

从跨尺度集成计算到人工智能设计新材料

——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、化学和计算机等的新兴交叉学科，已经成为材料科学研究的必要组成部分，在新材料研发中发挥着愈加重要的作用。作为“2019新材料国际发展趋势高层论坛（IFAM2019）”重要的系列活动之一，计算材料学分论坛引起了众多参会者的浓烈兴趣。会议由孙志梅、杜勇、汪洪和宋晓艳4位教授主持。论坛邀请了15位计算材料学领域知名专家学者与会作报告，报告涵盖了高通量筛选、集成计算、微介观模拟、机器学习及数据库等先进技术，囊括了合金、玻璃和陶瓷等结构材料以及光伏转换、信息存储、复合催化等功能材料体系。

报告精彩瞬间



北京航空航天大学孙志梅教授 分享了其在材料基因工程加速存算一体化相变存储材料方面的研究成果，介绍了自主研发的高通量集成计算材料软件平台ALKEMIE Matter Studio。该平台具有多尺度集成功能、高通量自动流程、可视化易扩展和移植等优点。基于该平台，将材料计算与实验验证相结合，获得了新型存算一体化相变存储材料。

上海交通大学汪洪教授 以“太阳能光热转换材料的理性设计优化与工程应用”为题，介绍了其团队通过理论模拟与实验结合在太阳能集热器的关键材料——太阳能吸收层材料的选择和设计方面的最新进展及实际生产应用。

中南大学杜勇教授 介绍了Co-Ni-Al复合粘结相在硬质合金中的应用背景；简述了Co基高温合金最新研究成果和有序相沉淀强化粘结相硬质合金的性能特点；分析了集成计算材料工程在复合粘结相开发上的应用；总结了WC-Co-Ni-Al硬质合金在制备、显微结构表征及性能方面的研究进展。

北京工业大学宋晓艳教授 分享了团队构建的Sm-Co多元合金数据库及材料知识信息解析、关联与管理信息系统以及其在开发具有优良磁性能的Sm-Co基多元永磁合金中的应用。

北京科技大学宿彦京教授 以高熵合金研发、相分类及多服役性能协同优化为例，介绍了机器学习在新材料研发和设计中的应用，其成果表明通过机器学习指导材料设计和实验制备，可提高新材料研发的效率。

北京应用物理与计算数学研究所宋海峰研究员 分享了在辐照结构损伤中，通过微观模拟认识材料微观缺陷结构成核机理，结合介观相场建模及模拟研究微结构生长及演化过程，对锆材料核电应用具有积极推动作用。

华中科技大学徐明教授 介绍了其发现的非晶材料Ge-Sb-Te“八面体”局部结构规律；并利用C掺杂对二元Ge-Sb进行基因改良，大大提升器件的稳定性和寿命。

北京航空航天大学王鹏教授 通过采用低秩矩阵、压缩感知等计算数学方法，提出了一种全新的高性能计算框架来预测异质材料之间的互扩散系数；并以三元系统为例，进行数值验证；通过对样本选取优化设计，可降低数据成本。

哈尔滨工业大学(深圳)刘兴军教授 介绍了将材料学知识和机器学习算法相结合开发的新型Co基高温合金多性能优化设计系统，及其在高温合金设计工作中的应用。

武汉理工大学赵焱教授 分享了其团队在泛函方面的研究进展及将量子力学方法用于研究多硫化锂结构和强亲和材料中，如 Co_9S_8 、 TiO_2 和TiN等正极材料，并将计算结果与实验的充放电性能进行比较。

上海大学刘轶教授 通过机器学习辅助第一性原理计算，提出了“中心环境”描述符模型，设计了一系列多组元的镍基高温合金，并表示由大数据和人工智能驱动的材料设计具有高效率和高准确度等特点。

华中科技大学单斌教授 针对高效复合催化材料的原子尺度设计及制备，基于第一性原理和微反应动力学计算，发展了一种负载型贵金属-稀土氧化物原子层沉积制备新方法，实现了亚纳米级贵金属团簇在氧化物表面的原子尺度可控制备，攻克了稀土表面贵金属纳米颗粒的高分散性和抗烧结难题。

武汉理工大学刘韩星教授 提出了一种使用形成能作为中间变量对钙钛矿材料的带隙进行预测的机器学习模型，并利用该模型在大量未知材料库中搜索新型高性能钙钛矿材料。

武汉理工大学李能教授 以水泥、玻璃、陶瓷等功能结构陶瓷材料原子与电子结构计算为主题，研究了功能陶瓷材料的热/动力学参数与形貌、结构和性质的关系，表征了材料原子局域结构，阐释了相变的原子与电子尺度机制，为功能结构陶瓷材料功能升级及可控制备与应用提供理论依据。



2019 IFAM