

计算材料学

陈爽

匡亚明学院C212

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

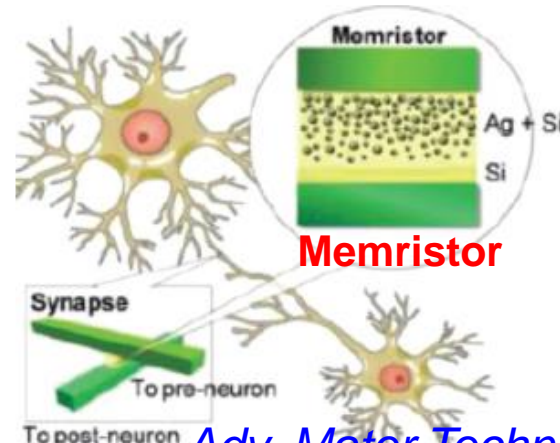
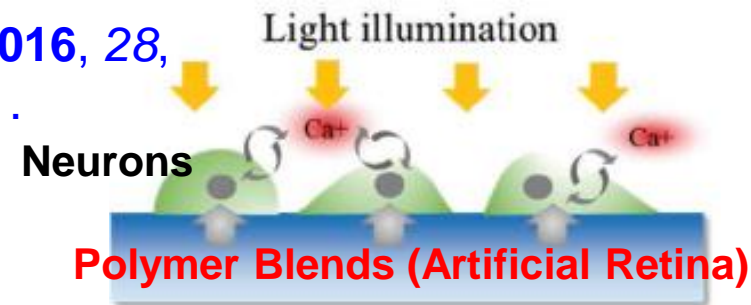
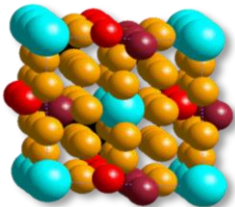
1.1 计算材料学的发展

1.1.1 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

Adv. Mater. **2016**, *28*,
10684–10691.

.....



Adv. Mater. Technol. **2019**,
4, 1800544.

1.1 计算材料学的发展

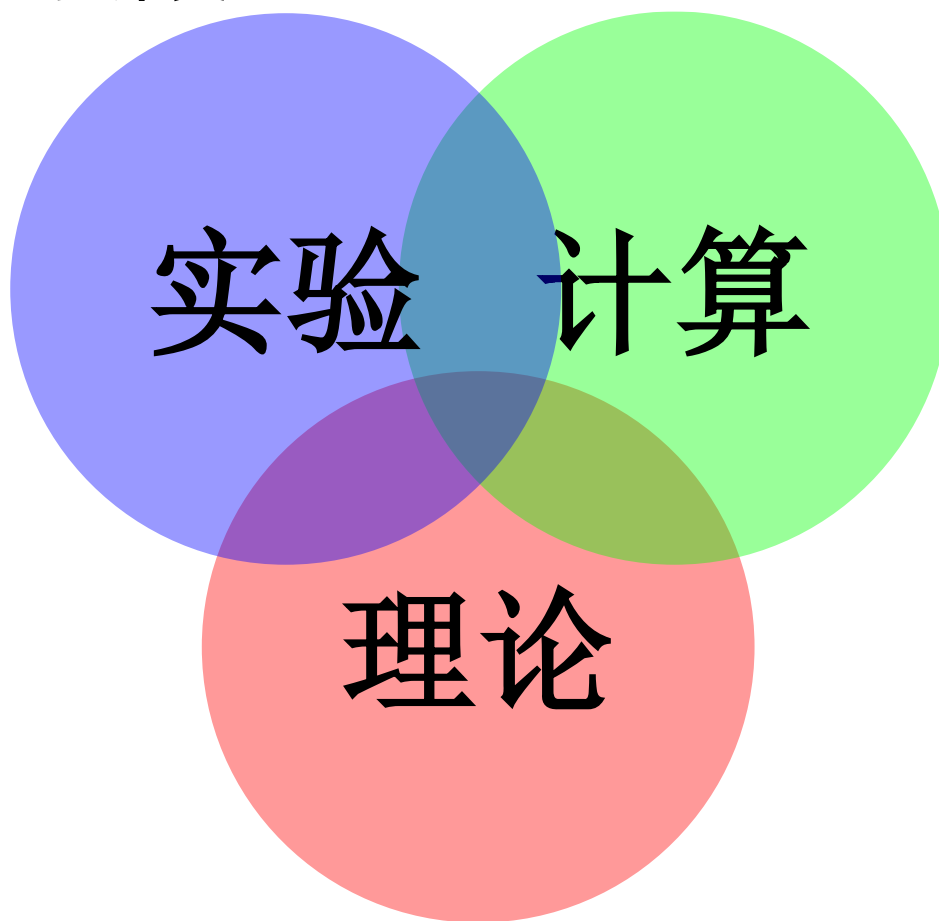
1.1.1 材料研究的重要性

➤ 美国《2016-2045年新兴科技趋势报告》：

- | | |
|--------------|--------------|
| 1. 物联网 | 11. 先进数码设备 |
| 2. 机器人与自动化系统 | 12. 先进材料 |
| 3. 智能手机与云端计算 | 13. 太空科技 |
| 4. 智能城市 | 14. 合成生物科技 |
| 5. 量子计算 | 15. 增材制造 |
| 6. 混合现实 | 16. 医学 |
| 7. 数据分析 | 17. 能源 |
| 8. 人类增强 | 18. 新型武器 |
| 9. 网络安全 | 19. 食物与淡水科技 |
| 10. 社交网络 | 20. 对抗全球气候变化 |

1.1 计算材料学的发展

1.1.2 材料的研发



1.1 计算材料学的发展

1.1.3 计算材料学的出现及理论发展

- 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——**计算**
 - ✓ 借助于材料设计理念——**理论**

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：

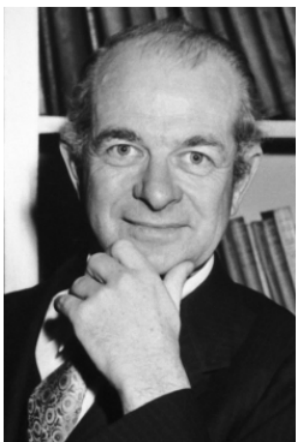
- ✓ 20世纪20年代——量子力学体系的建立
(Schrödinger方程、Heisenberg矩阵力学、Dirac相对论方程)

- ✓ 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 1954



价键理论

Linus Carl Pauling

Prize share: 1/1

The Nobel Prize in Chemistry 1954 was awarded to Linus Carl Pauling "for his research into the nature of the chemical bond and its application to the elucidation of the structure of complex substances."

The Nobel Prize in Chemistry 1966

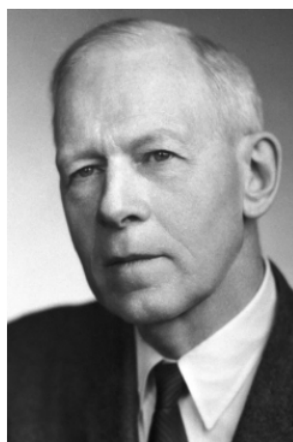


Photo from the Nobel Foundation archive.

Robert S. Mulliken

Prize share: 1/1

分子轨道理论

The Nobel Prize in Chemistry 1966 was awarded to Robert S. Mulliken "for his fundamental work concerning chemical bonds and the electronic structure of molecules by the molecular orbital method."

The Nobel Prize in Chemistry 1998

前线轨道理论

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"*

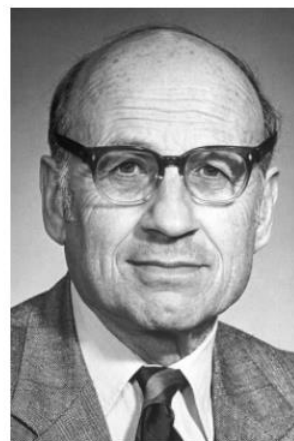


Photo from the Nobel Foundation archive.

Walter Kohn

Prize share: 1/2

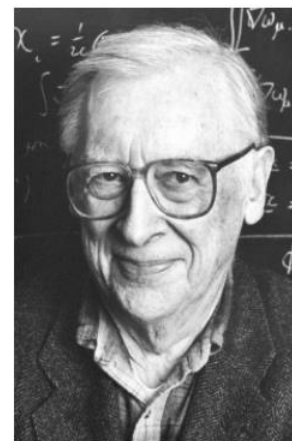


Photo from the Nobel Foundation archive.

John A. Pople

Prize share: 1/2

The Nobel Prize in Chemistry 1998 was divided equally between Walter Kohn "for his development of the density-functional theory" and John A. Pople "for his development of computational methods in quantum chemistry."

密度泛函理论

The Nobel Prize in Chemistry 2013

复杂体系的
多尺度模拟



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



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

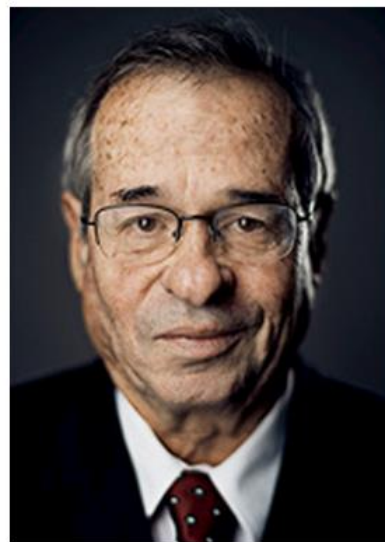


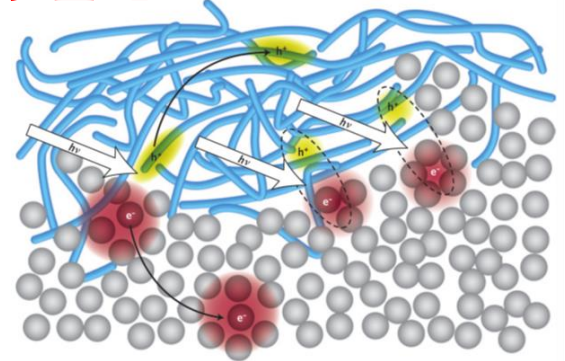
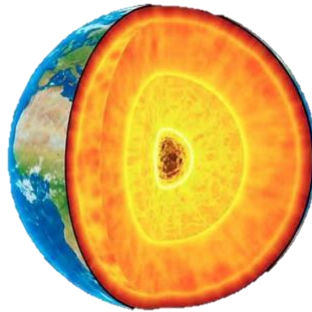
Photo: A. Mahmoud
Arieh Warshel
Prize share: 1/3

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

1.1.4 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）

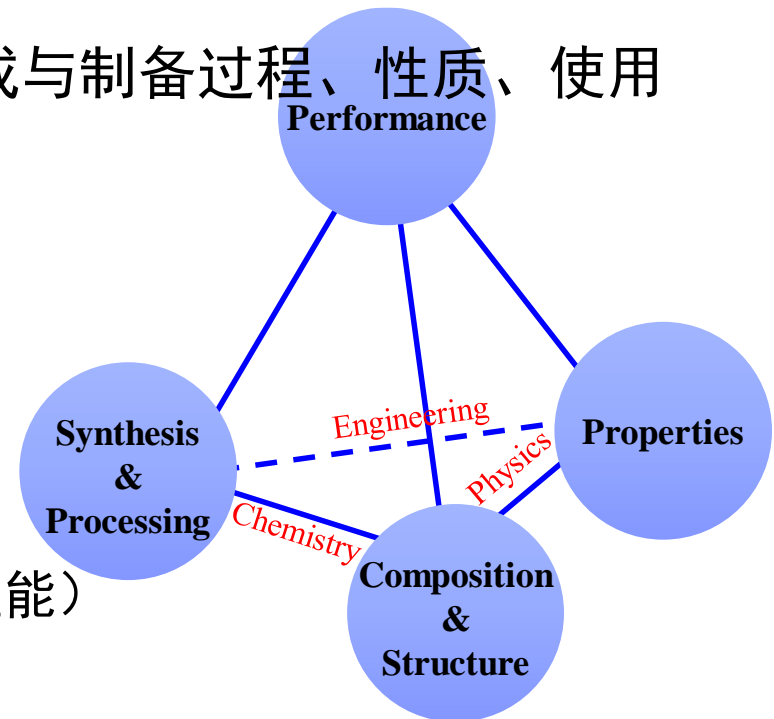


1.1 计算材料学的发展

➤ 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)：先理论与计算，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

1.1.5 计算材料学的特征：

➤ 跨学科交叉理论体系

➤ 跨层次调控方法

➤ 跨尺度设计理念

➤ 跨领域应用特征



1.1 计算材料学的发展



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

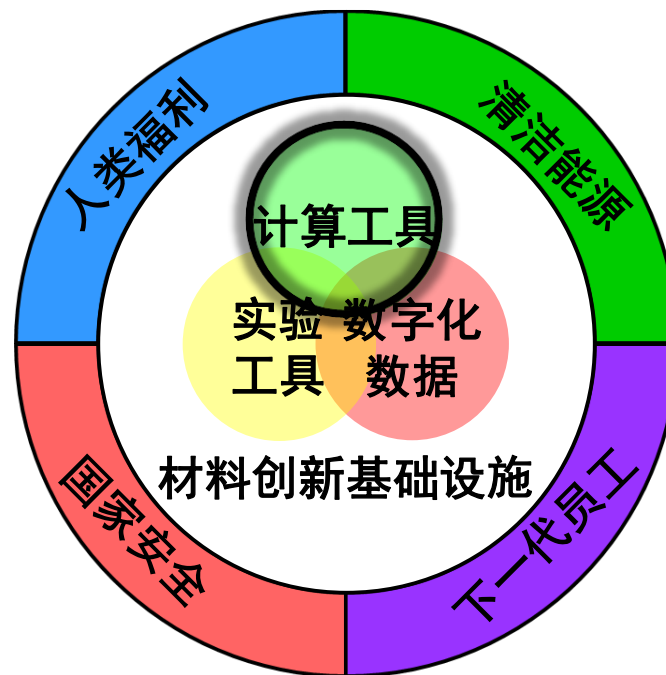
传统的材料研发：试错法

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)**

1.1 计算材料学的发展

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

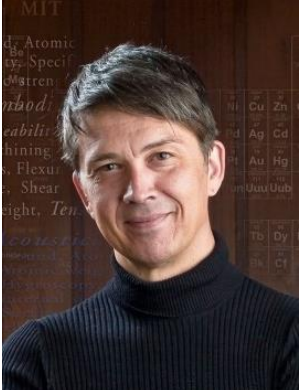
- 以美国为例：短期发展成功的原因在于前期积累（MGI前奏）
 - ✓2000年，国防高级研究计划局(DARPA)资助通用电气公司+ 普惠公司 + 波音公司 for AIM (Accelerated Insertion of Materials)
 - ✓美国科学院、工程院 for ICEM (Integrated Computational Materials Engineering)

1.1 计算材料学的发展

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

➤ Advantages of ICME:

- ✓ Reduce the product development time by alleviating costly trial-and-error physical design iterations (design cycles) and facilitate far more cost-effective virtual design optimization
- ✓ Reduce product costs through innovations in material, product, and process designs
- ✓ Reduce the number of costly large systems scale experiments
- ✓ Increase product quality and performance by providing more accurate predictions of response to design loads
- ✓ Help develop new materials
- ✓ Help medical practice in making diagnostic and prognostic evaluations related to human body



美国MGI的成果展示



➤ Gerbrand Ceder (MIT → UCB)

✓ Database: Materials Project

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

- 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
- Over 15,000 users being used to do research in a broad range of applications **from energy storage, to photo catalysts, and ionic conductors** → within 10 years to generate the Materials Genome²

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

²G. Ceder. *ICEM* **2016**.



美国MGI的成果展示

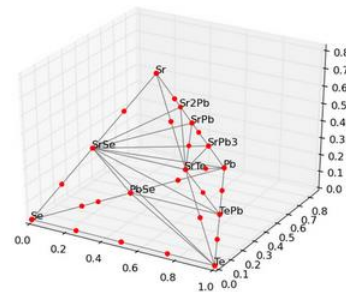
- Stefano Curtarolo (Duke University)
 - ✓ Database: AFLOWlib
 - ✓ Collaborators: Marco Buongiorno Nardelli (University of North Texas) for advanced density functionals and representations
 - ✓ The largest MGI database among Materials Project, AFLOWlib, and OQMD (more than a million different materials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

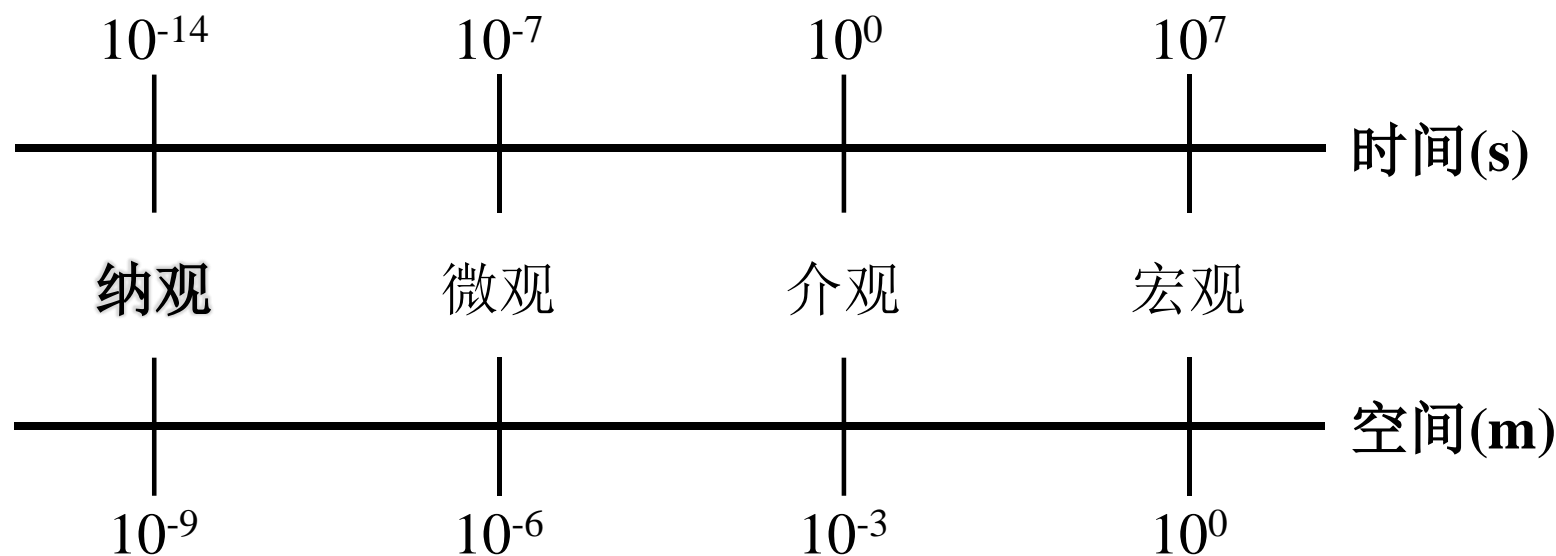
➤ Chris Wolverton (Northwestern University)

- ✓ 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.

1.2 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



量子力学

分子动力学
蒙特卡洛方法
晶界动力学

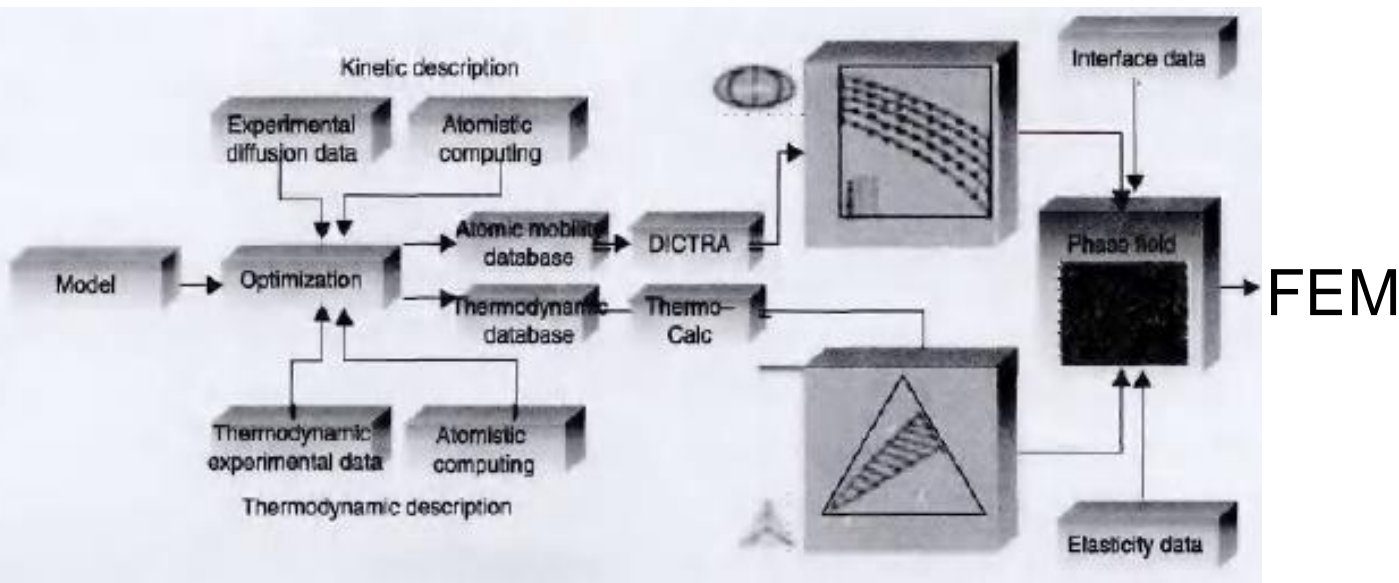
微观动力学
相场动力学

晶塑性有限元
元胞自动机

大尺度有限元
有限差分法

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

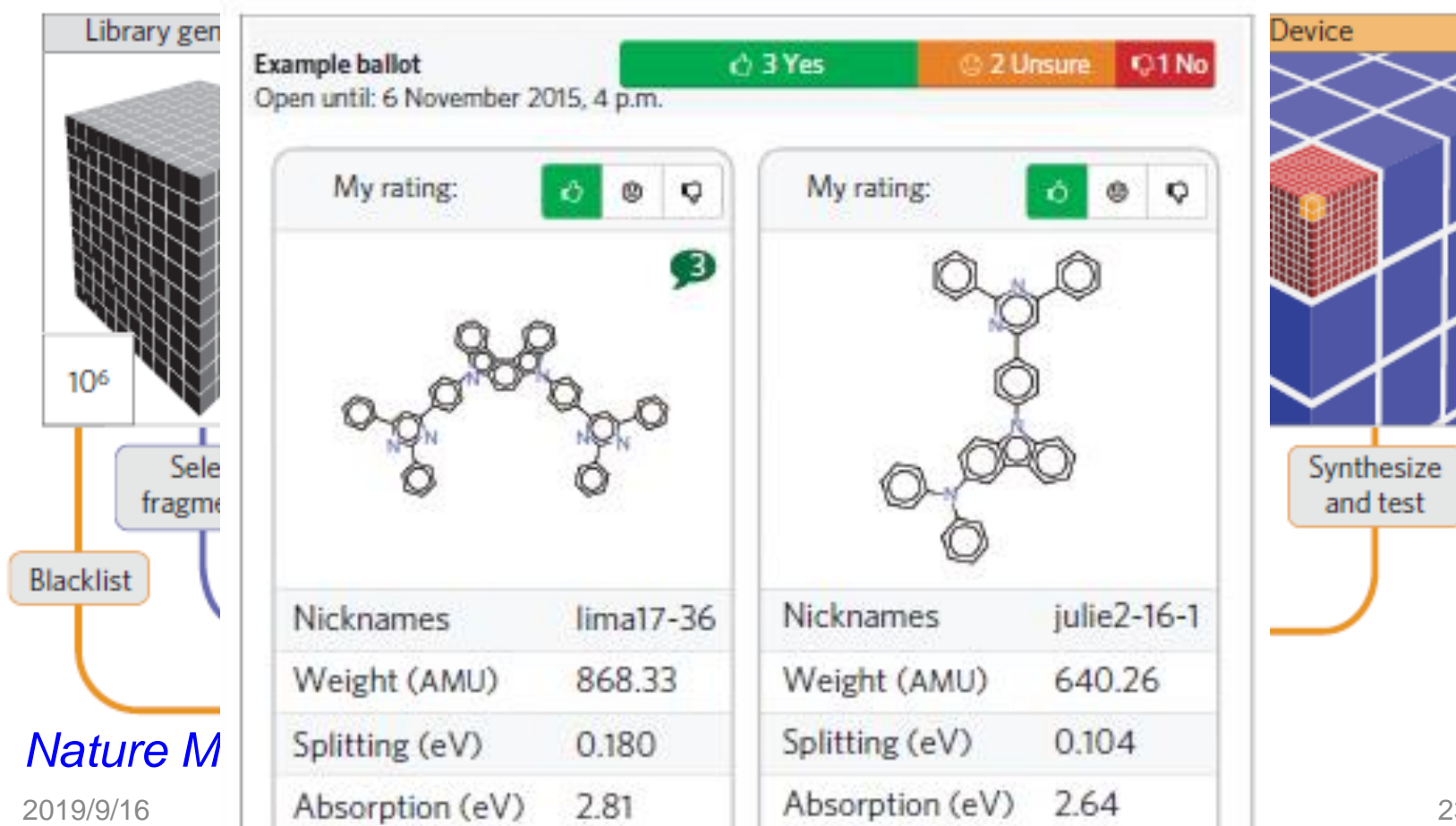


Zikui Liu
Pennsylvania
State University
2002 “Materials
Genome”

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:



1.3 计算材料科学的学习

- 数学基础
- 晶体结构理论、固体物理、量子化学
- 结合材料研究着重讲解Gaussian、VASP、Materials Studio、LAMMPS、CP2K等成熟、通用软件的使用
 - ✓ 结合实践：
 - 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）
 - ✓ 结合Linux平台、计算集群的使用

1.3 计算材料科学的学习

➤ 理论基础（14*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)
- ✓ 固体能带论和第一性原理的计算 (VASP, Dmol3, and CASTEP)
- ✓ 分子力场及分子动力学模拟(Forcite and Discover)
- ✓ 第一性分子动力学模拟(CP2K)
- ✓ 多尺度模拟

1.3 计算材料科学的学习

➤ 上机实践（8*2课时）

- ✓ 基于GaussView和Materials Studio的建模
- ✓ 基于Gaussian的量化计算
- ✓ CASTEP的第一性原理计算
- ✓ VASP的第一性原理计算
- ✓ Dmol3的第一性原理计算
- ✓ Discover和Forcite的分子动力学模拟
- ✓ LAMMPS分子动力学模拟

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. R. Lesar, *Introduction to Computational Materials Science: Fundamentals to Applications*, **2013**.
4. D. Raabe, *Integrated Computational Materials Engineering (ICME) for Materials*, **2012**.
5. Website and manual for each software……

我的设想 vs 同学们的设想

➤我的设想：

1. 学会各种计算方法
2. 面对具体的材料研究问题，同学们能分离出计算的问题。
3. 完成开题 == 拟定研究方案

➤同学们的设想？

成绩评定 for Undergraduate Students

- 期末完成课程内容相关的计算材料领域的任何问题（自选，也可以教师提供）的开题报告：
 - ✓ 内容：到计算设计、建模即可
 - ✓ 完成方式：个人或组队（ ≤ 5 人）
 - ✓ 考核方式：口头（30分，组队作为陈述的同学加10分）+ 书面（70分，组队需陈述各个同学在该课题的具体贡献）
- 一次PPT展示加10分（累计满100分，期末成绩以98分计）：
 - ✓ 与课程内容相关
 - ✓ 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

成绩评定 for Graduate Students

- 平时上机实习：需在课堂规定时间内完成实习内容，并记入**平时成绩**（一次实习一次成绩，平均后记入总成绩），该成绩占成绩总评的**30%**；
- 期末完成与自己目前科研工作有关的一份开题报告：
 - 内容：研究问题的提出、研究方案、研究特色与创新等。
 - 考核方式：**PPT展示**（占成绩总评的**30%**）和**书面报告**（占成绩总评的**40%**）
- 一次PPT展示**加10分**（累计满100分，期末成绩以**98分**计，但期末开题报告不能免）：
 - ✓ 与课程内容相关
 - ✓ 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