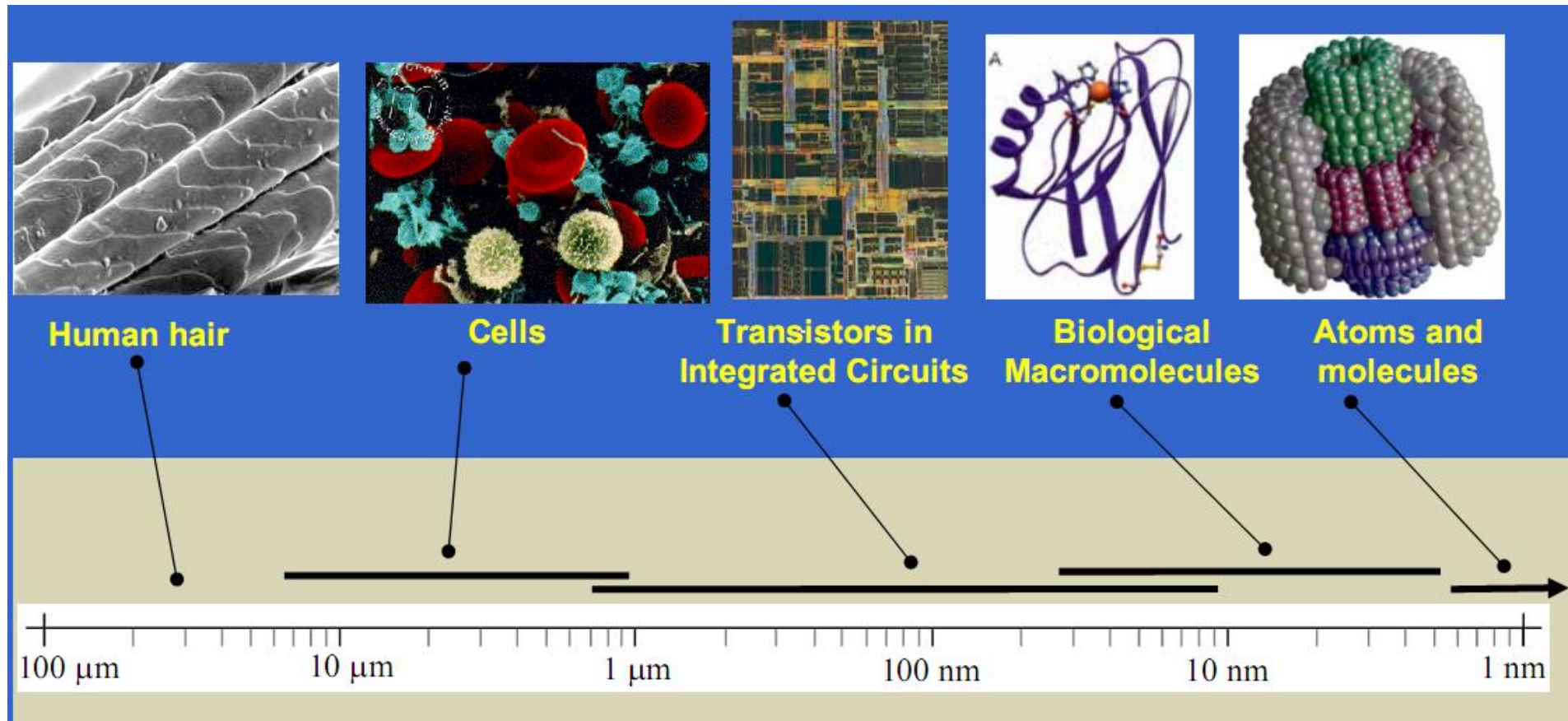
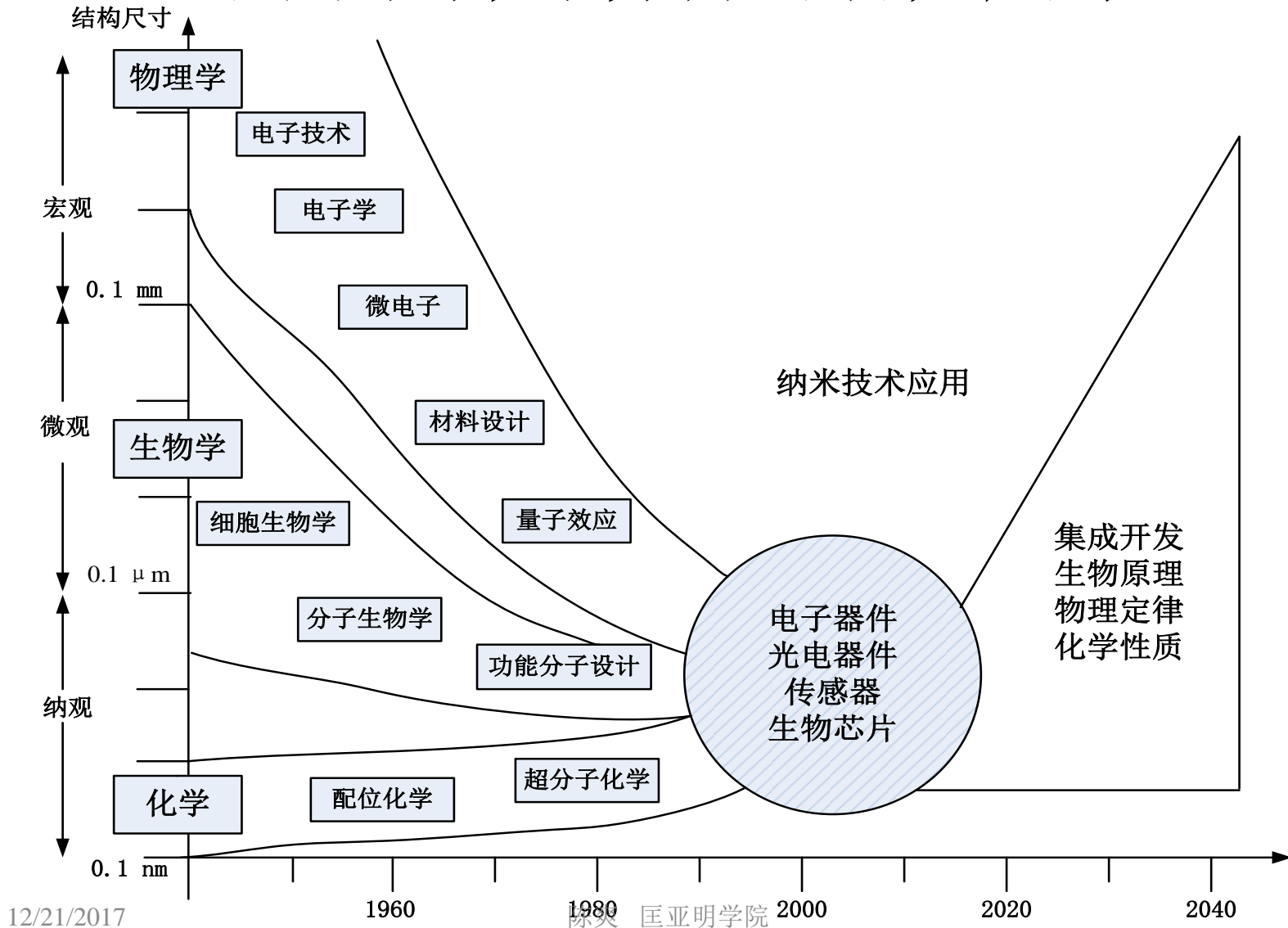


第10章 多尺度模拟

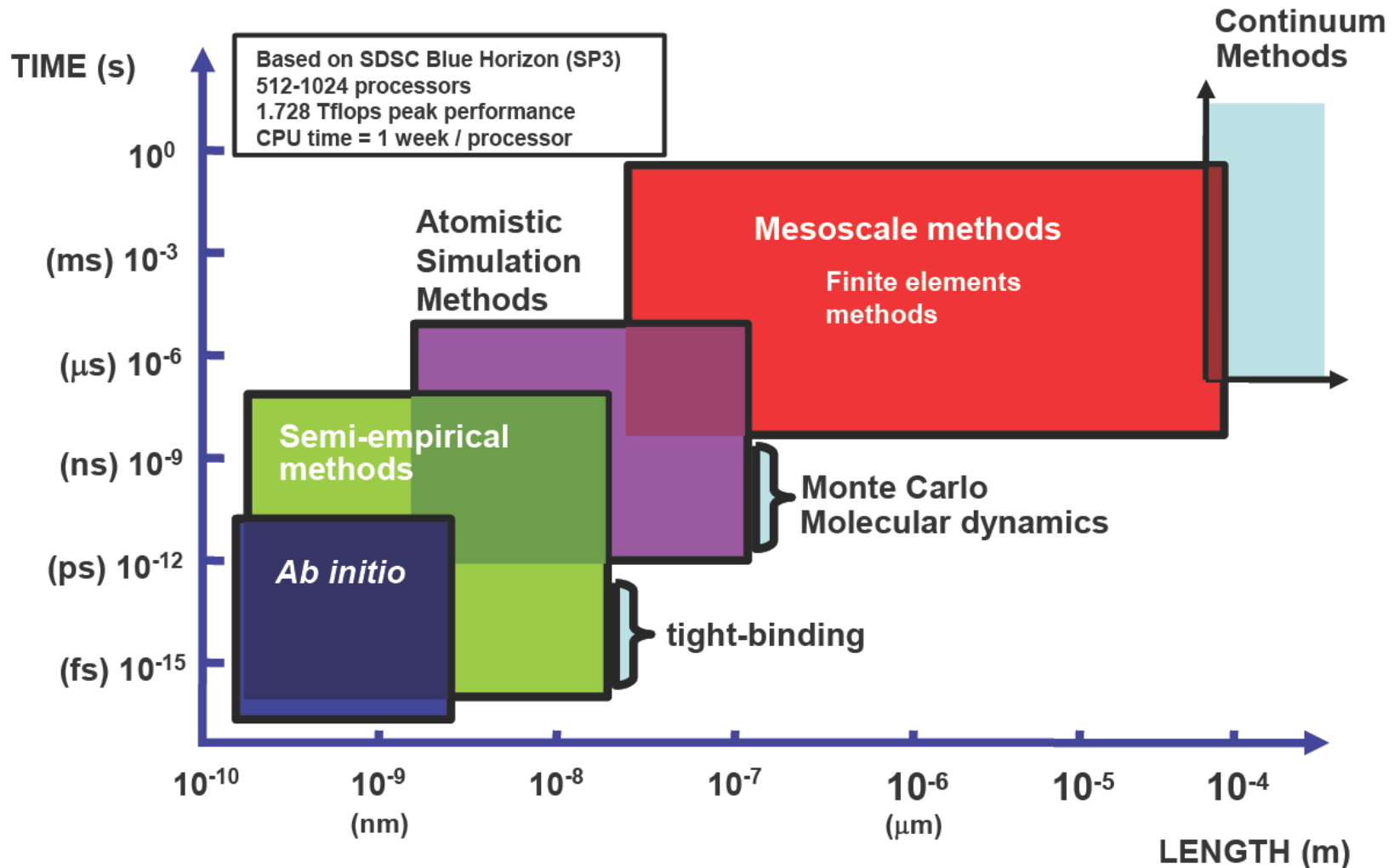
材料的尺寸



不同学科对材料的研究尺寸

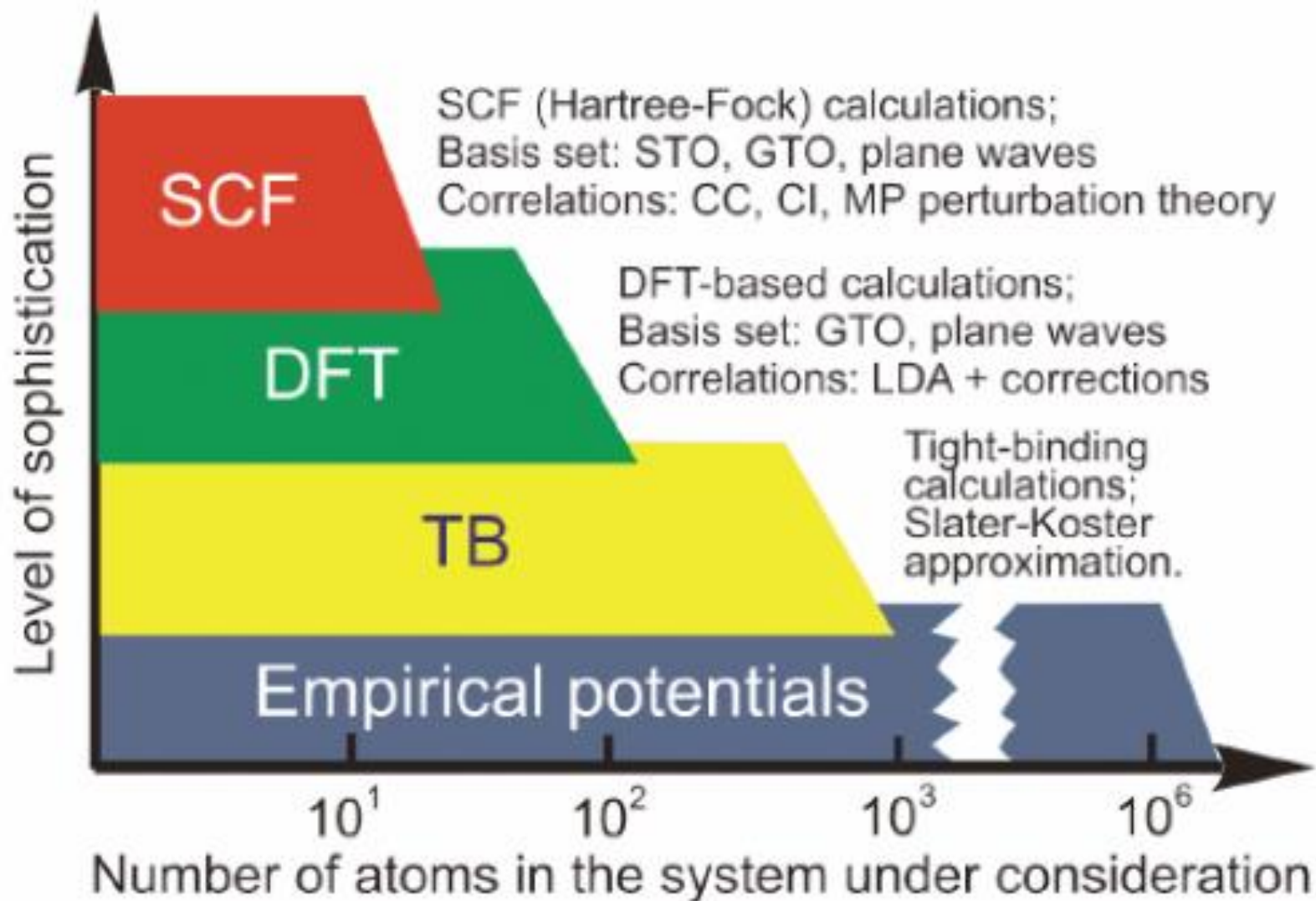


计算材料学模拟的时空尺度

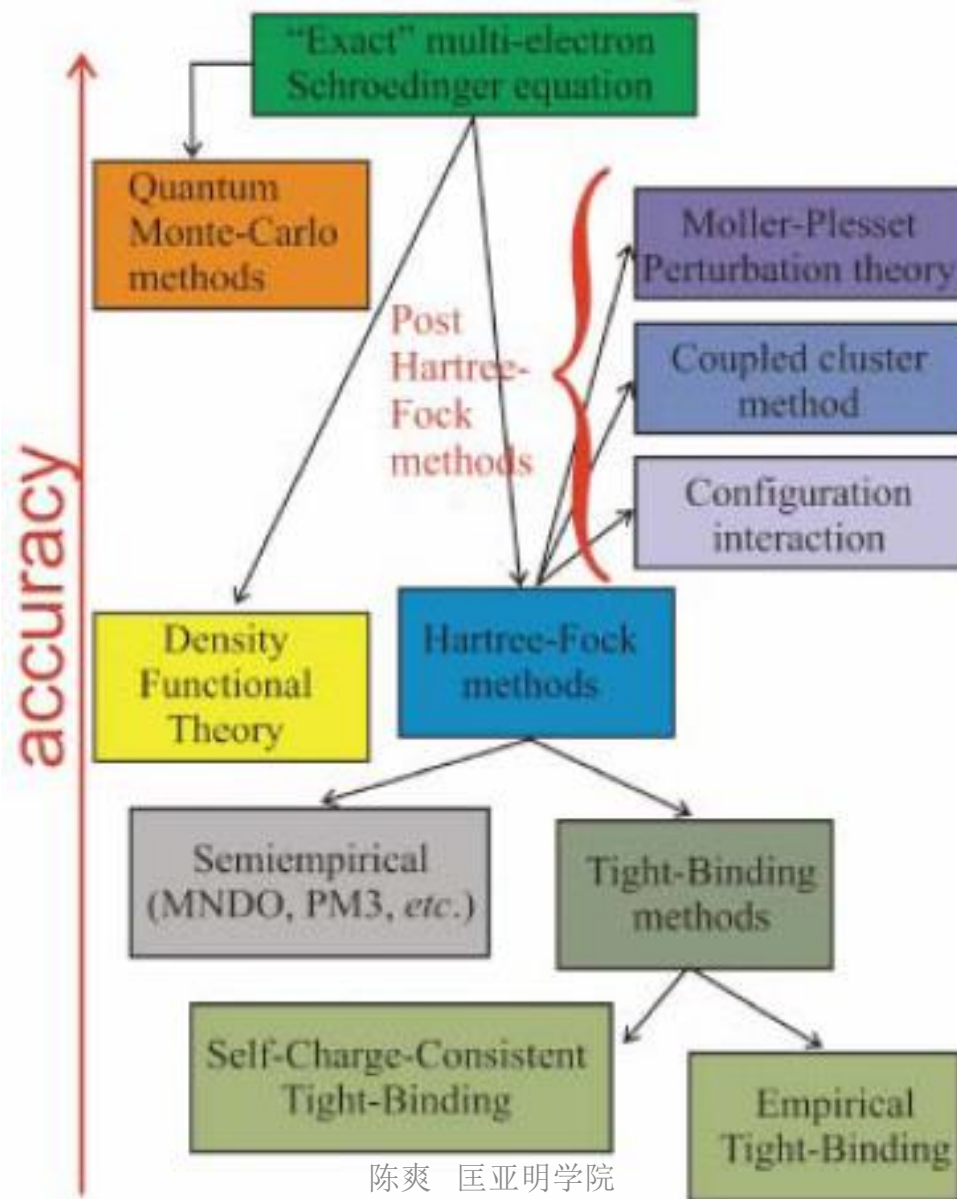


对于材料从微观原子尺度到宏观尺度的模拟存在挑战！！！！

材料计算对应的原子数（电子数）



量化计算的精度



多尺度材料模拟方法的小结

➤ 第一性原理方法(First-Principles methods) = DFT:
从量子力学出发, 通过数值求解Schrödinger方程,
计算材料性质。

✓ 优点:

- 直接给出电子和结构/力学行为的信息;
- 能够描述化学键的断裂和重组或电子的重排;
- 原则上, 只需要原子的种类和坐标作为输入就可以精确计算材料的性质。

✓ 缺点:

- 数值计算的计算量很大;
- 只限于研究较小的尺寸体系 ($\sim 10^2$ 个原子) 和瞬时现象 (~ 10 ps)。

多尺度材料模拟方法的小结

➤ 半经验方法(Semi-Empirical Methods): 从第一性原理方法出发作必要的简化, 例如只处理价电子, 将Hamiltonian参数化, 采用从第一性原理计算或实验得到的参数等。

✓ 优点:

- 仍然可以描述化学键的断裂和重组或电子的重排等过程;
- 与第一性原理方法相比, 可以处理更大更复杂的系统 ($\sim 10^3$ 个原子) 或模拟较长的时间尺度 (~ 10 ns)。

✓ 缺点:

- 难以确定计算结果的可靠性;
- 需要实验或从头计算结果作为输入;
- 方法中采用经验参数, 存在可移植性的困难。

多尺度材料模拟方法的小结

➤经验原子模拟(Empirical Atomistic Simulations):
采用经验势或力场, 结合统计力学, 确定系统的热力学性质或输运行为。

✓优点:

- 可以模拟复杂系统的微观结构 (10^4 - 10^6 个原子);
- 可以模拟较长时间尺度的过程 (时间达到 μs 量级)。

✓缺点:

- 结果依赖于所采用力场的质量;
- 许多物理现象 (如固体中的扩散、化学反应、蛋白质折叠等) 所发生的时间和空间尺度, 采用经验原子模拟仍然是无法达到的。

多尺度材料模拟方法的小结

➤介观方法(Mesoscale Methods): 对于原子模拟方法引入适当的简化来去除较快的自由度, 和/或将一组原子 (“物质滴”, Blobs of Matter) 作为通过有效势相互作用的独立个体来处理, 即进行粗粒化(Coarse Graining)。

✓优点:

- 可以用来研究复杂体系 (10^8 - 10^9 个原子) 的结构特性;
- 可以研究微观模拟方法所无法达到的时间尺度 (s量级) 上的动力学过程。

✓缺点:

- 只能描述定性趋势, 所得到的定量结果的精度难以确定;
- 在很多情况下, 模拟所引入的近似限制了对问题的物理解释。

多尺度材料模拟方法的小结

➤连续体方法(Continuum Methods): 假定材料是连续体, 将系统的各种性质处理为场变量。数值求解唯象方程预言材料的性质。

✓优点:

- 原则上可以处理任意宏观尺度的系统和较长时间尺度上的动力学行为。

✓缺点:

- 需要从实验或者更低尺度模拟获得的材料信息（如弹性系数、扩散系数、状态方程等）作为输入，而这些数据可能很难得到；
- 无法解释从分子水平上或与电子结构相关的结果。

多尺度模拟的基本思路

- 从小往大：采用小尺度计算的结果，获得大尺度模拟所需参数。
 - ✓ 从原子模拟出发，计算唯象参数（如弹性系数张量、扩散系数、黏滞系数等），用于连续体模拟。
 - ✓ 借助第一性原理计算，拟合经验势参数，用于经验原子模拟。
 - ✓ 采用第一性原理计算化学反应势能面，用于分子动力学模拟。
 - ✓ 通过原子模拟获得粗粒化后物质滴间的相互作用势。
- 从大往小：采用大尺度的信息（通常为实验），构造小尺度模拟所需的参数。这属于逆问题，结果不唯一，较难解决。
 - 根据实验数据（如电离能、电子亲和能）拟合半经验电子结构方法中的电子积分参数。
 - 根据实验热力学性质，拟合经验势参数。

Report

- 研究意义（国内外研究现状及发展动态分析→提出迫切需要解决的关键科技问题并论述其应用前景→附主要参考文献目录）
- 研究内容、研究目标，以及拟解决的关键科学问题（此部分为重点阐述内容）
- 拟采取的研究方案（计算方法、技术路线、关键技术等说明）及可行性分析
- 研究的特色与创新之处

尽量选择上课内容涉及的nm尺度以内的各种计算方法!!!