

中国材料大会 2025

暨新材料科研仪器与设备展

7 月 5-8 日, 2025

福建 厦门

E18-第三届多尺度材料计算模拟国际研讨会

**E18-The 3rd International Symposium
on Multiscale Materials Computational
Modeling**

主办单位

中国材料研究学会

会议网址: <https://cmc2025.scimeeting.cn>



E18. 第三届多尺度材料计算模拟国际研讨会

分会主席：施思齐、谢代前

E18-01

算法-数据-知识互利共生的电化学储能材料

施思齐¹

1. 上海大学

摘要内容：锂离子电池和钠离子电池等电化学储能体系的关键是材料。研发新材料的传统方法是试错法，从材料的发现到应用往往需要十几年，很难满足产业界对更高性能电化学储能体系的要求。因此，迫切期望从物理学、材料学、化学和数据等学科交叉的角度，有机地融合理论、计算和实验方法，理解电池材料中电子/离子输运协同调控、界面电化学稳定性等关键科学问题，为电化学储能新材料和新体系的设计提供理论支持，以加快新材料和新体系的研发速度。本报告拟提出算法-数据-知识互利共生的储能材料设计范式，研究微观机制与寿命、比功率和比能量等宏观性能间的构效关系；着重结合本人和合作伙伴开展的一些工作介绍近些年来在这方面的主要进展，并对该范式在电化学储能新材料和新体系研发中扮演的角色进行了展望。

E18-02

基于多尺度模拟的氧还原催化剂及其反应界面研究

李莉¹

1. 重庆大学 特种化学电源国家重点实验室 先进电能源中心

摘要内容：在全球碳中和目标驱动下，氢能作为零碳能源载体的战略地位日益凸显。燃料电池作为氢能高效转化的核心装置，其商业化进程受制于阴极氧还原反应（ORR）的动力学迟缓。相较于阳极氢氧化反应（HOR，过电位约 0.02 V），ORR 需克服高达 0.3 - 0.4 V 的过电位，导致 60% 以上的电池能量损失。因此，开发高效阴极催化电极成为突破燃料电池性能瓶颈的关键。铂（Pt）是当前最优 ORR 催化剂，但存在本征活性受限与线性比例关系，铂用量矛盾以及三相界面反应与传质失配等问题。碳基催化剂作为最有潜力的替铂催化剂，面临着本征活性根源不清、活性位密度不足、工况活性急速衰减等问题。本研究分别针对低铂催化剂和非贵碳基催化剂，基于密度泛函理论计算、分子动力学、粗粒化模拟等多尺度模拟，结合微观分子动力学方法，展开反应机理解析、催化剂设计、三相界面构筑等方面的研究。针对低铂催化剂，重点研究了多晶面交错结构和晶面层数对反应机理、催化剂电子结构以及催化活性的影响规律；三相界面离聚物对铂基本征活性、质子通道与反应通道以及催化剂利用率的影响机制。针对碳基催化剂，重点解析了杂原子掺杂对本征活性的影响规律，多结构因素对活性位密度调控，以及失活机理等。

E18-03

大尺度非绝热动力学理论与复杂材料载流子动力学机制

王林军¹

1. 浙江大学化学系

摘要内容：大尺度非绝热动力学涉及成千上万原子和大量电子能级，需要刻画强烈耦合的电子与原子核运动，是理论化学的重大挑战。我们提出了细致内在自洽原理，建立了自洽的混合量子-经典动力学理论，正确刻画了非绝热耦合局域时的量子退相干，在大量标准测试体系中系统提高了非绝热动力学模拟的精度；发展了不依赖非绝热耦合的非绝热动力学方法，通过电子哈密顿矩阵和退相干时间的机器学习，大幅提升了大尺度非绝热动力学模拟的效率；开发了通用模拟软件，成功研究了常用方法和软件无法处理的复杂材料大体系动力学问题，实现了模型体系中任意电子耦合下百万级电子能级的载流子动力学模拟，系

统研究了数千到数万原子下石墨烯纳米带、二维材料和量子点等中的本征电子动力学机制。特别地，我们揭示了量子点跨大势垒的反常界面电子转移机制和非原位氧化动力学机制，通过材料设计促进量子点绿光和蓝光电致发光效率首次达到理论极限和稳定空穴掺杂。

E18-04

机器学习辅助陶瓷材料评价和筛选设计

柏跃磊，赫晓东

哈尔滨工业大学复合材料与结构研究所

摘要内容：机器学习可与现有理论模拟方法结合用于陶瓷材料的评价和筛选，例如连续纤维增强陶瓷基复合材料和三元层状过渡金属化合物 MAX (MAB) 相。首先，本文采用断裂相场法生成数据训练出一个深度学习模型实现了对 SiC 纤维增强 SiC 陶瓷复合材料裂纹扩展路径的快速高精度预测，计算速度提升 1-2 个数量级。而基于第一性原理计算和文献报道的实验结果，采用机器学习模型分析环境涂层材料稀土硅酸盐的热膨胀系数和热导率，定量化显示了化学组成和微观结构参数的影响，实现了热膨胀系数和热导率的精确预测。最后，采用文献报道结果训练出一个机器学习模型用于分析和预测 MAX 相的物相稳定性，仅根据元素组成即可实现对稳定性的快速预测，经第一性原理确认后筛选出一系列新型化合物并成功合成出新型 Ti_2SnN 。

E18-05

基于机器学习势函数的负载金催化剂理论研究

刘锦程

南开大学材料科学与工程学院，天津津南区，300381

*liujincheng@nankai.edu.cn

摘要内容：烧结是负载金属纳米颗粒催化剂中最重要的失活方式之一。因此，了解载体对烧结行为的影响至关重要。本文通过原位球差校正透射电子显微镜和深度势能分子动力学计算模拟，揭示了金纳米颗粒和各种载体之间的原子尺度动态相互作用。研究发现，与非晶态二氧化硅上的金纳米颗粒相比，氧化铈上的金纳米颗粒具有更小的接触角，并且在表面台阶处的流动性明显较小。与液滴亲水性的概念类似，作者将小纳米颗粒的烧结迁移归因于亲金属性，它决定了金属与载体之间的相互作用。从头算分子动力学 (AIMD) 和基于机器学习的深度势能分子动力学 (DPMD) 模拟直接观察到二氧化硅表面的烧结过程和金在氧化铈上的强结合作用，并揭示了负载纳米金催化剂的尺寸效应本质。[1-4]

E18-06

固态电解质失效机制与改性策略的多尺度模型研究

唐法威¹

¹ 杭州研趣信息技术有限公司，浙江省杭州市西湖区文二西路，邮编 310000

摘要内容：随着电动汽车和储能技术的飞速发展，高能量密度、高安全性的固态锂电池成为下一代电池的焦点。固态电解质（如石榴石型 $\text{Li}_7\text{La}_3\text{Zr}_2\text{O}_{12}$, LLZO）凭借高离子电导率、宽电化学窗口和强力学性能备受关注。然而，充放电过程中在锂金属负极侧易形成锂枝晶，并生长穿透固态电解质导致电池短路，使其实际应用受限于循环寿命较短等问题。以往研究将枝晶归因于石榴石型电解质表面残碱导致的润湿性差或晶界处的高电子电导率等。但近期实验发现，即使在单晶无残碱石榴石型固态电解质中，枝晶仍会形成，并且细晶多晶石榴石型固态电解质相较于粗晶体系更易在晶界处形成锂枝晶，暗示背后存在更复杂的失效机制。

基于以上原因，本研究围绕固态电解质离子传输动力学和锂枝晶形核机制，构建了多尺度模型。结合数理模型、第一性原理计算和有限元模拟，综合考虑了电子结构、几何构型、离子输运、浓度分布、晶粒

尺寸等各类材料理化性质的特征与关联。引入晶粒尺寸效应构建了可定量描述多晶固态电解质中离子电导率随晶粒尺寸变化的数理模型,揭示了多因素耦合下晶界对离子电导率的影响机制;再以 LLZO 材料为例,结合第一性原理计算和数理模型,从微观尺度探讨了晶界对锂传输特征的影响及枝晶形核的作用机制。进一步地,通过有限元模拟从宏观尺度论证了特殊锂传输形式存在的可能性,并结合微观尺度的失效机制提出多晶体固态电解质材料的非对称设计策略(“粗晶-细晶”复合结构),为开发兼顾高离子电导率和枝晶抑制能力的固态电解质提供了理论指导。

E18-07

低维光学功能材料的计算与设计

赵纪军¹

1. 华南师范大学物理学院

摘要内容: 光与材料的相互作用是一个复杂而多样的过程,涉及电磁波与材料内部的量子态和集体激发的相互作用。相比其他物理化学性质,材料光学性质的第一性原理模拟计算更具有挑战性。近年来,本研究团队利用 Gaussian、VASP 等程序,基于量子限域效应、元素掺杂、官能团修饰、结构设计(多聚体、Janus、异质结)等调控策略,设计了一系列低维光学功能材料,本讲座将对相关研究内容进行系统的总结,主要包括: 1) 配体金团簇和富勒烯的荧光调控; 2) 手性硒化镉量子点的光活性; 3) 二维单层材料及异质结的非线性光学性质; 4) 二维反铁磁材料 Fe_2CX_2 ($\text{X} = \text{F}, \text{Cl}$) 的磁光克尔效应。

E18-08

large scale atomistic simulations of electronic devices

中科院半导体研究所

摘要内容: As the size of electronic device shrinks to nanometer scale, it becomes necessary to simulate the device behavior at atomic scale. We developed a charge patching method which can be used to describe atomistic dielectric screening to get the device C-V property. For the quantum transport calculation, we developed a divide and conquer method to construct the scattering states. This allows us to calculate the I-V curves for $> 10,000$ atom devices. Combining these methods, we can simulate realistic nano-size microelectronic devices.

E18-09

人工智能辅助的材料设计与模拟

谢禹、李家祥、杨欣、吕健、刘寒雨

吉林大学物理学院物质模拟方法与软件教育部重点实验室

摘要内容: 在高压、高温等非标准条件下,材料的结构稳定性与物理性质呈现出复杂的依赖关系,这对理论建模提出了严峻挑战。为应对这一问题,我们开发了第一性原理材料模拟软件 ARES (Ab initio atomic mateRial modEling Software at JLU)。ARES 基于实空间有限差分与平面波方法,具有高精度与优异的并行扩展性,能够高效执行复杂体系的电子结构计算、结构优化及分子动力学模拟任务。为了提升材料预测能力,ARES 集成了机器学习模块,支持基于主动学习的结构搜索与高精度机器学习势函数构建。在确保计算精度的前提下,大幅降低了大规模结构模拟的成本。通过高通量结构搜索与机器学习加速的势能面建模相结合,ARES 成功识别并预测了多种高压稳定相及其相关性质。尤其在多元复杂体系中,ARES 展现出对潜在稳定结构的高效发现能力。例如在 Mg-Ca-H1 和 M-B2 等体系中,ARES 结合机器学习方法,成功识别出多个潜在的高温超导体。目前,ARES 已广泛应用于氧化物、硼化物、氢化物等材料体系,在理论预测与实验验证之间架起了重要桥梁,为新材料的高效发现与性能调控提供了强有力的技术支撑。

E18-10

氢、氧电催化的界面结构效应

陈胜利¹

1. 武汉大学 化学与分子科学学院

摘要内容：电催化反应发生在催化剂/电解质界面处，其效率同时受催化剂表面性质和界面微环境及结构的影响。以往电催化材料设计和机制研究主要聚焦于催化剂组成和结构、电解质组成等调控催化剂与反应中间体的相互作用方面，从表面关键步骤的能垒入手。最近，越来越多的电催化研究开始关注催化剂-电解质界面双电层的组成和结构对电催化过程的影响，并基于此实现电催化效率的提升。

本报告介绍我们最近在氢、氧电催化体系界面结构效应方面的一些研究结果。在氧电催化方面，针对 Pt 基催化剂氧还原反应高起始过电位和缓慢动力学这一长久存在的问题，结合实验循环伏安曲线、从头算分子动力学 (AIMD) 模拟，我们发现高电位下 (0.9 V 以上) Pt(111) 电极表面会形成疏水的有序结构 (*OH-*H₂O 共吸附结构和 *O 层结构)，且电极表面呈现为高正电荷密度状态，造成了界面水分子呈现为十分刚性且氧朝下的构型，阻碍了界面质子耦合电子转移反应的发生。我们还证明了合金化或高指数晶面等催化剂结构组成及形貌调控策略可以通过调节电极表面疏水结构、正电荷密度进而改善界面水层结构，有效提升氧还原动力学。此外，针对原子级分散的金属-氮-碳 (M-N-C) 氧还原催化剂在酸、碱电解质中显著的 pH 效应，我们的结果表明催化剂表面电荷密度的巨大差异导致的界面溶剂构型及氢键丰度的显著区别是引起 pH 效应的根源。在氢电催化方面，我们结合 AIMD 模拟、原位表面增强红外谱学和计算谱学，基于多角度结果之间的相互印证，揭示了溶液 pH、阳离子种类、催化剂 OH 结合能 (OHBE) 等影响 Pt 基催化剂上氢电催化反应活性的界面机制。这与以往认为这些因素通过影响表面反应步骤的能量的观点截然不同。我们研究了 OHBE 系列不同 OHBE 催化剂在不同 pH 值电解质溶液中的氢氧化和氢析出反应动力学，发现其呈现出随 pH 先减缓后上升的特点，即“催化剂活性-电解质 pH”关系曲线存在拐点，而非传统认为的随 pH 单调下降。基于氢电极反应三路径机理的微观动力学模型分析，这种 OHBE 依赖的拐点行为支持 pH 和 OHBE 主要通过改善界面双电层中氢键网络来促进氢电催化动力学的认识。另外，通过在 Pt 电极上修饰不同亲氧性的过渡金属，我们发现碱性氢析出活性、界面双电层结构性质以及电极零电荷电势与表面亲氧性之间的一致火山型关系，提出了表面亲氧性影响碱性氢电催化动力学的根源在于它对电极 PZC 的改性，从而影响了双电层的电场强度、刚性和氢键网络结构，并最终控制了界面质子传输动力学。这些发现都强调了关注电催化界面结构对于理解电极和电解质性质依赖的电催化反应动力学的重要性。

E18-11

材料张量数据库与 NEP 自动化训练工具的开发及应用

唐刚¹，胡涛²，王世豪¹，陈成兵³

1. 北京理工大学
2. 重庆邮电大学
3. 桂林理工大学

摘要内容：随着 AI for Science 研究范式的兴起，材料科学正经历深刻变革。机器学习技术的发展为材料研发开辟了新路径，通过对有性能标签的数据集进行学习并构建回归模型，实现了材料性能的高效精准预测。尤其是机器学习势方法，通过学习第一性原理计算数据集，能够构建兼具高准确性与高效率的势能模型，为大尺度材料动力学模拟提供了可能。针对当前国内外材料数据库中物理张量数据（如介电、压电等）较为稀缺的问题，我们基于图神经网络和高通量第一性原理计算，开发了专门的介电和压电张量数据库平台，并搭建了回归机器学习模型自动化框架，已成功应用于光电和热电性能预测。为进一步降低神经网络进化势能方法的应用门槛，我们开发了可视化数据集管理工具 NepTrainKit。该工具采用创新的卡片组合设计，集成了异常值识别、最远点采样、非物理结构检测等功能，支持用户通过拖拽灵活构建个性化训练数据集，并具备插件式扩展能力，极大提升了数据处理效率。这些工具将有力推动人工智能在材料科学领域的深入应用。

E18-12

锌离子电池实用化探究

陈维

中国科学技术大学

摘要内容：将探讨目前锌离子电池实用化进程中遇到的问题和相应的解决策略及未来发展方向。