



# 材料基因组与相图计算

ÅGREN John

Department of Materials Science and Engineering, the Royal Institute of Technology, Stockholm 10044, Sweden  
E-mail: john@kth.se

2013-06-15 收稿, 2013-08-22 接受, 2013-11-21 网络版发表

**摘要** 作为新型药品和医疗手段的发展基础, 在过去 10 年间人类基因图谱的绘制获得了巨大的研究经费支持. 2011 年 6 月, 美国总统奥巴马宣布了结合计算模拟和先进材料数据库的材料基因组计划(MGI). 遗憾的是, 在公告中对材料基因组仅仅给出了一个相当模糊的定义. 材料基因组的定义与生物基因组类似, 对于特定的材料, 它的性能取决于其化学成分(储存在基因组中的固有特性)和使用环境(外部交互作用、加工处理、使用条件). 基于此, 材料基因组可以定义为一组通过仔细评估实验数据和量子力学的计算结果而获得的, 以热力学语言描述的信息, 从中可以得到材料的相关结论. 相图计算(CALPHAD)数据库包含材料体系的热力学和动力学性质. 这些数据库可以用于预测材料的组织结构以及加工和使用条件对结构的影响, 是集成计算材料工程(ICME)的主要组成部分.

## 关键词

材料基因组  
热力学与动力学  
计算  
相图计算

美国总统奥巴马在 2011 年 6 月提出的材料基因组计划(MGI), 不但在美国而且在国际上也引发了越来越广泛的反响. 尽管材料基因组的概念起源于近半个世纪之前, 但是其内涵从 20 世纪末开始逐渐演变进化. 早在 20 世纪 90 年代, 一大批材料工程师意识到计算材料科学已经达到了一个可作为强大的实用工具的阶段. 自从 Kaufman 和 Bernstein<sup>[1]</sup>于 1970 年发表了其开创性著作, 使得相图计算(CALPHAD)技术迅速发展, 目前已成为一项可推广到工业应用的成熟技术. 此外, 从 Saunders 和 Miodownik<sup>[2]</sup>的著作可知, CALPHAD 技术的发展不仅使相平衡与相图的计算成为可能, 而且还可进行复杂材料在真实条件下的动力学模拟.

然而目前的数据库往往是基于陈旧的数据和估计值, 它们的广度和质量在实际应用中远远达不到要求. 而且经费资助机构不太情愿支持像评估和编辑材料工程数据库此类的基础性研究. 这似乎是一个悖论, 生命科学领域的情况却大不相同, 大量的人力物力投入到编制人类基因组数据库的工作中. 因

为人们知道在生命科学领域里, 一旦人类基因组数据库完成, 将可以用来提高人类健康, 例如治愈顽症和开发新的更有效的药物. 2004 年国家研究委员会(NRC)在其“加速技术转变”的报告<sup>[3]</sup>中相当明确地阐述了这个悖论. 报告的第 3 章第 42 页写道: “物理科学的学术价值体系普遍压制了工程数据库的创建, 而生命科学却推进了历史上最伟大的工程数据库——人类基因组计划的实施. 用于支持计算材料工程的基础数据库计划可以建立起物理科学和工程之间的有效联系, 这种联系将同生命科学/医药的模式一样富有成效.” 2008 年 NRC 在关于集成计算材料工程(ICME)的报告<sup>[4]</sup>中进一步强调了数据库的重要性.

遗憾的是, 在美国材料基因组计划里并没有非常精确地定义材料基因组这个概念([http://www.whitehouse.gov/sites/default/files/microsites/ostp/materials\\_genome\\_initiative-final.pdf](http://www.whitehouse.gov/sites/default/files/microsites/ostp/materials_genome_initiative-final.pdf)), 只是在报告的第 4 页模糊地阐述道: “基因组是一组以 DNA 语言编码的信息, 可作为有机体的生长和发展的蓝图. 当把基因组这个词应用在非生物语境中, 则意味着面向更大目标的基础

**引用格式:** Ågren J. 材料基因组与相图计算. 科学通报, 2013, 58: 3633–3637

Ågren J. The materials genome and CALPHAD (in Chinese). Chin Sci Bull (Chin Ver), 2013, 58: 3633–3637

性构造单元。”一方面可以认为材料基因组计划是一个相当广泛的建立材料创新体系(包括计算、实验工具和数据资料)的结合体;另一方面,材料基因组计划旨在通过注重材料结构、性质和服役性能来加速材料的开发,希望把新材料的实用化速度从目前的 10~20 年缩短为 2~3 年.因此,材料基因组计划的工作必须研究实际材料,并涉及新的实验、高质量的量子力学计算以及对实验和计算数据的仔细评估.

本文的目的是为材料基因组提供更多的背景资料,并且试图为理解材料基因组提供一个恰当的视角.另外,将会对材料基因组提出更加准确的定义,这样有利于判断哪些领域需要更深入的研究.

## 1 需求推动的研究和好奇心推动的研究

将物理科学(例如材料科学)分为应用研究和基础研究是常见的分类方法.社会需求推动着应用研究,而对于基本问题的不懈追求推动着基础研究.政治家和经费资助机构通常会认为基础研究必须通过应用研究,才能实现技术创新,这是一个线性进步的过程.毫无疑问,这就是为什么获得经费来建立 CALPHAD 数据库如此之难的原因.开发数据库具有基础研究的特征,尽管这项研究可以被认为是一项应用研究. Stokes<sup>[5]</sup>用生命科学中一个著名的例子来质疑这种线性进步的观点.他认为,在 19 世纪和 20 世纪,即使是在基础科学中,大多数的成就实际上是由科学界之外的实际需求启发和推动的.在生命科学中,这是不言而喻的,但在物理科学中却并非如此. Stokes 用二维图表取代了一维的线性链,如图 1 所示.

文献[3]中指出,我们应该借鉴生命科学的经验,将材料基因组看作是由工业生产需求推动的科学,同时将它视为由现代科学赐予的机遇来推动的一项工程.

人们会问图 1 左下方区域代表什么.没有人希望处在这个区域.然而,我们无需做太多思考就可以得



图 1 Stokes 提出的 Pasteur 象限<sup>[5]</sup>

出一个令人失望的结论,即在学术界有相当一部分的研究都落在这个象限里.这些研究既不会增加我们对自然本质的理解,也没有实际应用价值.

## 2 未来的研究方向

材料基因组计划和集成计算材料工程对于达到加速新材料的开发和应用的整体目标都是非常必要的.另外,广泛发展起来的所谓 3D 材料科学也构成了三角形的第 3 个角,如图 2 所示.值得强调的是,后者涉及了实验和理论的 2 种方法.基于陡直界面模型<sup>[6]</sup>或者扩散界面模型<sup>[7]</sup>,并结合使用 CALPHAD 和第一性原理数据的连续场近似,可以精细地预测从纳米到微米尺度的结构演变.这种模拟已经被应用到各种材料中,用来研究液体流动、应力和塑性变形的影响<sup>[8]</sup>.

在近期模型理论深化发展的同时,新的实验技术也崭露头角.这些新技术可以提供 3D 结构的详细表征.例如,使用 3D 背散射电子衍射进行非原位研究<sup>[9]</sup>和使用高能 X 射线技术进行原位研究<sup>[10]</sup>.另外,使用原子探针层析技术<sup>[11]</sup>来探索原子尺度的非原位结构,并且可以与上文提到的原子尺度的模拟结果进行比较.

## 3 材料基因组的定义

生物基因组是一组以 DNA 语言编码的信息,可作为有机体的生长和发展的蓝图.在任何时候,有机体的功效都取决于它的基因组(固有特性)和它的“经历”(外部相互作用).本文尝试对材料基因组进行更加准确的定义,在这里将材料基因组解释为使用热力学语言描述的可作为材料结构蓝本的一组信息.在任何时候,材料的性能取决于它的基因组(固有特

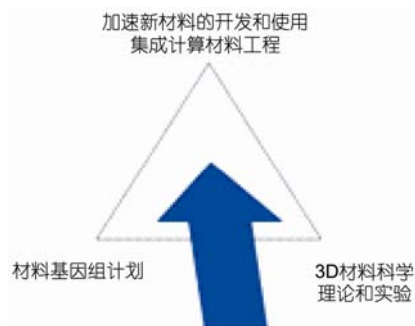


图 2 未来 5 年材料科学与工程的主要研究方向

性)和它的“经历”(外部相互作用、加工处理、使用条件). 一个基因组是通过对实验和理论数据进行仔细评估而得到的, 可以提炼出关于有机体或材料的特定结论的一组信息.

#### 4 CALPHAD: 材料基因组的基石

Gibbs<sup>[12]</sup>于 1875 年建立了热力学的理论框架. 1908 年, van Laar<sup>[13]</sup>和随后其他一些学者揭示, 通过热力学数据可以获得相图, 并在一定程度上能够得到材料在给定条件下的结构. 即倘若理解了材料的热力学语言, 其结构信息就蕴藏在它的化学成分中. CALPHAD 领域的真正起步始于 Kaufman 和 Bernstein<sup>[1]</sup>的著作, 他们采用规则溶液模型, 用比较简单形式将热力学信息参数化. 特别是晶格稳定性概念的引入, 超越了当时常用的稀溶液模型, 能够自洽地拟合数据. 但正如 Saunders 和 Miodownik<sup>[2]</sup>在其综述中指出, Kaufman 和 Bernstein 著作中的观点在当时并不能被完全接受. 他们的观点受到了来自实验工作者和理论研究者的批评, 实验工作者认为他们依据的数据不可靠, 而理论研究者认为他们的理论分析过于粗糙. 然而, 这本书却成了许多研究小组的灵感之源. 1973 年 Kaufman 创办了年会(后被称作 CALPHAD 会议), 加速了 CALPHAD 技术的发展.

在 20 世纪 70 年代初期已汇集了一些热力学数据, 如 Kubaschewski 等人<sup>[14]</sup>、Daniel<sup>[15]</sup>、Barin 等人<sup>[16]</sup>以及 Hultgren 等人<sup>[17,18]</sup>收集整理的纯元素和二元系热力学数据. 另外, 众多的研究文章也提供了大量的热力学实验数据. 使用 CALPHAD 方法可以把对多组元体系的热力学描述自洽地集成一体. 随后不久,

数种电脑程序在学术界和公众中开始使用, 并且可以和新兴的 CALPHAD 数据库相结合, 完成复杂材料(如钢和半导体)的计算. 其中一些程序是免费软件, 如 Eriksson 的 Solgasmix 程序<sup>[19]</sup>和 Lukas 程序<sup>[20]</sup>, 但另外一部分则是以商业盈利为目的开发的, 如 ASPEN(最初是用于化学模拟的免费软件)<sup>[21]</sup>, FACT<sup>[22]</sup>, Thermo-Calc<sup>[23]</sup>和 MTDATA<sup>[24]</sup>等.

随后将扩散动力学<sup>[25,26]</sup>引入到 CALPHAD 方法, 从而可以处理材料的加工和使用过程中的非平衡现象.

很明显, CALPHAD 方法具备材料基因组的所有特点, 原因如下: (1) CALPHAD 结合热力学数据库能够计算实际工程材料的平衡状态; (2) CALPHAD 结合动力学数据库可以计算模拟材料对加工处理过程和外界环境作用的响应; (3) 任何人经过培训学习都可以运用软件(免费软件或商业软件)和数据库来进行计算.

整个 CALPHAD 结构框架可以引用 Wang Yun-Shi(Ohio State University)的路线图来总结, 如图 3 所示. 同时, 基于密度泛函理论的量子力学计算, 在确定实验难以精确测量的材料性质的过程中扮演着重要角色, 具体可参见文献[27,28].

#### 5 材料基因组和 Hero-m 项目

Hero-m 中心是由位于斯德哥尔摩的瑞典皇家工学院主持的多学科交叉研究中心. 瑞典皇家工学院的研究团队在 CALPHAD 方法<sup>[2]</sup>的发展初期做出了奠基性的贡献. Hero-m 项目于 2007 年启动, 是瑞典皇家工学院和瑞典企业的合作项目. 对 Hero-m 更详

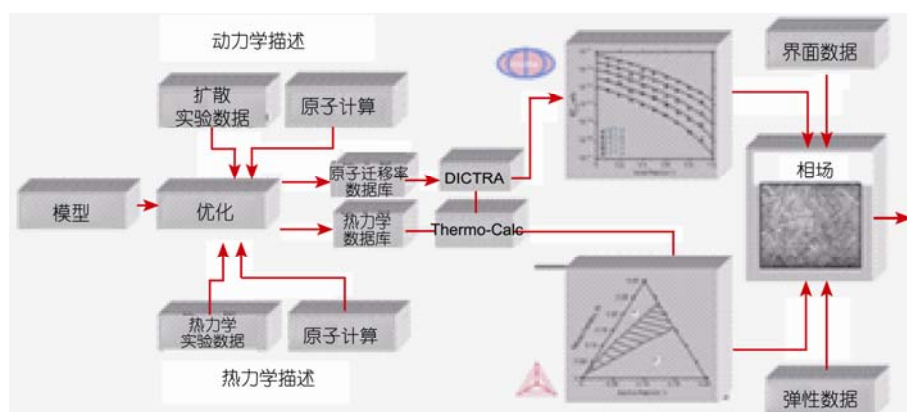


图 3 CALPHAD: 定量微观结构工程的路线图——材料基因组

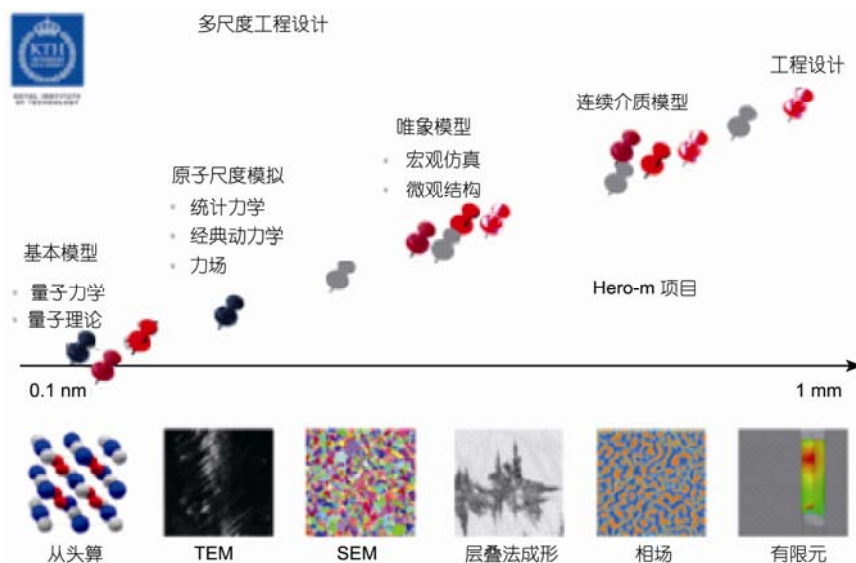


图 4 Hero-m 项目针对不同尺度的研究工作

细的介绍可以查看其主页(<http://www.hero-m.mse.kth.se/>). Hero-m 项目的目的是开发和应用新型材料设计过程中所需的 ICME 工具. Hero-m 项目与 ICME 和 MGI 密切相关, 其具体内容如图 4 所示. Hero-m 的部分课题直接针对 500 °C 以下钢的行为. 现有的 CALPHAD 数据库主要源自 1000 °C 以上温度区间的实验数据, 故并不适合于低温温区的应用. Hero-m 项目结合第一性原理、原子尺度的模拟计算和诸如原子探针层析等新的实验工作, 同时对一系列关键体系

已有的实验数据重新进行了认真细致的检验(文献[29]为其中的一个例子). 这些经过修订的数据库被用于诸如相场模拟等方法, 用于处理解释相关问题.

## 6 结论

将 CALPHAD 数据库及其配套软件作为材料基因组的重要组成部分是合理的. 美国的材料基因组计划和其他类似项目佐证了投资基础研究的必要性, 这些经费投入是开发新一代数据库的必要保证.

**致谢** 感谢瑞典皇家工学院的 Malin Selleby 教授和 Joakim Odqvist, Annika Borgenstam 副教授提出的宝贵意见. 感谢瑞典国家创新局(VINNOVA)、瑞典皇家工学院(KTH)和瑞典工业界共同为 Hero-m 项目提供经费支持.

## 参考文献

- 1 Kaufman L, Bernstein H. Computer Calculation of Phase Diagrams. New York and London: Academic Press, 1970
- 2 Saunders N, Miodownik A P. CALPHAD—A Comprehensive Guide. Oxford: Pergamon Press, 1998
- 3 National Research Council. Accelerating Technology Transition—Bridging the Valley of Death for Materials and Processes in Defense Systems. Washington DC: The National Academies Press, 2004
- 4 National Research Council. Integrated Computational Materials Engineering: A Transformational Discipline for Improved Competitiveness and National Security. Washington DC: The National Academies Press, 2008
- 5 Stokes D E. Pasteur's Quadrant—Basic Science and Technological Innovation. Washington DC: Brookings Institution Press, 1997
- 6 Borgenstam A, Höglund L, Ågren J, et al. DICTRA, a tool for simulation of diffusional transformation in alloys. J Phase Equilib, 2000, 21: 269–280
- 7 Villanueva W, Grönham K, Amberg G, et al. Multicomponent and multiphase modeling and simulation of reactive wetting. Phys Rev E, 2008, 77: 056313
- 8 Yeddu K H, Malik A, Ågren J, et al. Three-dimensional phase-field modeling of martensitic microstructure evolution in steels. Acta Mater, 2012, 60: 1538–1547

- 9 Calcagnotto M, Ponge D, Demir E, et al. Orientation gradients and geometrically necessary dislocations in ultrafine grained dual-phase steels studied by 2D and 3D EBSD. *Mater Sci Eng A*, 2010, 527: 2738–2746
- 10 Liss K L, Bartels A, Schreyer A, et al. High-energy X-rays: A tool for advanced bulk investigations in materials science and physics. *Text Microstruct*, 2003, 35: 219–252
- 11 Miller M K, Forbes R G. Atom probe tomography. *Mater Charact*, 2009, 60: 461–469
- 12 Gibbs J W. *Collected Works*. New Haven: Yale University Press, 1948
- 13 van Laar J J. Melting or solidification curves in binary system. *Z Phys Chem*, 1908, 63: 216
- 14 Kubaschewski O, Evans E L L, Alcock C B. *Metallurgical Thermochemistry*. Oxford: Pergamon Press, 1967
- 15 Daniel R S. *JANAF Thermochemical Tables*. Dow Chemical Company: Clearinghouse for Federal Scientific and Technical Information, 1965
- 16 Barin I, Knacke O, Kubaschewski O. *Thermochemical Properties of Inorganic Substances*. Berlin, Heidelberg and New York: Springer-Verlag, 1977
- 17 Hultgren R, Desai P D, Hawkins D T, et al. *Selected Values of the Thermodynamic Properties of the Elements*. Metals Park Ohio: American Society for Metals, 1973
- 18 Hultgren R, Desai P D, Hawkins D T, et al. *Selected Values of the Thermodynamic Properties of Binary Alloys*. Metals Park Ohio: American Society for Metals, 1973
- 19 Eriksson G. Thermodynamic studies of high temperature equilibria. *Chem Scr*, 1975, 8: 100–103
- 20 Lukas H L, Henig E T, Zimmermann B. Optimization of phase diagrams by a least squares method using simultaneously different types of data. *Calphad-Comput Coupling Ph Diagrams Thermochem*, 1977, 1: 225–236
- 21 Evans L B, Boston J F, Britt H I, et al. ASPEN: An advanced system for process engineering. *Comput Chem Eng*, 1979, 3: 319–327
- 22 Pelton A D, Bale C W. Computational techniques for the treatment of thermodynamic data in multicomponent systems and the calculation of phase equilibria. *Calphad-Comput Coupling Ph Diagrams Thermochem*, 1977, 1: 253–273
- 23 Sundman B, Jansson B, Andersson J O. The Thermo-Calc databank system. *Calphad-Comput Coupling Ph Diagrams Thermochem*, 1985, 9: 153–190
- 24 Davies R H, Dinsdale A T, Gisby J A, et al. MTDATA—Thermodynamic and phase equilibrium software from the national physical laboratory. *Calphad-Comput Coupling Ph Diagrams Thermochem*, 2002, 26: 229–271
- 25 Andersson J O, Ågren J. Models for numerical treatment of multicomponent diffusion in simple phases. *J Appl Phys*, 1992, 72: 1350–1355
- 26 Campbell C E, Boettinger W J, Kattner U R. Development of a diffusion mobility database for Ni-base superalloys. *Acta Mater*, 2002, 50: 775–792
- 27 Razumoskiy V I, Ruban A V, Korzhavyi P A. Effect of temperature on the elastic anisotropy of pure Fe and Fe<sub>0.9</sub>Cr<sub>0.1</sub> random alloy. *Phys Rev Lett*, 2011, 107: 205504
- 28 Andersson D A, Simak S I, Skorodumova N V, et al. Optimization of ionic conductivity in doped ceria. *Proc Natl Acad Sci USA*, 2006, 103: 3518–3521
- 29 Xiong W, Hedström P, Selleby M, et al. An improved thermodynamic modeling of the Fe-Cr system down to zero Kelvin coupled with key experiments. *Calphad-Comput Coupling Ph Diagrams Thermochem*, 2011, 35: 355–366