

计算材料学

陈爽

2017年9月

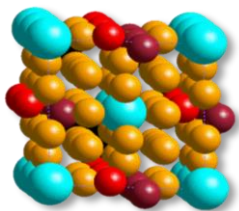
chenshuang@nju.edu.cn

第1章 绪论

1.1 计算材料学的发展

1.2 计算材料学的理论体系

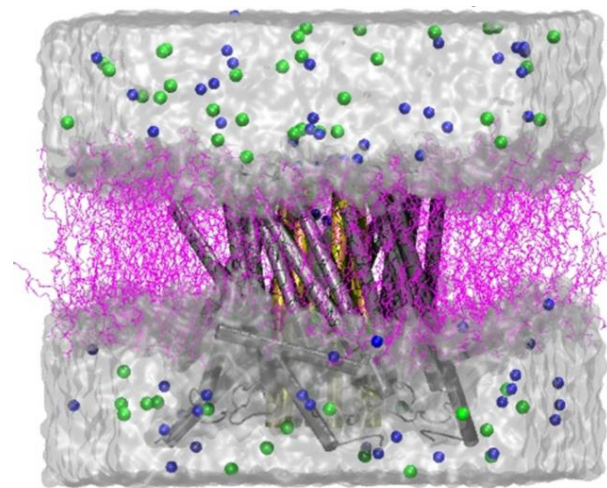
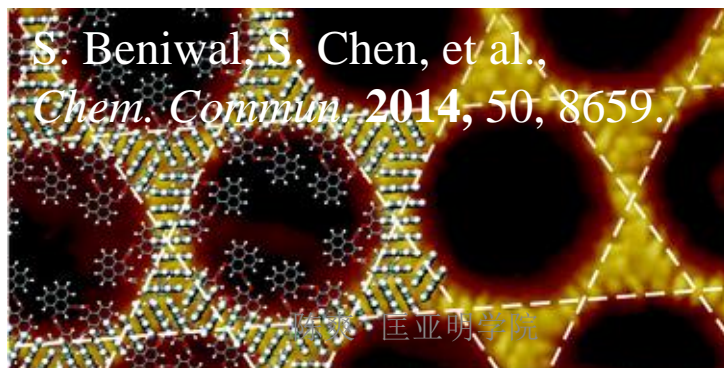
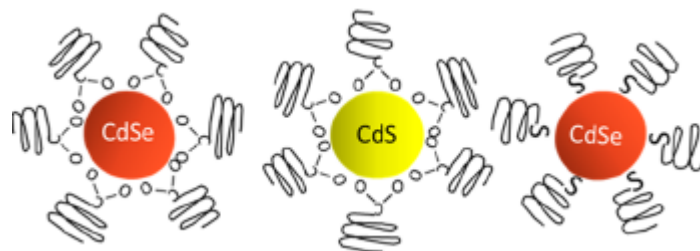
1.3 计算材料学的学习



1.1 计算材料学的发展

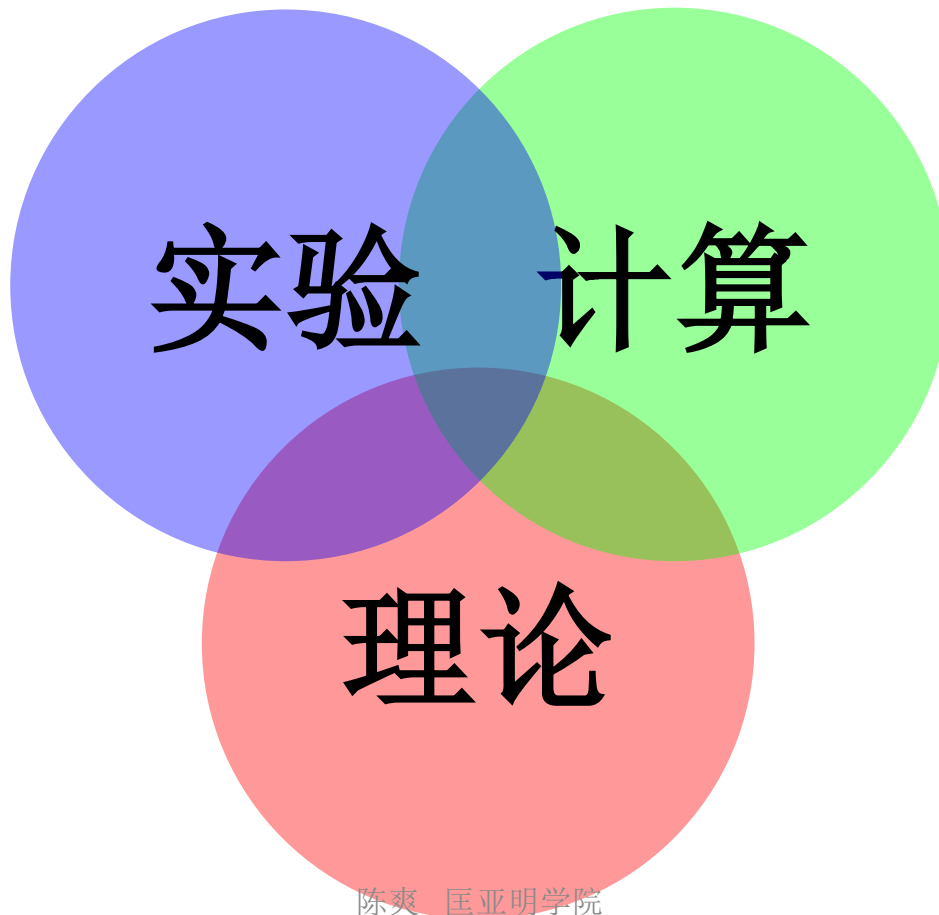
➤材料研究的重要性

- ✓20世纪70年代，信息、材料、能源——当代文明的三大支柱
- ✓20世纪80年代，新材料、信息技术、生物技术——新技术革命



1.1 计算材料学的发展

➤ 材料的研发





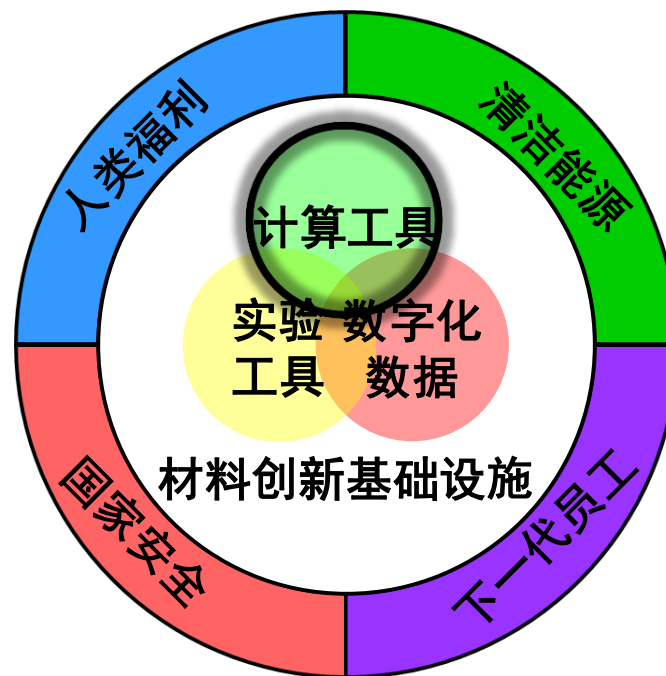
1.1 计算材料学的发展



► 新时代的材料研发：材料基因组计划(Materials Genome Initiative, MGI)

传统的材料研发：试错法
依赖于实验，材料研发周期过长

MGI下的材料研发：
“理论预测、实验验证” 新模式
计算占据主导地位——指导材料研发的每个步骤



**材料基因组计划
(MGI)**

美国MGI的成果展示



➤ Gerbrand Ceder (MIT → UCB)

✓ Database: Materials Project

✓ Collaborators: Kristin Persson (UCB) and MIT algorithm supporting for exacting experimental data from references → expand database

- Starting with some 15,000 computed structures derived from Ceder and Persson's research on **lithium batteries**.¹
- Another 130,000 structures predicted by the Nanoporous Materials Genome Center at the University of Minnesota in Minneapolis for **zeolites and MOFs**.¹
- Currently, the Materials Project has over 15,000 users and worldwide and has been used to inform materials research in a broad range of applications **from energy storage, to photo catalysts, and ionic conductors**. I believe it is possible to within ten years determine most of the intrinsic properties of all known compounds, thereby generating the Materials Genome.²

¹N. Nodrnho. Nature **2016**, 533, 22–25.

²G. Ceder. ICEM2016.

美国MGI的成果展示

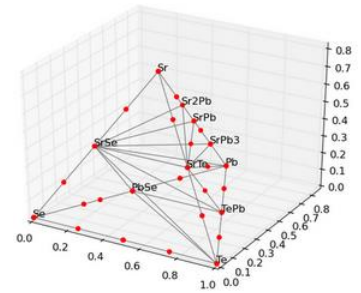
➤Stefano Curtarolo (Duke University)

- Database: AFLOWlib
- Collaborators: Marco Buongiorno Nardelli (University of North Texas) for advanced density functionals and representations
- The largest MGI database among Materials Project, AFLOWlib, and OQMD (more than a million different materials and about 100 million calculated properties)



N. Nodrnho. Nature **2016**, 533, 22–25.

美国MGI的成果展示



OQMD:

The Open Quantum Materials Database

➤ Chris Wolverton (Northwestern University)

✓ Database: Open Quantum Materials Database (OQMD)

✓ Collaborators: Gregory Bolson (Northwestern University)
for **integrated computational materials design**

✓ Around **400,000 hypothetical materials** calculated by taking a list of crystal structures commonly observed in nature and ‘decorating’ them with elements chosen from almost every part of the periodic table

✓ A particularly wide coverage of **perovskites-crystals and also thermoelectrics**

N. Nodrnho. Nature **2016**, 533, 22–25.

1.1 计算材料学的发展

- 随着计算机和计算机科学的发展，为研究复杂材料，产生了计算材料学(computational materials science)。
- 计算材料学是材料科学与计算机科学的交叉学科，涉及材料、物理、计算机、数学、化学等多门学科。
- ✓依托于计算物理和计算化学
- ✓借助于材料设计理念

1.1 计算材料学的发展

✓计算物理的发展历史:

- Computational physics正式出现1963年美国的《计算物理方法》丛书，源自1959年美国解密“曼哈顿计划”。
- “曼哈顿计划”始于1942年，是为了利用核裂变反应来研制原子弹。
- 解密“曼哈顿计划”总结了统计物理、量子力学、核物理等各方面物理问题，介绍了很多计算方法，开启了计算物理。
- 20世纪40年代开始，计算物理学家发展了很多新的数值方法，包括快速傅里叶、蒙特卡洛、分子动力学等。

1.1 计算材料学的发展

✓计算化学的发展历史:

- 20世纪20年代——量子力学体系的建立（Schrödinger方程、Heisenberg矩阵力学、Dirac相对论方程）
- 1927年Heitler-London讨论氢分子结构——量子计算化学的开始
- 3个重要阶段
 - I. 20世纪20~50年代，Pauling价键理论(1954)、Mulliken分子轨道理论(1966)、Bethe配位场理论
 - II. 20世纪60~70年代，从头算方法、半经验方法等
 - III. 20世纪80~90年代，以DFT为基础的第一性原理计算方法(Kohn & Pople 1998)

The Nobel Prize in Chemistry 1981



Kenichi Fukui
Prize share: 1/2



Roald Hoffmann
Prize share: 1/2

The Nobel Prize in Chemistry 1981 was awarded jointly to Kenichi Fukui and Roald Hoffmann *"for their theories, developed independently, concerning the course of chemical reactions"*

The Nobel Prize in Chemistry 2013



Photo: A. Mahmoud
Martin Karplus
Prize share: 1/3



Photo: A. Mahmoud
Michael Levitt
Prize share: 1/3

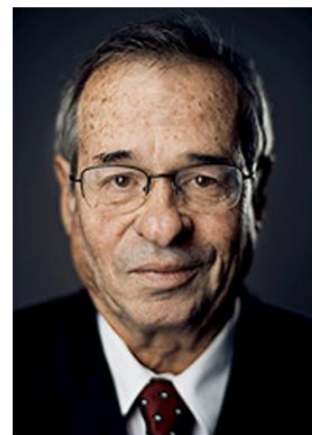


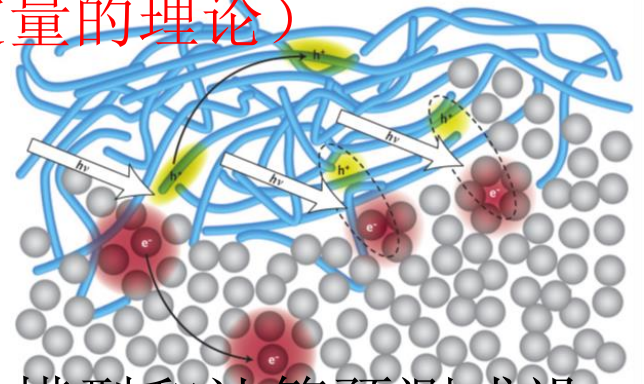
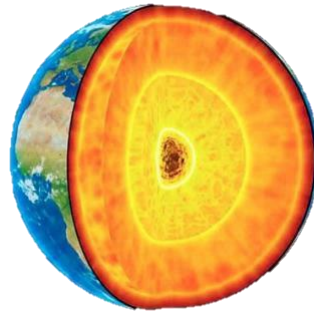
Photo: A. Mahmoud
Arieh Warshel
Prize share: 1/3

The Nobel Prize in Chemistry 2013 was awarded jointly to Martin Karplus, Michael Levitt and Arieh Warshel *"for the development of multiscale models for complex chemical systems"*.

1.1 计算材料学的发展

➤ 计算材料学包含2方面内容：

✓ 计算模拟：从实验出发，通过建立计算模型模拟实际过程（使实验结果上升到一般的、定量的理论）



✓ 材料的计算机设计：直接通过理论模型和计算预测或设计材料的结构与性能（有方向地开发，有助于创新，提高材料研发效率，eg MGI）

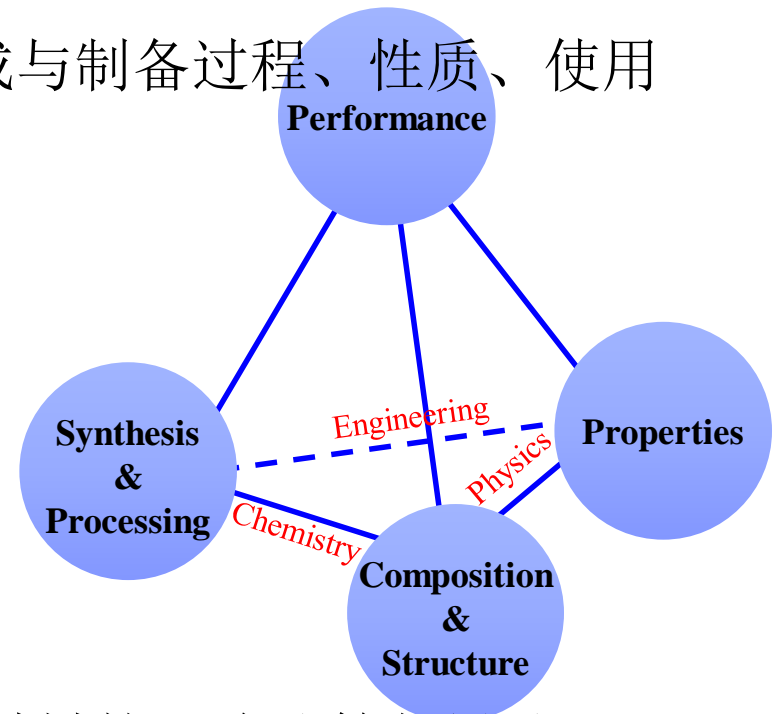


1.1 计算材料学的发展

✓材料的4大要素：组成与结构、合成与制备过程、性质、使用性能

✓计算机模拟研究材料的优势：

- 多尺度全方位的研究
- 模拟极端条件（超高温、超高压）
- 模拟性能演变、失效机理
- 最终实现材料设计（深入到服役性能）



✓材料信息学->材料专家设计系统->材料的理论计算与设计

✓材料设计(Materials Design)_通过理论与计算，最后实验验证

- 预测新材料的组分、结构与性能
- “订做” **具有特定性能**的新材料

1.1 计算材料学的发展

➤ 计算材料学的特征：

✓ 跨学科

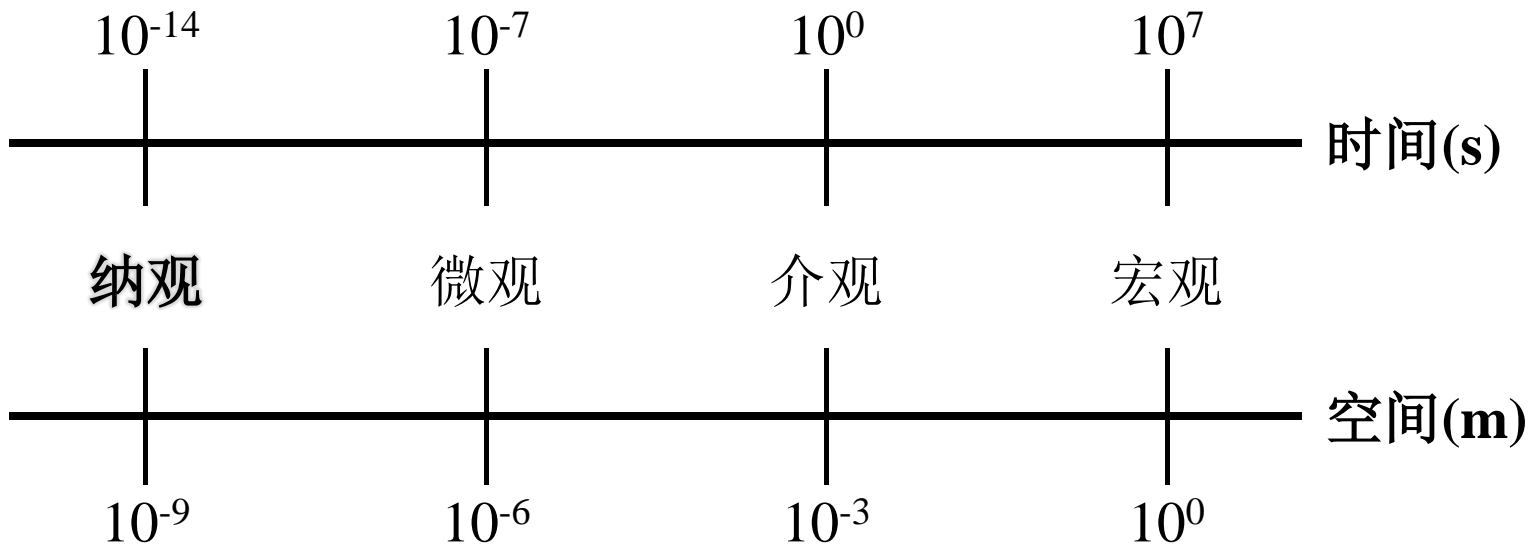
✓ 跨层次

✓ 跨尺度

✓ 跨领域

1.2 计算材料学的理论体系

➤ 计算材料学中的典型模拟方法所对应的空间和时间尺度



局域电子
密度泛函

分子动力学
蒙特卡罗方法
晶界动力学

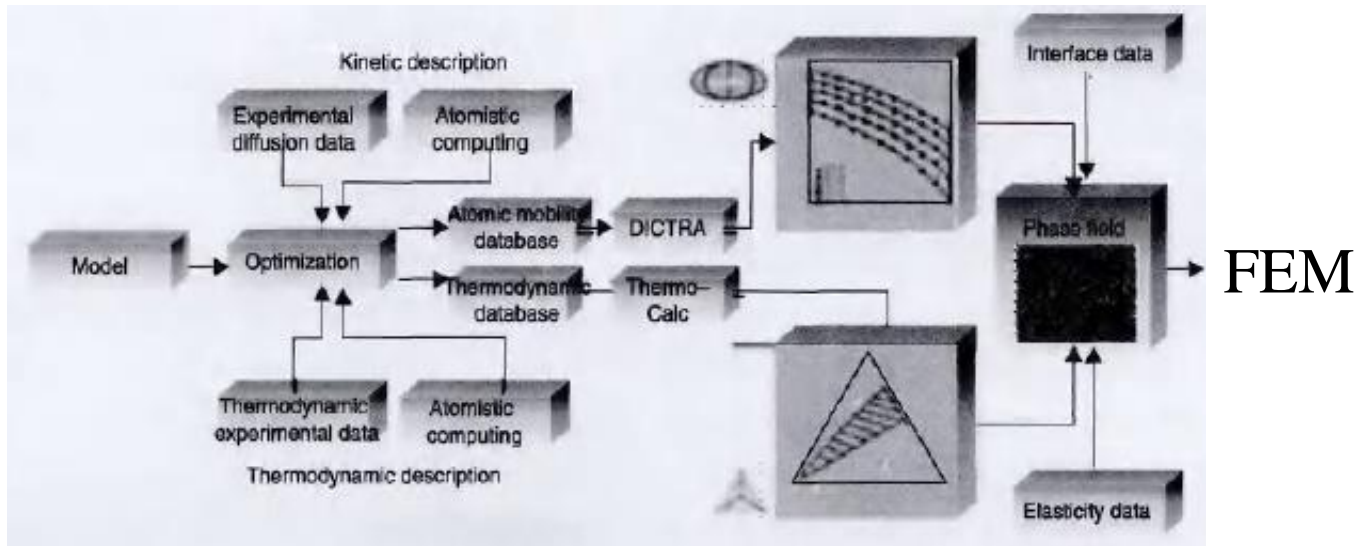
微观动力学
相场动力学

晶塑性有限元
元胞自动机

大尺度FEM
和FD方法

1.2 计算材料学的理论体系

- 以MGI为例理解计算材料学中的典型模拟方法
- ✓ ICME发展合金集成算法：软件CALPHAD



Zikui Liu
Pennsylvania
State University
2002 “Materials
Genome”


Scripta Materialia **2014**,, 70, 7–11.

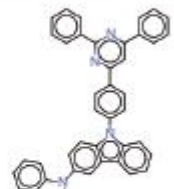
1.2 计算材料学的理论体系

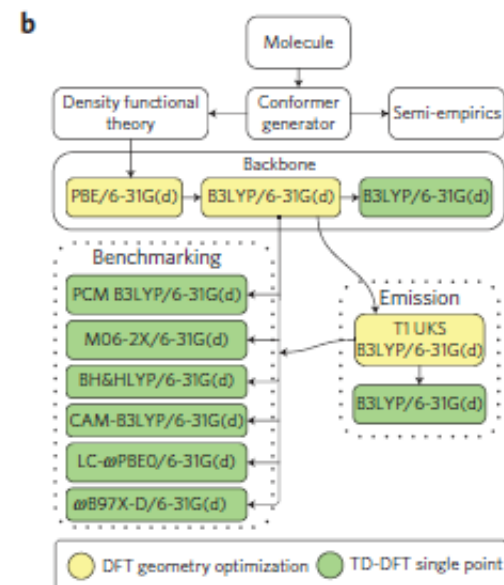
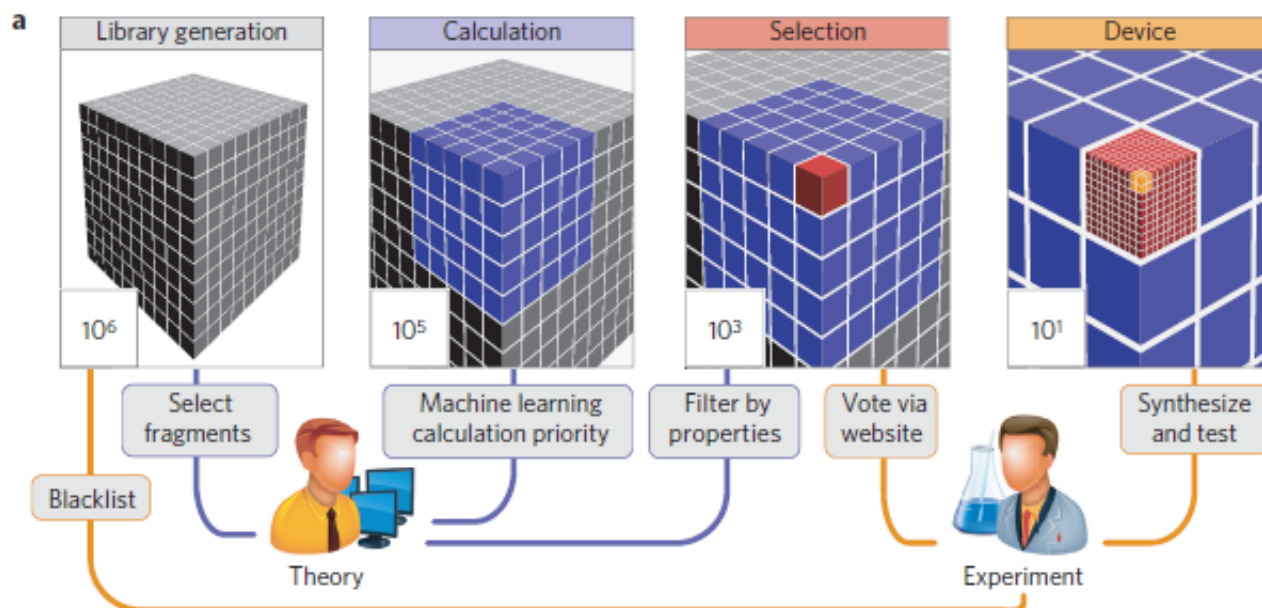
➤以MGI为例理解计算材料学中的典型模拟方法

✓有机发光二极管分子反向设计:

Example ballot
Open until: 6 November 2015, 4 p.m.

3 Yes		2 Unsure		1 No	
My rating: <input checked="" type="radio"/> <input type="radio"/> <input type="radio"/>					
					
Weight (AMU)	868.33				
Splitting (eV)	0.180				
Absorption (eV)	2.81				

3 Yes		2 Unsure		1 No	
My rating: <input checked="" type="radio"/> <input type="radio"/> <input type="radio"/>					
					
Weight (AMU)	640.26				
Splitting (eV)	0.104				
Absorption (eV)	2.64				



Nature Mater. **2016**, 15, 1120.

1.3 计算材料科学的学习

- 数学基础自学
- 固体物理、量子化学自学加简单回顾
- 着重讲解Gaussian、VASP、Materials Studio、LAMMPS、CP2K等成熟、通用软件的使用
- Linux平台、计算集群
- 实践：
 - ✓ 上机实习结合课堂PPT展示
 - ✓ 科研问题讨论
 - ✓ 多尺度模拟计算的设计（期末开题报告）

1.3 计算材料科学的学习

➤理论基础（12*2课时）

- ✓计算材料学导论
- ✓材料体系的建模（晶体的对称性结合Materials Studio的使用）
- ✓电子结构方法(Gaussian)
- ✓第一性原理的计算和固体能带论(VASP, Dmol3, and CASTEP)
- ✓紧束缚近似
- ✓分子动力学方法
- ✓多尺度模拟

1.3 计算材料科学的学习

➤上机实践（15*2课时）

✓GaussView和Materials Studio建模

✓Gaussian:

- 单点能（电荷、偶极矩、BSSE）、优化、频率、SCAN
- 反应过渡态和IR、NMR光谱

✓VASP的第一性原理计算（单点能（STM）和优化）

✓Dmol3和CASTEP的第一性原理计算

✓Materials Studio Discover分子动力学模拟

✓LAMMPS分子动力学模拟

✓CP2K第一性分子动力学模拟

✓多尺度模拟

✓开题讨论

教材及参考书

1. 单斌，陈征征，陈蓉编，材料学的纳米尺度计算模拟：从基本原理到算法实现，华中科技大学出版社，**2015**。
2. 坚增运，刘翠霞，吕志刚编，计算材料学，化学工业出版社，**2012**。
3. J. B. Foresman and A. Frisch, *Exploring Chemistry with Electronic Structure Methods (3rd Edition)*, **2015**.
4. Website and manual for each software……

我的设想 vs 同学们的设想

- 我的设想：面对具有的研究问题，同学们能有可入手的设计（针对计算）。
- 同学们的设想？

成绩评定

- 期末完成课程内容相关的计算材料领域的任何问题（可以教师提供选题，也可以自选）的开题报告即可，内容到计算设计、建模即可（60分起评）
- 一次PPT展示加10分（累计满100分，期末成绩以100分计，但期末开题报告不能免）：
 - 与上机实习内容相关
 - 展示目前从事的科研问题，着重介绍可实施理论计算的问题，并展开讨论

Homework（文献调研）

- 计算物理发展史及重要计算方法的发展
- 计算化学发展史及重要计算方法的发展
- 结合Nobel Prices for Physics & Chemistry建立计算物理和计算化学发展的宏观图像
- MGI for Europe and Japan