

数据驱动的新材料设计

——计算材料学分论坛侧记

文 / 北京航空航天大学 缪奶华

计算材料学作为一门涵盖了材料、物理、化学和计算机等领域的新兴交叉学科,已经成为物质科学研究的必要组成部分,在新材料研发中发挥着关键作用。作为“新材料国际发展趋势高层论坛”重要的系列活动之一,计算材料学分论坛于2021年10月17~18日在宁波举行,吸引了众多现场参会代表,且线上直播观看人次达4300余次。会议由北京航空航天大学孙志梅教授、南京理工大学刘伟教授、哈尔滨工业大学(深圳)施荣沛教授和北京航空航天大学缪奶华副教授主持,邀请了15位领域知名专家、学者贡献精彩报告,报告内容丰富、材料种类多样,囊括了量子算法开发、高通量集成计算、微介观模拟、机器学习和数据库等方向,涉及了合金、陶瓷等结构材料和光电转换、信息存储等功能材料,现场交流火爆、线上反响热烈。

精彩报告



孙志梅 教授

北京航空航天大学孙志梅教授介绍了其团队自主研发的高通量集成计算材料软件平台ALKEMIE Matter Studio及材料数据库Data Vault,基于该平台开发了高温电子结构与电导率的第一性原理计算方法和模块,用于相变存储材料的性质预测。

上海交通大学汪洪教授报道了其团队基于材料基因工程(MGE)数据通则,以密度泛函理论(DFT)计算数据产生流程及组合材料芯片制备与表征过程为例,提出相应数据模式的建立原则及具体内容方案,实现了数据的全面收集、灵活存储、高效IO等。

哈尔滨工业大学(深圳)刘兴军教授介绍了高温合金的成分与工艺智能筛选平台AI Platscreen,该平台用于合金相结构、成分和组织的高通量计算与设计,可以实现计算数据高速自动化筛选,极大地缩短材料研发周期,提高材料研发效率。

西北工业大学刘峰教授从热-动力学相关性出发,创新性地提出了“广义稳定性”新概念,探讨了广义稳定性与相变热-动力学、位错热-动力学的定量关联,并提出了大驱动力大广义稳定性的金属材料设计策略。



刘峰 教授



东南大学王金兰教授基于机器学习算法的新型功能材料靶向设计,展示了材料大数据、机器学习和密度泛函理论计算在快速发现稳定的有机-无机杂化钙钛矿、无机电钙钛矿光伏材料和二维铁磁材料中的应用。

中国科学技术大学李震宇教授以“周期体系电子结构计算的量子算法”为题,阐述了将变分子特征值求解算法应用于周期固体体系,并引入新算符来提高计算准确度和效率,由此提出了可精确高效计算能带结构的EOM-APADT-C方法。



李震宇 教授

上海大学刘轶教授通过机器学习来拓展第一性原理计算能力,提出了“化学组分”和“中心环境”描述符模型,设计了一系列 $\text{Co}_3(\text{Al}, \text{X})$ 多组元合金,证明了数据驱动多组元合金设计具有高效、准确等优点。

南京理工大学刘伟教授以“机器学习加速高熵合金相设计与力学性能优化”为题,分享了其团队开发的机器学习模型和合金设计新方法,为深入理解高熵合金的相结构形成机理及其优异力学性能对应的微观变形机制提供了理论线索。



刘伟 教授

南京工业大学崔予文教授针对轻质镁合金,发展了合金中溶剂扩散系数的测定方法,建立了溶剂扩散系数-蠕变力学性能的物理关联,揭示了Mg中国溶强化效应的冶金学本质,修正了现有文献中扩散对镁合金高温蠕变性能影响作用的认识。

北京科技大学尹海清教授以“三元硼化物的跨尺度筛选与原位反应复合材料制备研

究”为题,通过结合微观硬度模型、第一性原理计算和实验验证等方法,研制了具有良好的硬度、塑性综合性能的金属基复合材料。

中国科学院上海硅酸盐研究所孙宜阳研究员介绍了卤族钙钛矿材料中缺陷容忍的物理起源研究及其最新进展,揭示了自旋轨道耦合(SOC)效应对材料电子结构的显著影响,提出了基于分子动力学模拟来研究缺陷容忍性。



孙宜阳 研究员

西安交通大学张伟教授讨论了相变存储器PCRAM的结构相变、电学差异、电阻漂移、热稳定性以及相分离趋势的微观机制,着重介绍材料设计与研发在提升相变存储与类脑计算性能方面起到的关键性作用。

华中科技大学徐明教授利用材料基因工程平台对材料进行计算和筛选,获得了性能优异的疏系材料,对其进行实验验证,结果表明该材料显著提高了相变和阻变存储器的若干特性,对后续开发同类材料具有指导作用。

美国劳伦斯利弗莫尔国家实验室/哈工大(深圳)施荣沛教授围绕高性能金属结构材料快速设计以及金属构件增材制造过程中形性主动控制,介绍了多尺度多物理场集成计算平台的开发及其在加速设计新材料、新工艺研发中的应用。



施荣沛 教授

宁波工程学院尚明辉副教授分享了其在全无机钙钛矿光电材料方面的最新研究进展,揭示了表面孤对电子失活和定向 π 共轭有机配体界面插层对材料结构和性能的作用机制;基于第一性原理计算,深入讨论和分析了不同有机配体的功能。