

计算材料学是近年来飞速发展的一门新兴交叉学科,它综合了材料科学、物理、化学、计算机及人工智能等多个学科。通过利用高性能的超级计算机模拟材料行为并预测其物理化学性质,深入理解材料从微观到宏观多个尺度的各类现象与特征,为新材料设计提供指导。相较于传统的材料研究,计算材料学能够有效推动新材料研发并提高设计效率,更直观地理解材料性质与成分、结构间的内在关系,为纷繁多样的材料功能提供直接的微观机理解释,进而推动材料研发及应用。

数据与理论共舞:计算材料学推动高效体系化新材料设计

——计算材料学分论坛侧记

文 / 西安交通大学 孙苏阳 王晓哲

本次“2020新材料国际发展趋势高层论坛——计算材料学分论坛”吸引了众多学者的兴趣与关注,会场气氛十分火爆。分论坛由孙志梅、宿彦京、曾小勤、刘峰4位教授主持,邀请了16位计算材料学领域的知名专家、学者与会作报告。报告内容涵盖了材料基因数据库、新材料高通量筛选研发、一体化集成计算平台、机器学习等先进技术,以及合金结构材料、电极材料、信息存储材料、热电能源材料、光电转换材料等材料体系。



孙志梅 教授



宿彦京 教授



曾小勤 教授



刘峰 教授

精彩报告

北京科技大学宿彦京教授针对机器学习模型的可解释性问题,介绍了利用多模型筛选技术得到的固溶强化数学表达式,其预测精度高于基于材料固溶强化机理的数学模型;发展的紧凑型遗传编程算法,得到了具有NaCl结构且满足量纲分析的材料带隙数学表达式,并可拓展到具有ZnS结构的材料带隙的预测,从数学表达式得到的信息与带隙的物理解释类似。

中南大学杜勇教授介绍了团队在软件开发、科学数据库建设方面的研究成果,并展示了材料设计与产品设计一体化的几个实例,包括自主研发的多元合金热物性计算程序CALTPP、多尺度相场模型、具有自主知识产权的轻合金和硬质合金科学数据库等。

湖南大学胡望宇教授针对现有金属钨势函数不能准确预测位错环形成能的问题,分享了团队构建的钨及钨合金的势函数及一个金属钨高中低能级碰撞模拟的数据库,涵盖了钨嬗变元素铼(Re)与典型辐照缺陷(如间隙型位错环、晶界等)的相互作用。

北京航空航天大学孙志梅教授介绍了自主研发的高通量集成计算软件平台ALKEMIE Matter Studio及材料数据库ALKEMIE Data Vault。基于该平台,孙教授团队发现了双层二维钼硫氧固溶体中存在半导体-金属转变现象,可通过间隙层中的硫元素浓度梯度调控理论对其进行解释。以上研究成果为研发具有半导体-金属转变现象的新材料和器件提供了方向。

中国科学院上海硅酸盐研究所刘建军研究员着重介绍了基于电荷转移能力梯度计算的电化学活性定量计算方法,及其在高通量计算、机器学习筛选与设计新材料、优化材料性能研究中的应用,如富锂相正极新材料设计等,该研究为筛选设计和数据挖掘新材料、优化材料性能提供了重要的技术基础。

哈尔滨工业大学(深圳)刘兴军教授介绍了一种针对热电材料 $XNiSn$ ($X=Ti, Zr, Hf$)热电输运参数的机器学习模型,研究了成分调控对材料性能的影响,加速开发高性能热电材料。该模型预测了材料的最优元素成分区间,使其热电性能提升了约15%,与实验结果一致。此外,其团队通过在小数据集上的实验迭代有效提升了模型预测精度。



杜勇教授和孙志梅教授



刘建军研究员和宿彦京教授

大连理工大学周思研究员 介绍了其团队发展的非金属的p带中心理论,提出了精准调控非金属催化剂活性的普适性思路;分享了这一思想在一系列低维非金属催化剂设计中的应用,设计的低维非金属催化剂主要用于水分解制 H_2 反应、 CO_2 还原和 N_2 还原3类重要的催化反应等。

中国科学院计算机网络信息中心杨小渝研究员 介绍了其团队研发的将“计算、数据、超算、AI”一体化集成的材料基因组云平台MatCloud的最新研究进展,包括如何更好地支持第一性原理高通量计算和筛选,分子动力学LAMMPS的支持及案例讲解等。这一工具的开发极大地降低了材料研发一线人员使用计算模拟的技术门槛。



宋晓艳教授和曾小勤教授

北京工业大学宋晓艳教授 通过开发材料知识信息解析、关联与管理信息系统,解决了Sm-Co基金属体系数据标注与分析的难题,实现了多用户在线数据标注和高度自动化的数据关联。她们团队利用机器学习实现了对 $SmCo_{7-x}M_x$ 合金相组成的高通量预报,突破了现有理论中仅从单一角度对合金相组成进行解释的局限性。

上海交通大学曾小勤教授 通过第一性原理方法高通量计算镁合金的多种基本性能,在原子、电子层面从理论上分析镁合金体系腐蚀相关行为,建立了较完善的耐腐蚀镁合金设计思路与计算流程,为开发满足需求的新型镁合金材料奠定基础。

西北工业大学刘峰教授 介绍了团队从凝固和固态相变演绎出的热-动力学相关性,展示了热-动力学相关性在晶界迁移和相界迁移中的模型化体现,并将相关性模型应用于钢铁组织调控,实现了钢铁组织预测和制备工艺确定。

中国科学院金属研究所胡青苗研究员 通过第一性原理计算发现,在密排六角结构Ti中,置换原子Mo占据偏离高对称点的偏心位置,引起了强烈的非均匀晶格畸变。这意味着置换原子也可能引起内耗现象,颠覆了人们对金属固溶体性质的传统认识,说明经典固溶强化理论不再适用于此类固溶体。

吉林大学张立军教授 分享了其团队近期在新型半导体光电材料优化设计方面开展的工作,包括具有自主知识产权的材料设计计算软件JUMP2,及其应用于太阳能光伏材料、透明导体材料、光电探测材料、光催化材料等光电半导体体系时所开展的新材料设计研究。



张立军教授和刘峰教授

西北工业大学王俊杰教授 利用高通量计算预测了一系列稳定的层状三元硼化物,通过理论计算和实验验证相结合,为MAX相扩展到硼基化合物体系提供了一个典型范例,有望为MAX相的研究和MXenes材料的合成开辟新方向。

苏州大学尹万健教授 以氧化物钙钛矿析氧反应为例,提出了跳过DFT计算,利用符号回归机器学习方法直接建立催化活性与简单材料参数的构效关系,发现了析氧反应的新描述 μ/t 。根据此方法进行材料设计,并指导实验成功合成了5种新材料,其中Cs基氧化物钙钛矿首次被报道用作析氧反应催化剂。

昆明理工大学冯晶教授 针对镍基合金使用温度很难突破1200 °C的难题,开展了Pt-Ir-Ta-Zr-Ni-Co-Cr-Y-Al-Si多元系合金的高通量计算与设计。通过建立上述多元体系数据库,结合机器学习获得可以满足1300 °C使用的超高温粘结层合金,配合稀土钽酸盐和超高温镍基合金,达到了体系整体高温使用可行的目的。

