

·“双清论坛”专题:理论化学家视角中的仪器创制·

材料的理性设计与计算模拟

武晓君 杨金龙*

(中国科学技术大学化学与材料科学学院,合肥 230026)

[摘要] 材料的理性设计与计算模拟是基于计算机开展的“实验”研究。通过材料的理性设计与计算模拟,可以在原子层次上揭示材料的结构与性能之间的联系,预测新材料。这也促进了材料科学研究模式从“经验指导实验”向“理性设计与计算模拟、实验验证”转变。材料的理性设计与计算模拟的核心问题是发展先进的电子结构计算方法与软件,包括可以处理复杂材料体系的快速、可靠的方法与软件,以及材料“大数据”驱动的材料理性设计。

[关键词] 理性设计;电子结构计算;材料大数据;材料基因组

在材料研究中,为什么需要理性设计与计算模拟?或者说,材料的理性设计与计算模拟与传统研究有什么不同,给材料科学研究带来什么机遇?它的发展趋势以及需要重点关注和优先解决的核心科学与技术是什么?

众所周知,发展先进材料是科技进步的基础和高新技术发展的先导,是提高国家竞争力的关键。长期以来,材料科学领域依赖于实验与经验模型理解不同材料的性质,采用“经验指导实验”的模式,沿着“加工—结构—性质—性能”链优化材料性能、探索新材料,研发周期长、成本高。缩短新材料的研发周期、降低研发成本,最终实现从特定性能出发“逆向”材料的结构、组分与加工方案,是材料科学研究的终极目标。实现这一目标需要材料的理性设计与计算模拟。

数千年来,人们对于材料的理解从宏观走向微观,经历了“经验”和“模型”的科学范式。例如,热力学定律就是一个具有广泛意义的理论模型。但是随着时间推移,针对材料中的许多科学问题,理论模型日益复杂,无法直接分析求解。近几十年来,计算机的快速发展使得人们可以基于“理论模型”计算模拟复杂的现实世界,是材料科学研究的新范式。

作为材料科学研究的第三个范式,材料的理性设计与计算模拟可以看作是利用计算机开展的“实验”研究(Theoretical Experiment)。通过准备“样

品”(构建模型),发展先进的“实验仪器”(理论方法、计算方法与程序等),获得原始“实验数据”(计算结果)。与传统的实验研究相比较,材料的理性设计与计算模拟不仅可以利用理论模型对计算数据进行处理、归纳与分析,获得可观测的物理量,而且还可以通过以第一性原理为核心基础的电子结构计算,透过表象在原子层次上揭示材料结构/物性之间的内在联系,探索微观机理。正是这一差别使得我们可以通过计算模拟研究预测材料的结构与性能,并在原子层次上建立材料的结构与物性的联系,进一步针对特定性能设计新材料。材料的研究模式从传统的“经验指导实验”向“理性设计与计算模拟、实验验证”转变,缩短新材料的研发周期。

此外,不可忽视的事实是计算机越来越便宜,单位计算能力越来越强;相反,新材料探索对实验技术的要求越来越高,实验成本急速增加;如果材料的理性设计与计算模拟可以快速地提供足够准确的结果,同时计算成本变得比实验更低时,可以通过材料的理性设计与计算模拟降低新材料的研发成本。

材料的理性设计与计算模拟面临的最具挑战性的核心问题,是如何快速地得到足够准确的结果可以指导实验研究。这个问题的答案就是材料理性设计与计算模拟研究所依赖的“实验仪器”。所以,我们需要重点关注与优先解决的核心科学与技术是发展先进的理论计算方法与软件。我们认为,在现阶段

收稿日期:2017-10-10;修回日期:2017-10-29

* Email:jlyang@ustc.edu.cn

段,至少要在两个方面发展先进的理论计算方法与软件:(1)发展可以快速、准确的模拟复杂体系电子结构的计算方法与程序;(2)结合物理原理、数据库与机器学习技术,发展基于大数据驱动的材料理性设计与计算模拟的方法和软件。

真实材料体系时间与空间尺度跨度大,涉及的问题复杂。结构是材料科学研究的最基本的问题,是材料性能的基础。由于材料势能面的高度复杂性,从给定的化学组分预测材料可能的结构长期以来都是一个挑战。材料的性能是材料在服役环境下对外场(力、热、光、电、磁等)的响应性质所决定的。这些问题都取决于材料的电子状态,而描述材料体系的电子结构往往需要以第一性原理为核心基础进行电子结构计算。尽管国际上已经率先发展了一系列量子化学计算方法与软件,可以初步圆满地解决简单材料体系的基态电子结构问题。但是,真实材料体系的性能一般涉及到电子激发态、激发态的演化动力学、以及表面反应动力学等。发展电子结构计算方法与程序,能够快速、准确地描述复杂材料体系的电子结构,是决定材料的理性设计与计算模拟的效率和可靠性的关键所在。

另一方面,随着实验技术和计算能力的提高,我们在材料科学研究中搜集“大数据”的能力大大超过了我们分析这些数据的能力。这种变化预示了材料的理性设计与计算模拟的发展趋势:收集、整合材料科学研究中的实验与计算模拟产生的数据,结合基本物理原理、数据库、信息科学、与机器学习技术,破译材料“加工—结构—性质—性能”研究链中隐匿的关系,通过“大数据”驱动新材料的理性设计和计算模拟。虽然类似的“大数据”驱动技术已经在很多领域得到广泛的应用,材料领域独有的数据复杂性和

多样性要求开发新的大数据方法和程序,进一步推动在材料结构、性能与动态演化过程等方面快速、定量可靠的预测,最终实现材料“大数据”驱动的理性设计。正是在这一背景下,2011年,美国国家科学与技术委员会发布了“材料基因组计划”,通过融合高通量计算、实验和专用数据库等三大技术,协同提升材料制造水平,提高(美国)国家竞争力。与此同时,我国科学家也积极行动迎接这一机遇与挑战,布局了中国的材料基因组计划。可以说,材料基因组计划的核心就是根据计算和大数据分析理性地进行材料设计。

总体来说,材料的理性设计与计算模拟作为材料科学研究的新范式,将推动材料科学研究的迅速发展。同时,材料的理性设计与计算模拟作为材料基因组基因工程的核心基础,迫切发展具有自主知识产权和国际领先的计算方法与软件平台,这将是我們是否能抓住这一机遇、并取得领先地位的关键。

参 考 文 献

- [1] Agrawal A, Choudhary A. Perspective: materials informatics and big data: realization of the “fourth paradigm” of science in materials science. *APL Materials*, 2016, 4(5): 053208.
- [2] Marzari N. Materials modelling: The frontiers and the challenges. *Nature materials*, 2016, 15(4): 381–382.
- [3] Nørskov JK, Bligaard T, Rossmeisl J, et al. Towards the computational design of solid catalysts. *Nature chemistry*, 2009, 1(1): 37–46.
- [4] Curtarolo S, Hart G LW, Nardelli MB, et al. The high-throughput highway to computational materials design. *Nature materials*, 2013, 12(3): 191–201.
- [5] 刘梓葵. 关于材料基因组的基本观点及展望. *科学通报*, 2013, 58(35): 3618–3622.
- [6] Kalinin SV, Sumpter BG, Archibald R K. Big-deep-smart data in imaging for guiding materials design. *Nature materials*, 2015, 14(10): 973–980.

Rational design and computational simulation of materials

Wu Xiaojun Yang Jinlong

(School of Chemistry and Materials Sciences, University of Science and Technology of China, Hefei 230026)

Abstract The rational design and computational simulation of the material is a kind of “experimental” research accomplished with computer, which can reveal the relationship between the structure and performance of materials at the atomic level and predict new materials. This also boosts the transformation of material science research from “experience-guided experiment” model to “rational design and computational simulation-experimental confirmation”. The key of the rational design and computational simulation of materials is to develop advanced electronic structure calculation methods and software packages, including fast and reliable methods and software packages that can handle complex material systems, as well as data-driven material rational design.

Key words rational design; electronic structure calculation; material big-data; materials genome