ژنوم مواد (MGI): نوآوری برافکن در کشف، طراحی، توسعه و تجاری‌سازی مواد جدید

حسین کیوان بهجو[۲،۱]، مالک نادری*[۲،۱]

چکیده

توسعه هر فناوری، به‌شدت وابسته به تأمین مواد و ترکیبات مورد نیاز است. اگر شتاب کشف و معرفی و تولید مواد نوین با شتاب توسعه فناوری همخوانی نداشته باشد، قطعاً توسعه فناوری‌های نوین با چالش اساسی مواجه خواهد شد. روش‌های متداول کشف و تولید مواد که به‌طور عمده متمرکز بر روش‌های تجربی و گاهی همراه با محاسبات می‌باشد، پاسخگوی این شتاب نبوده است. برنامه ژنوم مواد که توسط ایالات متحده آمریکا در سال ۲۰۱۱ معرفی شد، بر مبنای بانک داده بسیار قوی، ابزارهای محاسباتی (از جمله شبکه گراف معرفی شده توسط گروه تفکر عمیق گوگل) و آزمایشگاه خودران مستقر در آزمایشگاه ملی لارنس برکلی، تحول بی‌بدیلی در طراحی، کشف، تولید و کاربردی‌سازی مواد نوین و ناموجود برای خلق فرصت‌های جدید در اختیار فناوری‌های بدیع و نوظهور فراهم کرد. با این ابزارها، زمان دستیابی به این مواد از بیش از دو دهه به کمتر از یک سال کاهش یافت. این یک تحول برافکن در حوزه فناوری است. عدم آشنایی و ورود به این حوزه قطعاً در کوتاه‌مدت و بلندمدت غافلگیری فناوری بسیار جدی را رقم خواهد زد. پیشنهاد این است که در کوتاه‌مدت، برنامه راهبردی ژنوم مواد ایران تدوین و در یک برنامه میان‌مدت در بازه ۵ تا ۷ سال آزمایشگاه خودران در حوزه ژنوم مواد راه‌اندازی شود. بدیهی است، تأسیس یک مرکز ملی ژنوم مواد برای راهبری این برنامه ضروری خواهد بود.

واژگان کلیدی: رویکرد ژنوم مواد (MGI)، زیرساخت نوآوری مواد، نوآوری برافکن و پروژه مواد

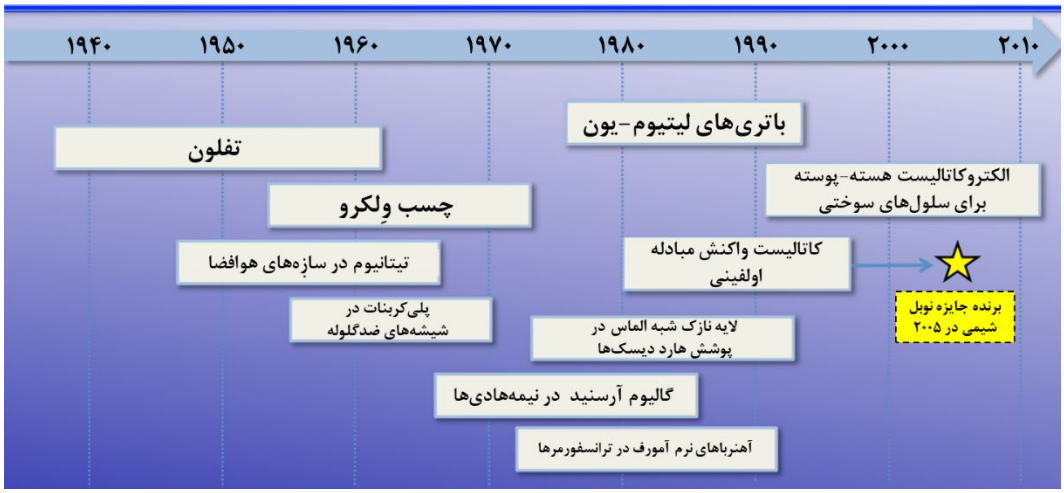
* عهده‌دار مکاتبات، استاد، تلفن/نمابر: ۶۴۵۴۲۹۹۲ (۲۱ ۹۸+)، نشانی الکترونیکی: Mnaderi@aut.ac.ir

[۱] آزمایشگاه گرافن و مواد پیشرفته (گام)، برج فناوری و نوآوری شماره ۱ (ساختمان ابن سینا)، دانشگاه صنعتی امیرکبیر (پلی‌تکنیک تهران)، تهران، ایران.

[۲] دانشکده مهندسی مواد و متالورژی، دانشگاه صنعتی امیرکبیر (پلی‌تکنیک تهران)، تهران، ایران.

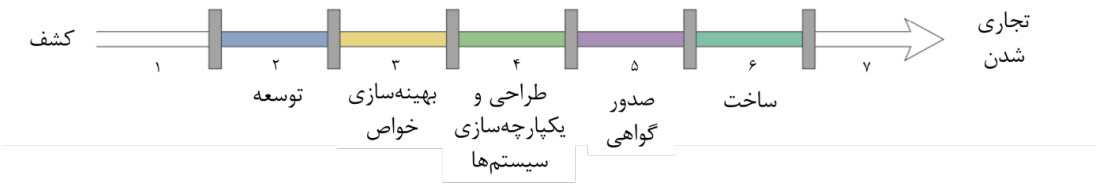
مقدمه

با شروع دهه ۱۹۸۰ میلادی، جهش‌های فنّاورانه و پیشرفت‌های اقتصادی کشورها بیش‌از گذشته به توسعه مواد جدید وابسته شد. ایجاد صنایع نوظهور و با ارزش میلیاردها دلار در سال‌های اخیر، به کمک مواد جدید صورت گرفت. این امر موجب شد تا راه‌حل‌های متنوّعی برای چالش‌های حوزه انرژی، امنیت ملی و رفاه بشری یافت شوند [۲,۱]. به‌عنوان مثال، باتری‌های لیتیوم-یون، چشم‌انداز جدیدی را برای فناوری‌های عرصه حمل‌ونقل ترسیم کردند. امروزه این باتری‌ها در تمام دستگاه‌های الکترونیکی (به‌ویژه موارد قابل‌حمل) یافت می‌شوند. امّا، حدود ۲۰ سال طول کشید (شکل ۱) تا این باتری‌ها از یک ایده آزمایشگاهی در اواسط دهه ۱۹۷۰ میلادی به بازار عرضه شوند [۴,۳].



شکل ۱: مدت زمان مورد نیاز برای تجاری شدن تأثیرگذارترین مواد در قرن ۲۰ میلادی [۵].

برای کاهش این زمان و هزینه‌های مربوط به آن، تلاش‌های بسیاری هم‌زمان با آغاز قرن ۲۱ میلادی انجام گرفت. در سال ۲۰۰۲ میلادی شرکتی تحت عنوان Materials Genome®، متأثر از موفقیت مدل محاسباتی دیاگرام‌های فازی[1] (CALPHAD) و با الهام از برنامه ژنوم انسان[2] (HGP) تأسیس شد [۶]. هدف از تأسیس این شرکت، تأمین زیرساخت‌های نرم برای توسعه مواد، از قبیل پایگاه داده و ابزارهای محاسباتی بر اساس نیاز مشتریان بود. اطلاق واژه «ژنوم» به مواد، شاید بر این اساس بوده است که در این مسیر، داده‌های مربوط به هر عنصر و ساختار در مواد به صورت نظام‌مند با هم ترکیب شده و مواد جدیدی خلق و معرفی می‌شوند. هرچند، در سال‌های بعد گروه تفکر عمیق گوگل (Google DeepMind Team) عبارت شبکه‌های گراف برای اکتشاف مواد[3] (GNoME) را برای نزدیک کردن دیدگاه‌ها معرفی کرد [۷]. بزنگاه سلسله اقدامات انجام‌شده در این حوزه، به سال ۲۰۱۱ میلادی برمی‌گردد. در ۲۴ ژانویه این سال، انجمن ملی علم و فناوری ایالات متحده آمریکا[4] (NSTC) گزارشی را با عنوان «MGI برای رقابت‌پذیری جهانی» منتشر کرد. در این گزارش اذعان شده بود که یکی از موانع تجاری‌شدن سریع مواد جدید، به‌کارگیری روش متداول و مبتنی بر آزمون و خطاست که در طی آن مواد به صورت گام‌به‌گام مراحل توسعه خود را طی می‌کنند (شکل ۲) [۹,۸].

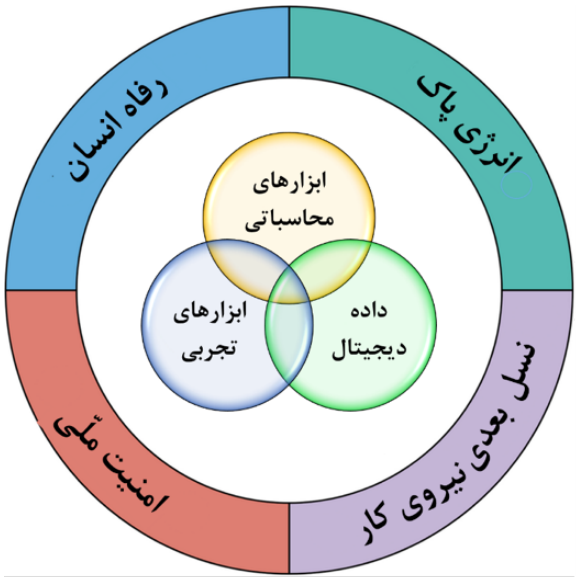


شکل ۲: روش متداول تجاری‌شدن یک ماده جدید [۹].

[1] CALculation of PHAse Diagrams
[2] Human Genome Project
[3] Graph Networks for Materials Exploration
[4] National Science and Technology Council

در این روش یک ماده جدید در ۷ گام، از ایده اولیه به یک محصول قابل‌عرضه در بازار تبدیل می‌شود. هر گام توسط تیم‌های مهندسی یا علمی متفاوتی انجام می‌شوند؛ امّا در این روش، بستری برای به اشتراک گذاشتن تجربیات وجود ندارد تا سرعت تیم‌ها افزایش یابد. به‌عنوان نمونه، در مرحله کشف بسیار مهم است که محققان به یک پایگاه‌داده جامع دسترسی داشته باشند تا براساس آن مدل‌های خود را پایه‌گذاری کنند؛ بنابراین قادر می‌شوند تا تصویر کامل‌تری از ویژگی‌های یک ماده را ارائه کنند. همچنین نبود یک دستورالعمل استاندارد که بر اساس آن دانشمندان مدل‌های پیش‌بینی و محاسباتی عملکرد مواد مختلف را با یکدیگر به اشتراک بگذارند، مانع تجاری‌شدن سریع مواد نوین و نوظهور شده است. در روش متداول لازم بود تا الگوهای محاسباتی قدرتمند، وابستگی محققان را به تجربیات فیزیکی کاهش دهند؛ بنابراین در روش جدید، نظام اشتراک داده‌ها اصلاح شد و تیم‌های مهندسی یکپارچه شدند تا هر تیم بتواند تعامل اثربخش‌تری را با سایر تیم‌ها داشته باشد.

هم‌زمان با انتشار گزارش NSTC، رئیس‌جمهور وقت آمریکا، به‌طور رسمی عنوان کرد که: «برای کمک به کسب‌وکارها در کشف، توسعه و به‌کارگیری دو برابر سریع‌تر مواد جدید، MGI را دنبال خواهیم کرد. اختراع مدارهای سیلیکونی و باتری‌های لیتیوم–یون



شکل ۳: ارکان و اهداف کلی زیرساخت نوآوری مواد در رویکرد ژنوم مواد [۹].

بود که تولید رایانه‌ها، آی‌پادها و آی‌پُدها[1] را امکان‌پذیر کرد؛ امّا سال‌ها طول کشید تا این فناوری‌ها از میز طراحی به بازار عرضه شوند. ما می‌توانیم این مسیر را سریع‌تر طی کنیم». بنابراین به‌منظور بهره‌برداری از MGI، مجموعه‌ای از ابزارها و ظرفیت‌های میان‌رشته‌ای باعنوان زیرساخت نوآوری مواد[2] در گزارش NSTC معرفی شد. این زیرساخت که بر ۳ رکن اصلی ابزارهای محاسباتی، ابزارهای تجربی و داده‌های دیجیتال استوار است، در نظر دارد تا ۴ هدف بهبود رفاه انسان‌ها، تضمین امنیت در سطح ملی، گسترش فرهنگ استفاده از انرژی‌های پاک و آموزش نسل بعدی نیروی کار را تحقق بخشد (شکل ۳).

ارکان و اهداف کلی MGI

مطابق زیرساختی که NSTC برای توسعه MGI تعریف کرد، محققان با استفاده از ابزارهای محاسباتی همچون نرم‌افزارهای مدل‌سازی، از انجام برخی آزمایش‌های فیزیکی پرهزینه برای اعتبارسنجی عملکرد مواد بی‌نیاز می‌شوند. همچنین این ابزارها محققان را قادر می‌سازد تا خواص مواد را در شرایط کاری مختلف پیش‌بینی کنند. به‌عنوان مثال، تغییر ناخواسته استحکام کششی یک پیچ در طول فرآیند ساخت برای عملکرد آن بسیار مخرب است. پیش‌بینی اثر این تغییرات در مورفولوژی و خواص پیچ، طراحی سریع‌تر و مطمئن‌تری را رقم می‌زند. پر واضح است که محاسبات نظری به‌تنهایی قادر به ارائه یک مدل دقیق نیستند. در این شرایط، انجام آزمایش‌های تجربی این شکاف را پر می‌کنند. اصلاح مستمر محاسبات با داده‌های جدید، مدل‌هایی کارآمدتر را به‌همراه دارد. بنابراین خواص مواد در حین تولید، با آزمون‌های مشخصه‌یابی درمحل، به‌صورت لحظه‌ای پایش می‌شود. بدین‌ترتیب، هر محقق قادر می‌شود تا داده‌های خود را به یک مدل بهینه تبدیل کند، اما هدف از MGI وسیع‌تر است. این هدف در مقیاسی جامع‌تر، شامل ایجاد یک شبکه یکپارچه انتقال و ذخیره داده میان محققان رشته‌ها و مؤسسات مختلف می‌شود. در نتیجه، می‌توان انتظار داشت که محققان با دسترسی گسترده به تجربیات سایر افراد، مدل‌های بهینه و دقیق خود را سریعتر ارائه کنند. به‌عنوان نمونه می‌توان به وبگاه nanoHUB اشاره کرد. این پایگاه‌داده، در راستای یکی از

[1] iPads and iPods
[2] Materials Innovation Infrastructure

برنامه‌های بنیاد ملی علم آمریکا[1] (NSF) ایجاد شد. از طریق آن محققان می‌توانند برنامه‌های مدل‌سازی و شبیه‌سازی و داده‌های مرتبط با حوزه فناوری نانو را دریافت و استفاده کنند [۹].

حال این سؤال مطرح می‌شود که قرار است با MGI به چه چالش‌هایی پاسخ داده شود؟ اولین چالش ذکر شده در گزارش NSTC، تضمین امنیت ملی کشور ایالات متحده آمریکا است. هر فرد در ایالات متحده به‌طور متوسط سالانه ۲۵,۰۰۰ پوند مواد معدنی غیرسوختی[2] مصرف می‌کند. از این مواد معدنی، تعدادی حیاتی تلقی می‌شوند. منظور از یک ماده معدنی حیاتی ماده‌ای است که یا زنجیره تأمین آن با تهدید جدی مواجه است و یا محدودیت در عرضه آنها اثرات مخرب شدیدی را به‌دنبال خواهد داشت. استفاده از MGI به محققان کمک می‌کند تا بتوانند برای مواد معدنی حیاتی (به‌ویژه عناصر نادر خاکی)، در زمان بسیار کوتاه جایگزینی را با همان کارایی پیدا کنند. بدین ترتیب، وابستگی صنایع مختلف (از جمله نظامی) به منابع ناپایدار داخلی یا خارجی تأمین این مواد رفع می‌شود. چالش دوم، ارتقای سطح رفاه انسان‌ها با استفاده از مواد پیشرفته است. ضربه مغزی پدیده‌ای است که حدود ۳۶۰,۰۰۰ نظامی آمریکایی در جنگ عراق و افغانستان با آن مواجه شدند و سالانه ۱٫۷ میلیون انسان در تصادفات دچار این ضایعه می‌شوند. تخمین زده شده که هرسال حدود ۶۰ میلیارد دلار اعتبار به درمان آسیب‌های ناشی از ضربه‌مغزی اختصاص می‌یابد. به کمک MGI می‌توان بهینه‌سازی مواد طراحی‌شده ساخت ادوات محافظتی بخش‌های نظامی و غیرنظامی را با سرعت بیشتر و هزینه کمتر دنبال کرد. MGI همچنین قادر است تا به چالش‌های حوزه انرژی پاک پاسخگو باشد. از ۱۲ میلیون بشکه نفت وارداتی آمریکا در سال ۲۰۰۹ میلادی، دو سوم آن برای حمل‌ونقل استفاده شد. جهت کاهش این عدد می‌توان مبتنی بر MGI، ابزارهایی را برای بهینه‌سازی و به‌کارگیری مواد سازه‌ای جدید، کارآمد، سبک و مقرون‌به‌صرفه فراهم کرد. در نتیجه دستگاه‌هایی قابل‌حمل برای ذخیره‌سازی و تولید انرژی پاک ساخته خواهند شد. چالش آخر، تجهیز نسل بعدی نیروی کار به ابزارها و رویکردهای لازم برای دستیابی به اهداف ملی است. دانشگاه‌ها و بنیادهای علمی موظف هستند تا مهندسان آینده را به استفاده از الگوهای محاسباتی در حل مسئله و به اشتراک گذاشتن نتایج خود تشویق کنند. این امر مستلزم آن است که متولیان امر در دولت، دانشگاه و صنعت مفاد MGI را بپذیرند و به‌طور مداوم آن را توسعه بدهند [۹].

اهرم‌های راهبری MGI

بعد از گذشت ۳ سال از انتشار گزارش NSTC، سند برنامه راهبردی MGI توسط همین نهاد تهیه و در سال ۲۰۱۴ میلادی منتشر شد. مقرر شد تا آژانس‌های فدرال در چارچوب این سند اهداف MGI را محقق کنند. در سال ۲۰۲۱ میلادی، این سند به‌روزرسانی شد. در نسخه جدید، اهداف پنج سال آینده به‌همراه شرح وظایف نهادها براساس پیشرفت‌های یک دهه قبل MGI ارائه گردید. با مطالعه هر دو نسخه این سند، مشخص گردید که MGI با محوریت ۳ بازیگر اصلی توسعه چشمگیری یافته است:

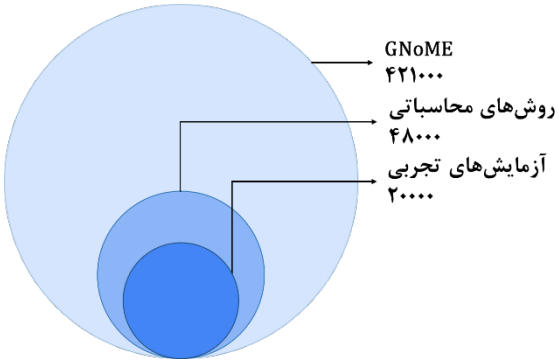
۱. پایگاه‌داده پروژه مواد[3] (MP)

مبتکرین ایده MGI، داده‌های مربوط به پایداری فاز میلیون‌ها ترکیب را جمع‌آوری کردند و آنها را از طریق درگاه MP (www.materialsproject.org) و تحت نظارت آزمایشگاه ملی لارنس برکلی[4] (LBNL) در اختیار همگان قرار دادند. هدف اصلی از ایجاد این پایگاه‌داده، متمرکز کردن آزمایش‌ها بر روی ترکیباتی است که احتمال تشکیل شدن آنها به‌صورت پایدار بیشتر از سایرین است. در حال حاضر MP با بیش از ۵۰۰,۰۰۰ کاربر در سراسر جهان، داده‌های مربوط به ۱۵۳,۲۳۵ ماده و ۲۲۱,۵۹۸ مولکول را محاسبه و منتشر کرده است [۱۰].

۲. ابزار محاسباتی GNoME

در سال ۲۰۲۳ میلادی، گروه تفکر عمیق گوگل GNoME را با انتشار یک مقاله در مجله «Nature» معرفی کرد [۱۱]. GNoME یک الگوی یادگیری عمیق نوین است که با پیش‌بینی پایدار بودن مواد جدید (برمبنای انرژی تجزیه)، سرعت و کارایی اکتشاف آنها را به‌طور چشمگیری افزایش داد. در مقاله عنوان گردید که با استفاده از GNoME، تعداد ۲٫۲ میلیون ساختار کریستالی جدید تنها در عرض ۲ سال پیش‌بینی شد. از این بین، ۳۸۰,۰۰۰ مورد به‌عنوان پایدارترین ساختارها تعیین شدند تا به‌صورت تجربی ادعای پایدار بودن آنها در عمل هم بررسی شود (شکل ۴). اگر قرار بود این کار بدون استفاده از ابزار GNoME انجام شود، باید معادل ۸۰۰ سال کار پژوهشی انجام می‌شد [۱۱].

[1] National Science Foundation
[2] Non-Fuel Minerals
[3] Materials Project
[4] Lawrence Berkeley National Laboratory

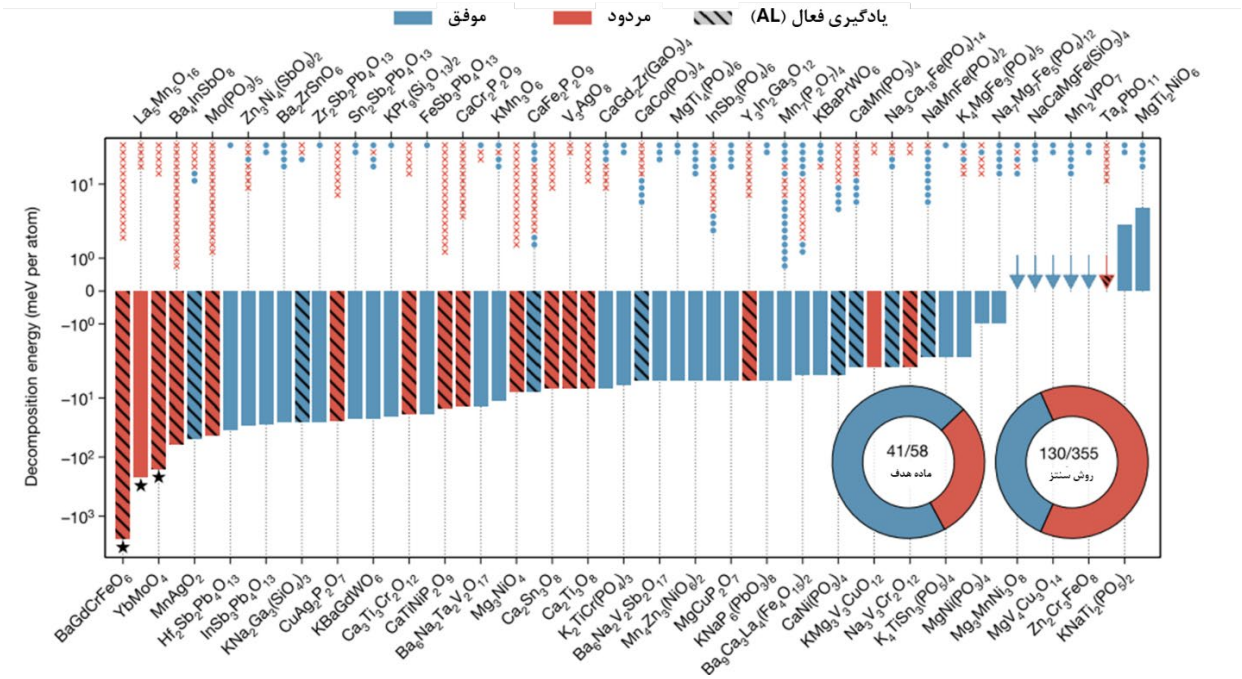


شکل ۴: حدود ۲۰,۰۰۰ کریستال پایدار در دهه‌های مختلف و بطور تجربی در پایگاه‌داده ساختارهای کریستالی معدنی[1] (ICSD) ثبت شدند. رویکردهای محاسباتی مبتنی بر داده‌های ۳ پایگاه MP، OQMD[2] و WBM[3] این عدد را به ۴۸,۰۰۰ رساند. در نهایت ابزار محاسباتی GNoME موفق شد تا تعداد کریستال‌های پایدار را به ۴۲۱,۰۰۰ افزایش دهد [۱۲].

۳. آزمایشگاه خودران[4] (A-Lab) لارنس برکلی

تاکنون ۷۳۶ مورد از ۳۸۰,۰۰۰ ساختار پایدار معرفی شده توسط GNoME در آزمایشگاه‌های مختلفی سنتز شده است [۱۲]. یکی از این آزمایشگاه‌ها، A-Lab واقع در LBNL است که توانست در مدت فقط ۱۷ روز و با استفاده از داده‌های دو بستر Google DeepMind و MP، ۴۱ ترکیب جدید را از میان ۵۸ ترکیبی که هدف‌گذاری کرده بود (معادل ۷۱٪ بهره‌وری) سنتز کند. در این پژوهش، با به‌کارگیری الگوهای یادگیری ماشین[5] (ML) بر روش‌های سنتز موجود در منابع، ۳۵۵ روش سنتز کشف شد و مورد استفاده قرار گرفت (شکل ۵)[۱۳].

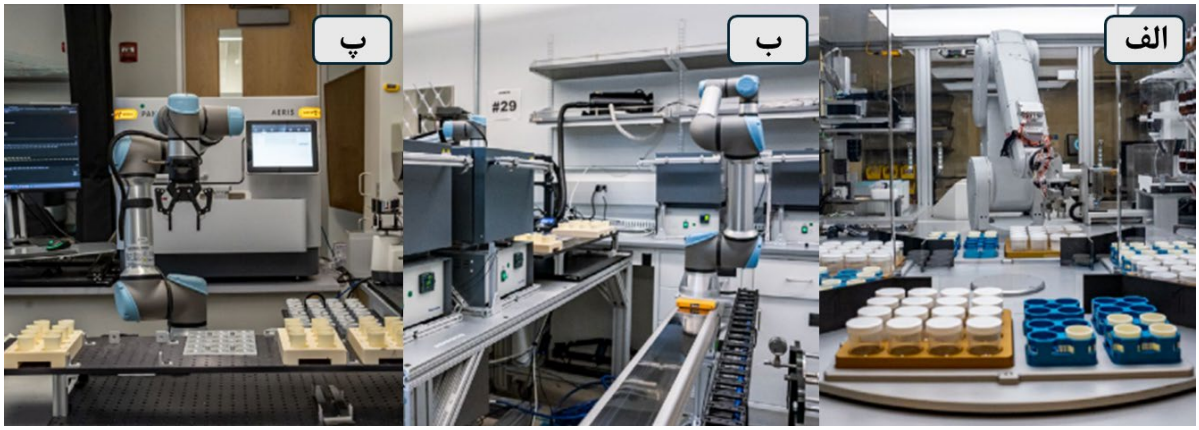
A-Lab با استفاده از سه بخش مجهز به بازوی رُباتیک (به مساحت حدود m^2 ۵۵)، تمام مراحل آماده‌سازی نمونه و مشخصه‌یابی پژوهش‌های خود را به‌صورت خودکار پیش می‌برد و قادر است بین ۱۰۰ تا ۲۰۰ سنتز را تنها در یک شبانه‌روز انجام دهد (شکل ۶). رُبات بخش اول A-Lab، موظف است تا از میان ۲۰۰ پودر آزمایشگاهی، پیش‌ماده‌های لازم برای سنتز یک ترکیب مشخص را وزن و با نسبت معیّنی مخلوط کند. در بخش دوم، رُبات دیگری بوته‌های حاوی این مخلوط ها را درون یک کوره آزمایشگاهی می‌گذارد. در این بخش، هوش مصنوعی (AI[4]) تعیین می‌کند که



شکل ۵- نتیجه سنتز مواد پایدار پیش‌بینی شده در A-Lab؛ میله‌های آبی رنگ نشان‌دهنده سنتز موفق و میله‌های قرمز رنگ بیانگر عدم‌موفقیت در سنتز ترکیب‌های هدف است [۱۳].

[1] Inorganic Crystal Structure Database
[2] Open Quantum Materials Database
[3] Wang, Botti and Marques
[4] Artificial Intelligence
[4] Autonomous Laboratory
[5] Machine Learning

برای دستیابی به خواص مورد نیاز، چه دما و اتمسفری باید به مخلوط ها اعمال شود. پس از خروج بوته‌ها از کوره و خنک شدن، رُبات بخش سوم آنها را آسیاب کرده و ساختار تشکیل شده را با روش پراش اشعه ایکس[1] (XRD) مورد مطالعه قرار می‌دهد. تمام نتایج جهت بهینه کردن فرآیند به هوش مصنوعی ارجاع داده می‌شود. در واقع عملکرد این آزمایشگاه خودران[2]، از طریق یک برنامه نرم‌افزاری کنترل می‌شود و امکان بررسی در لحظه را برای محققان انسانی فراهم می‌کند [۱۴].



شکل ۶: بخش‌های رُباتیک الف) تهیه پودر، ب) عملیات حرارتی نمونه‌ها و پ) مشخصه‌یابی با **XRD** در **A-Lab** [۱۳].

نتیجه‌گیری

باتوجه‌به آنچه گفته شد، کشف، مشخصه‌یابی و صنعتی‌شدن مواد جدید در توسعه نسل بعدی فناوری‌ها از اهمیت بالایی برخوردار است و در قرن ۲۱ میلادی، MGI می‌تواند یک کشور را بسیار سریع‌تر و ارزان‌تر از سایر رقبا به این هدف برساند. در این راستا، مثال‌هایی از به‌کارگیری این رویکرد در پاسخ به چالش‌های نظامی، سلامت و انرژی کشور آمریکا بیان شد. کشور ایران هم با برخورداری از مزیت رقابتی در عرصه هوش مصنوعی و ابزارهای پیشرفته محاسباتی قادر است که خود را در زمره سرآمدان MGI قرار دهد و از یک غافلگیری فناورانه بی‌سابقه جلوگیری کند. پیشنهاد می‌شود در کوتاه‌مدت برنامه راهبردی ملی ژنوم مواد با لحاظ کردن ظرفیت‌های ملی و بین‌المللی تدوین و به تصویب بالاترین رکن تصمیم‌گیری نظام توسعه علمی و فناوری کشور برسد. بدیهی است، طراحی و تأسیس یک آزمایشگاه ملی خودران برای توسعه برنامه ژنوم مواد و همراه‌سازی یک ابزار محاسباتی ابری بسیار قوی برای تسریع و تسهیل تحقیقات دانشمندان ملی و بین‌المللی بسیار ضروری است.

منابع و مآخذ

[1]. Moskowitz, S. L., (2008). The Advanced Materials Revolution: Technology and Economic Growth in the Age of Globalization. Wiley.
[2]. Roberto, J., (2010). Computational Materials Science and Chemistry for Innovation, Office of Science, U.S. Department of Energy, Washington, District of Columbia, United States.
[3]. Brodd, R. J. Comments on the History of Lithium-Ion Batteries, Broddarp of Nevada, Inc.
[4]. Whittingham, M. S., (1976). Electrical Energy Storage and Intercalation Chemistry, Science, Vol. 192, Issue 4244, PP. 1126–1127.
[5]. Eagar, T. W., (1995). Bringing new materials to market, Technology Review, Vol. 98, Issue 2, PP. 42–49.
[6]. Liu, Z., (2014). Perspective on Materials Genome®, Chinese Science Bulletin, Vol. 59, Issue. 15, PP. 1619–1623.
[7]. Long, B., Amaral, G. S., Dessauw, P., & Bouhanni, H., (2024). Community-Scale Problem-Solving: Reflections on a Decade of Infrastructure Development in the MGI, Integrating Materials and Manufacturing Innovation, Vol. 13, Issue 3, PP. 622–640.
[8]. Xie, J., (2023). Prospects of materials genome engineering frontiers, Materials Genome Engineering Advances, Vol. 1, Issue 2.
[9]. (2011). Materials Genome Initiative for Global Competitiveness, The Office of Science and

[1] X-ray Diffraction
[2] Self-Driving Laboratory

Technology Policy, National Science and Technology Council (NSTC), Washington, District of Columbia, United States.
[10]. Subcommittee on the Materials Genome Initiative, N. (2021). Materials Genome Initiative Strategic Plan. http://www.whitehouse.gov/ostp.
[11]. [۱۱] Merchant, A., Batzner, S., Schoenholz, S. S., Aykol, M., Cheon, G., & Cubuk, E. D., (2023). Scaling deep learning for materials discovery, Nature, Vol. 624, Issue 7990, PP. 80–85.
[12]. Merchant, A., & Cubuk, E. D., (2023). Millions of new materials discovered with deep learning, Google DeepMind.
[13]. Szymanski, N. J., et al., (2023). An autonomous laboratory for the accelerated synthesis of novel materials, Nature, Vol. 624, Issue. 7990, PP. 86–91.
[14]. Biron, L., (2023). Meet the Autonomous Lab of the Future, Lawrence Berkeley National Laboratory, University of California, California, United States.

Science and Education

Materials Genome Initiative (MGI): A Disruptive Innovation in Discovery, Design, Development and Deployment (4Ds)

Hossein Keivan Behjoo [1,2], Malek Naderi [1,2,*]

The advancement of any technology is inherently dependent on the availability of suitable materials and compounds. A misalignment between the pace of novel material discovery, development, and production and the rapid progression of technological innovation poses a critical challenge to the development of emerging technologies. Traditional approaches to material discovery, predominantly based on experimental methods supplemented by computational techniques, have proven inadequate to address this gap. The Materials Genome Initiative (MGI), launched by the United States in 2011, represents a paradigm shift in the design, discovery, and deployment of novel materials. By integrating robust databases, advanced computational tools-such as Graph Networks for Materials Exploration (GNoME) pioneered by Google DeepMind-and autonomous laboratories, such as those at Lawrence Berkeley National Laboratory, MGI has dramatically accelerated the timeline for material discovery. What once required over two decades can now be achieved in less than a year, enabling unprecedented opportunities for groundbreaking and transformative technologies. Failure to engage in this field will inevitably lead to significant technological vulnerabilities, both in the near and distant future. To address this, a strategic roadmap for the Iranian Materials Genome Initiative is proposed as an immediate priority. Additionally, the establishment of an autonomous materials genome laboratory within a 5- to 7-year timeframe is essential. To oversee and coordinate such efforts, the creation of a National Materials Genome Center is imperative.

Keywords: Materials Genome Initiative, Materials Innovation Infrastructure, Disruptive Innovation and Materials Project

* Corresponding Author, Professor, Tel/Fax:((+9821) 64542992, E-mail: mnaderi@aut.ac.ir

[1] Department of Materials and Metallurgical Engineering, Amirkabir University of Technology, Tehran, Iran

[2] Graphene and Advanced Materials Laboratory (GAMLab), Amirkabir University of Technology, Tehran, Iran