

文章编号: 1000-324X(2021)08-0785-04

DOI: 10.15541/jim20210901



# 我国自强自立高质量发展“四个基础” 面临的科学理论难题与对策建议

张莉, 张清杰

(武汉理工大学, 武汉 430070)

**摘要:** 基础材料、基础元器件、基础软件和基础算法(简称为“四个基础”)是我国基础工业和高科技工业发展的基石, 未来十五年是我国“四个基础”突破重围、自强自立高质量发展并引领国际的关键时期。本文通过战略研究, 分析了我国“四个基础”的发展现状, 提出了“四个基础”发展面临的核心科学理论难题, 建议从五个方面系统建设有利于突破重围和超越引领的原始创新环境与体制机制。

**关键词:** 基础材料; 基础元器件; 基础软件; 基础算法; 科学理论难题; 对策建议



张莉, 博士, 武汉理工大学副研究员, 重大项目与基地处副处长, 美国密歇根大学物理系访问学者, 长期从事科研管理及新能源材料的研究工作。

E-mail: zhanglihy@whut.edu.cn

## Scientific and Theoretical Problems and Countermeasures for the High Quality Development of “Four Foundations” in China

ZHANG Li, ZHANG Qingjie

(Wuhan University of Technology, Wuhan 430070, China)

**Abstract:** Basic materials, basic components, basic software and basic algorithms (abbreviated as “Four Foundations”) are the cornerstone of the development of China’s basic industry and high-tech industry. The next 15 years will be a critical period for China’s “Four Foundations” to achieve breakthrough against the siege, self-reliance, high-quality development and lead the world. Through strategic research, this paper analyzes the current situation of the development of “Four Foundations” in China, puts forward the core scientific theoretical problems faced by the development of “Four Foundations”, and suggests that the system construction from five aspects is conducive to breaking through the encirclement and surpassing the original innovation environment and system mechanism.

**Key words:** basic materials; basic components; basic software; basic algorithm; scientific and theoretical problems; countermeasures



张清杰, 博士, 武汉理工大学教授, 中国科学院院士, 第一届国家基础研究战略咨询委员会委员, 国家自然科学基金委员会重大研究计划《功能基元序构的高性能材料》专家组组长。长期从事新能源材料与器件和先进复合材料与应用技术研究。

E-mail: zhangqj@whut.edu.cn

## 1 我国“四个基础”发展现状

《中共中央关于制定国民经济和社会发展第十四个五年规划和二〇三五年远景目标的建议》提出“坚持创新在我国现代化建设全局中的核心地位,把科技自立自强作为国家发展的战略支撑”<sup>[1]</sup>。“四个基础”是我国基础工业和高科技工业发展的基石,其关键核心技术是“强化国家战略科技力量,加强原创性和引领性科技攻关”的重要内容<sup>[2-3]</sup>。

### 1.1 基础材料与基础元器件

我国基础材料主要包括金属材料、无机非金属材料(含硅基和碳基半导体)、高分子材料和复合材料<sup>[4-6]</sup>;基础元器件主要包括场效应晶体管、光电子器件、传感器件、功率器件等,是构建大规模集成电路与信息通信系统的基本单元<sup>[7-8]</sup>。改革开放,特别是近二十年来,我国基础材料和基础元器件取得了长足的发展,有力地支撑了国防、钢铁、建材、交通、航空航天、光电子等工业的快速发展<sup>[9-11]</sup>。但我们必须看到,我国基础材料和基础元器件大多是中低端产品,设计制造还长期主要依赖于国外算法、软件、流程工艺与装备。由我国原创的材料体系也很少,特别是对人类现代文明和世界经济产生广泛影响的材料体系如硅半导体、光纤、石墨烯、蓝光半导体、导电高分子、高温合金、碳纤维等,都是由国外开发的<sup>[12]</sup>。

长期以来,我国基础材料和基础元器件设计(包括学术界和工业界)普遍采用国外开发的软件系统 VASP、LAMMPS、Materials Studio 和 EDA 平台,没有建立自成体系的设计科学理论和软件系统,无法从设计源头实现材料体系的原始创新。“十三五”期间,我国实施的材料基因工程研究计划将材料高通量计算与大数据技术相结合,推动了我国基础材料设计计算的长足进步,但采用的建模理论和基本算法与国外软件系统属同一架构。

自国家高技术研究发展计划(863 计划)实施以来,我国基础材料的制造科学理论取得了重要进展,发展了晶体生长、人工微纳结构调控、稀土合金化等理论,为制造高性能基础材料及其高质量产品提供了基础理论支撑。但到目前为止,我国基础材料的制造科学理论主要建立在上世纪 40~70 年代国外科学家基于热场/力场及其耦合场作用创建的材料结构动力学理论的框架之下,实质上是基于高温和压力环境下材料合成与加工过程中能量、动量和物质的传输动力学过程的可控理论。因此,基础材料现有制造科学理论存在两个重大局限:一是在通常条件下创制的分子基元和纳米基元的众多优异性能

难以在高温制备的宏观材料中实现,无法按需精准制造;二是在此基础上发展起来的基础材料高温制造工艺能耗大并且污染重。

### 1.2 基础软件和基础算法

我国材料领域普遍采用的设计和计算软件是国外开发的 VASP、LAMMPS、Materials Studio、EDA;工程领域普遍采用的软件是国外开发的软件系统 ANSYS、ABAQUS、ADINA、COMSOL Multiphysics、CAD、CAE;数学计算领域普遍采用的也是国外开发的软件 MATLAB。这些著名的国外软件系统采用的建模理论和基本算法都是国外科学家在二十世纪 30~70 年代针对不同的物质尺度建立的<sup>[13-16]</sup>。原子/分子尺度(0~10 nm)的建模和基本算法建立在薛定谔方程(1933 年获诺贝尔物理奖)和 1964 年由科恩提出的密度泛函理论与波普提出的波函数方法(即第一性原理)基础上,后面两位科学家因此共享了 1998 年的诺贝尔化学奖。纳米尺度(10~100 nm)的建模和基本算法建立在 1957 年阿德尔和温莱特提出的分子动力学方法基础上。1976 年,卡普拉斯、莱维特和瓦谢尔提出将第一性原理与分子动力学方法相结合的杂化方法,实现了从原子/分子尺度到纳米尺度的跨尺度计算,三位科学家因此共享了 2013 年的诺贝尔化学奖。介观尺度(100 nm~100  $\mu\text{m}$ )的建模和基本算法建立在 1975 年由莱维特和瓦谢尔提出的介观粗粒化模型基础上。宏观尺度(>100  $\mu\text{m}$ )的建模和基本算法则建立在 1960 年由克劳夫提出的有限元方法基础上。我国科学家冯康于 1965 年独立于国外科学家提出的有限元法,为宏观计算科学贡献了中国算法。

## 2 我国“四个基础”发展面临的科学理论难题

### 2.1 基础材料智造科学理论体系

基础材料智造科学理论体系涵盖基础材料设计科学理论和基础材料精准制造科学理论。

基础材料设计科学理论的核心是跨原子-分子尺度到纳米-介观尺度再到宏观尺度的跨尺度理论和核心设计方法。难点在于突破涵盖微观-介观-宏观的跨尺度设计理论和方法瓶颈。目标是实现全尺度的新功能、新效应和新物质的理论设计,精准预测由各类不同材料中的电荷-自旋-轨道-晶格的耦合而产生的各种量子效应,以及这些耦合与材料宏观力、热、光、电、磁、和化学等性能的内在关系,从设计源头实现材料体系的原始创新以及材料的按

需设计。

基础材料精准制造科学理论的核心在于对热/力场与其它能场(电、磁、光等)进行耦合,利用大数据和人工智能技术在局域空间及超快时间尺度上,通过精确描述材料形成的热力学和动力学,精准调控微纳尺度限域空间分子、原子、原子团簇、离子、活性基团等物质的传递、反应规律以及凝聚态结构转变行为。目标是在多能场耦合环境中利用具有优异性能的分子基元和纳米基元创造出具有颠覆性性能的宏观新材料,实现基础材料的按需精准制造和低能耗绿色制造。

## 2.2 基础元器件极限设计制造科学理论

基础元器件极限设计制造科学理论的核心问题涉及基础元器件信息处理能耗下限问题、极限尺度下信息调控编码和传输问题、跨尺度元器件在异质集成系统中的等比例缩小与可靠性问题。

基础元器件信息处理能耗下限问题。电子学元器件的最低工作能耗以及如何逼近该能耗是制约超大规模集成电路集成密度的核心理论问题。传统电子学的元器件工作机理受到玻尔兹曼热力学理论支配,存在最低的信息处理工作能耗。解决思路主要是突破电子学理论框架,探寻非电荷信息载体和新的开关存储机制。

极限尺度下信息调控、编码和传输问题。当元器件尺寸不断逼近工艺极限尺度时,信息载体呈现离散化的特征,同时受到量子效应的耦合影响,展现出多物理场相互作用。解决思路主要是探索信息的精确调控方法、信息在多物理场空间上的编码方式以及在器件之间的传输机制,借助自主开发的EDA平台建立精确的器件数学模型。

跨尺度元器件在异质集成系统中的等比例缩小与可靠性问题。当不同尺度、不同功能的元器件集成在同一系统中以满足日益增长的功能与性能需求时,受限于不同元器件的不同材料基础及其所遵循的不同物理法则,系统尺寸难以实现协同一致的等比例缩小。当把适用于不同环境的元器件集成在同一系统时,会带来元器件之间可靠性不协调的严重问题。解决思路是设计发现新的材料体系和多功能融合新器件,建立异质集成工艺平台和协同优化解决方案。

## 2.3 基础算法与软件跨尺度计算科学理论

推动数学计算科学与人工智能、脑科学、认知科学、材料电子学等跨学科的深度交叉融合,建立跨原子-分子尺度到纳米-介观尺度再到宏观尺度的智能建模理论和核心算法,创建类脑智能和博弈智

能等原始创新的核心算法。

## 3 对策建议

改革开放40年带来了科学研究真正的“春天”,我国在“四个基础”方面的研究取得了长足发展。但是,与西方长达数百年的系统科学研究相比,我国基础研究起步较晚,对“科学”内涵的理解还显薄弱,缺乏从0到1引领世界的“有所创造”的材料;缺乏原始创新的概念和理论;缺乏诺奖级别的科学研究成果,已成为我国的“科学之痛”。自然科学是运用定理、定律的思维方式,揭示自然界内在规律的知识体系,是支撑技术发展和推动社会进步的基石。不同于技术,科学不能立竿见影“直接”推动国民经济发展,科学研究不能急于求成或急功近利。因此,必须大力营造有利于破解科学难题的创新环境,创建我国“四个基础”的科学理论及技术体系,全面提高我国经济的高质量发展水平。为此,提出如下对策与建议。

1)在全社会营造“崇尚科学、用科学”的环境和氛围,提高全民的科学素质,培养好奇心,鼓励突破传统的归纳法,推崇理性的演绎法,提升创新驱动动力;

2)加强从0到1原始创新研究的教育,培养和造就一批潜心于“四个基础”科学研究、甘于“坐稳冷板凳”、具有持之以恒工匠精神的年轻队伍。倡导细微观察、不怕失败的精神,厚植批判性、前沿性、变革性和引领性思维观念;

3)在加大对基础研究资助的同时,建立长期不图回报的原始创新研究支持和资助体系。破除“权威式”导向,鼓励解放思想、打破常规思维、大胆自由探索,建立符合科学规律的宽松管理体制和评价机制;

4)加强广泛的国际交流和合作,支持连续化、系统化、国际化的“四个基础”研究,将“四个基础”的原始创新研究纳入国际评价体系,提升我国基础研究的国际影响力;

5)建立基础材料和基础原器件、基础算法和基础软件科学与化学、物理学、数学和人工智能等科学的深度交叉融合机制,大力营造协同创新的环境,突破现有国家重点实验室体系在协同创新方面存在的体制机制壁垒,建议设立“基础与材料交叉科学”国家实验室或国家创新中心。

致谢:

感谢南策文、赵东元、刘明、郭雷、程一兵五

位院士对该战略研究的指导。

### 参考文献:

- [1] 中共中央关于制定国民经济和社会发展第十四个五年规划和二〇三五年远景目标的建议. 人民日报, 2020-11-04(001).
- [2] 谢曼, 干勇, 王慧. 面向 2035 的新材料强国战略研究. 中国工程科学, 2020, **22(5)**: 1-9.
- [3] 贾豫冬, 王嘉琦. 集中力量攻克“卡脖子”技术 增强关键基础材料自主保障能力. 中国材料进展, 2020, **39(11)**: 800-801.
- [4] 蒋金华, 陈南梁, 钱晓明, 等. 产业用纺织先进基础材料进展与对策. 中国工程科学, 2020, **22(5)**: 51-59.
- [5] 冯凯. 钢铁材料与钢铁工业未来发展分析. 金属世界, 2021(2): 7-11.
- [6] 王昶, 耿红军, 宋慧玲, 等. 智能制造关键新材料创新突破的研究框架与主要议题. 资源科学, 2019, **41(1)**: 53-62.
- [7] 杨艳明, 朱明皓, 邵珠峰, 等. 我国基础零部件和元器件发展对策研究. 中国工程科学, 2017, **19(3)**: 117-124.
- [8] 刘明. 半导体存储器技术. 科技导报, 2019, **37(3)**: 62-65.
- [9] 本刊专题报道. 我国基础原材料技术推动经济社会协调发展. 科技促进发展, 2015(2): 233-238.
- [10] 屠海令, 李腾飞, 马飞. 我国关键基础材料发展现状及展望. 中国工程科学, 2017, **19(3)**: 125-135.
- [11] 陈达, 杨晓亮, 赵安中, 等. 重大技术装备用关键基础材料产业技术路线与对策解析. 功能材料, 2019, **50(5)**: 5028-5032.
- [12] 杨晓丽, 刘亭, 关欣, 等. 由日本限制向韩国出口 AMOLED 基础材料看我国 AMOLED 产业的瓶颈问题. 电子元器件与信息技术, 2019, **3(12)**: 6-9.
- [13] 黄健, 冯瑞华, 姜山, 等. 国外材料计算与模拟研究进展分析. 新材料产业, 2013(10): 48-51.
- [14] 赵曦, 王昌, 刘汉源, 等. 第一性原理计算在新型医用金属材料中的应用研究进展. 材料导报, 2018, **32(S2)**: 530-534.
- [15] 崔永杰, 刘勇, 彭帅, 等. SiBNC 体系陶瓷的材料计算研究进展. 硅酸盐学报, 2019, **47(3)**: 345-352.
- [16] 周万琦, 仇虎, 郭宇锋, 等. 基于二维材料纳米孔的生物传感器: 计算和模拟研究进展. 科学通报, 2021, **66(6)**: 657-673.