

孙志梅 SUN Zhimei

长江学者特聘教授

Chang Jiang Scholar

国家杰出青年科学基金获得者

Winner of National Science Fund for Distinguished Young Scholars


北京航空航天大学教授,博导,国际交叉科学研究院副院长,集成计算材料科学中心主任。长期从事材料电子结构计算和分子动力学模拟的研究以及相关试验工作,在半导体材料和高性能结构材料等体系的结构与性能研究中取得了显著成绩,已发表SCI论文140余篇,包括4篇*Phys. Rev. Lett.*,2篇*PNAS*,11篇*Phys. Rev. B*等。论文曾被*Nature*作为*Research Highlights*进行评论和介绍,被*Nature Materials*在*News & Views*栏目进行介绍,被*Science*、*Nature Mater.*、*JACS*、*PRL*、*PNAS*等SCI期刊引用3300余次;授权7项国家发明专利。获得福建省杰出青年科学基金,入选科技部中青年科技创新领军人才、国家百千万人才工程、国家万人计划领军人才、福建省高校领军人才等多项国家和省部级人才计划,主持和参与多项国家及省部级项目。

材料基因组工程, 创新材料研制模式

——访计算材料学专家,北京航空航天大学孙志梅教授

Materials Genome Initiative, Innovative Method for Accelerating Materials Research and Development

本刊记者 李丹

: 计算材料学属于交叉学科,是一门正在快速发展的新兴学科,您认为需要哪些知识储备才能全面地理解研究内容?

孙志梅: 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,利用现代超级计算机,模拟材料的各种物理化学性质,研究材料从微观到宏观多个尺度的各类现象与特征,预测材料的结构和性质,达到优化材料或者设计新材料的目的。随着对材料性能要求不断提高,材料学研究对象的空间尺度在不断变小,

从微米级的显微结构拓展到电子层次。材料研究的难度越来越高,仅仅依靠试验来进行材料研究已难以满足现代新材料的发展需求,因此促进了计算材料学的迅速发展。计算材料学根据有关基本理论,在计算机虚拟环境下从纳观、微观、介观、宏观尺

度对材料进行多层次研究。计算材料学研究对象的空间尺度从埃到米,时间尺度可以从飞秒到天甚至到年。不同尺度和不同层次所用的计算材料学理论方法也不同。如基于量子力学原理的第一性原理计算、基于统计物理学的分子动力学方法和基于连续介质力学的有限元方法等。

早期各种计算方法之间相对独立,然而依靠单一的计算方法难以解决实际材料中的问题,需要发展多层次的集成计算方法。在固体电子结构研究中,第一性原理计算的核心是求解薛定谔方程,计算过程中不需要使用任何经验参数,只需要一些基本物理量,即可得到材料的基本物理性能参数。但是薛定谔方程在描述真实复杂系统时,求解非常困难。直到 Walter Kohn 建立了密度泛函理论,以电荷密度代替波函数,才使得求解复杂体系的薛定谔方程成为可能。在分子结构演化研究中,分子动力学方法是通过给定的原子间相互作用势,在一定边界条件和热力学条件下,求出原子所受到的力,建立体系粒子的牛顿运动方程,进而求出原子在每一时刻的位置和速度,最后对体系进行统计平均得到宏观物理量。第一性原理和分子动力学模拟在纳观和微观层次都取得了巨大成功,将这两种方法结合起来是人们一直追求的。Car R 和 Parrinello M 成功地将两种方法有机地联系起来,提出了第一性原理分子动力学计算方法,即在正确描述电子状态和作用于各原子间力的基础上进行分子动力学模拟。它不仅能得到系统基态的结构和电子性质,还可以研究有限温度下系统的离子和电子特性。目前,在现代材料学研究中,计算材料学已经成为与实验室的试验同样重要的研究手段,并且还在不断发展。总之,从事材料计算,不仅要了解材料、化学、物理、计算机的知识,还要了解加工和工程方面的内容,各学科之间的相

互交流和借鉴是非常重要的。

: 谈到材料计算学不得不提的就是近些年受到广泛关注的材料基因组计划,能否为我们做个简单的介绍? 该计划发挥了什么样的作用? 中国是否有此计划?

孙志梅:2011年6月24日,美国总统奥巴马宣布启动一项价值超过5亿美元的“先进制造业伙伴关系”(Advanced Manufacturing Partnership, AMP)计划,呼吁美国政府、高校及企业之间应加强合作,以强化美国制造业领先地位,而“材料基因组计划”(Materials Genome Initiative, MGI)作为AMP计划中的重要组成部分,投资将超过1亿美元。自2012年开始,美国全面实施MGI计划,已投入数亿美元资助MGI研究项目。为实施MGI计划,美国国家标准与技术研究院(NIST)建立了一个新的“先进材料卓越研究中心”;威斯康星大学-麦迪逊新建了“威斯康星材料创新研究院”;乔治亚理工新建了“材料研究院(IMat)”;密西根大学新建了“集成计算材料工程中心”;MIT设立了“材料计划(Materials Project)”等。材料基因工程通过融合高通量计算、高通量试验、专用数据库3大技术,实现新材料研发由“试错法”向“理论预测、试验验证”模式转变,从而达到降低材料研发成本、缩短研发周期的目的。


材料基因组计划的关键在于计算、试验、数据库之间的协作和共享。借力于信息技术,建立包括高通量材料计算、制备、表征、仪器装备、数据库、材料信息等新型共享平台,是互联网时代新材料研究方法的核心内容。

通过材料基因组方法,美国在几种先进材料的研究中获得了巨大成功。如MIT的Ceder G等人利用高通量的密度泛函理论计算,从两万种化合物中筛选出了3种最有希望的锂电池材料,其性能与商用材料相比

有大幅提高;美国GE公司采用材料基因组思想,依托公司内部相近合金的数据库,成功研发了GTD262高温合金。GTD262高温合金用Nb替代了GTD222合金中的Ta,使合金成本大幅降低,而且蠕变强度提高了一倍。GTD262合金研发和服役,从概念设计到工业生产过程历时仅4年。

自2011年6月美国启动“材料基因组计划”后,欧盟、日本等国迅速启动了类似研究计划。我国材料界一直在关注加速材料研发的新方法,美国宣布材料基因组计划后,我国科学家立即敏锐地捕捉到该计划所释放出的重要信息。在多位专家学者建议下,2011年7月中国工程院和中国科学院分别召开“材料基因组”研讨会,12月召开“材料科学系统工程”香山科学会议;2012年12月和2013年3月,中国工程院和中国科学院分别启动“材料基因组计划”重大咨询项目;2014年10月中国科学院向国务院报送了《实施材料基因组计划,推进我国高端制造业材料发展》的咨询建议;2015年2月,中国工程院向国务院报送了《中国版材料基因组计划》的咨询建议,受到了高度重视。

材料基因组计划以变革传统研发模式为理念,以实施快速、低耗、创新发展为目标,将为加速先进材料的发现、发展、开发、产业化和应用创造基础。材料基因组计划蕴含着巨大挑战性和历史机遇,孕育着材料科学走向创新时代。

: 您于2002年在中科院金属研究所获工学博士学位,2002~2007年先后在德国亚琛工业大学冶金系和瑞典乌普萨拉大学物理系从事研究工作,2007年6月~2013年7月在厦门大学任职,2013年8月起加入北京航空航天大学材料科学与工程学院。从事材料计算工作10余年,您和您的团队做了哪些工作,取得哪些进展?

孙志梅:2013年加入北航后成立了集成计算材料科学中心(Integrated Computational Materials Engineering, ICME),邀请了各研究领域的老师加盟,包括计算机、数学、航空、材料、材料加工、固体力学等。中心旨在把基于多尺度模拟与材料模型的集成计算材料工程应用到材料科学与工程各学科,变革材料研发模式,缩短研发周期,降低成本,实现从原子到零部件(器件)的快速研发。北航ICME中心拥有一支专业领域互补、年龄结构合理、活跃在科研前沿的创新队伍。中心现有2名教育部长江学者特聘教授、2名国家杰出青年科学基金获得者、3名中组部“青年千人计划”入选者以及一批研究骨干,并且邀请了多名国际知名学者作为兼职教授或顾问。各专业的老师经常交流合作,为促进新材料研发飞跃式的发展提供了必要条件,学校也非常重视和认可这个学科的发展模式。国外把集成计算材料科学作为一个学科已经发展了很多年了,我们还有很长的路要走。

在基础研究方面,我们重点关注材料性能优化与新材料预测。比如,我们通过理论计算提出了优化相变存储材料性能的方法。常规的方法是从元素周期表中选择元素进行试验,在电阻率方面有所改善,但是其他性能没有得到同步的增长,甚至变差,比如相稳定性降低了。我们利用第一性原理计算结合无机晶体结构数据库,提出了快速获得最优化掺杂元素的新方法。理论计算表明,该化合物非常稳定,且电阻率有明显提高,计划进一步做试验验证。

在新材料预测方面,主要关注二维过渡金属层状碳化物/氮化物(MXene)。近年来发现的MXene是最大的二维材料族,它们展现出优越的物理化学性质,在锂电池、磁性器件、光催化等很多领域具有重要的应用前景。MXene体系因其种类和性

能异常丰富,恰好为“材料基因组计划”的研究提供了一个很好的模型体系,我们将对该族二维材料做全面的理论计算,并积累数据,建成小型的数据库,为今后的试验研究和应用提供参考。目前,我们在MXene的研究中已取得系列进展,包括研究了MXene的微观剥离机制、预测了 $T_{n+1}C_nT_x$ 在柔性电子器件中的潜在应用,发现了 Cr_2C 中半金属和半导体的导电性质及铁磁和反铁磁的转变,预测了MXene的光催化性质等。

孙志梅:您博士毕业后去了德国和瑞典从事研究工作,在科研过程中,他们的科研态度在哪些方面对您影响较大?从您的角度来看,我们在哪些方面还有所欠缺?

孙志梅:从我个人经历谈一些感想,主要有以下几个方面:

(1)严谨的工作态度。我所在的德国亚琛工业大学材料化学所从事薄膜材料的研究。他们在做沉积薄膜试验之前,会将市场上不同公司的同一类型靶材全部购买来做试验,采用不同的靶材在相同工艺条件下制得薄膜,测试薄膜性能,最终检测出使用哪个公司的靶材得到的薄膜性能最好、最稳定。不同公司的产品在生产工艺上有所不同,对薄膜材料性能的影响是非常大的。他们在沉积薄膜前花大量的时间对不同的靶材进行研究,以便稳定沉积工艺,缩小影响因素的控制范围。然而,就是这些细致的前期工作,保证了快速地沉积出高质量的薄膜材料。此外,他们在日常工作中也保持了严谨的作风,办公室整理得井井有条,任何文字工作都有标准模版,而且分门别类管理,包括参考文献的查阅,这样大大提高了工作效率。

(2)自由的学术氛围。我所在的瑞典乌普萨拉大学物理系,学术讨论和交流非常多。每天有固定的工作间隙休息时间,大家聚在一起,就像聊天一样,各自提出遇到的问题和

新的想法,不同方向的研究人员一起讨论,从不同的角度提出看法和解决方案。在宽松愉快的交流中,不同研究领域的思想的相互碰撞往往会产生新的灵感。

(3)勤奋的探索精神。我所在课题组的德国和瑞典教授都有共同的特点,就是勤奋的探索精神。对德国和瑞典的教授,学校并不严格考核其产出,但是他们依然非常勤奋,坚持研究和指导学生等。在他们眼里,探索未知是乐趣和享受,他们往往为搞清楚一个科学问题而进行经年累月的研究。持之以恒的专注也是他们成功的原因。例如,材料计算软件的开发,涉及多学科交叉,对计算机和专业知识要求很高,且经历时间很长,需要一代一代的研究者持续做这件事情。而欧洲的科研团队做到了,他们开发了大部分的商业化材料计算软件。

从我的教学和科研工作来看,我认为我们还需在以下方面进行努力:

(1)拥有自主知识产权软件的开发。关于材料计算,目前较为严重的问题是我们缺乏具有自主知识产权的软件。国外的商业化计算软件种类较多,发展也较为成熟,但是现有的软件有各自的优缺点,并不能完全满足计算材料学发展的需求,这就需要有既懂专业又懂算法的交叉学科人才来研发拥有自主知识产权的软件。

(2)交叉学科人才的培养。目前的材料人才培养、专业设置仍偏向传统的材料研发。随着材料信息化的发展,交叉领域的研究越来越多,传统培养方法难以跟上发展的节奏。如前所述,计算材料领域涵盖了计算机、数据、材料信息、机械、物理、材料、化学等学科,我们亟需培养一大批具有交叉学科知识储备,热爱科研并能静下心来钻研的人才,为材料研发工作打好基础。

(责编 叶枫)