一种沉积源, 并多次组合和更换不同的掩模板和沉积源, 在薄膜均匀沉积的前提下, 实现叠层薄膜的依次沉积、多元材料的组合和样品单元的空间可控分布。常用的分立掩模包括二元掩模、四元掩模和多元掩模, 如图4所示。其中文献[74]利用脉冲激光沉积^[74]、离子束溅射^[75]等制备技术, 将二元和四元分立掩模应用于荧光材料、超导材料和介电材料等的高通量制备, 单个基片最多可制备1 024个不同成分的样品单元, 极大地提高了材料研究的效率。文献[76]设计了由12种不同掩模组成的多元分立掩模组, 可实现2英寸基片上多达64个不同样品的制备, 结合预制的电极阵列, 应用于燃料电池电极材料的电化学性能高通量表征。分立掩模法可用于组成元素多、成分空间跨度大的材料样品库制备, 适合电学、电化学等需要对分立样品进行表征的技术要求, 尤其可用于器件的高通量研究, 但由于其实验通量相对有限, 依然无法实现多元材料体系的系统、完整研究。

连续掩模法是指在薄膜沉积速率均匀可控的前提下, 利用由电机控制下可连续移动的掩模板实现薄膜厚度梯度沉积的方法, 如图5所示为连续掩模制备三元相图的工作流程^[3], 结合旋转角度精确控制的基片台, 可用于三元连续相图组合材料芯片的制备。文献[77]将该技术用于Ge-Sb-Te相变存储材料样

品库的制备,通过步进电机控制连续掩模步长1 mm/步精确控制,在1inch基片上实现了样品密度2个/mm²的样品制备。日本Pascal公司开发了型号为C-LMBM的组合laser MBE系统,如图6所示^[78],将连续掩模技术引入分子束外延制备装备,结合Rheed原位监测装置,可实现高质量薄膜沉积和高通量样品制备。

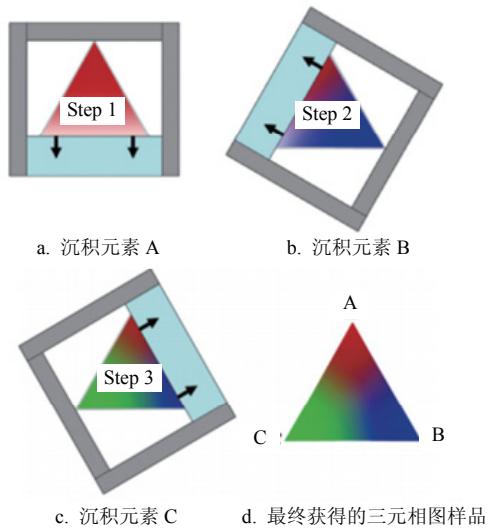
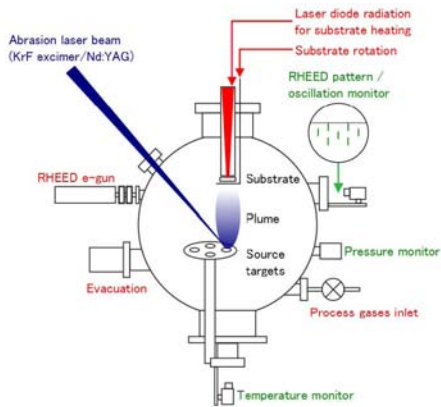


图5 连续掩模法^[3]



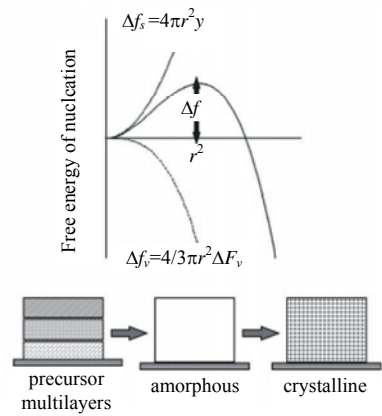
a. C-LMBM原理示意图



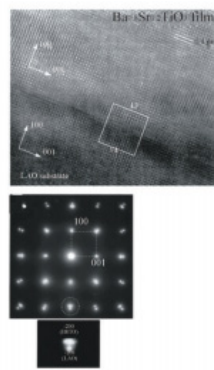
b. C-LMBM实物图

图6 日本Pascal公司开发的C-LMBM组合laser MBE系统
上述基于物理掩模技术制备的叠层薄膜只实现

了材料堆叠,还需要低温扩散热处理过程方可实现多元材料的均匀“扩散”,此外还需“原位”或“离位”热处理“成相”过程才可实现组合材料芯片的制备。其中,低温扩散热处理是组合材料芯片制备的关键,倘若未实现完全均匀扩散就对其进行高温结晶,则会由于存在复相而影响实验结论,这是因为多层膜界面上会发生“扩散”和“结晶”竞争热处理过程,界面一旦结晶则阻碍扩散进一步进行。按照Johnson的理论^[79-82],该过程存在薄膜临界厚度和温度的热力学窗口,决定上述竞争过程的发生,如图7所示。由于各样品通常为大于几十微米的三角形或正方形,其横向尺寸远远大于样品厚度(微米/亚微米),故样品间横向扩散可以忽略。具体的热处理方法可分为平行法和分立法,前者是对各样品单元进行相同条件热处理,而后者是采用多通道并行或单通道扫描的方式对各样品单元进行不同条件的热处理。



a. 利用“层厚/温度”热力学窗口可让多层膜均匀扩散



b. 利用平行法生长高质量的钛酸锶钡外延薄膜^[3]

图7 薄膜样品高通量合成

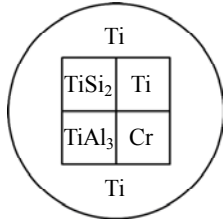
2.1.2 块体材料

薄膜形态的样品由于受样品尺度的影响,通常不能定量反应样品力学等方面的性能,只能定性反应其性能变化的趋势,为此还需要制备块体材料,以便准确表征相关体系材料的性能。近年来,一系

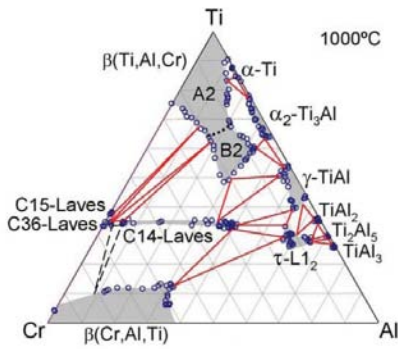
列高通量块体材料制备新方法、新技术得到发展, 包括激光增材制造法、等静压制备法等, 其中发展较为成熟的是体材扩散法和快速合金成型法。

1) 体材扩散法

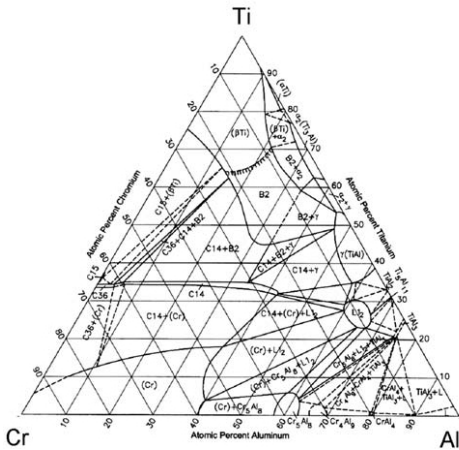
体材扩散法按照制备的工艺不同可分为扩散多元节和扩散切片法, 两者都是利用单质原料在高温下发生扩散反应, 形成中间相扩散层, 通过微米级空间分辨率的材料性能表征工具就可以对上述微区进行成分、物相、性能的高通量表征。



a. 扩散多元节



b. 利用扩散多元节绘制Ti-Cr-Al体系相图



c. 利用扩散多元节绘制Ti-Cr-TiAl3-TiSi2体系相图

图8 扩散多元节及Ti-Cr-TiAl3-TiSi2体系相图

扩散多元节^[83]是将多个金属块材紧密贴合在一起, 并在高温下对其进行真空或保护性气氛热处理, 使元素之间发生相互扩散, 则可在其相界面处获得成分连续/梯度分布的固溶体和化合物相。结合时域热反射技术(TDTR)^[84]、定量微区成分分析(EPMA)^[85]等微区表征技术, 对样品切片进行微区成

分、物相、热导率、热膨胀系数和比热容等性能测试, 并构建扩散系数/迁移率等数据库, 一方面筛选有用的材料, 同时也可以为相图计算(CALPHAD)提供原始数据。如图8所示, 文献[86]利用上述技术, 设计了由多个二元、三元扩散节组成的扩散多元节, 结合相关表征技术, 成功实现对Ti-Cr-TiAl3-TiSi2体系的相图绘制和材料筛选。

扩散切片法是将所需微量元素单质放置于主要元素单质制成的坩埚中, 在对其进行高温退火和冷却处理后, 其中的元素发生熔融和凝固, 则会形成坩埚材料和微量元素间的中间平衡相, 通过对坩埚进行切片, 结合微区X射线衍射和磁光克尔成相等高通量微区表征技术, 则可获得成分-结构-性能映射关系。文献[87]将Nd和B元素放入Fe制坩埚中, 通过对其进行高温热处理, 使其中的Nd和B熔融并与Fe发生扩散反应, 形成Fe、Nd、B组成的三元材料样品库, 通过对其进行磁光克尔微区扫描分析, 绘制了Fe、Nd、B三元材料物相分布图, 如图9所示。

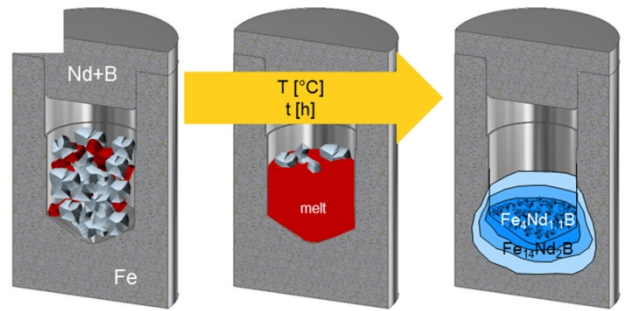


图9 扩散切片法制备示意图

2) 快速合金成型法

该方法基于半自动的高通量块体铸造、滚压、热处理以及样品制备技术, 可以在35 h内完成由5种不同种类合金构成的45个块体样品, 上述样品是经过系统改变成分和处理条件制成, 可提高与化学成分和热处理工艺相关性能, 如拉伸、硬度和微结构等的表征效率。如图10所示, 文献[88]通过向5个装有相同成分Fe-30Mn-1.2C合金的铜坩埚中添加不同含量的Al(0-8wt.%), 并经过相同热处理条件得到5种不同合金; 将上述得到的5种不同合金依次进行滚压, 各切割成2×60×55 mm³的9个合金样品; 对每种合金的9块样品分别进行450、500、550和600 °C的0、1、24 h热处理, 并经过油冷却; 采用火花蚀刻的方法将上述合金样品制成拉伸测试所需的“工”字形, 最终得到45种可直接进行拉伸等力学表征测试的不同成分和热处理工艺的合金样品, 结合晶相分析和机械性能等表征方法最终实现材料的高通量筛选。

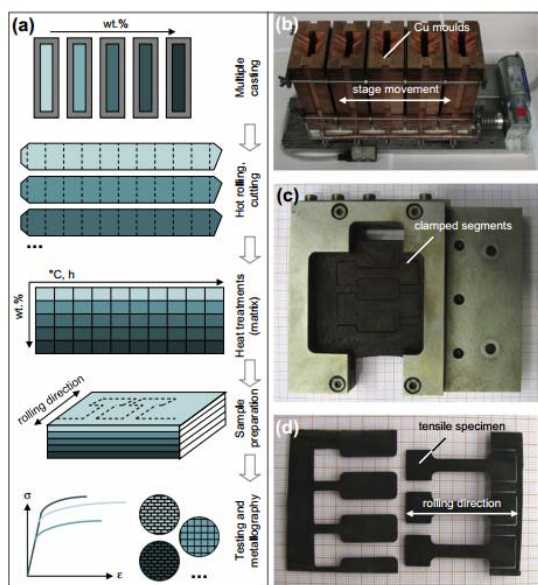


图10 快速合金成型法示意图

2.1.3 粉体材料

除了上述块体材料、薄膜材料的高通量制备技术,适用于粉体材料的高通量制备技术也得到较快发展,其中最具代表性的有:

1) “喷印”合成法

该方法是通过喷射的方式将多组分原料沉积在基底或反应腔中,按照喷射原理和混合方式的不同,可分为喷墨打印、等离子喷涂、激光喷涂和超声雾化喷涂等,上述方法实现高通量样品制备的关键是确保多组分样品形成均匀混合的前驱体,然后通过阵列燃烧、激光加热等方法对上述样品进行成相。其中较为成熟的方法包括“喷墨”打印法和超声雾化喷涂法,该方法适用于有机、无机结构和功能材料的制备,可实现多组分分子水平的混合(液相),样品空间分辨率可达300 dpi。图11为扫描式多喷头喷墨组合合成系统示意图^[89],结合光谱照相的方法,可用于荧光材料的高通量筛选。

2) 多通道微反应器法

该方法借鉴了水热合成反应的原理,集成多个独立反应腔、原料递送系统和高精度环境控制单元,可用于催化材料等纳米颗粒的高通量合成。通常,催化过程受温度、压力等反应条件影响较大,故为了实现催化材料高通量催化特性的表征,必须在模拟相关反应过程的同时进行性能表征,为此需要发展专用的高通量制备与表征平台,实现更为精密和模拟实际应用条件的材料筛选^[3]。图12为亚申科技公司开发的一种高通量催化研发系统^[90],该系统集成了并行实验、自动控制、信息处理等技术,在不改变材料研发本质和流程的前提下,实现研发效率

的提高,实现催化材料合成工艺研究、开发和产业化全过程的提升。

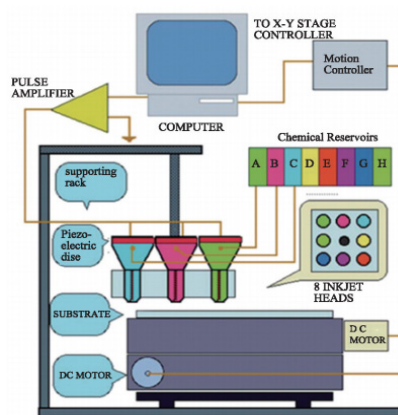
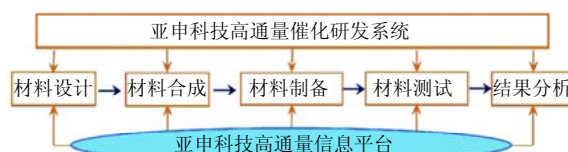
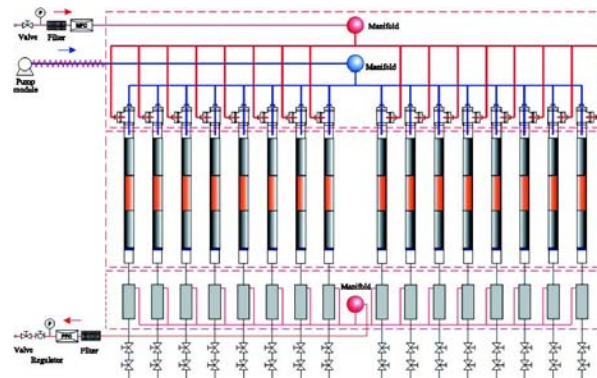


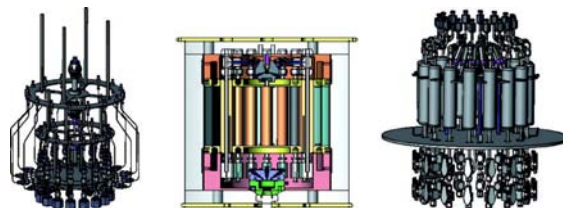
图11 扫描式多喷头喷墨液相合成系统示意图



a. 系统框图



b. 反应器模块示意



c. 流体分配器(左), 反应器内腔(中)和反应器外观(右)



d. PRS-16多通道高速量反应器系统外观

图12 亚申科技PRS-16多通道高通量反应器系统^[3]

2.2 高通量表征技术

高通量材料表征是高通量材料实验技术的重要组成部分。针对材料不同的应用需求, 近年来研究人员已陆续发展了面向材料微观基本单元、介观材料等不同尺度的高通量表征技术, 涉及电学^[91]、磁学^[92]、电化学^[93]、电磁学^[94]和热力学^[95-97]等多种材料性能表征。

2.2.1 高通量微区成分、结构表征

光学方法是研究材料成分、结构最直接有效的表征方法, 常用的光学检测方法包括X射线衍射/散射、X射线荧光光谱分析、X射线能谱仪、紫外/可见/红外分光光度计等。但是常规的光学检测仪器由于其光通量密度较低, 影响了空间分辨率的进一步提升, 从而限制了常规光学仪器在高通量微区表征中的应用。同步辐射光源克服了光通量低下的缺点, 从红外至硬X射线全光谱范围内均能实现高亮度微聚焦, 提升了表征的空间分辨率, 因此成为理想的材料成分、结构高通量表征手段^[98]。

由于同步辐射光源等大型科学装置资源有限, 在使用时机方面并不能得到充分保证。在此背景下, 美国劳伦斯伯克利国家实验室开发了全自动集成微区X射线荧光和衍射系统^[99], 该系统的微束聚焦X射线的亮度是普通X光源的20多倍, 空间分辨率最高可达10 μm , 可以同时高通量实验样品进行成分和结构的快速表征。图13分别展示了全自动集成微区X射线荧光和衍射系统的仪器照片、工作原理、以及用该仪器对四元(Zn, Zr, Sn, Ce)组合材料芯片快速表征所得的组分分布图。此外, 布鲁克公司生产的D8 discover系列X射线衍射仪也可以实现最小50 μm 束斑的微区物相表征^[100]。

2.2.2 高通量微区电磁学表征

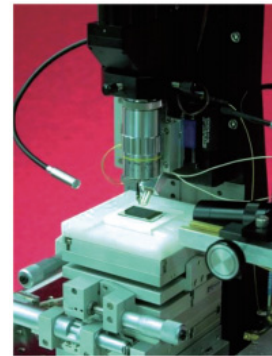
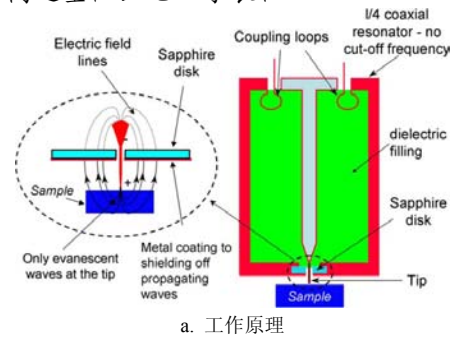


图14 衰减微波探针显微镜

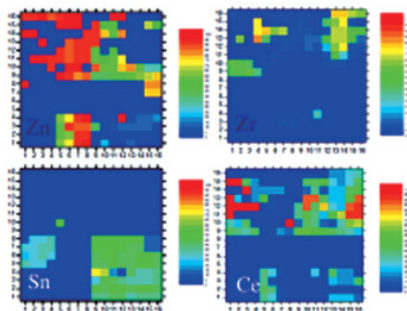
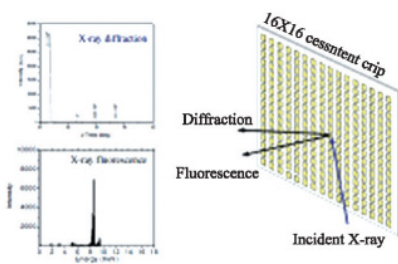
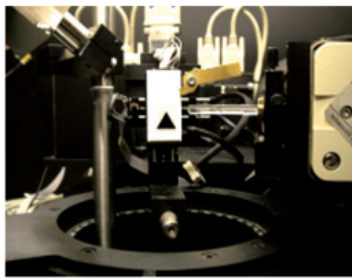


图13 全自动集成微区X射线荧光和衍射系统

电磁学特性是科学研究中最基本的物理特性, 分为电学特性和磁学特性, 其中: 电学特性包括超导电性、电导率、介电常数、铁电常数、磁阻效应、电子迁移率、扩散长度、腐蚀、接触电阻、界面参数、能级对准等, 磁学特性包括磁化率、自旋共振等。衰减微波探针显微镜是研究以上电磁学特性最有效的高通量研究工具。衰减微波探针显微镜利用衰减波的原理, 将微波信号控制在谐振腔内针尖上极小的微区, 通过针尖与样品间发生相互作用, 进而改变谐振腔的频率和品质因子, 结合相关物理模型, 最终获得材料的电磁学性质。图14^[94]是美国劳伦斯伯克利国家实验室开发的衰减微波探针显微镜的工作原理和仪器照片。该系统拥有极高的微区分

分辨率, 结合样品台的自动化控制和数据采集处理功能, 能够应用于材料芯片电磁学特性的高通量、快速和自动化表征。

2.2.3 高通量微区电化学表征

对于电极、电解质等电池、电容材料或器件而言, 其电化学性质具有重要的研究意义。作为材料基因芯片高通量表征的基本要求, 电化学性质的表征仪器必须具有高分辨率和自动化特性。

目前, 广泛应用于锂电池正负极、薄膜电解质、半导体等重要材料的高通量组合电化学表征仪器是由美国Princeton Applied Research、AMETEK, Inc. 开发的VersaSCAN微区电化学扫描系统^[93]。该仪器的特点是样品定位精度高, 平台空间分辨率可达50 nm, 样品测试区域为100×100 mm, 且满足高密度组合材料样品的全自动编程测试需要。该高通量微区电化学测试平台基于电化学过程和材料电化学特性, 可提供扫描电化学显微镜、扫描开尔文探针、扫描振动电极测试、微区电化学阻抗测试、扫描电解液微滴测试、非接触式微区形貌测试等电化学测试。

2.2.4 高通量微区热力学表征

高通量微区热力学表征对由于传导热损失带来的测试误差有较高要求。文献[95-96]开发了应用于高通量微区热力学性能表征的并行纳米扫描量热系统(PnSC)。该系统由25个独立的微型加热/量热单元组成。每个集成加热与测温单元由微机电加工工艺在硅基底上制备而成, 如图15所示。为了降低传导热损失带来的测试误差, 器件沉积在氮化硅薄膜表面, 只留出量热单元的两端与衬底接触。该系统可对材料样品库的焓变、热容、相变温度等热力学参数进行并行表征, 最高测量温度为900 °C, 升温速率达 10^4 °C/s, 灵敏度为10 nJ/K。结合三靶磁控共溅射和高精度物理掩模的方法, Vlassak等在该系统上制备了Cu-Au-Si非晶态合金材料样品库, 并得到了不同组分对应的玻璃态转化温度与转变焓分布, 如图16所示。

基于飞秒脉冲激光技术进行时间域热反射成相, 其空间分辨率可以达到1 μ m, 测试速率可达10000点/h, 可对薄膜或块体材料样品库的热力学参数(如导热系数、热膨胀系数、熔点、热电参数等)进行微区表征。文献[97]将该技术应用于热传导系数快速测量, 图17为其测量方法示意图。在样品上沉积一层80~100 nm厚的金属铝, 将快速激光分为两束, 其中一束激光用作加热, 另一束用作反射率探测。将激光波长调为特定波长时, 通过反射率随时间变化关系, 以及样品表面温度随时间变化关系可以

求解方程组, 即可得到相关材料的热传导系数。

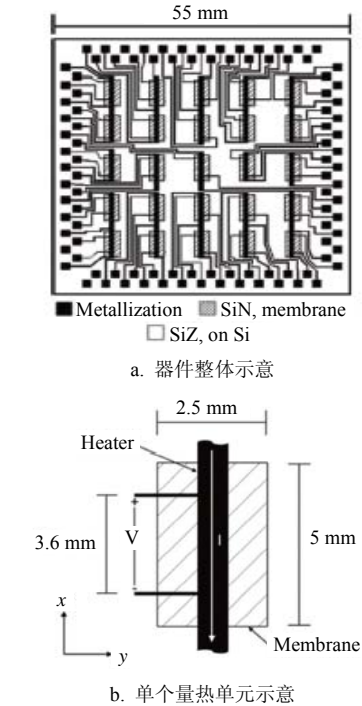


图15 并行纳米扫描量热系统示意图

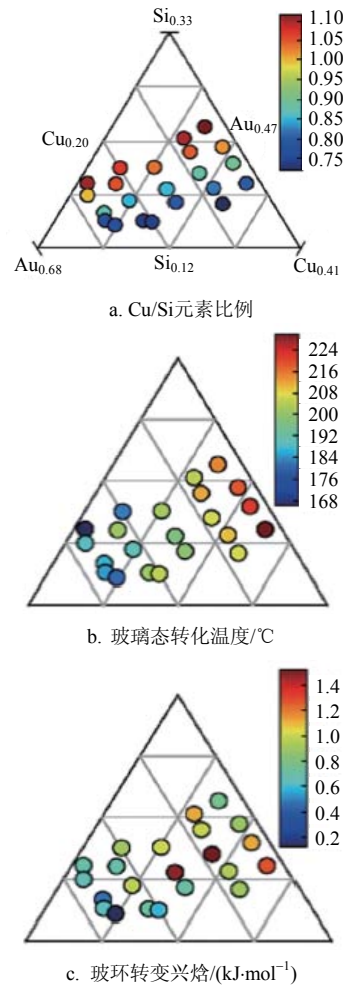


图16 Cu-Au-Si 三元非晶态合金热力学参数分布

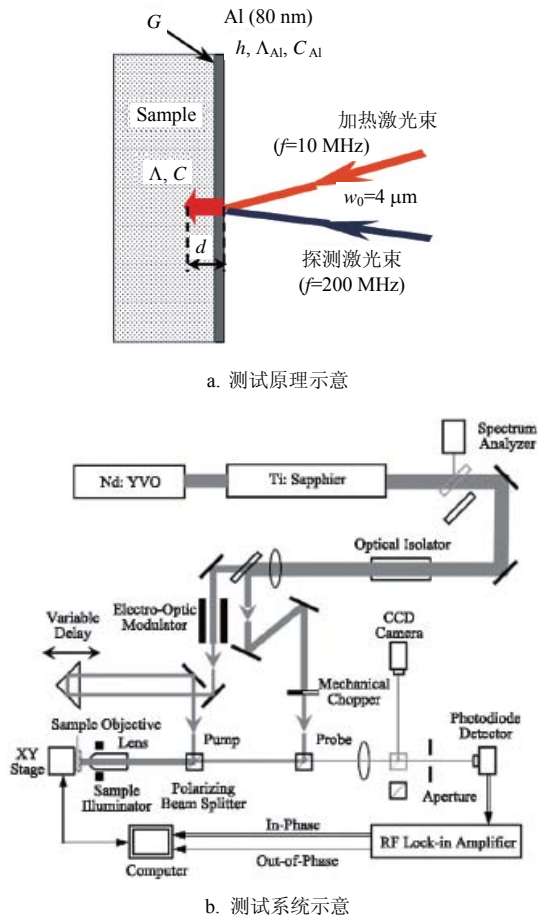
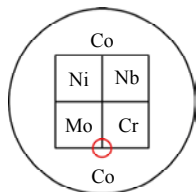


图17 飞秒激光热力学测试系统

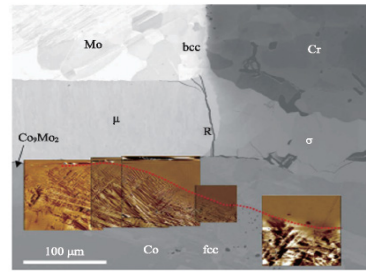
2.2.5 高通量微区磁学表征

高通量实验中主要的微区磁学性能表征工具包括: 磁力显微镜、扫描霍尔效应探针、扫描磁光克尔效应成像系统、超导量子干涉器件扫描显微镜^[101]等。需注意的是, 在进行高通量微区磁学表征时, 需施加外部磁场才能得到材料样品库各样品点饱和磁化性能, 否则, 所得数据为材料样品库的残余磁化参数。

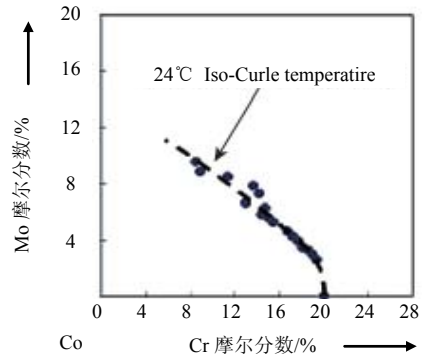
文献 [18] 利用磁力显微镜 (magnetic force microscope, MFM) 对 Co-Cr-Mn-Nb-Ni 多元扩散节样品库富 Co 区域进行了磁学特性表征, 如图 18 所示。图 18b 为 Co-Cr-Mo 三元结处富 Co 区域扫描电子显微镜背散射图片, 可见其中的铁磁区域与顺磁区域边界明显。对该边界进行介电常数测量, 得到该边界上在居里温度与成分点分布情况, 如图 18c 所示。



a. 红色圆圈标注区域为 Co-Cr-Mo 三元扩散结



b. Co-Cr-Mo 三元扩散结磁力显微镜成像与其扫描电子显微筒背散射电子成像的叠加图像



c. 铁磁/顺磁边界处居里温度-样品组分关联性

图18 应用磁力显微镜研究Co-Cr-Mo三元体系居里温度和组分关系示意图

2.2.6 大科学装置

大科学装置经过多年的发展, 为材料高通量实验技术的发展奠定了重要的硬件基础。材料高通量实验中涉及的材料样品库, 具有较高的空间分辨率, 对表征手段要求具有微区、快速表征的性能, 传统的实验室表征设备在这些方面具有较大的局限性。大科学装置因其具有高亮度、高时空分辨率等特性, 特别适合快速表征材料高通量实验中产生的大量样品, 真正发挥其快速、精确、高效的特点。其中“同步辐射光源”和“散裂中子源”是在材料研究中最具代表性的大科学装置。

基于“同步辐射光源”可利用高通量X射线衍射技术、高通量X射线吸收精细结构分析技术、高通量硬X射线微聚焦分析技术、工程材料硬X射线原位表征技术、高通量小角散射技术、扫描X射线光电谱技术、高通量红外测量技术、同步辐射X射线成像技术、光电子能谱技术、时间分辨技术等材料表征技术, 对材料样品库进行材料成分、晶体结构、近邻结构、电子结构等材料性能快速、精确的表征^[102]。

基于“散裂中子源”可对材料样品实施中子全散射、中子工程材料探测、磁性中子散射、电子材料全能谱中子测试、中子成像等材料表征, 实现对

高通量材料样品的磁学性能、轻元素占位替位等信息的快速、准确掌握^[103]。

采用大科学装置进行高通量材料表征早有记载。文献[104]基于同步辐射X射线荧光、X射线衍射和近边吸收谱,针对稀土荧光材料 $\text{Gd}(\text{La},\text{Sr})\text{AlO}_3:\text{Eu}$ 组合材料样品库的物质成分、晶格结构与稀土元素Eu在材料中的电子结构进行了快速表征。文献[105]利用同步辐射X射线衍射技术对Fe-Co-Ni材料样品库进行了快速扫描表征,成功发现了用实验室光源未能发现的2个非晶区域。文献[106]利用同步辐射X射线衍射技术与同步辐射X射线荧光技术,针对Bi-V-Fe氧化物样品库进行了高通量表征,成功得到了该体系伪连续相图。除了上述工作以外,由于大科学装置超高的亮度和时空分辨率,还可以用于材料瞬态和动态的高通量实验研究,可实时原位表征材料样品库在样品制备、测试以及服役过程中,成分、结构、元素价态,甚至样品性能演化等关键信息。

3 高通量材料计算与数据库

按照“材料基因组技术”的研发理念,为实现新材料研发由“经验指导实验”传统模式向“理论预测、实验验证”的新模式转变,高通量材料计算模拟、材料基因数据库技术与高通量实验技术同样重要。

材料基因组技术中所指的高通量计算,是指利用超级计算平台与多尺度集成化、高通量并发式材料计算方法和软件相结合,实现大体系材料模拟、快速计算、材料性质的精确预测和新材料的设计,提高新材料筛选效率和设计水平,为新材料的研发提供理论依据。其中并发式材料计算方法包括第一原理计算方法、计算热力学方法、动力学过程算法等,跨越原子模型、简约模型和工程模型等多个层次,并整合了从原子尺度至宏观尺度等多尺度的关联算法^[107]。

材料数据分为计算数据和实验数据。长期以来,材料数据研究处于单打独斗和小规模的“数据制造—简单处理”模式,往往采用图表和统计方法等传统低通量人工数据处理方法,针对单次或数次计算、实验得出的少量数据进行分析,并对其规律进行猜想和提出经验公式,无法严谨预测和深度挖掘材料本质科学规律,造成材料研究经验结论多于理论的现状,无法完成从“试错”材料研究向材料理性设计的转变,同时也使得相同工作盲目重复进行,极大地浪费了有限的科研资源。为解决上述问题,目

前国际上已有多个国家建立了跨机构材料基因数据库,将计算数据与实验数据实时全面地搜集储存和共享,以便深度发掘有用信息和规律。

美国麻省理工学院建立的Materials Project数据库^[108],主要集中在无机固体上,尤其以锂离子电池材料为主。Materials Project利用密度泛函理论(density functional theory)收集的巨型数据库来预测模拟物质模型的实际属性。目前该数据库里保存了大约10万种可能存在的材料。为了充分发挥这些数据在新材料研发中的作用,研究人员用人工筛选结合机器学习的方式来探索这些数据间蕴含的材料本质性能规律。Materials Project采用分布式计算的原理,使用者可以通过在电脑上下载一个程序来进行运算并返还结果。

美国哈佛大学清洁能源计划建立起来的Molecular Space数据库^[109]也是基于密度泛函理论,采用人工加机器学习的方式来挖掘数据库的潜力。目前,Molecular Space数据库在网上发布了230万种元素组合供研究人员使用。

日本国立材料科学研究所建立的材料数据库^[110]是在其原有的11个材料数据库基础上整合建立的,涵盖了聚合物、无机非金属材料、金属材料、超导材料、复合材料以及扩散等内容,是目前世界上最大的、最全的材料数据库系统。目前,其含有数据库及应用系统已达到20个,包括8个材料基本性能数据库,3个工程应用数据库,5个在线结构材料数据库以及4个数据库应用系统。目前注册用户超过80 000名,分别来自149个国家的21 228个组织机构。

4 电子科技大学在材料基因组技术方向的相关工作

电子科技大学在李言荣院士的带领下全程参与了中国版“材料基因组计划”的论证和立项,是国内最早参与国家材料基因组技术发展规划、建议和项目研究的单位之一。

2012年李言荣院士作为低维材料小组组长参与起草了中国工程院的材料基因工程重大咨询报告《材料科学系统工程——中国版材料基因组计划》;所在团队于2015年获得国家第一个关于材料基因组技术的863计划项目资助,开展“生物医用材料及低维半导体材料的高通量设计、制备与表征”的研究,并发展了二维材料迁移率的高通量计算方法;2016年所在团队承担了国家重点研发计划首批试点专项中“材料基因工程关键技术与支撑平台专项”的“低

维组合材料芯片高通量制备及快速筛选关键技术与装备”项目。

本文作者及其团队也是中国材料基因组计划的重要参与者。向勇教授曾参与组织2012年中国工程院“高通量组合材料制备与表征平台技术”专题研讨会,参与起草了中国工程院《材料科学系统工程——中国版材料基因组计划》和中国科学院《实施材料基因组计划,推进我国高端制造业材料发展》等“中国版材料基因组计划”战略咨询报告,作为子课题负责人承担了“基于材料基因工程的高通量设计、制备与表征技术”863项目课题“电磁波频谱响应材料的高通量制备与表征技术”,并参与组织了科技部重点研发计划材料基因工程专项的申报工作。在材料基因组关键技术领域的代表性成果包括:带领团队与宁波英飞迈材料科技有限公司项晓东博士等合作开发了我国完全自主知识产权的48靶离子束溅射材料芯片制备系统、国内首台磁控溅射材料芯片制备系统和超声雾化喷涂电化学芯片制备系统等材料基因工程专用材料制备装备,以及扫描衰减微波探针显微镜、高通量扫描阻抗探针仪和高通量电化学实验数据智能处理系统等多台填补国内空白的高通量表征装备;其中,高通量电化学实验数据智能处理系统已经进入测试阶段,磁控溅射高通量组合材料芯片制备系统可实现最大100个/mm²的样品制备和掩模真空下的自动切换,设计的纳米/亚纳米超薄叠层薄膜沉积的方法可实现多元材料原子尺度的材料均匀混合。目前,本团队正在将材料基因组技术应用于锂离子电池、太阳能电池和高性能合金等领域。其中高安全高密度凝胶固态锂电池已进入中试。

5 结束语

材料基因组技术是近年来全球新材料研发方法的革命,在美国被列为国家发展战略,在我国被列入新材料重大科技专项的重要主题之一。材料基因组技术是材料研发新理念与高性能计算、材料基因芯片、大数据、互联网+等现代信息技术深度融合的产物,是典型的多学科交叉,是新兴学科生长点。材料基因组技术旨在数十倍乃至数百倍地加速新材料从研发到应用的进程,提高效率,降低成本,支撑包括电子信息、能源环保、航空航天等先进制造业的发展,是国民经济和国家安全的重要保障。

我校在材料基因芯片、大数据、互联网+等电子信息技术方向处于国内优势地位。未来,通过相关优势学科的交叉融合,抓住材料基因组技术这一战

略性前沿新兴领域的发展机遇,我校有望建设国际一流的材料基因组技术研究平台和队伍,突破国家和国民经济亟需的关键新材料技术瓶颈,为我校“一校一带”发展战略提供强有力支撑。

参 考 文 献

- [1] WHITE A. The materials genome initiative: One year on[J]. MRS Bulletin, 2012, 37(8): 715-716.
- [2] HOLDREN J P. Materials genome initiative for global competitiveness[R]. Washington D C, USA: NSTC, 2011.
- [3] 王海舟, 汪洪, 丁洪, 等. 高通量材料实验与表征[J]. 科技导报, 2015, 33(10): 31-49.
WANG Hai-zhou, WANG Hong, DING Hong, et al. High throughput experimentation for materials genome[J]. Science & Technology Review, 2015, 33(10): 31-49.
- [4] 项晓东, 汪洪, 向勇, 等. 组合材料芯片技术在新材料研发中的应用[J]. 科技导报, 2015, 33(10): 64-78.
XIANG Xiao-dong, WANG Hong, XIANG Yong, et al. Applications of combinatorial material chip technology in research and development of new materials[J]. Science & Technology Review, 2015, 33(10): 64-78.
- [5] 汪洪, 向勇, 项晓东, 等. 材料基因组技术—材料研发新模式[J]. 科技导报, 2015, 33(10): 13-19.
WANG Hong, XIANG Yong, XIANG Xiao-dong, et al. Materials genome enables research and development revolution[J]. Science & Technology Review, 2015, 33(10): 13-19.
- [6] KENNEDY K, STEFANSKEY T, DAVY G, et al. Rapid method for determining Ternary Alloy phase diagrams[J]. Journal of Applied Physics, 1965, 36: 3808.
- [7] MILLER N C, SHIRN G A, SONG B S, et al. Co-sputtered Au-SiO₂ cermet films[J]. Applied Physics Letters, 1967, 10: 86.
- [8] HANAK J J, GITTLEMAN J I, PELLICANE J P, et al. The effect of grain size on the superconducting transition temperature of the transition metals[J]. Physics Letters, 1969, 30A: 201.
- [9] SAWATZKY E, KAY E. Cation deficiencies in rf sputtered gadolinium iron garnet films[J]. Journal of Research Development, 1969, 9: 696.
- [10] HANAK J J. The “multiple-sample concept” in materials research: Synthesis, compositional analysis and testing of entire multicomponent systems[J]. Journal of Materials Science, 1970, 5(11): 964-971.
- [11] XIANG Xiao-dong, TAKEUCHI I. Combinatorial materials synthesis[M]. New York: Marcel Dekker Inc, 2003.
- [12] TONEGOWA S. Somatic generation of antibody diversity[J]. Nature, 1983, 302: 575.
- [13] BRICENO G, CHANG H. A class of cobalt oxide magnetoresistance materials discovered with combinatorial synthesis[J]. Science, 1995, 270: 273-275.
- [14] XIANG X D, SUN X, BRICENO G, et al. A combinatorial approach to materials discovery[J]. Science, 1995, 268(5218): 1738-1740.

- [15] SUN X D, XIANG X D. New phosphor (Gd_{2-x}Zn_x)O_{3-δ}:Eu³⁺ with high luminescent efficiency and superior chromaticity[J]. *Applied Physics Letters*, 1998, 72(5): 525-527.
- [16] CHANG H, GAO C, TAKEUCHI I, et al. Combinatorial synthesis and high throughput evaluation of ferroelectric/dielectric thin-film libraries for microwave applications[J]. *Applied Physics Letters*, 1998, 72(18): 2185-2187.
- [17] WANG J, YOO Y, GAO C, et al. Identification of a blue photoluminescent composite materials from a combinatorial library[J]. *Science*, 1998, 279(5357): 1712-1714.
- [18] ZHAO J C, JACKSON M R, PELUSO L A, et al. A diffusion multiple approach for the accelerated design of structural materials[J]. *MRS Bulletin*, 2002, 27(4), 324-329.
- [19] 亚申科技. 亚申高通量实验设备加速您的创新[EB/OL]. [2016-05-01]. <http://www.yashen-ht.com>.
YASHENTECH. Yashen high throughput experiment will accelerate you innovation[EB/OL]. [2016-05-01]. <http://www.yashen-ht.com>.
- [20] EID J, LIANG H, GEREIGE I, et al. Combinatorial study of NaF addition in CIGSe films for high efficiency solar cells[J]. *Progress in Photovoltaics: Research and Applications*, 2015, 23(3): 269-280.
- [21] 英飞迈. 高通量装备推动新材料跨越式发展[EB/OL]. [2016-05-01]. <http://infinitematerials.com/cn/fangan.php>.
Infinitematerials. High throughput equipment will promote the cross-development of new materials[EB/OL]. [2016-05-01]. <http://infinitematerials.com/cn/fangan.php>.
- [22] HOLDREN J P. Report on the president on ensuring American leadership in advanced manufacturing[R]. Washington, D C: PCAST, 2011.
- [23] 李楠楠, 沈一笋, 臧亮, 等. 人类基因组计划对材料基因组计划的启发[J]. *中国材料进展*, 2016, 35: 156.
LI Nan-nan, SHEN Yi-sun, ZANG Liang, et al. Inspiration of the human genome project on materials genome project[J]. *Materials China*, 2016, 35: 156.
- [24] 向勇, 闫宗楷, 张晓琨, 等. 面向材料基因工程的高通量实验技术进展[C]//2015新材料国际发展趋势高层论坛. 上海: 2015新材料国际发展趋势高层论坛组委会, 2015.
XIANG Yong, YAN Zong-kai, ZHANG Xiao-kun, et al. Advancement of high-throughput experimentation for materials genomics[C]//2015 International Forum of Advanced materials. Shanghai: The organizing committee of 2015 International Forum of Advanced materials, 2015.
- [25] YOO Y K, XUE Q, CHU Y S, et al. Identification of amorphous phases in the Fe-Ni-Co ternary alloy system using continuous phase diagram material chips[J]. *Intermetallics*, 2006, 14(3): 241-247.
- [26] XIANG X-D. High throughput synthesis and screening for functional materials[J]. *Applied Surface Science*, 2004, 223(1-3): 54-61.
- [27] CHANG K S, GREEN M L, SUEHLE J, et al. Combinatorial study of Ni-Ti-Pt ternary metal gate electrodes on HfO₂ for the advanced gate stack[J]. *Applied Physics Letters*, 2006, 89(14): 142108.
- [28] CHRISTEN H M, SILLIMAN S D, HARSHAVARDHAN K S. Continuous compositional-spread technique based on pulsed-laser deposition and applied to the growth of epitaxial films[J]. *Review of Scientific Instruments*, 2001, 72(2): 2673-2678.
- [29] CHRISTEN H M, ROULEAU C M, OHKUBO I, et al. An improved continuous compositional-spread technique based on pulsed-laser deposition and applicable to large substrate areas[J]. *Review of Scientific Instruments*, 2003, 74(9): 4058-4062.
- [30] POTYRAILO R A, MORRIS W G. Multifunctional sensor system for high-throughput primary, secondary, and tertiary screening of combinatorial materials[J]. *Review of Scientific Instruments*, 2004, 75(6): 2177-2186.
- [31] FRANK T, LIANG H. Techniques for combinatorial molecular beam epitaxy[J]. *Review of Scientific Instruments*, 2005, 76(6): 062206.
- [32] LONG C J, SIMPERS J H. Rapid structural mapping of ternary metallic alloy systems using the combinatorial approach and cluster analysis[J]. *Review of Scientific Instruments*, 2007, 78(7): 072217.
- [33] GREGOIRE J M, VAN DOVER R B. Getter sputtering system for high-throughput fabrication of composition spreads[J]. *Review of Scientific Instruments*, 2007, 78(7): 072212.
- [34] MCDOWELL M G, HILL I G. Rapid thermal conductivity measurements for combinatorial thin films[J]. *Review of Scientific Instruments*, 2013, 84(5): 053906.
- [35] SURAM S K, ZHOU L. Combinatorial thin film composition mapping using three dimensional deposition profiles[J]. *Review of Scientific Instruments*, 2015, 86(3): 033904.
- [36] 赵继成. 材料基因组计划中的高通量实验方法[J]. *科学通报*, 2013, 58(35): 3647-3655.
ZHAO Ji-Cheng. High throughput experimental tools of materials genome initiative[J]. *Chinese Science Bulletin*, 2013, 58(35): 3647-3655.
- [37] 王薪, 朱礼龙, 方姣, 等. 基于“材料基因组工程”的3种方法在镍基高温合金中的应用[J]. *科学导报*, 2015, 33(10): 79-86.
WANG Xin, ZHU Li-long, FANG Jiao, et al. Applications of "materials genome engineering" based methods in Nickel-based superalloys[J]. *Science & Technology Review*, 2015, 33(10): 79-86.
- [38] ZHAO Ji-cheng, ZHENG Xuan, CAHILL D G. High-Throughput measurements of materials properties[J]. *Journal of the Minerals Metals & Materials Society*, 2011, 63(3): 40-44.
- [39] SUN T X, XIANG X D, TAKEUCHI I. Combinatorial materials synthesis[M]. New York: Dekker, 2003.
- [40] LIU X, SHEN Y, YANG R, et al. Inkjet printing assisted synthesis of multicomponent mesoporous metal oxides for ultrafast catalyst exploration[J]. *Nano Letters*, 2012, 12(11): 5733-5739.
- [41] GREGOIRE J M, MCLUSKEY P J, DALE D, et al. Combining combinatorial nanocalorimetry and X-ray diffraction techniques to study the effects of composition

- and quench rate on Au-Cu-Si metallic glasses[J]. *Scripta Materialia*, 2012, 66(3-4): 178-181.
- [42] LEE D, SIM G, XIAO K, et al. Scanning AC nanocalorimetry study of Zr/B reactive multilayers[J]. *Journal of Applied Physics*, 2013, 114(21): 214902.
- [43] FLEISCHAUER M D, TOPPLE J M, DAHN J R. Combinatorial investigations of Si- M (M=Cr + Ni, Fe, Mn) thin film negative electrode materials[J]. *Electrochemical and Solid-State Letters*, 2005, 8(2): A137-A140.
- [44] REEVES W H, SKRYABIN D V, BIANCALANA F, et al. Transformation and control of ultra-short pulses in dispersion-engineered photonic crystal fibres[J]. *Nature*, 2003, 424(6948): 511-515.
- [45] WEI T, XIANG X D, WALLACE FREEDMAN W G, et al. Scanning tip microwave near-field microscope[J]. *Applied Physics Letters*, 1996, 68(24): 3506-3508.
- [46] FUJIMOTO K, KATO T, ITO S, et al. Development and application of combinatorial electrostatic atomization system "MistCombi": High-throughput preparation of electrode materials[J]. *Solid State Ionics*, 2006, 177(26-32): 2639-2642.
- [47] MAO S S. High throughput growth and characterization of thin film materials[J]. *Journal of Crystal Growth*, 2013, 379: 123-13.
- [48] BERGH S, GUAN S, HAGEMeyer A, et al. Gas phase oxidation of ethane to acetic acid using high-throughput screening in a massively parallel microfluidic reactor system[J]. *Applied Catalysis A: General*, 2003, 254(1): 67-76.
- [49] SCHUTH, F. Heterogene katalyse. schlüsseltechnologie der chemischen industrie[J]. 2006, 40(2): 92-103.
- [50] BERGH S, GUAN S, HAGEMeyer A, et al. Gas phase oxidation of ethane to acetic acid using high-throughput screening in a massively parallel microfluidic reactor system[J]. *Applied Catalysis A: General*, 2003, 254(1): 67-76.
- [51] GASPARINI G, MOLIN M D, PRINS L J. Dynamic approaches towards catalyst discovery[J]. *European Journal of Organic Chemistry*, 2010, 2010(13): 2429-2440.
- [52] BERCAW J E, DAY M W. Robotic lepidoptery: Structural characterization of (mostly) unexpected palladium complexes obtained from high-throughput catalyst screening[J]. *Organometallics*, 2009, 28(17): 5017-5024.
- [53] VRIAMONT N, GOVAERTS B. Design of a genetic algorithm for the simulated evolution of a library of asymmetric transfer hydrogenation catalysts[J]. *Chemistry a European Journal*, 2009, 15(25): 6267-6278.
- [54] LEFORT L, BOOGERS J. Rapid identification of a scalable catalyst for the asymmetric hydrogenation of a sterically demanding aryl enamide[J]. *Organic Process Research and Development*, 2010, 14(3): 586-573.
- [55] GOUDRIAAN P E, VAN L P. Libraries of bidentate phosphorus ligands; synthesis strategies and application in catalysis[J]. *European Journal of Inorganic Chemistry*, 2008, 19: 2939-2958.
- [56] KOLB H C, FINN M G. Click chemistry: Diverse chemical function from a few good reactions[J]. *Angewandte Chemie International Edition*, 2001, 40(11): 2004-2021.
- [57] TOMOE C W, MELDAL M. Peptidotriazoles: copper(i)-catalyzed 1,3-dipolar cycloadditions on solid-phase[C]//The Wave of The Future, Proceedings of the Second International and the Seventeenth American Peptide Symposium. San Diego, CA, USA, 2001: 263-264.
- [58] UTTAMCHANI M, LU C, YAO S Q. Next generation chemical proteomic tools for rapid enzyme profiling[J]. *Accounts of Chemical Research*, 2009, 42(8): 1183-1192.
- [59] KOIDA T, KONDO M. Comparative studies of transparent conductive Ti-, Zr-, and Sn-doped In₂O₃ using a combinatorial approach[J]. *Journal of Applied Physics*, 2007, 101(6): 063713.
- [60] SAITO Y, TAKAO H, TANI T, et al. Lead-free piezoceramics[J]. *Nature*, 2004, 432(7013): 84-87.
- [61] FUJINO S, MURAKAMI M, ANBUSATHAIAH V, et al. Combinatorial discovery of a lead-free morphotropic phase boundary in a thin-film piezoelectric perovskite[J]. *Applied Physics Letters*, 2008, 92(20): 202904.
- [62] CATALAN G, SCOTT J F. Physics and applications of bismuth ferrite[J]. *Advanced Materials*, 2009, 21(24): 2463-2485.
- [63] MURAKAMI M, FUJINO S. Microstructure and phase control in Bi-Fe-O multiferroic nanocomposite thin films[J]. *Applied Physics Letters*, 2006, 88(11): 112505.
- [64] COX D E, NOHEDA B. Universal phase diagram for high-piezoelectric perovskite systems[J]. *Applied Physics Letters*, 2001, 79(3): 400-402.
- [65] SUCHOMEL M R, DAVIES P K. Predicting the position of the morphotropic phase boundary in high temperature PbTiO₃-Bi(B'B'')O₃ based dielectric ceramics[J]. *Journal of Applied Physics*, 2004, 96(8): 4405-4410.
- [66] IMADA M, FUJIMORI A, TOKURA Y. Metal-insulator transitions[J]. *Reviews of Modern Physics*, 1998, 70(4): 1039-1263.
- [67] VANDOVER R B, HONG M. Intrinsic anisotropy of Tb - Fe films prepared by magnetron Co sputtering[J]. *Journal of Applied Physics*, 1985, 57(8): 3897-3899.
- [68] PRIYADARSHINI D, KONDRATYUK P. Compact tool for deposition of composition spread alloy films[J]. *Journal of Vacuum Science & Technology A*, 2012, 30(1): 011503.
- [69] YOO Y. Identification of amorphous phases in the Fe-Ni-Co ternary alloy system using continuous phase diagram material chips[J]. *Intermetallics*, 2005, 14(3): 241-247.
- [70] DEGROOT R A, MUELLER F M. New class of materials: Half-metallic ferromagnets[J]. *Physical Review Letters*, 1983, 50(25): 2024-2027.
- [71] YOO Y, XIANG X D. Combinatorial material preparation[J]. *Journal of physics: Condensed Matter*, 2002, 14: 49-78.
- [72] MCCLUSKEY P J, VLASSAK J J. Glass transition and crystallization of amorphous Ni-Ti-Zr thin films by combinatorial nano-calorimetry[J]. *Scripta Materialia*, 2011, 64(3): 264-267.
- [73] MCCLUSKEY P J, VLASSAK J J. Combinatorial nanocalorimetry[J]. *Journal of Materials Research*, 2011, 25(11): 2086-2100.

- [74] XIANG X D, SUN X, BRICENO G, et al. A combinatorial approach to materials discovery[J]. *Science*, 1995, 268(5218): 1738-1740.
- [75] CHANG H, GAO C, TAKEUCHI Y, et al. Combinatorial synthesis and high throughput evaluation of ferroelectric/dielectric thin-film libraries for microwave applications[J]. *Applied Physics Letters*, 1998, 72(17): 2185-2187.
- [76] COOPER J S, ZHANG G H, MCGINN P J. Plasma sputtering system for deposition of thin film combinatorial libraries[J]. *Review of Scientific Instruments*, 2005, 76: 062221
- [77] 项晓东. 原位实时高通量组合材料实验技术[C]//2014新材料国际发展趋势高层论坛. 西安: 2014新材料国际发展趋势高层论坛组委会, 2014: 61-70.
XIANG Xiao-dong. High throughput in-situ combinatorial materials synthesis and characterization[C]//2014 International Forum of Advanced materials. Xi'an: The organizing committee of 2014 International Forum of Advanced Materials, 2014: 61-70.
- [78] Pascal. Combinatorial research and development by a compact, high performance, and fully PC controlled system[EB/OL]. [2016-04-30]. http://www.pascal-co-ltd.co.jp/products/deppld_mcpld.html.
- [79] FISTER L, JOHNSON D C. Controlling solid-state reaction mechanisms using diffusion length in ultrathin-film superlattice composites[J]. *Journal of American Chemical Society*, 1992, 114: 4639-4644.
- [80] HORNBOSTEL M D, HYER E J, THIEL J, et al. Rational synthesis of metastable skutterudite compounds using multilayer precursors[J]. *Journal of American Chemical Society*, 1997, 119: 2665-2668.
- [81] FISTER L, LI Xiao-mei, MCCONNELL J, et al. Deposition system for the synthesis of modulated, ultrathin-film composites[J]. *Journal of Vacuum Science & Technology*, 1993, 11(6): 3014-3019.
- [82] FISTER L, JOHNSON D C, BROWN R. Synthesis of $Cu_xMo_6Se_8$ without Binary compounds as intermediates: a study using superlattices to kinetically control a solid-state reaction[J]. *Journal of American Chemical Society*, 1994, 116: 629-633.
- [83] SURYANARAYANA C. Mechanical alloying and milling[J]. *Progress Materials Science*, 2001, 46(1/2): 1-184.
- [84] CAHILL D G. Analysis of heat flow in layered structures for time-domain thermoreflectance[J]. *Review of Scientific Instrument*, 2004, 75: 5119-5223.
- [85] ZHANG X, CAHILL D G, WEAVER R, et al. Micron-scale measurements of coefficient of thermal expansion by time-domain probe beam deflection[J]. *Journal of Applied Physics*, 2008, 104: 073509.
- [86] ZHAO J C, XU Y, HARTMANN H. Measurement of an iso-curie temperature line of a CoCrMo solid solution by magnetic force microscopy imaging on a diffusion multiple[J]. *Advanced Engineering Materials*, 2012, 15(5): 321-324.
- [87] GOLL D, LOEFFLER R, HERBST J, et al. Novel permanent magnets by high-throughput experiments[J]. *The Minerals, Metals & materials Society*, 2015, 67(6): 1336-1343.
- [88] SPRINGER H, RAABE D. Rapid alloy prototyping: compositional and thermos-mechanical high throughput bulk combinatorial design of structural materials based on the example of 30Mn-1.2C-xAl triplex steels[J]. *Acta Materialia*, 2012, 60: 4950-4959.
- [89] CHEN L, BAO J, GAO C, et al. Combinatorial synthesis of insoluble oxide library from ultrafine/nano particle suspension using a drop-on-demand inkjet delivery system[J]. *Journal of Combinatorial Chemistry*, 2004, 6(5): 699-702.
- [90] Yashen Tech. High Throughput R&D technology & systems[EB/OL]. [2015-01-28]. <http://www.yashentech.com/en/pages/htrd.htm>.
- [91] CLAYHOLD J A, KERNS B M, SCHROER M D, et al. Combinatorial measurements of Hall effect and resistivity in oxide films[J]. *Review of Scientific Instruments*, 2008, 79(3): 033908.
- [92] MARTIN Y, WICKRAMASINGHE H K. Magnetic imaging by "force microscopy" with 1000 Å resolution[J]. *Applied Physics Letters*, 1987, 50(20): 1455.
- [93] VersaSCAN. Electrochemical scanning system[EB/OL]. [2016-01-28]. <http://www.princetonappliedresearch.com/Our-products/Electrochemical-Scanning-System/index.aspx>.
- [94] GAO C, DUEWAR F, XIANG X D. Quantitative microwave evanescent microscopy[J]. *Applied Physics Letters*, 1999, 75(19): 3005-300.
- [95] MCCLUSKEY P J, VLASSAK J J. Combinatorial nanocalorimetry[J]. *Journal of Materials Research*, 2011, 25(11): 2086-2100.
- [96] LEE D, SIM G, XIAO K, et al. Scanning AC nanocalorimetry study of Zr/B reactive multilayers[J]. *Journal of Applied Physics*, 2013, 114(21): 214902.
- [97] HUXTABLE S, CAHILL D G, FAUCONNIER V, et al. Thermal conductivity imaging at micrometre-scale resolution for combinatorial studies of materials[J]. *Nature Materials*, 2004, 3(5): 298-301.
- [98] 麦振洪. 同步辐射光源及其应用[M]. 北京: 科学出版社, 2013.
MAI Zhen-hong. Synchrotron radiation source and its application[M]. Beijing: Science press, 2013.
- [99] XIANG X D. High throughput synthesis and screening for functional materials[J]. *Applied Surface Science*, 2004, 223(1-3): 54-61.
- [100] BRUKER. Advanced X-ray diffraction system for materials research applications[EB/OL]. [2016-04-30]. <https://www.bruker.com/products/x-ray-diffraction-and-elemental-analysis/x-ray-diffraction/d8-discover/overview.html>.
- [101] FLEET E F, CHATRAPHOORN S, WELLSTOOD F C, et al. Closed-cycle refrigerator cooled scanning SQUID microscope for room-temperature samples[J]. *Review of Science Instruments*, 2001, 72(8): 3281.
- [102] XIANG X D. High throughput approaches for combinatorial materials science based on synchrotron light source[R]. Beijing: China Building Materials Academy,

- 2013.
- [103] XIANG X D. The in-situ, real time, and high throughput study on combinatorial materials chips[R]. Beijing: China Building Materials Academy, 2014.
- [104] ISAACS E D, MARCUS M, AEPPLI G, et al. Synchrotron X-ray microbeam diagnostics of combinatorial synthesis[J]. Applied Physics Letters, 1998, 73(13): 1820-1822.
- [105] YOO Y, XUE Q, CHU Y S, et al. Identification of amorphous phases in the Fe- Ni- Co ternary alloy system using continuous phase diagram materials chips[J]. Intermetallics, 2006, 14(3): 241-247.
- [106] GREGOIRE J M, VAN CAMPEN D G, MILLER C E, et al. High-throughput synchrotron X-ray diffraction for combinatorial phase mapping[J]. Journal of Synchrotron Radiation, 2014, 21(6): 1262-1268.
- [107] 中华人民共和国科技部. 国家重点研发计划重点专项实施方案—材料基因工程关键技术与支撑平台[M]. 北京: 中华人民共和国科技部, 2015.
Ministry of Science and Technology of People's Republic of China. China national key research and development program-key technology and supporting platform of material gene engineering[M]. Beijing: Ministry of Science and Technology of People's Republic of China, 2016.
- [108] ANUBHAV J, SHYUE P O. Commentary: the materials project: a materials genome approach to accelerating materials innovation[J]. Applied Physics Letters Materials, 2013, 1: 1-11.
- [109] ROBERTO O, CARLOS A, JOHANNES H, et al. Accelerated computational discovery of high-performance materials for organic photovoltaics by means of cheminformatics[J]. Energy & Environmental Science, 2011, 4: 4849-4861.
- [110] 高志玉, 刘国权. 在线材料数据库进展与 NIMS_MatWeb 案例研究[J]. 材料工程, 2013, 15(11): 89-96.

GAO Zhi-yu, LIU Guo-quan. Recent progress of web-enable material database and a case study of NIMS and matweb[J]. Journal of Materials Engineering, 2013, 15(11): 89-96.

编辑 蒋晓

向勇(1977—), 教授, 博士生导师, 中国工程院



/中国科学院“中国版材料基因组计划”论证专家组成员(2012-2015), 教育部“新世纪优秀人才计划”(2012), 四川省“千人计划”(2013), 电子科技大学“百人计划”(2014), 美国材料研究协会银奖(2014)、GRC国际会议最佳论文

奖(2004、2005)、拉斯阿拉莫斯国家实验室主任奖(2006)等。目前主要从事材料基因组技术、固态锂电池、特种合金等方面的研究, 先后承担国家自然科学基金、工信部工业强基专项、总装预研重点基金、863计划和973计划子课题等国家级和省部级项目。近年来发表学术论文60多篇, 他引超过1 500次, 申报发明专利70多项, 国内外会议邀请报告50余次。代表性成果包括48靶离子束溅射组合材料芯片制备系统、磁控溅射组合材料芯片制备系统、超声喷涂组合电化学芯片制备系统等3台高通量制备装备, 并在高安全/高密度凝胶固态锂电池等领域形成材料基因组技术研究演示示范, 取得行业领先的技术指标。