



## 研究生课程教学大纲

课程名称：	材料基因工程		
	Materials Genome Engineering		
课程编号：	ZX14201D		
开课单位：	材料科学与工程学院	开课学期：	第一学期
课内学时：	32	学分：	2
适用学科	材料科学与工程学术学位博士生		
专业及层次：	材料工程专业学位博士生		
授课语言：	中文		
先修课程：	《计算材料学》		
负责人：	张军	团队成员：	燕友果、王晓、李振

### 一、课程简介

本课程主要讲授材料基因工程的提出、发展及核心问题；以材料基因工程为背景，从高通量材料计算模拟、高通量应用材料设计、高通量材料制备表征和高通量材料数据库这四个方面介绍其中所涉及的相关基础科学和技术问题；介绍材料基因工程研究中理论、实验、数据的融合与协同方法；研讨材料基因工程前沿研究进展与发展方向。本课程是对《材料多尺度模拟》研究生课程的拓展与延伸。

通过本课程的学习，使学生全面认识材料基因工程的概念、意义、方法及发展现状，理解高通量模拟计算、高通量实验、人工智能、数据挖掘等技术的内涵，了解各种材料基因工程手段背后的理论、原理和应用，并初步掌握材料设计与模拟相关的理论知识及模拟方法，扩宽学生的学术视野。

### 二、课程大纲

#### (一) 课程目标

目标 1：了解材料基因工程、材料信息学、材料大数据的基本内涵及相互之间的区别与联系。

目标 2：掌握高通量材料计算模拟、高通量材料制备与表征的基本方法。

目标 3：深刻认识材料基因工程的意义、发展现状、存在的问题与挑战、未来发展方向。

目标 4：以本课程涉及的研究领域为依托，提高学生文献综述、学术报告能力。

## (二) 课程内容

### 第一章 绪论

本章重点难点：材料基因工程的内涵

#### 1.1 材料基因工程的概念与内涵

从“人类基因组计划”到“材料基因组计划”，材料基因工程内涵与意义。

#### 1.2 材料基因工程的提出与发展

《材料基因组计划》的目标与进展。

#### 1.3 材料基因工程国内外研究现状

材料基因工程各国政府发展政策分析，国内外材料基因工程研究机构介绍，材料基因工程学术会议介绍，材料基因工程研究进展概述。

### 第二章 材料信息学与材料大数据

本章重点难点：材料信息学的内涵和实施途径、数据挖掘方法

#### 2.1 材料信息学

材料信息学的概念和内涵，材料信息学的应用，利用材料信息学进行知识发现的流程。

#### 2.2 材料数据的产生途径

计算驱动，实验驱动。

#### 2.3 材料数据的管理

材料数据库，国内外材料数据库介绍，材料数据库的应用。

#### 2.4 材料数据挖掘

材料研究中的数据挖掘技术，包括线性和非线性分析、回归分析、因素分析和聚类分析、决策树理论、人工神经网络等；数据挖掘方法在材料中的应用。

#### 2.5 材料信息学的问题与挑战

海量数据管理，数据准确性，数据分析与挖掘的准确性。

### 第三章 高通量材料计算模拟

本章重点难点：计算模拟的高通量管理

#### 3.1 多尺度材料计算模拟

产出材料数据的计算模拟方法，包括第一性原理、分子动力学、相场模拟、有限元分析等。

#### 3.2 高通量材料计算与多尺度模拟集成

多种模拟方法的集成，材料计算模拟的高通量管理技术。

### 3.3 应用实例

结构材料设计应用介绍，能源材料设计应用介绍，生物材料设计应用介绍。

以“学术沙龙”形式展开研讨，围绕多尺度计算模拟、材料计算数据挖掘、高通量管理等方面，学生自选题目，通过文献调研与综述，进行学术报告。

## 第四章 高通量材料制备表征

本章重点难点：材料制备与表征的高通量控制方法

### 4.1 高通量材料制备

高通量材料制备的概念，高通量制备方法（包括扩散多元节法、共沉积法、物理掩膜法、喷印合成法、微流控合成法等）。

### 4.2 高通量材料表征

高通量成分与结构检测方法（同步辐射、散裂中子源、数字化三维微观结构表征），高通量性能检测方法（高通量微区热力学/力学/电化学表征、高通量催化/光学/电磁学性能表征）。

### 4.3 应用实例

以“学术沙龙”形式展开研讨，围绕高通量材料制备与表征，学生自选题目，通过文献调研与综述，进行学术报告。

## 第五章 材料基因工程数据库

本章重点难点：材料基因工程数据库的特点和要求

### 5.1 传统材料数据库

数据库概念，材料数据库的分类，国内外材料数据库介绍。

### 5.2 材料基因工程的共享数据库

材料基因工程数据库的特点，国内外材料基因工程数据库介绍。

### 5.3 材料基因工程数据库发展方向

数据库的匹配功能，数据库的数据收集和输出功能，数据库的在线集成计算和分析功能。

## 第六章 材料高通量实验的流程

本章重点难点：材料高通量实验的实现手段

### 6.1 理论和实验的融合与协同

材料计算数据与材料实验数据的关系，理论计算与实验结合现状及挑战，理论计算与实验结合的未来发展方向。

### 6.2 数据的采集与管理

数据库技术，Python、Matlab等程序语言或工具在高通量数据采集与管理中的应用。

### 6.3 未来发展展望

理论与实验的结合，材料计算效率的提高，数据应用和管理规范的制定等。

根据对本课程的掌握与理解，展开研讨，评价材料基因工程的现状、挑战与未来。

### 三、教学安排及要求

内容	课内学时	教学方式	课外学时	课外环节	课程目标
第一章	4	理论讲授			目标 1
第二章	4	理论讲授			目标 1、3
第三章	8	理论讲授、案例研讨	8	专题调研	目标 2、4
第四章	8	理论讲授、案例研讨	8	专题调研	目标 2、4
第五章	4	理论讲授			目标 2
第六章	4	理论讲授			目标 3

### 四、考核内容、方式及评分标准

#### (一) 考核环节

考核环节		总成绩占比	支撑课程目标
课堂表现	1. 本课程要求每个学生有一次课堂报告。 2. 成绩采用百分制，主要根据 PPT 准备、讲述表现、讨论表现等评分。	50%	目标 3、4
课程报告	1. 本课程要求每个学生提交一份课程总结报告。 2. 成绩采用百分制，主要根据对本课程各部分掌握情况、撰写规范、报告内容丰富程度和逻辑性等评分。	50%	目标 1、2、3

#### (二) 评分标准

考核环节	<60	60-75	75-90	90-100
课堂表现	课堂报告不流畅，PPT 制作较差、离题，报告混乱、难以理解。	课堂报告基本完整，PPT 制作一般，报告内容基本切题，能够回答部分提问。	课堂报告较流畅，PPT 制作较好，报告内容较完整、基本切题，能够对提问进行回答。	课堂报告流畅，PPT 美观整洁，报告深入浅出、切题，对提问的回答充分。

课程报告	报告中没有对课程的理解和思考，报告不规范、内容不完整。	报告中有少量的思考和分析，报告内容和格式一般。	报告包含了学生的部分思考和理解，报告内容较完整、格式较规范。	报告体现出学生对课程的思考和深刻理解，报告内容详实、格式规范。
------	-----------------------------	-------------------------	--------------------------------	---------------------------------

## 五、教材与参考资料

1. Rajan, K., Informatics for Materials Science and Engineering, Ed. Butterworth-Heinemann: Oxford, 2013
2. 坚增运等, 计算材料学, 化学工业出版社, 2012
3. 潘教峰等, 第四范式: 数据密集型科学发现, 科学出版社, 2012
4. 陈禹保等, 高通量测序与高性能计算理论和实践, 北京科学技术出版社, 2017
5. 王阜等, 材料信息学及其在材料研究中的应用, 中国材料进展, 2017, 36(2), 132-140
6. 关洪达等, 材料高通量制备与表征技术研究进展, 稀有金属材料与工程, 2019, 48 (12) , 4131-4140
7. 杨丽等, 材料数据库和数据挖掘技术的应用现状, 中国材料进展, 2019, 38 (7) , 672-681

## 六、其它说明

无

大纲执笔人：张军、李振

审核人（学位点负责人）：

分管院长签字：