

ICS 01.040.01
CCS A 20



团 体 标 准

T/CSTM 00839—2022

材料基因工程 术语

Materials genome engineering - Terminology

2022-08-29 发布

2022-11-29 实施

中关村材料试验技术联盟

前　　言

本文件参照 GB/T 1.1-2020《标准化工作导则 第1部分：标准化文件的结构和起草规则》和 GB/T 20001.1《标准编写规则 第1部分：术语》的规定起草。

请注意本文件的某些内容可能涉及专利。本文件的发布机构不承担识别专利的责任。

本文件由中国材料与试验团体标准委员会材料基因工程领域委员会（CSTM/FC97）提出。

本文件由中国材料与试验团体标准委员会材料基因工程领域委员会通则技术委员会（CSTM/FC97/TC01）归口。

引　　言

材料基因工程是材料研发的新趋势。近年随着对材料的深入认识、快速发展的人工智能、数据库与材料研发相结合，出现这一新型的研究范式，即以数据驱动的科学第四范式。同时，围绕材料基因工程领域随之涌现，层出不穷的各类新术语。然而材料基因工程发展目前尚处于初级阶段，各类术语表述不一，同一术语表述不同。从科学发展过程可以看出，只有标准的术语才能保证行业规范和健康发展。所以统一术语将有助于推动材料基因工程发展，促进材料学术交流，方便文献检索，推动材料数据库建设，因此有必要建设术语标准。

从科学化、标准化、规范化角度，收集和统计材料设计、开发、生产、计算、表征、数据、应用到评价等各环节中的术语，对材料数据生产、采集、汇交、存储、检索、交互、挖掘、计算、安全、质量、共享、知识产权等各方面起到标准约束和统一要求。

本术语标准收集的词条来自于从 2008 年以来，Web of Science 引文索引数据库、专利数据库、标准数据库、国内外学术会议数据库检索统计的高频词。从这些材料基因工程领域使用频繁的术语中剔除了常见材料术语，保留材料基因工程相关紧密的术语。材料基因工程是一种新兴的材料研究模式，具有高度学科交叉性和学术前瞻性。为了体现这些特性，术语选择原则是必须体现材料基因工程的特点和热点方向。

本标准收集的术语根据通则类、计算类、数据类、制备类、表征类、应用类分成 6 类术语。在术语基础上衍生的词条以同一索引号下多级编号，形成分层关系。通过分类和分层实现材料基因工程术语体系建设。

术语建设必须具备开放性。术语体系建设不是一蹴而就，一劳永逸，需要不断更新和扩展，所以本术语标准将与时俱进，调整和补充材料基因工程领域的术语，保证实时体现材料基因工程特点。

通过建立材料基因工程术语标准，实现示范材料的通用标准、分类标准以及技术标准，从而形成材料的系列术语体系，既反映材料基因工程的热点和特点，又支持材料数据库技术研究和大数据技术研究工作，共同支撑新材料数据平台的建设，提升新材料产业自主创新能力和服务能力。

材料基因工程 术语

1 范围

本文件界定了材料基因工程领域中的通用类、计算类、数据类、制备类、表征类、应用类术语规范性表述。

本文件适用于材料基因工程领域的科学研究、教学和应用。

2 规范性引用文件

本文件没有规范性引用文件。

3. 词条分类

材料基因工程术语词条按通用类、计算类、数据类、制备类、表征类和应用类分类。

4 词条要素

4.1 词条要素构成

每类术语包括若干词条。每个词条由必需的要素构成，包括索引号，一个术语或者几个同义术语和缩写，定义。同一个术语可由不同领域的词条定义，一个词条可以包括注解或者便于理解概念的示例。

每个词条根据需要，可以增减一些要素。词条按照以下顺序包括如下要素：

- a) 索引号（对发布的本文件所有语言是公共的）
- b) 术语或者某语言中首选术语；
- c) 首选术语（根据GB/T4880.1-2005的规则标明）；
- d) 术语的缩写；
- e) 许可的同义术语；
- f) 定义的正文；
- g) 来源；
- h) 参见；
- i) 注解；
- j) 示例。

4.2 定义中黑体字的用法

术语在定义、注解、示例中用黑体字印刷时，表示该术语已在其他词条定义过。

4.3 定义中尖括弧的用法

对于一些具有普遍含义的术语，在术语定义句首，放在尖括弧的文字指明该术语的特定应用范围或者领域。

4.4 定义中方括弧的用法

定义之后的方括弧文字指明该术语定义来源，术语词典及版本详细信息参考附件文献列表。

5. 术语和定义

5.1 通用类

5.1.1

材料基因工程 materials genome engineering

一种材料科学的新型研发理念，颠覆了传统的“试错法”，以“数据+人工智能”为标志的数据驱动模式，实现新材料及工艺的理性设计和研究。在此模式下，材料研究活动围绕数据产生与数据处理展开，使掌握成分-组织-工艺-性能间关联规律的速度更快、效率更高、成本更少。

5.1.2

大数据 big data

具有体量巨大、来源多样、生成极快且多变等特征，并且难以用传统数据体系结构有效处理的包含大量数据集的数据。

注：国际上，大数据的4个特征直接用volume、variety、velocity、variability予以表述，分别赋予它们在大数据语境下的定义。

[来源：GB/T 35295—2017，2.1.1]

5.1.3

数据集 data set

集合数据记录汇聚形式。

5.1.4

元数据 meta data

关于数据的数据。

[来源：GB/T19710—2005, 4.5]

注：包括描述材料样品信息、源数据、衍生数据的数据，描述数据的内容、产生、应用、共享、联系以及其他特征，帮助人们更好获取、管理、认识、利用数据。

5.1.5

材料数据 materials data

反映材料成分、结构、性能的各类数据，来自于实验、计算、分析、文献等途径，根据数据通则标准，分为样品信息、源数据、衍生数据，可以通过数据分析和挖掘进一步建立材料性能和数据之间的联系。

5.1.5.1

材料数据集 materials dataset

面向材料应用，按照数据结构组织、存储和管理的数据集合。

5.1.5.2

数据获取 data acquisition

通过实验、表征、计算、模拟等手段，采集材料成分、组织、性能、服役相关数据的过程。

5.1.5.3

数据挖掘 data mining

对材料数据库中的数据通过统计、人工智能等算法进行抽取、转化、分析和模式化处理，从中提取有效的、新颖的、潜在有用的、最终可理解的材料信息和知识的过程。

5.1.5.4

数据查询 data access

数据访问

用户检索、浏览数据，甚至进一步利用数据潜力的过程。

5.1.5.5

数据交换 data exchange

指将源模式下的数据结构转换为目标模式下的数据结构的过程。

5.1.5.6

数据字典 data dictionary

对每个元数据元素和元数据实体中的中文名称、英文名称、缩写名、定义、数据类型、值域、约束/条件和最大出现次数等属性进行完整说明。

通常包括数据项、数据结构、数据流、数据存储和基本加工五个部分。其中数据项是数据的最小组成单位，若干个数据项可以组成一个数据结构。通过对数据项和数据结构的定义来描述数据流、数据存储的逻辑内容。

注1：(1) 数据项：是不可再分的数据单位。(2) 数据结构：反映了数据之间的组合关系。(3) 数据流：是数据结构在系统内传输的路径。(4) 数据存储：是数据结构停留或保存的地方，也是数据流的来源和去向之一。(5) 基本加工：其具体处理逻辑一般用结构化语言、判定表或判定树来描述。

注2：数据字典一般有手工建立和利用计算机辅助建立并维护两种形式。前者按各条目规范的格式印制、填写和处理卡片，建立索引目录；后者可编制程序来生成和管理字典，并在生成字典的同时建立字典的数据库文件，以便于字典的修改、查询和印刷。

5.1.5.7

数据存储 data storage

对于材料研发领域产生的各类数据进行有效存储和管理的技术。

5.1.5.8

数据评价 data evaluation

对材料数据的内容、质量、可靠性、价值、生命周期进行判断的过程

5.1.5.9

数据安全 data security

在数据的使用和交换过程中，保护在存储、处理过程中的数据不被破坏、泄露、篡改或非授权使用而采取的措施及技术。

注：可以采用一定的安全机制，按照不同等级的权限对数据进行处理，保护数据所有者的权益。

5.1.5.10

数据管理 data management

指对数据进行管理、维护、存储、评价、备份以及对其他用户授予数据访问权限等全面操作。

5.1.5.11

数据原则 data principle

指遵循FAIR的原则，FAIR是Findable（可发现），Accessible（可获取），Interoperable（可互操作），Reusable（可再利用）英文单词首字母组合。

注：参见可发现(5.1.47)，可获取(5.1.48)，可互操作(5.1.49)，可再利用(5.1.50)。

5.1.6

材料基因 materials gene

形象描述决定材料性能的基本功能单位。

注：迄今为止，材料科学尚无特定的、科学的、明确的、普遍的微观组织结构。

5.1.6.1

材料基因组 materials genome

指决定材料性能的基本功能单位集合。

注：与基因类似，材料科学尚无特定的、科学的、明确的、普遍的微观组织结构集合。

5.1.7

高通量 high throughput

在材料基因工程领域，指在较短时间内处理大量样品，支持相应数据的技术体系，具有微量、快速、灵敏和准确等特点，相关技术可应用于材料制备、材料表征、材料计算、材料筛选等方向。

5.1.7.1

高通量技术 high throughput technology

高通量方法 high throughput method

借鉴生物研究理念，材料研究中如何实现高通量、多任务、多通道、高并发等目的的技术。

5.1.7.2

高通量工艺开发 high throughput process development

为了实现快速处理目的，研发**高通量技术**（5.1.7.1）的过程。

5.1.7.3

高通量计算材料基础设施 high throughput computational materials infrastructure

通过计算机网络，将高性能计算、海量数据、和人工智能算法或工具的有效集成，建立起适合高通量材料计算筛选的信息化基础设施或者平台，包括能用于实现高通量材料计算的各种资源、软件和设备等。

5.1.7.4

高通量实验 high throughput experiment

材料基因工程方法之一，不同于传统样品制备实验手段。这一方式借鉴生物和制药研究方法，以小尺寸，大批量、并行特征的实验新型手段应用于材料研发，具有快速、灵敏、准确、高效率特点。

5.1.7.5

高通量合成 high throughput synthesis

指基于多通道、并行手段合成制备材料样品的技术和方法。

5.1.7.6

高通量制造 high throughput fabrication

指通过同步并行方式实现大批量材料生产。

5.1.7.7

高通量计算 high throughput calculation

区别于传统计算方法，能够并行大批量实现计算目标的高效率计算技术。

5.1.7.8

高通量表征 high throughput characterization

区别于传统表征方法，能够并行大批量实现材料样品分析的高效率表征技术。

5.1.7.9

高通量分析 high throughput analysis

以微板形式作为分析载体，自动化操作系统执行分析过程，灵敏快速的检测仪器采集实验结果数据，计算机分析处理实验数据，在同一时间检测数以千万的样品，并得到的相应数据的过程，它具有微量、快速、灵敏和准确等特点。

注：高通量技术常应用于测量和测试中。

5.1.7.10

高通量测量 high throughput measurement

高通量测试 high throughput testing

基于高通量测量设备或编写专门的程序，按一定流程实现材料性能或者特征的记录过程。

5.1.7.11

高通量筛选 high throughput screening

基于高通量设备对大批量的实验样品进行对比，选择优化材料成分范围的过程。

5.1.7.12

高通量计算筛选 high throughput computational screening

通过材料计算寻找、筛选、替代或优化材料组成的基本构建单元，从而“构建”新的化合物，并计算其相关物性，同时结合材料信息学相关技术将数据、代码和材料计算软件进行集成，通过数据挖掘尽可能建立起材料组分、结构和性能的定量关系模型用于指导新材料设计。

5.1.7.13

高通量搜索 high throughput search

从已有的材料数据中通过高通量技术进行数据优化，挑选最佳的材料成分、工艺参数等。

5.1.7.14

高通量处理 high throughput processing

指材料制备过程中，应用高通量技术对材料样品进行准备过程。

5.1.7.15

高通量材料模拟 high throughput materials simulation

高通量模拟 high throughput simulation

材料基因工程特征手段之一，指材料模拟基于并行、高速的平台进行，具备快速高效特点。

5.1.8

数据标识符 data identifier

标识符 identifier

标识数据的符号，通常由字母和数字以及其它字符构成，满足FAIR原则需要，实现数据之间联系。

5.1.9

样品信息 sample information

依据材料基因工程数据通则，指材料样品的成分、标识，制备条件等信息。

5.1.10

原始数据 source data

测量或计算产生的，未经处理过的数据。

[来源：T/CSTM 00120-2019，3.4，有修改]

注：也称为源数据，为避免与元数据混淆，修订称为原始数据。

5.1.11

衍生数据 derived data

对源数据或者衍生数据进行分析后产生的结果数据。

[来源：T/CSTM 00120-2019，3.5]

5.1.12

材料信息学 materials informatics

利用信息技术与技术对材料信息进行收集、存储、加工、检索、提取、交换、传输、分析、研究和应用的学科。

5.1.13

纳米材料 nanomaterials

任一外部维度、内部或表面结构处于纳米尺度（ $1\text{nm} \sim 100\text{nm}$ ）范围的材料。

注：纳米材料可以分为零维材料、一维材料、二维材料、三维材料。

[来源：GB/T 30544.1-2014，2.4]

5.1.13.1

零维材料 zero-dimensional materials

指粒径比较小的颗粒，包括团簇。常见的有纳米粒子，超细粒子，超细粉，烟粒子，人造原子，量子点，原子团簇及纳米团簇等。

5.1.13.2

一维材料 one-dimensional materials

指电子仅在一个维度的纳米尺度方向上自由运动（直线运动），如纳米线性结材料、量子线，最具代表的是碳纳米管。

5.1.13.3

二维材料 two-dimensional materials

全名称二维原子晶体材料，指电子仅可在两个维度的纳米尺度（ $1\text{nm} \sim 100\text{nm}$ ）上自由运动（平面运动）的材料，如纳米薄膜、超晶格、量子阱、石墨烯。

5.1.13.4

三维材料 three-dimensional materials

指电子可以在三个维度的纳米尺度上自由运动，如纳米粉末高压成型或控制金属液体结晶而得到的纳米晶粒结构（纳米结构材料）。

5.1.14

本体 ontology

对一个论域中存在的概念及其关系和性质进行可共享的、可形式的、可显现的描述。

注：使用该本体所建立的模型可以被其他人员或系统共享。

5.1.15

表型 phenotype

某一研究对象所能显现出的性状的总和。

5.1.16

材料研究 materials research

从事材料开发和性能改进使之得以应用的行为。

5.1.16.1

材料开发 materials development

为研究新材料或者提升已有材料性能进行的活动。

5.1.16.2

材料表征 materials characterization

运用各种技术的方式对材料成分、性能、组织等特点进行检测、观察、记录的过程。

5.1.16.3

材料发现 materials discovery

通过理论和计算预测材料的组分、结构与性能，实现新材料发现和性能拓展。

5.1.16.4

材料非线性 materials nonlinearity

指材料行为与成分、组织、物理环境之间不是简单线性关系，而是复杂、耦合关系。

5.1.16.5

材料分类 materials classification

材料按照化学组成可以分为金属材料、无机非金属材料、高分子材料和复合材料。

5.1.16.6

材料工程 materials engineering

以材料科学原理为基础，研究、开发、生产和应用各种材料的工程领域。

5.1.16.7

材料合成 materials synthesis

通过一定途径，从气态、液态或者固态的各种原材料中得到化学成分、组织及性能不同于原材料的新材料的过程。

5.1.16.8

材料科学 materials science

结合固体物理、无机化学、有机化学与物理化学等学科发展推动了物质结构和物理化学性质的研究，从而对材料制备、成分、结构与性能以及之间关系认识愈加深入的一门学科。

5.1.16.9

材料加工 materials processing

为了实现应用，对材料进行性能、形状和尺寸改变的过程。

5.1.16.10

材料检测 materials test

对原材料的成分分析、测量、无损伤检测和环境模拟测试等。

5.1.16.11

材料建模 materials modeling

为了研究材料成分、组织和性能关系建立的模型的行为和过程。

5.1.16.12

材料预测 materials prediction

通过理论模型预测材料组织、性能的行为。

5.1.16.13

材料选择 materials selection

选择满足性能要求材料的过程和手段。

5.1.16.14

材料描述符 materials descriptor

用于标识材料样品、成分、特征、性能、工艺等符号。

5.1.16.15

材料模拟 materials simulation

根据实际材料问题建立模型，对真实材料及其体系和过程进行求解计算或模拟，以获知所模拟系统的某些关键性特征的一类研究方法。

5.1.16.16

材料筛选 materials screening

从多个备选材料中，依据一定要求和规则缩小材料选择范围，寻找潜能满足需要的过程。

5.1.16.17

材料设计 materials design

通过理论和计算预测材料的组分、结构与性能的行为。

5.1.16.18

材料辨识 materials identification

在丰富的材料数据库中，通过材料数据库检索或者人工智能方式确定材料品种的过程。

5.1.16.19

材料识别 materials recognition

指应用人工智能对材料种类、特性、样品的辨别和标识。

5.1.16.20

材料分形 fractal of materials

界面失稳引起材料几何分形与界面形态的演变。

5.1.16.21

材料知识 materials knowledge

指以材料科学和认知体系，在材料基因工程领域中，指数据挖掘获得的有价值信息。

5.1.16.22

材料知识系统 materials knowledge system

材料基因工程领域中，材料数据有价值信息的体系。

5.1.16.23

材料数据库 materials database

用于材料数据存储、查询、管理、处理的数据库。在材料基因工程中，是不可或缺的重要组成部分。

5.1.16.24

数据库中的知识发现 knowledge discovery in databases; KDD

从原始数据中提炼出有意义的、简洁的知识，直接提供给使用者，是“数据挖掘”的一种更广义的说法。

注：基于数据库的知识发现(KDD)和数据挖掘还存在着混淆，通常这两个术语替换使用。KDD表示将低层数据转换为高层知识的整个过程。而数据挖掘可认为是观察数据中模式或模型的抽取。虽然数据挖掘是知识发现过程的核心，但它通常仅是数据库中的知识发现的一部分。

5.1.16.25

材料特性预测 material properties prediction

在材料基因工程领域，指基于材料物理、化学、力学方面认识，通过数学建模，数值模拟和回归等人工智能手段预测材料性能。

5.1.16.26

材料集成 materials integration

材料一体化

在材料基因工程领域，指材料计算、模拟、服役等研究活动集成。

5.1.16.27

材料基因组计划 material genome initiative; MGI

美国在2011年启动的一项科学计划，这一计划是基于材料计算指导实验的材料新型研究模式，目的在于加快研究材料进程。翻倍加快材料研发速度，减半降低材料研发成本是这一计划的特点。

5.1.17

超晶格 super lattice

由两种或多种厚度在纳米量级的半导体材料构成的周期性交替层结构。在这种结构中，相邻势阱中的电子可以互相耦合，使得原来分立的能级展宽成为微小能带。

5.1.18

成分分布 composition spread

材料成分沿着材料空间变化，常用于表示梯度材料性能与成分关系。

注：成分分布是成分数据之一，反映材料成分的数据，与样品信息有关。

5.1.19

尺寸效应 size effect

由材料整体或局部尺寸的微小化引起的机理及性能等特异性变化的现象。

5.1.20

多变量分析 multivariate analysis

针对统计资料中同时存在多个变量（或称因素、指标）时的统计分析方法。随着计算机能力提高，该方法更为普遍在材料基因工程中应用。它为统计方法的一种，是统计学的重要分支，是单变量统计的扩展。

5.1.21

多尺度 multi-scale

从原子（分子）尺度、纳观尺度、微观尺度、介观尺度、宏观尺度的不同尺度研究。

5.1.21.1

多尺度方法 multi-scale method

结合多个尺度研究材料的方法。

5.1.21.2

多尺度分析 multi-scale analysis

对材料基于微观、介观、宏观不同尺度的研究。

5.1.21.3

多尺度建模 multi-scale modeling

在材料基因工程领域，对材料进行包含原子（分子）水平、纳观尺度、微观尺度、介观尺度、宏观尺度等不同尺度耦合关联的计算机仿真行为。

5.1.21.4

多尺度模拟 multi-scale simulation

结合全部原子（分子）尺度、纳观尺度、微观尺度、介观尺度、宏观尺度或者几个尺度建模模拟材料组织和性能、服役行为等。

5.1.21.5

多尺度模型 multi-scale model

从原子尺度到微观、介观、宏观的多尺度模拟的材料模型。

5.1.21.6

多尺度设计 multi-scale design

基于微观、介观、宏观等多尺度进行材料结构设计获得期望的性能。

5.1.22

多功能材料 multifunctional materials

具备电、磁、声、光、热等多方面特性的材料。

5.1.23

多物理场 multiphysics

包括力学、热、电、磁等物理环境。

5.1.23.1

多物理场建模 multiphysics modeling

综合考虑力学、热、电、磁等物理环境下的材料性能模型。

5.1.24

多相 multi-phase

材料中具备多个不同微观组织的结构。

5.1.24.1

多相材料 multi-phase materials

指材料由多种不同组织构成。

5.1.25

多材质 multi-material

指不同物质以一定方式组合形成材料。

5.1.26

功能材料 functional materials

指通过光、电、磁、热、化学、生化等作用后具有特定功能的材料。

5.1.27

构效关系 structure-activity relationship

结构与性能之间存在直接或者间接关系。

5.1.28

关键维度 critical dimension

决定材料性能的方向。

5.1.29

合金设计 alloy design

基于元素和含量、性能的定量认识，通过模型设计合金的成分、数量，满足性能要求。

5.1.30

集成计算材料工程 integrated computational materials engineering；ICME

结合物理、化学、力学、材料等多学科对材料复杂行为进行建模和计算，实现材料设计目的。

注：基于多尺度材料模型和计算模拟集成设计材料及相关工艺，并将其应用于工程设计制作的一类方法学。有时又扼要解释为使用多尺度材料建模振兴科学工程设计的方法学。ICME主要是将计算工具得到的材料信息与工业产品性能分析和制造工艺模拟集成，与美国政府与2011年提出的材料基因组计划（Material Genome Initiative MGI）关系密切。材料基因组计划还考虑了数据驱动的作用，提出了加快研究速度和降低研究成本的目标。

5.1.31

晶体结构预测 crystal structure prediction

通过计算机软件预计晶体生长方向和晶面的能力。

5.1.32

计算材料学 computational materials science

材料科学与计算机科学的交叉学科，综合材料科学、数学、物理学、化学以及机械工程等学科而发展，是连接材料学理论与实验的桥梁，对材料组织结构和性能进行建模、模拟仿真计算和预测预报，是关于材料组成、结构、性能、服役性能的模拟与设计学科。

5.1.33

数学建模 mathematical model

根据实际问题来建立数学模型，对数学模型来进行求解，然后根据结果去解决实际问题。

5.1.34

梯度 gradient

原指是指物体或斜面倾斜、歪斜的程度，现指材料成分或者性能随深度或距离变化。

示例：梯度损伤、梯度损伤理论和梯度损伤模型。

5.1.35

拓扑 topology

研究几何图形或空间在连续改变形状后某些性质保持不变的一个学科。它只考虑物体间的位置关系而不考虑它们的形状和大小。

5.1.35.1

拓扑优化 topology optimization

一种根据给定的负载情况、约束条件和性能指标，在给定的区域内对材料分布进行优化的数学方法，是结构优化的一种。结构优化可分为尺寸优化、形状优化、形貌优化和拓扑优化。

5.1.36

相变 phase transformation

一个有大量原子或者分子构成的系统，在一定外部约束条件下达到平衡时，系统内形成一个或多个相互区别的均匀区域，称为相。当外界施加的约束条件（如温度、压强、磁场强度等）改变时，引起系统中相的数目或者相的性质发生变化的现象。

5.1.37

相图 phase diagram

在给定条件下体系中各相达到平衡后，环境约束（如温度和压力）、稳定相态、相组成及热力学变量（如化学势、摩尔焓、摩尔熵等）间相互关系的几何表达，即表示平衡条件下的系统状态图。

5.1.38

相图计算 calculation of phase diagram； CALPHAD

指运用热力学原理计算一个体系的相平衡关系和绘制相图。利用这种方法可以在已有化合物材料基础上预测和设计具有某种特定结构和性能的新材料。

5.1.39

异质材料 heterogeneous materials

由两种不同元素或者不同成分、组织的材料所构成的材料。

5.1.40

异质结 heterojunction

由两种不同元素或者不同成分材料所构成的结型材料。

注：常用于研究物质的扩散行为。

5.1.41

异质结构 heterostructure

由两种不同元素或者不同成分材料所构成的结构。

5.1.42

有序-无序转变 order-disorder transition

无序结构和有序结构间的相互转化。

注：通常高温有利于向无序相转化，低温则有利于向有序相转化。有序-无序转化会影响物质的物理性质和化学性质。

5.1.43

增材制造 additive manufacturing

3D打印 3D printing

融合了计算机辅助设计、材料加工与成型技术、以数字模型文件为基础，通过软件与数控系统将专用的金属材料、非金属材料以及医用生物材料，按照挤压、烧结、熔融、光固化、喷射等方式逐层堆积，制造出实体物品的制造技术。

5.1.44

综合分析 integrated analysis

在材料基因工程领域，结合各种分析手段对材料性能和特征行为进行研究。

注：一般指通过实验和计算两个方面进行。

5.1.45

组学 omics

生物科学发现单纯研究某一方向（基因组，蛋白质组，转录组等）无法解释全部生物医学问题，提出从整体角度出发研究人类组织细胞结构，基因，蛋白及其分子间相互的作用，通过整体分析反映人体组织器官功能和代谢的状态，为探索人类疾病的发病机制提供新的思路。

注：受此启发出现基因组(genome)和基因组学(genomics)两个名词，过去10年“组omes”和“组学omics”成为科学界的流行语，部分组学已经被确立为一个重要的知识体系和研究领域。

5.1.46

系综 ensemble

由宏观性质完全相同而微观性质各不相同的大数目体系所组成的集合。

5.1.46.1

微正则系综 microcanonical ensemble

由许多具有相同能量、粒子数、体积的体系的集合，属于系综的一种。

5.1.46.2

正则系综 canonical ensemble

它代表了许多具有相同温度的体系的集合，是统计力学中系综的一种。

5.1.47

可发现 findable

指数据及其元数据被赋予全球性唯一并持久的标识，数据被丰富的元数据所描述并在可检索的源中登记或建立索引，易于被第三方(人员与机器)方便地找到。

5.1.48

可获取 accessible

指数据及其元数据可使用标准通讯协议通过标识查询并获取。

5.1.49

可互操作 interoperable

指数据及其元数据的表达使用正式、可获得、共享和广泛使用的语言。

5.1.50

可再利用 reusable

指数据及其元数据由多种准确并相关的特征所描述，与细致的出处信息相关联并符合相关领域的标准，从而被不同用户(人员与机器)方便地使用。

5.2

计算类

5.2.1

高性能计算 high performance computing

通常指使用多台处理器组成的高性能计算系统所执行的计算。

5.2.2

有限元法 finite elements method

将连续体离散化为若干有限大小的单元体，建立模型对实际物理问题进行模拟求解的分析方法。

5.2.3

第一性原理计算 first principle calculation

根据原子核和电子互相作用的原理及其基本运动规律，运用量子力学原理，经过近似处理后直接求解薛定谔方程的算法。被广泛应用在化学、物理、生命科学和材料学等领域。

注：可以确定已知材料的结构和基础性质，并实现原子级别的精准控制，是现阶段解决实验理论问题和预测新材料结构性性能的有力工具。由于不需要开展真实的实验，极大地节省了实验成本。

5.2.3.1

从头计算 ab initio calculation

狭义指不使用经验参数，只基于电子质量，原子核质量等少数实验数据进行计算，进而获得物质分子结构和性质参数的过程。

注：与5.2.3第一性原理计算同义。

5.2.4

格子玻尔兹曼方法 lattice Boltzmann method

一种基于细观尺度模型和通过对玻尔兹曼方程进行离散，得到离散玻尔兹曼方程作为理论基础的模拟方法。

5.2.5

分子动力学 molecular dynamics; MD

一种分子模拟方法，依靠牛顿力学模拟分子体系的运动，以粒子位置和动力学信息为基础，计算体系的热力学量和进一步获得其它宏观性质。属于微观尺度的模拟方法。

5.2.5.1

高通量分子动力学计算 high throughput molecular dynamics

以高通量方式进行分子动力学模拟的方法和技术。

5.2.6

相场法 phase-field method

考虑化学场、晶体场、结构场随时间和空间变化下，以态变量离散化形式处理固态和液态相变动力学的一种微观组织模拟方法。

注：20世纪80年代中期，Langer, Caginalp提出相场模型，以克服界面追踪法的缺点，可以描述枝晶的生长过程，避免跟踪固液界面的位置与形状。在相场模型中，固/液界面不再是厚度为零的尖锐界面，而是具有一定厚度的弥散界面。相场模型的基础是Ginzburg-Landau方程，通过引入一个或一组仅在界面区域急剧变化但在空间上仍然保持光滑性的场变量—序参量场来描述不同的相(如等于1时表示固相；等于-1或0时表示液相；其他值时为界面)，并与其他场变量(如溶质场、温度场、应力场等)结合起来描述组织演化问题。

5.2.7

多场耦合 multi-field coupling

多个物理场（温度场，应力场，湿度场）相互叠加，相互影响的作用。

5.2.8

多相场 multi-phase-field

多个相在空间中的分布及其演化情况。

5.2.8.1

多相场法 multi-phase-field method

基于热力学解决材料中多相演化问题的方法。

5.2.9

原子模拟 atomistic simulation

基于原子尺度，应用量子力学理论的材料性能计算。

5.2.10

本构方程 constitutive equation

表述金属材料变形时，应力或应变对时间的变化率同应变或应变速率之间关系的物性方程，也称本构关系。它反映了材料性质等因素对上述关系的影响，是金属塑性加工力学的重要方程之一。

5.2.11

密度泛函理论 density functional theory

一种研究多电子体系电子结构的方法。密度泛函理论在物理和化学上都有广泛的应用，特别是研究分子和凝聚态的性质，是凝聚态物理计算材料学和计算化学领域最常用的方法之一。

5.2.12

能带结构 band structure

周期性晶格的量子力学电子波衍射引起的现象。材料的能带结构决定了多种特性，特别是材料电子学和光学性质。

5.2.13

均质化 homogenization

在细观尺度下对非均质材料中呈现出周期性的单胞堆积结构，以单胞作为代表性体积单元RVE，建立力学模型，利用能量极值原理计算变分，得出基本求解方程，再利用周期性条件均匀化条件及数学变换，联立求解，然后通过类比得到宏观等效的弹性系数张量，或者运用渐进展开和平均法得到细观尺度下RVE的场响应平均作为宏观整体性质。

5.2.14

自适应网格细化 adaptive mesh refinement

有限元计算中，在变化较为剧烈的区域，如大变形、激波面、接触间断面和滑移面等，网格在迭代过程不断调节细化，实现网格点分布与物理解的耦合，从而提高解的精度和分辨率的一种技术。

5.3

数据类

5.3.1

大数据挖掘 big data mining

大数据分析 big data analytics

从海量数据找到值得参考的样型或规则，转换成有价值的信息、洞察或知识，创造更多新价值。

注：参见大数据（5.1.3）。

5.3.2

机器学习 machine learning

计算机通过对数据、事实或自身经验的自动分析和综合获取知识的过程。

5.3.2.1

机器学习算法 machine learning algorithm

实现机器学习目的的计算机指令序列。

5.3.2.2

机器学习方法 machine learning method

具有通用性的解决机器学习的规则和程序。

5.3.2.3

机器学习模型 machine learning model

实现机器学习目的的抽象表示集合。

5.3.2.4

机器学习技术 machine learning technique

指机器学习的方法及方法原理。

5.3.3

迁移学习 transfer learning

一种机器学习方法，任务 A 开发模型作为初始点，重新使用在为任务 B 开发模型的过程。

5.3.4

监督学习 supervised learning

当训练样本的期望输出已知，学习目的是对新样本的输出进行预测，典型任务包括分类和回归。

5.3.5

半监督学习 semi-supervised learning

监督学习与无监督学习相结合的一种学习方法。半监督学习使用大量的未标记数据，以及同时使用标记数据，来进行模式识别工作。

5.3.6

无监督学习 unsupervised learning

对没有类别标记的样本进行学习，学习目的通常是发现数据内在结构，典型任务是聚类和降维。

5.3.7

贝叶斯统计 Bayesian statistics

英国学者托马斯·贝叶斯提出一种归纳推理的理论，后被统计学者发展为一种系统的统计推断方法，又称为贝叶斯方法。

5.3.7.1

贝叶斯推理 Bayesian inference

基于贝叶斯定理的一种推论统计方法。

5.3.7.2

贝叶斯网络 Bayesian network

一种不确定知识表达和推理领域的理论模型。

5.3.7.3

贝叶斯优化 Bayesian optimization

对贝叶斯算法进一步优化的过程。

5.3.8

大规模并行处理 massively parallel processing；MPP

将大量处理器按照一定的拓扑结构互连在一起，实现大规模计算的一种并行处理技术。

5.3.9

分类 classification

在材料基因工程领域，数据挖掘中按照种类、等级或性质分别归类。通常基于样本数据先训练构建分类函数或者分类模型（也称为分类器），具有将待分类数据项映射到某一特点类别的功能。

5.3.9.1

分类方法 classification method

在人工智能领域，各种用于分类目的方法。

5.3.9.2

分类算法 classification algorithms

用于分类目的的算法，常见有贝叶斯分类算法、决策树和神经网络分类算法。

5.3.9.3

朴素贝叶斯分类器 naive Bayesian classifier

基于贝叶斯定理，通过计算给定实例属于一个特定类的概率来对给定实例进行分类。

5.3.10

回归 regression

在材料基因工程领域，一般指研究一组随机变量(Y_1, Y_2, \dots, Y_i)和另一组(X_1, X_2, \dots, X_k)变量之间关系的统计分析方法。

注：回归与分类是人工智能两个主要研究方向。

5.3.10.1

多元回归 multivariate regression

通过对两个或两个以上的自变量与一个因变量的相关分析，建立预测模型进行预测的方法。

5.3.11

机器视觉 machine vision

通过传感器等机械、电子实现人类的可视能力，输出电子信号。

5.3.12

集成 ensemble

在材料基因工程领域，结合多个“个体学习器”的策略。

5.3.12.1

集成分类器 ensemble classifier

实现集成学习的学习器。

5.3.12.2

集成机器学习 ensemble machine learning

集成学习 ensemble learning

通过构建并结合多个学习器完成学习任务，有时也被称为多分类器系统。

5.3.13

聚类 clustering

在材料基因工程领域，采用统计分析算法实现样品或指标分类，是数据挖掘重要算法之一。

5.3.13.1

聚类分析 clustering analysis

将实际对象或抽象对象(一般指样品或指标)的集合分组为类似对象组成的多个类(簇)的分析过程。

5.3.13.2

聚类算法 clustering algorithm

研究对象(一般指样品或指标)分类问题的一种统计分析方法，也是数据挖掘的一个重要算法。

5.3.13.3

层次聚类 hierarchical clustering

一种重要的无监督学习方法。该方法通过合并和分裂途径来实现。合并时，先使每个样本各成一类，然后通过合并不同的类，来减少类别数目。分裂时，先将所有样本归入一类，然后通过后续分裂，来增加类别数目。因此，存在基于合并的层次聚类方法和基于分裂的层次聚类方法。

5.3.14

卷积神经网络 convolutional neural network

一类包含卷积计算且具有深度结构的前馈神经网络，是深度学习的代表算法之一。

5.3.15

决策支持系统 decision support systems；DSS

辅助决策者通过数据、模型、知识以及人机交互方式进行半结构化或非结构化决策的计算机应用系统。它为决策者提供分析问题、建立模型、模拟决策过程和方案的环境，调用各种信息资源和分析工具，帮助决策者提高决策水平和质量。这是一门综合经济管理理论、决策科学、控制论、行为科学和计算机科学的边缘性科学，它已广泛用于企业决策管理、战略研究与规划、经济分析和资源管理等部门。材料基因工程有应用。

5.3.16

决策树 decision tree

直观运用概率分析的一种图解法。基于已知各种情况发生概率，评价项目风险，判断可行性的决策分析方法，采用这种决策图解分支类似一棵树的枝干。

5.3.17

深度机器学习 deep machine learning

深度学习 deep learning

可理解为进行“特征学习”或“表示学习”，通过多层处理，将初始“低层”特征表示转化为“高层”特征后，用“简单模型”实现复杂的分类等学习任务。

注：常见方式有深度卷积神经网络，自编码神经网络，深度置信网络等方式。

5.3.18

深度卷积神经网络 deep convolutional neural network

基于卷积运算的神经网络系统。

注：参见卷积神经网络（5.3.14）。

5.3.19

统计数据分析 statistical data analysis

指运用统计方法及与分析对象有关的知识，结合定量与定性进行的研究。

5.3.20

统计计算 statistical computing

基于数理统计、计算数学和计算机科学的交叉学科。

5.3.21

统计模型 statistical model

以概率论为基础，采用数学统计方法建立的模型。

5.3.22

统计推断 statistical inference

对抽样调查所得的样本进行分析，进而由样本推断总体的过程。主要内容包括参数估计和假设检验。

注：由于统计推断是由部分（样本）推断整体（总体），所得出的结论含有不确定性（5.3.41），因此对统计推断的讨论必须以概率论为基础。

5.3.23

统计学习 statistical learning

一种使用统计方法的机器学习。

5.3.24

相关向量机 relevance vector machine；RVM

基于贝叶斯框架构建学习机，先验参数的结构下基于主动相关决策理论来移除不相关的点，从而获得稀疏化的模型。

注：属于监督学习方法，有别于SVM。

5.3.25

支持向量机 support vector machine；SVM

是一类按监督学习方式对数据进行二元分类的广义线性分类器。

注：基于结构风险最小化原则构建学习机。

5.3.26

主动学习 active learning

学习过程中由学习器挑选未标记样本，并请求外界提供标记信息，其目标是使用尽可能少的查询来取得好的学习性能。

5.3.27

专家系统 expert system

一种基于知识的系统，它根据由人类专家经验开发出的知识库进行推理，解决某一特定领域或应用范围中的问题。

注：术语“专家系统”有时与“基于知识的系统”同义

[来源：GBT5271.28-2001 28.01.06]

5.3.28

自然语言处理 natural language processing

自然语言理解和生成及其衍生技术。

5.3.29

人工蜂群算法 artificial bee colony algorithm

模仿蜜蜂行为提出的一种集群智能优化方法，不需要了解问题的特殊信息，只需要对问题进行优劣比较，通过各蜂个体的局部寻优行为，最终在群体中使全局最优值突现出来，有着较快的收敛速度。

5.3.30

人工神经网络 artificial neural network

一种运算模型，由大量的节点或称神经元之间相互联接构成。

5.3.31

人工智能 artificial intelligence

解释和模拟人类智能、智能行为及其规律的学科。主要任务是建立智能信息处理理论，进而设计可展现近似于人类智能行为的计算机系统。

5.3.32

神经科学 neuroscience

研究人类神经网络工作机制的学科。

5.3.33

神经网络 neural network

模拟人脑结构的一种非线性系统，由大量人工神经元按照某一种拓扑结构互联而成。

5.3.34

数据驱动 data driven

一种新的问题求解方法。从原始数据出发，运用人工智能等计算机程序，寻找和建立数据内部之间的关系，从而发现知识、关联、规律、定律或定理。

5.3.34.1

数据驱动设计 data driven design

以数据驱动为核心的设计方式，首先建立数据源，然后根据材料对象模型进行数据库关系设计，在此基础上根据材料性能构造数据集，最后对数据集进行各种更新和操作。

5.3.34.2

数据驱动建模 data driven modeling

根据材料数据关系建立模型，实现数据驱动的目的。

5.3.35

数据可视化 data visualization

借助于计算机及相关软件，对抽象的、大规模、非结构化的原始数据、衍生数据实现材料建模、仿真和科学计算的可视化输出，将材料工艺、组织结构演变、使用场景等各种材料相关动态过程及瞬态图像直观显现出来的模拟技术。

5.3.36

自适应学习 adaptive learning

系统通过不断调整自身参数以适应环境的机器学习方式。

5.3.37

多元统计分析 multivariate statistical analysis

在多个对象和多个指标互相关联的情况下分析之间的统计规律。

5.3.38

区块链 block chain

按照时间顺序，将数据区块以顺序相连的方式组合成的链式数据结构，并以密码学方式保证的不可篡改和不可伪造的分布式账本。

注：具有去中心化，开放性，独立性，安全性，匿名性特点。

5.3.39

云计算 cloud computing

用户只需要提供计算需求并获取计算结果，对计算过程不需要了解和干涉，计算过程由网络服务器对计算、存储、数据等资源以服务的形式完成。

5.3.40

蚁群优化 ant colony optimization；ACO

基于蚂蚁复杂的社会行为所发展起来的一种算法，用于解决最短路径问题。

5.3.41

术语抽取 terminology extraction

从给定语料中抽取有关术语及其定义，是信息抽取研究领域的一分支。

5.4

制备类

5.4.1

封装 encapsulation

一种用绝缘的塑料或陶瓷材料包围集成电路成整体的技术。

5.4.2

自组装 self-assembly

指基本结构单元(分子，纳米材料，微米或更大尺度的物质)自发形成有序结构的技术。

5.4.3

层层组装 layer-by-layer assembly

一种镀膜方式，逐层镀膜构造。

5.4.4

超表面 metasurface

一种具有特殊结构的表面，使其具备高硬度等特殊性能。

5.4.5

超材料 metamaterial

一类具有特殊性质的人造材料，奇特性质源于其精密的几何结构、尺寸、大小。

5.4.6

晶圆 wafer

制作硅半导体电路所用的硅单晶片。

5.4.7

外延生长 epitaxy growth

在单晶基板上沿其晶向连续生长具有特定参数的单晶薄膜方式。

5.4.8

微磁学 micromagnetics

阐述和研究单畴粒子尺度范围和畴壁厚度大小的磁学理论，是宏观磁学的一个分支。

5.4.9

微萃取 microextraction

基于采用涂有固定相的熔融石英纤维来吸附、富集样品中的待测物质，具有集取样、萃取、浓缩和进样于一体的功能，操作方便，耗时短，测定快速高效的特点。

5.4.10

微反应器 microreactor

一种借助于特殊微加工技术制造，可用于进行化学反应的三维结构固体基质元件。常见10到1000微米之间的微型反应器，含有多道且小尺寸的通道（当量直径小于500微米）。

5.4.11

微观力学 microscopic mechanics

微观尺度描述材料力学行为的理论。

5.4.12

微机械 micro-electromechanical system；MEMS

以微电子技术(半导体制造技术)为基础，融合了光刻、腐蚀、薄膜、LIGA、硅微加工、非硅微加工和精密机械加工等技术，是集微传感器、微执行器、微机械结构、微电源微能源、信号处理和控制电路、高性能电子集成器件、接口、通信等于一体的微型器件或系统。

5.4.13

微加工 microscale processing

加工微纳尺寸范围器件的动作和行为。

5.4.14

微胶囊 microcapsules

指用高分子等将某种球形芯物质（液体或者固体，直径数微米~数百微米）包裹而成的粒状物，也可用于材料小批量多品种制备和分析。

5.4.15

微孔材料 microporous materials

含有大量直径为1到几十纳米的微孔的玻璃或者陶瓷，可用于高温气体分离、淡化海水、固化酶、膜反应器。

5.4.16

微观材料学 micro-materialogy

研究材料（单个或集体）环境下所表现的各种行为，以及这些行为与材料内部结构之间的关系和改变这些结构的工艺，即研究材料性能、结构和工艺三者微观机制。

5.4.17

微粒 micro particles

指当量直径在微米尺度及以下的颗粒，是制备功能材料的重要原材料。

5.4.18

微流控 microfluidic

使用微管道（尺寸为数十到数百微米）处理或操纵微小流体（体积为纳升到阿升）的系统所涉及的科学和技术，是一门涉及化学、流体物理、微电子、新材料、生物学和生物医学工程的新兴交叉学科。因为具有微型化、集成化等特征，微流控装置通常被称为微流控芯片，也被称为芯片实验室和微全分析系统。

示例：微流控设备

5.4.19

微通道 microchannel

当量直径在10到1000 μm 范围内的通道。

5.4.20

微透镜阵列 micro lens array

指用具有梯度折射率的光导纤维，从其横截面的中心到边缘折射率呈放射状降低，将其制成适当厚度的圆片，具备成像能力。如此制作的微透镜排列可用微小光学领域和光信号处理技术领域。

5.4.21

微细加工 microfabrication

见**微加工** (5.4.13)

5.4.22

微阵列 microarray

为实现高效率的高通量制备，对微反应器排列形成的布局。

5.4.23

微执行器 microactuator

一般指微纳米技术应用下的微马达、光学执行器、微阀门、微型泵、生物微执行器、微机械执行器和化学执行器。

5.4.24

物理气相沉积 physical vapor deposition; PVD

在真空条件下，采用物理方法，将材料源（固体或液体）表面气化成气态原子、分子或部分电离成离子，通过低压气体（或等离子体）过程，在基体表面沉积具有某种特殊功能薄膜的技术。

5.4.25

组合磁控溅射 combinatorial magnetron sputtering

组合溅射 combinatorial sputtering

物理气相沉积的一种方式，通过在靶阴极表面引入磁场，利用磁场对带电粒子的约束来提高等离子体密度以增加溅射率。

5.4.26

组合材料科学 combinatorial materials science

根据特定的组合法则，运用数学、机械、物理、化学或者生物学的手段，在材料、结构和功能等按所实现的科学技术目的划分，有提高效能综合性能的组合法、完全多效用的组合法、具有最优性或求最优性或求最优性的组合法、探索创新的组合法等等。

5.4.27

组合材料芯片 combinatorial materials chip

一种实现高通量、多组分变化的材料样品基片。

5.4.28

组合库 combinatorial libraries

组合化学中表示包含数量较多且为不同结构的化合物集合。

5.4.29

组合学 combinatorics

研究离散对象的组合的学科。

5.5

表征类

5.5.1

X射线吸收近边结构 X-ray absorption near edge structure; XANES

物质的X射线吸收谱中从吸收阈值处的吸收边到吸收边以上约50eV之间的谱结构，是研究物质的局域结构和局域电子特性的有力手段。

5.5.2

X射线光电子能谱 X-ray photoelectron spectroscopy；XPS

以单色X射线为光源，测量并研究光电离过程发射出的光电子能量及相关特征的方法。能够给出原子内壳层及价带中各占据轨道电子结合能和电离能的精确数值。

5.5.3

变形孪晶 deformation twinning

晶粒的一部分原子沿一定晶面同时移动的一种塑性变形过程。孪生后晶体变形与未变形部分以孪晶面形成镜面对称。

5.5.4

表面处理 surface treatment

在基体材料表面形成一层与基体的机械、物理和化学性能不同的表层的工艺方法。

5.5.5

表面分析 surface analysis

利用电子束、离子束、光子束、中性离子束等作为探束，探测处于真空或者超高真空中的样品，测量从表面散射或者发射的电子、光子、离子、原子、分子的能谱、光谱、质谱、空间分布或者衍射图像，获得表面形貌、表面结构、化学组分、原子机构、原子态、电子态及表面物理化学过程等信息的实验技术。

5.5.6

表面改性 surface modification

使材料表面的硬度和抗腐蚀能力提高的方法。

5.5.7

表面功能化 surface functionalization

通过表面处理工艺使材料最外层具备特定性能或者功能的过程。

5.5.8

表面和界面 surface and interface

前者是物体与真空或者气体的界面，后者指物质相与相之间的分界面。

5.5.9

表面科学 surface science

研究固体物质最外层或者吸附原子、分子及薄膜的特性的学科。

注：在表面层附近的几个原子层中，由于原子移动和重新排列，使得其物理结构及电子状态有明显变化，具有与体内不同的物理化学性质，许多材料的特性和物理化学过程，都取决于表面状态。

5.5.9.1

表面扩散 surface diffusion

指在晶态表面上原子、离子、分子或小的原子集团的迁徙运动，不涉及顶层之下若干原子层中的扩散效应。

5.5.9.2

表面能 surface energy

从微观的能量观点看，指液体或固体表面分子所拥有的剩余能量。表面的分子要把液体内部的分子移向表面来扩大表面积，就须对抗液体内部的引力而作功，即液体表面的分子比内部的分子具有较大的能量，相当于增大单位表面积时所需的能量。

注：从宏观的观点看，表面能是一种力，即垂直于表面边缘处单位长度的力。液体的表面能实际上与表面张力是一样的。它们都是表示自动缩小表面趋势的大小。

5.5.10

表面效应 surface effect

随着颗粒尺寸急剧减小，表面或者界面原子数迅速增加，表面和界面在材料中所占比重大大提高，表面能为增加了表面和界面的原子活性提供可能，引起纳米离子表面原子输运和构型变化，造成表面电子自旋和电子能谱变化，提高固体反应性。

5.5.11

表面形态 surface morphology

描述材料表面形貌和状态，包括物理状态和化学状态。

5.5.12

表面应力 surface stress

作用在材料表面或表层的应力。

注：表面应力一般来自于表面涂层和基底之间的力学性能差异。

5.5.13

表面增强拉曼散射 surface-enhanced Raman scattering

金、银、铜等金属表面吸附不同的分子或者离子均发现拉曼散射截面有不同程度增强效应，与表面亚微观的粗糙度有关。

5.5.14

采样 sampling

采集样品信息的动作，又称取样。

5.5.15

差热分析 differential thermal analysis；DTA

在过程控制温度下，测量物质和参比物的温度差和温度关系的一种技术。利用差热曲线的吸热或放热峰来表征当温度变化时引起试样发生的任何物理或化学变化。

5.5.16

3维成像 3D imaging

通过光学和计算机图像合成技术构成拍摄对象立体图像的技术。

5.5.17

成像光谱 imaging spectroscopy

通过传感器在获取目标图像的同时，也能获取反映目标特点的连续、光滑的光谱曲线。这种既能成像又能获取目标光谱曲线的“谱像合一”的技术。

5.5.18

传感器阵列 sensor array

以一定规律排布，满足测量需要的元器件组。

5.5.19

电子背散射衍射 electron backscattered diffraction；EBSD

一种晶体微区取向和晶体结构的分析技术，广泛应用于材料微观组织结构及微织构表征，织构和取向差分析，晶粒尺寸及形状分布分析，晶界、亚晶及孪晶界性质分析，应变和再结晶的分析，相鉴定及相比计算等。

5.5.20

多探测器计算机断层扫描 multidetector computed tomography

X射线从多个方向沿着某一选定断层面进行照射，测定透过的X射线量，数字化后经过计算机算出该层面组织各个单位容积的吸收系数，然后重建图像的一种技术。

5.5.21

范德华异质结构 van der Waals heterostructures

石墨烯/半导体结合形成范德华异质界面。

5.5.22

晶圆键合 wafer bonding

界面反应、键合电流、阳极键合所用键合质量的表征。

5.5.23

能量色散X射线光谱 energy dispersive X-ray spectroscopy; EDX

借助于分析试样发出的元素特征X射线波长和强度实现的，根据不同元素特征X射线波长的不同来测定试样所含的元素，通过对比不同元素谱线的强度可以测定试样中元素的含量。

5.5.24

透射电子显微镜 transmission electron microscope; TEM

透射电镜

以波长极短的电子束作为照明源，通过电磁透镜聚焦获得高放大倍数和高分辨成像的电子光学仪器，用于观察、分析材料微观结构。

5.5.25

原子力显微镜 atomic force microscopy; AFM

一种用来研究固体材料表面结构的分析仪器，通过非常接近物体表面的小探针获得物体表面三维图像。

5.5.26

原子探针断层扫描 atom probe tomography; APT

一种在原子尺度上提供三维断层扫描图像和化学识别的技术，具备高空间分辨率和高化学灵敏度。

5.5.27

中子衍射 neutron diffraction

利用原子核反应堆裂变产生的热中子束与试样中的原子核发生弹性或者非弹性散射，根据散射中子束的角分布和能量变化研究试样分子结构和动力学特征的一种试样手段。

5.6

应用类

5.6.1

材料失效 material failure

指材料由于机械力破损、疲劳断裂、腐蚀性破损和高温破损等原因导致材料不能使用。

5.6.2

材料质量 material quality

泛指评判材料产品符合有关质量要求的指标，在材料基因工程领域指材料研发性能是否达到预期或者超出预期。

5.6.3

残余应力 residual stress

金属加工过程中由于不均匀的应力场、应变场、温度场，以及不均匀的组织，在加工后，工件或产品内保留下来的应力。

5.6.4

裂纹生长 crack growth

在材料内部裂纹萌生后进入生长阶段，是决定了材料使用寿命关键因素之一。

5.6.5

缺陷分析 defect analysis

狭义指对晶体中晶格的规整性的偏离行为和机制的研究。

注：通常将缺陷分为点缺陷、线缺陷、面缺陷和体缺陷。

5.6.6

储氢材料 hydrogen storage materials

在一定温度和氢气压力下，能吸收、储存和释放氢的材料。

5.6.7

高熵合金 high entropy alloys

由五种或五种以上等量或大约等量金属形成的合金。相比传统合金，某些高熵合金抗断裂能力、抗拉强度、抗腐蚀及抗氧化特性更好。

5.6.8

能源材料 energy materials

支持建立新能源系统，满足各种新能源及节能技术的特殊要求的材料，涉及能量储存和转换技术，一般包括燃料电池材料、氢能源材料、太阳能电池材料等。

5.6.9

热电材料 thermoelectric materials

一种能将热能和电能进行相互转化的材料，可用于热电发电、制冷等领域。

5.6.9.1

热电优值 figure of merit

衡量热电材料的热电性能的指标参数，又称ZT值。

5.6.9.2

塞贝克系数 Seebeck coefficient

衡量材料中温度差引起的热电电压的大小。

5.6.10

陶瓷膜 ceramic membrane

以无机陶瓷材料经特殊工艺制备而形成的非对称膜，分为管式陶瓷膜和平板陶瓷膜两种，主要由氧化铝、氧化锆、氧化钛、碳化硅等陶瓷材料制备而成，

5.6.11

芯片材料 chip materials

用于集成电路的材料，常见有硅材料。

注：近年来新的材料制成半导体器件，比如砷化镓器件，碳化硅器件。

5.6.12

各向异性材料 anisotropic materials

指物理性质和力学性质表现随着晶体空间方向变化呈现差异的材料。

5.6.13

功能化 functionalization

使材料具备一定光、电、磁、化学等特性的过程。

附录 A

(资料性)
起草单位和主要起草人

本文件起草单位：上海交通大学、钢铁研究总院有限公司、北京科技大学、中国科学院上海硅酸盐研究所、中国科学院上海微系统与信息技术研究所、南京工业大学、北京迈高材云科技有限公司。

本文件主要起草人：余宁、唐凌天、黄海友、汪洪、张澜庭、刘茜、路勇超、蔡永珠、孙璧瑶、陈永彦、沈耀、朱虹、邵承瑾、王一、范秀凤、陆艳、朱雷、孔维悦、陈献富、丁伟同。

CSTM标准发布使用

参 考 文 献

- [1] GB/T4880.1-2005《语种名称代码》
- [2] GB/T 5271. 1-2000 《信息技术 词汇 第 1 部分：基本术语》
- [3] GB/T 5271.31-2010 《信息技术 词汇 第 17 部分：数据库》
- [4] GB/T 5271.31-2006 《信息技术 词汇 第 31 部分：人工智能 机器学习》
- [5] GB/T 5271.34-2006 《信息技术 词汇 第 34 部分：人工智能 神经网络》
- [6] GB/T13016《标准体系构建原则和要求》
- [7] GB/T 15237.1《术语工作 词汇 第 1 部分：理论与应用》
- [8] GB/T 19710-2005《地理信息 元数据》
- [9] GB/T 20533-2006《生态科学元数据》
- [10] GB/T 30544.1-2014《科技平台 元数据标准化基本原则与方法》
- [11] GB/T 35295-2017 《信息技术 大数据 术语》
- [12] T/CSTM 00120-2019 《材料基因工程数据通则》
- [13] 材料大辞典 师昌绪主编, 1994, 北京.化学工业出版社
- [14] 材料大辞典 第二版 黄伯云主编, 2016, 北京.化学工业出版社
- [15] 功能材料词典, 黄泽铣主编, 2002, 北京科学出版社
- [16] 新材料辞典, 周惠久主编, 1995, 上海科学技术文献出版社
- [17] 机械工业标准术语词典, 机械工业标准术语词典编写组, 1995, 上海, 世界图书出版公司
- [18] 计算机科学技术名词, 全国科学技术名词审定委员会, 第三版, 2018, 北京, 科学出版社
- [19] 英汉人工智能辞典, 王晓峰主编, 2019, 上海.上海交通大学出版社
- [20] 英汉人工智能简明词典, 王晓峰主编, 2020, 上海.上海交通大学出版社

索引

汉语拼音索引

B		
半监督学习	semi-supervised learning	5.3.5
贝叶斯统计	Bayesian statistics	5.3.7
贝叶斯推理	Bayesian inference	5.3.7.1
贝叶斯网络	Bayesian network	5.3.7.2
贝叶斯优化	Bayesian optimization	5.3.7.3
本构方程	constitutive equation	5.2.10
本体	ontology	5.1.14
变形孪晶	deformation twinning	5.5.3
标识符	identifier	5.1.8
表面处理	surface treatment	5.5.4
表面分析	surface analysis	5.5.5
表面改性	surface modification	5.5.6
表面功能化	surface functionalization	5.5.7
表面和界面	surface and interface	5.5.8
表面科学	surface science	5.5.9
表面扩散	surface diffusion	5.5.9.1
表面能	surface energy	5.5.9.2
表面效应	surface effect	5.5.10
表面形态	surface morphology	5.5.11
表面应力	surface stress	5.5.12
表面增强拉曼散射	surface-enhanced Raman scattering	5.5.13
表型	phenotype	5.1.15
C		
材料辨识	materials identification	5.1.16.18
材料表征	materials characterization	5.1.16.2
材料发现	materials discovery	5.1.16.3
材料仿真		5.1.16.15
材料非线性	material nonlinearity	5.1.16.4
材料分类	materials classification	5.1.16.5
材料分形	fractal of materials	5.1.16.20
材料工程	materials engineering	5.1.16.6
材料合成	materials synthesis	5.1.16.7
材料基因	materials gene	5.1.6
材料基因工程	materials genome engineering	5.1.1
材料基因组	materials genome	5.1.6.1

材料基因组计划	materials genome initiative (MGI)	5.1.16.27
材料集成	materials integration	5.1.16.26
材料加工	materials processing	5.1.16.9
材料检测	materials testing	5.1.16.10
材料建模	materials modeling	5.1.16.11
材料开发	materials development	5.1.16.1
材料科学	materials science	5.1.16.8
材料描述符	materials descriptor	5.1.16.14
材料模拟	materials simulation	5.1.16.15
材料筛选	materials screening	5.1.16.16
材料设计	materials design	5.1.16.17
材料失效	materials failure	5.6.1
材料识别	materials recognition	5.1.16.19
材料数据	materials data	5.1.5
材料数据集	materials data set	5.1.5.1
材料数据库	materials database	5.1.16.23
材料特性预测	materials properties prediction	5.1.16.25
材料信息学	materials informatics	5.1.12
材料选择	materials selection	5.1.16.13
材料研究	materials research	5.1.16
材料一体化	materials integration	5.1.16.26
材料预测	materials prediction	5.1.16.12
材料知识	materials knowledge	5.1.16.21
材料知识系统	materials knowledge system	5.1.16.22
材料质量	materials quality	5.6.2
采样	sampling	5.5.14
残余应力	residual stress	5.6.3
层层组装	layer-by-layer assembly	5.4.3
层次聚类	hierarchical clustering	5.3.13.3
差热分析	differential thermal analysis (DTA)	5.5.15
超表面	metasurface	5.4.4
超材料	metamaterial	5.4.5
超晶格	superlattice	5.1.17
成分分布	composition spread	5.1.18
成像光谱	imaging spectroscopy	5.5.17
尺寸效应	size effect	5.1.19
储氢材料	hydrogen storage materials	5.6.6
传感器阵列	sensor array	5.5.18
从头计算	ab initio calculation	5.2.3.1
D		
大规模并行处理	massively parallel processing (MPP)	5.3.8
大数据	big data	5.1.2

大数据分析	big data analytics	5.3.1
大数据挖掘	big data mining	5.3.1
第一性原理计算	first-principles calculation	5.2.3
电子背散射衍射	electron backscattered diffraction (EBSD)	5.5.19
多变量分析	multivariate analysis	5.1.20
多材质	multi-material	5.1.25
多场耦合	multi-field coupling	5.2.7
多尺度	multi-scale	5.1.21
多尺度方法	multi-scale method	5.1.21.1
多尺度分析	multi-scale analysis	5.1.21.2
多尺度建模	multi-scale modeling	5.1.21.3
多尺度模拟	multi-scale simulation	5.1.21.4
多尺度模型	multi-scale model	5.1.21.5
多尺度设计	multi-scale design	5.1.21.6
多功能材料	multifunctional materials	5.1.22
多探测器计算机断层扫描	multi-detector computed tomography	5.5.20
多物理场	multiphysics	5.1.23
多物理场建模	multiphysics modeling	5.1.23.1
多相	multi-phase	5.1.24
多相材料	multi-phase materials	5.1.24.1
多相场	multi-phase-field	5.2.8
多相场法	multi-phase-field method	5.2.8.1
多元回归	multivariate regression	5.3.10.1
多元统计分析	multivariate statistical analysis	5.3.37
E		
二维材料	two-dimensional materials	5.1.13.3
F		
范德华异质结构	van der Waals heterostructures	5.5.21
分类	classification	5.3.9
分类方法	classification method	5.3.9.1
分类算法	classification algorithms	5.3.9.2
分子动力学	molecular dynamics (MD)	5.2.5
封装	encapsulation	5.4.1
G		
高熵合金	high entropy alloys	5.6.7
高通量	high throughput	5.1.7
高通量表征	high throughput characterization	5.1.7.8
高通量材料模拟	high throughput materials simulation	5.1.7.15
高通量测量	high throughput measurement	5.1.7.10
高通量测试	high throughput testing	5.1.7.10
高通量处理	high throughput processing	5.1.7.14

高通量分析	high throughput analysis	5.1.7.9
高通量分子动力学计算	high throughput molecular dynamics	5.2.5.1
高通量工艺开发	high throughput process development	5.1.7.2
高通量合成	high throughput synthesis	5.1.7.5
高通量计算	high throughput calculation	5.1.7.7
高通量计算材料基础设施	high throughput computational materials infrastructure	5.1.7.3
高通量计算筛选	high throughput computational screening	5.1.7.12
高通量技术	high throughput technology	5.1.7.1
高通量模拟	high throughput simulation	5.1.7.15
高通量筛选	high throughput screening	5.1.7.11
高通量实验	high throughput experiment	5.1.7.4
高通量搜索	high throughput search	5.1.7.13
高通量制造	high throughput fabrication	5.1.7.6
高性能计算	high performance computing	5.2.1
格子玻尔兹曼方法	lattice Boltzmann method	5.2.4
各向异性材料	anisotropic materials	5.6.12
功能材料	functional materials	5.1.26
功能化	functionalization	5.6.13
构效关系	structure-property relationship	5.1.27
关键维度	critical dimension	5.1.28
H		
合金设计	alloy design	5.1.29
回归	regression	5.3.10
J		
机器视觉	machine vision	5.3.11
机器学习	machine learning	5.3.2
机器学习方法	machine learning method	5.3.2.2
机器学习技术	machine learning technique	5.3.2.4
机器学习模型	machine learning model	5.3.2.3
机器学习算法	machine learning algorithm	5.3.2.1
集成	ensemble	5.3.12
集成分类器	ensemble classifier	5.3.12.1
集成机器学习	ensemble machine learning	5.3.12.2
集成计算材料工程	integrated computational materials engineering (ICME)	5.1.30
集成学习		5.3.12.2
计算材料学	computational materials	5.1.32
监督学习	supervised learning	5.3.4
晶体结构预测	crystal structure prediction	5.1.31
晶圆	wafer	5.4.6
晶圆键合	wafer bonding	5.5.22

聚类	clustering	5.3.13
聚类分析	clustering analysis	5.3.13.1
聚类算法	clustering algorithm	5.3.13.2
卷积神经网络	convolutional neural network	5.3.14
决策树	decision tree	5.3.16
决策支持系统	decision support system (DSS)	5.3.15
均质化	homogenization	5.2.13
K		
可发现	findable	5.1.47
可互操作	interoperable	5.1.49
可获取	accessible	5.1.48
可再利用	reusable	5.1.50
L		
裂纹生长	crack growth	5.6.4
零维材料	zero-dimensional materials	5.1.13.1
M		
密度泛函理论	density functional theory	5.2.11
N		
纳米材料	nanomaterials	5.1.13
能带结构	band structure	5.2.12
能量色散 X 射线光谱仪	energy dispersive X-ray spectroscopy (EDX)	5.5.23
能源材料	energy materials	5.6.8
P		
朴素贝叶斯分类器	naive Bayesian classifier	5.3.9.3
Q		
迁移学习	transfer learning	5.3.3
区块链	block chain	5.3.38
缺陷分析	defect analysis	5.6.5
R		
热电材料	thermoelectric materials	5.6.9
热电优值	figure of merit	5.6.9.1
人工蜂群算法	artificial bee colony algorithm	5.3.29
人工神经网络	artificial neural network	5.3.30
人工智能	artificial intelligence	5.3.31
S		
3D 成像	3D imaging	5.5.16
塞贝克系数	Seebeck coefficient	5.6.9.2
三维材料	three-dimensional materials	5.1.13.4
深度机器学习	deep machine learning	5.3.17
深度卷积神经网络	deep convolutional neural network	5.3.18
深度学习	deep learning	5.3.17
神经科学	neuroscience	5.3.32

神经网络	neural network	5.3.33
术语抽取	terminology extraction	5.3.41
数据安全	data security	5.1.5.9
数据标识符	data identifier	5.1.8
数据查询	data access	5.1.5.4
数据存储	data storage	5.1.5.7
数据管理	data management	5.1.5.10
数据获取	data acquisition	5.1.5.2
数据集	data set	5.1.3
数据交换	data exchange	5.1.5.5
数据可视化	data visualization	5.3.35
数据库中的知识发现	knowledge discovery in database (KDD)	5.1.16.24
数据评价	data evaluation	5.1.5.8
数据驱动	data-driven	5.3.34
数据驱动建模	data-driven modeling	5.3.34.3
数据驱动设计	data-driven design	5.3.34.1
数据挖掘	data mining	5.1.5.3
数据原则	data principle	5.1.5.11
数据字典	data dictionary	5.1.5.6
数学建模	mathematical model	5.1.33
T		
陶瓷膜	ceramic membrane	5.6.10
梯度	gradient	5.1.34
统计计算	statistical computing	5.3.20
统计模型	statistical model	5.3.21
统计数据	statistical data analysis	5.3.19
统计推断	statistical inference	5.3.22
统计学习	statistical learning	5.3.23
透射电子显微镜	transmission electron microscope (TEM)	5.5.24
拓扑	topology	5.1.35
拓扑优化	topology optimization	5.1.35.1
W		
外延生长	epitaxy	5.4.7
微磁学	micromagnetics	5.4.8
微萃取	microextraction	5.4.9
微反应器	microreactor	5.4.10
微观材料学	micro-materialogy	5.4.16
微观力学	microscopic mechanics	5.4.11
微机械	micro-electromechanical system (MEMS)	5.4.12
微加工	microscale processing	5.4.13
微胶囊	microcapsules	5.4.14
微孔材料	microporous materials	5.4.15

微粒	microparticles	5.4.17
微流控	microfluidic	5.4.18
微通道	microchannel	5.4.19
微透镜阵列	micro lens array	5.4.20
微细加工	microfabrication	5.4.21
微阵列	microarray	5.4.22
微正则系综	microcanonical ensemble	5.1.46.1
微执行器	microactuator	5.4.23
无监督学习	unsupervised learning	5.3.6
物理真空沉积	physical vapor deposition (PVD)	5.4.24
X		
X 射线光电子能谱	X-ray photoelectron spectroscopy (XPS)	5.5.2
X 射线吸收近边结构谱	X-ray absorption near edge structure (XANES)	5.5.1
系综	ensemble	5.1.46
相变动力学	phase transformation kinetics	5.1.36
相场法	phase-field method	5.2.6
相关向量机	relevance vector machine (RVM)	5.3.24
相图	phase diagram	5.1.37
相图计算	calculation of phase diagram (CALPHAD)	5.1.38
芯片材料	chip materials	5.6.11
Y		
衍生数据	derived data	5.1.11
样品信息	sample information	5.1.9
一维材料	one-dimensional materials	5.1.13.2
蚁群优化	ant colony optimization (ACO)	5.3.40
异质材料	heterogeneous materials	5.1.39
异质结	heterojunction	5.1.40
异质结构	heterostructure	5.1.41
有限元法	finite elements method	5.2.2
有序-无序转变	order-disorder transition	5.1.42
元数据	meta data	5.1.4
原始数据	source data	5.1.10
原子力显微镜	atomic force microscopy (AFM)	5.5.25
原子模拟	atomistic simulation	5.2.9
原子探针断层扫描	atom probe tomography (APT)	5.5.26
云计算	cloud computing	5.3.39
Z		
增材制造	additive manufacturing	5.1.43
正则系综	canonical ensemble	5.1.46.2
支持向量机	support vector machine (SVM)	5.3.25
中子衍射	neutron diffraction	5.5.27
主动学习	active learning	5.3.26

专家系统	expert system	5.3.27
自然语言处理	natural language processing	5.3.28
自适应网格细化	adaptive mesh refinement	5.2.14
自适应学习	adaptive learning	5.3.36
自组装	self-assembly	5.4.2
综合分析	integrated analysis	5.1.44
组合材料科学	combinatorial materials science	5.4.26
组合材料芯片	combinatorial materials chip	5.4.27
组合磁控溅射	combinatorial magnetron sputtering	5.4.25
组合溅射	combinatorial sputtering	5.4.25
组合库	combinatorial library	5.4.28
组合学	combinatorics	5.4.29
组学	omics	5.1.45

英语索引

3D imaging	3D 成像	5.5.16
ab initio calculation	从头计算	5.2.3.1
accessible	可获取	5.1.48
active learning	主动学习	5.3.26
adaptive learning	自适应学习	5.3.36
adaptive mesh refinement	自适应网格细化	5.2.14
additive manufacturing	增材制造	5.1.43
alloy design	合金设计	5.1.29
anisotropic materials	各向异性材料	5.6.12
ant colony optimization (ACO)	蚁群优化	5.3.40
artificial bee colony algorithm	人工蜂群算法	5.3.29
artificial intelligence	人工智能	5.3.31
artificial neural network	人工神经网络	5.3.30
atom probe tomography (APT)	原子探针断层扫描	5.5.26
atomic force microscopy (AFM)	原子力显微镜	5.5.25
atomistic simulation	原子模拟	5.2.9
band structure	能带结构	5.2.12
Bayesian inference	贝叶斯推理	5.3.7.1
Bayesian network	贝叶斯网络	5.3.7.2
Bayesian optimization	贝叶斯优化	5.3.7.3
Bayesian statistics	贝叶斯统计	5.3.7
big data	大数据	5.1.2

big data analytics	大数据分析	5.3.1
big data mining	大数据挖掘	5.3.1
block chain	区块链	5.3.38
calculation of phase diagram (CALPHAD)	相图计算	5.1.38
canonical ensemble	正则系综	5.1.46.2
ceramic membrane	陶瓷膜	5.6.10
chip materials	芯片材料	5.6.11
classification	分类	5.3.9
classification algorithms	分类算法	5.3.9.2
classification method	分类方法	5.3.9.1
cloud computing	云计算	5.3.39
clustering	聚类	5.3.13
clustering algorithm	聚类算法	5.3.13.2
clustering analysis	聚类分析	5.3.13.1
combinatorial library	组合库	5.4.28
combinatorial magnetron sputtering	组合磁控溅射	5.4.25
combinatorial materials chip	组合材料芯片	5.4.27
combinatorial materials science	组合材料科学	5.4.26
combinatorial sputtering	组合溅射	5.4.25
combinatorics	组合学	5.4.29
composition spread	成分分布	5.1.18
computational materials	计算材料学	5.1.32
constitutive equation	本构方程	5.2.10
convolutional neural network	卷积神经网络	5.3.14
crack growth	裂纹生长	5.6.4
critical dimension	关键维度	5.1.28
crystal structure prediction	晶体结构预测	5.1.31
data access	数据查询	5.1.5.4
data acquisition	数据获取	5.1.5.2
data dictionary	数据字典	5.1.5.6
data evaluation	数据评价	5.1.5.8
data exchange	数据交换	5.1.5.5
data identifier	数据标识符	5.1.8
data management	数据管理	5.1.5.10
data mining	数据挖掘	5.1.5.3
data principle	数据原则	5.1.5.11
data security	数据安全	5.1.5.9
data set	数据集	5.1.3
data storage	数据存储	5.1.5.7
data visualization	数据可视化	5.3.35
data-driven	数据驱动	5.3.34
data-driven design	数据驱动设计	5.3.34.1

data-driven modeling	数据驱动建模	5.3.34.3
decision support system (DSS)	决策支持系统	5.3.15
decision tree	决策树	5.3.16
deep convolutional neural network	深度卷积神经网络	5.3.18
deep learning	深度学习	5.3.17
deep machine learning	深度机器学习	5.3.17
defect analysis	缺陷分析	5.6.5
deformation twinning	变形孪晶	5.5.3
density functional theory	密度泛函理论	5.2.11
derived data	衍生数据	5.1.11
differential thermal analysis (DTA)	差热分析	5.5.15
electron backscattered diffraction (EBSD)	电子背散射衍射	5.5.19
encapsulation	封装	5.4.1
energy dispersive X-ray spectroscopy (EDX)	能量色散 X 射线光谱仪	5.5.23
energy materials	能源材料	5.6.8
ensemble	系综	5.1.46
ensemble	集成	5.3.12
ensemble classifier	集成分类器	5.3.12.1
ensemble learning	集成学习	5.3.12.2
ensemble machine learning	集成机器学习	5.3.12.2
epitaxy	外延生长	5.4.7
expert system	专家系统	5.3.27
figure of merit	热电优值	5.6.9.1
findable	可发现	5.1.47
finite elements method	有限元法	5.2.2
first-principles calculation	第一性原理计算	5.2.3
fractal of materials	材料分形	5.1.16.20
functional materials	功能材料	5.1.26
functionalization	功能化	5.6.13
gradient	梯度	5.1.34
heterogeneous materials	异质材料	5.1.39
heterojunction	异质结	5.1.40
heterostructure	异质结构	5.1.41
hierarchical clustering	层次聚类	5.3.13.3
high entropy alloys	高熵合金	5.6.7
high performance computing	高性能计算	5.2.1
high throughput	高通量	5.1.7
high throughput analysis	高通量分析	5.1.7.9
high throughput calculation	高通量计算	5.1.7.7
high throughput characterization	高通量表征	5.1.7.8
high throughput computational materials infrastructure	高通量计算材料基础设施	5.1.7.3

high throughput computational screening	高通量计算筛选	5.1.7.12
high throughput experiment	高通量实验	5.1.7.4
high throughput fabrication	高通量制造	5.1.7.6
high throughput materials simulation	高通量材料模拟	5.1.7.15
high throughput measurement	高通量测量	5.1.7.10
high throughput molecular dynamics	高通量分子动力学计算	5.2.5.1
high throughput process development	高通量工艺开发	5.1.7.2
high throughput processing	高通量处理	5.1.7.14
high throughput screening	高通量筛选	5.1.7.11
high throughput search	高通量搜索	5.1.7.13
high throughput simulation	高通量模拟	5.1.7.15
high throughput synthesis	高通量合成	5.1.7.5
high throughput technology	高通量技术	5.1.7.1
high throughput testing	高通量测试	5.1.7.10
homogenization	均质化	5.2.13
hydrogen storage materials	储氢材料	5.6.6
identifier	标识符	5.1.8
imaging spectroscopy	成像光谱	5.5.17
integrated analysis	综合分析	5.1.44
integrated computational materials engineering (ICME)	集成计算材料工程	5.1.30
interoperable	可互操作	5.1.49
knowledge discovery in database (KDD)	数据库中的知识发现	5.1.16.24
lattice Boltzmann method	格子玻尔兹曼方法	5.2.4
layer-by-layer assembly	层层组装	5.4.3
machine learning	机器学习	5.3.2
machine learning algorithm	机器学习算法	5.3.2.1
machine learning method	机器学习方法	5.3.2.2
machine learning model	机器学习模型	5.3.2.3
machine learning technique	机器学习技术	5.3.2.4
machine vision	机器视觉	5.3.11
massively parallel processing (MPP)	大规模并行处理	5.3.8
material nonlinearity	材料非线性	5.1.16.4
materials characterization	材料表征	5.1.16.2
materials classification	材料分类	5.1.16.5
materials data	材料数据	5.1.5
materials data set	材料数据集	5.1.5.1
materials database	材料数据库	5.1.16.23
materials descriptor	材料描述符	5.1.16.14
materials design	材料设计	5.1.16.17
materials development	材料开发	5.1.16.1
materials discovery	材料发现	5.1.16.3

materials engineering	材料工程	5.1.16.6
materials failure	材料失效	5.6.1
materials gene	材料基因	5.1.6
materials genome	材料基因组	5.1.6.1
materials genome engineering	材料基因工程	5.1.1
materials genome initiative (MGI)	材料基因组计划	5.1.16.27
materials identification	材料辨识	5.1.16.18
materials informatics	材料信息学	5.1.12
materials integration	材料集成	5.1.16.26
materials integration	材料一体化	5.1.16.26
materials knowledge	材料知识	5.1.16.21
materials knowledge system	材料知识系统	5.1.16.22
materials modeling	材料建模	5.1.16.11
materials prediction	材料预测	5.1.16.12
materials processing	材料加工	5.1.16.9
materials properties prediction	材料特性预测	5.1.16.25
materials quality	材料质量	5.6.2
materials recognition	材料识别	5.1.16.19
materials research	材料研究	5.1.16
materials science	材料科学	5.1.16.8
materials screening	材料筛选	5.1.16.16
materials selection	材料选择	5.1.16.13
materials simulation	材料模拟	5.1.16.15
materials simulation	材料仿真	5.1.16.15
materials synthesis	材料合成	5.1.16.7
materials testing	材料检测	5.1.16.10
mathematical model	数学建模	5.1.33
meta data	元数据	5.1.4
metamaterial	超材料	5.4.5
metasurface	超表面	5.4.4
microactuator	微执行器	5.4.23
microarray	微阵列	5.4.22
microcanonical ensemble	微正则系综	5.1.46.1
microcapsules	微胶囊	5.4.14
microchannel	微通道	5.4.19
micro-electromechanical system (MEMS)	微机械	5.4.12
microextraction	微萃取	5.4.9
microfabrication	微细加工	5.4.21
microfluidic	微流控	5.4.18
micro lens array	微透镜阵列	5.4.20
micromagnetics	微磁学	5.4.8
micro-materialogy	微观材料学	5.4.16

microparticles	微粒	5.4.17
microporous materials	微孔材料	5.4.15
microreactor	微反应器	5.4.10
microscale processing	微加工	5.4.13
microscopic mechanics	微观力学	5.4.11
molecular dynamics (MD)	分子动力学	5.2.5
multi-detector computed tomography	多探测器计算机断层扫描	5.5.20
multi-field coupling	多场耦合	5.2.7
multifunctional materials	多功能材料	5.1.22
multi-material	多材质	5.1.25
multi-phase	多相	5.1.24
multi-phase materials	多相材料	5.1.24.1
multi-phase-field	多相场	5.2.8
multi-phase-field method	多相场法	5.2.8.1
multiphysics	多物理场	5.1.23
multiphysics modeling	多物理场建模	5.1.23.1
multi-scale	多尺度	5.1.21
multi-scale analysis	多尺度分析	5.1.21.2
multi-scale design	多尺度设计	5.1.21.6
multi-scale method	多尺度方法	5.1.21.1
multi-scale model	多尺度模型	5.1.21.5
multi-scale modeling	多尺度建模	5.1.21.3
multi-scale simulation	多尺度模拟	5.1.21.4
multivariate analysis	多变量分析	5.1.20
multivariate regression	多元回归	5.3.10.1
multivariate statistical analysis	多元统计分析	5.3.37
naive Bayesian classifier	朴素贝叶斯分类器	5.3.9.3
nanomaterials	纳米材料	5.1.13
natural language processing	自然语言处理	5.3.28
neural network	神经网络	5.3.33
neuroscience	神经科学	5.3.32
neutron diffraction	中子衍射	5.5.27
omics	组学	5.1.45
one-dimensional materials	一维材料	5.1.13.2
ontology	本体	5.1.14
order-disorder transition	有序-无序转变	5.1.42
phase diagram	相图	5.1.37
phase transformation kinetics	相变动力学	5.1.36
phase-field method	相场法	5.2.6
phenotype	表型	5.1.15
physical vapor deposition (PVD)	物理真空沉积	5.4.24
regression	回归	5.3.10

relevance vector machine (RVM)	相关向量机	5.3.24
residual stress	残余应力	5.6.3
reusable	可再利用	5.1.50
sample information	样品信息	5.1.9
sampling	采样	5.5.14
Seebeck coefficient	塞贝克系数	5.6.9.2
self-assembly	自组装	5.4.2
semi-supervised learning	半监督学习	5.3.5
sensor array	传感器阵列	5.5.18
size effect	尺寸效应	5.1.19
source data	原始数据	5.1.10
statistical computing	统计计算	5.3.20
statistical data analysis	统计数据	5.3.19
statistical inference	统计推断	5.3.22
statistical learning	统计学习	5.3.23
statistical model	统计模型	5.3.21
structure-property relationship	构效关系	5.1.27
superlattice	超晶格	5.1.17
supervised learning	监督学习	5.3.4
support vector machine (SVM)	支持向量机	5.3.25
surface analysis	表面分析	5.5.5
surface and interface	表面和界面	5.5.8
surface diffusion	表面扩散	5.5.9.1
surface effect	表面效应	5.5.10
surface energy	表面能	5.5.9.2
surface functionalization	表面功能化	5.5.7
surface modification	表面改性	5.5.6
surface morphology	表面形态	5.5.11
surface science	表面科学	5.5.9
surface stress	表面应力	5.5.12
surface treatment	表面处理	5.5.4
surface-enhanced Raman scattering	表面增强拉曼散射	5.5.13
terminology extraction	术语抽取	5.3.41
thermoelectric materials	热电材料	5.6.9
three-dimensional materials	三维材料	5.1.13.4
topology	拓扑	5.1.35
topology optimization	拓扑优化	5.1.35.1
transfer learning	迁移学习	5.3.3
transmission electron microscope (TEM)	透射电子显微镜	5.5.24
two-dimensional materials	二维材料	5.1.13.3
unsupervised learning	无监督学习	5.3.6
van der Waals heterostructures	范德华异质结构	5.5.21

wafer	晶圆	5.4.6
wafer bonding	晶圆键合	5.5.22
X-ray absorption near edge structure (XANES)	X 射线吸收近边结构谱	5.5.1
X-ray photoelectron spectroscopy (XPS)	X 射线光电子能谱	5.5.2
zero-dimensional materials	零维材料	5.1.13.1

CSTM标准发布使用