【作品名称】基于KDE方法的晶界性质机器学习预测模型

【关键字】晶界、机器学习、氢脆、预测模型

【作品简介】

晶界作为材料中广泛存在的重要缺陷，它的结构和行为很大程度上决定了多晶材料的物理、化学和力学性能。一个多世纪以来，晶界结构和行为的研究一直是材料科学的一个研究焦点。

近年来，关于晶界结构研究的实验手段已经有了长足的进步：传统的透射电子显微技术（TEM）已经将材料研究推进到亚埃尺度。而日前发展出的电子层析三维重构技术（Electron Tomography）可以通过三维成像直接从纳米，甚至原子尺度解析材料的三维结构。这为晶界结构的定量精确分析奠定了基础。

有了结构测定的精确手段，我们便可以构想出一种可以由材料的微观结构预测其性质的手段——即所谓的 PSP 模型。它一方面可由材料的微观结构的描述子预测材料性质，另一方面可由所需的结构或性质反推需要的工艺参数（对晶界而言指它的倾角θ和重位点阵Σ等）；

而让我们开展此项研究的另一动机来源于 DFT 计算的复杂性：直接由结构来预测材料中晶界的性质，能避免复杂的第一性原理（或者说密度泛函DFT）计算，能大量节省开发新材料的成本

为了检验本研究思路的有效性，我们尝试将该方法用于解决金属中的氢脆问题：氢脆问题自19世纪末被发现以来，一直是严重威胁金属材料使用安全的一个重大问题。就氢脆问题而言，高强度金属材料往往对其敏感程度更高，因而限制了其在一般环境条件下的使用；近年来随着氢能源的兴起，如何制造一种能在高强氢分压下保持结构强度的材料，也成为一种紧迫的需求。

针对氢脆问题人们提出了多种机制，包括氢致位错发射理论、氢致局部塑形变形理论、氢致微裂缝聚合理论、氢压理论、弱键理论、氢降低表面能理论、氢致相变理论等其他理论。晶界在氢脆的产生过程中扮演重要作用，也有研究证实，针对性地改变金属材料中的晶界种类可以使得金属对 HE 的敏感性大大降低，设计出低 HE 敏感性的材料。

我们想要探究哪些晶界能降低金属的 HE 敏感性，而这需要我们对金属中晶界-氢的相互作用（以偏聚能表征）有更多的了解；而借助数据科学和分子动力学技术的最新技术，我们有希望从原子尺度提取信息，构建多尺度模型，作出合适的预测。

