
第一篇

基础理论

第1章

电子材料理性设计概述

1.1 电子材料的基础概念与分类

电子材料是指那些在电子设备和系统中用于处理、传输或控制电流、信号及能量的材料^[1]。这些材料具有特定的物理和化学特性,使它们能够有效地执行各种电子功能。电子材料的性质直接决定了电子器件的性能,因此它们是现代电子技术的基础。根据电导性能,电子材料可分为三大类^[2-3](表 1-1)。

表 1-1 电子材料按电导性能分类

材料类型	电导率范围	典型材料	主要应用	关键特性
导电材料	$>10^4$ S/m	铜、铝、银、导电聚合物	电缆、导线、散热片	低电阻率、高热导率
半导体材料	$10^{-6} \sim 10^4$ S/m	硅(Si)、砷化镓(GaAs)、氮化镓(GaN)	集成电路、太阳能电池、发光二极管(LED)	可调控电导率、开关放大性能
绝缘材料	$<10^{-8}$ S/m	陶瓷、塑料(聚氯乙烯/聚四氟乙烯(PVC/PTFE))、橡胶	绝缘层、基材、外壳	高击穿场强、化学稳定性

1.2 电子材料的发展历程与现代挑战

电子材料作为现代信息技术的基石,其发展历程见证了人类科技的进步。从早期的硅基半导体到如今的二维材料、钙钛矿太阳能电池材料,每一次材料革命都推动了电子技术的跨越式发展。

1.2.1 电子材料的发展演进

电子材料的范畴非常广泛,涵盖了用于制造电子设备、集成电路、光电器件以及其他电子系统的关键功能材料。这些材料的独特性能,如电荷的流动、控制和操作以及它们与原子和分子的相互作用,使其在半导体、显示器、通信、能源存储和转换等领域得到广泛应用。经验驱动时代:早期,电子材料的研发主要依赖于经验积累和反复试错。例如,硅基半导体作为第一代电子材料,长期以来是电子产业的支柱。然而,传统试错方法效率低下,周期漫长。理论指导时代:随着量子力学和固体物理学理论的建立,材料科学开始有了坚实的理论基础,研究者能够从原子层面理解材料的本质特性,这为后续的理论指导和计算材料科学奠定了基础。

1.2.2 计算材料科学的兴起与人工智能的赋能

计算材料科学的兴起标志着材料研发进入一个新时代。第一性原理计算(first-principle calculation)方法,如密度泛函理论(DFT)等,使得研究者能够在实验之前就预测材料的基本性质,极大加速了材料发现的步伐。例如,Materials Project 等高通量计算平台致力于提高固体材料计算模拟的效率、文档化和共享性。近年来,机器学习(machine learning, ML)和 AI 技术的引入,更是带来了革命性的变化,使得材料设计从被动的筛选转向主动的创造^[4-7]。AI/ML 方法通过分析海量材料数据,能够发现传统方法难以察觉的材料性能与结构之间的复杂关联。

AI 技术具有三大优势。①加速发现与设计:AI 方法通过构建材料属性和性能预测的代理模型,加速了新材料的发现过程。例如,机器学习可以用于加速热电材料的发现,结合高通量计算预测材料性能。②逆向设计能力:AI 驱动的方法实现了“逆向设计”能力,即给定所需性能,可直接发现符合要求的新材料。③多尺度整合:AI/ML 方法能够整合从原子到宏观不同尺度的材料数据,从而更全面地理解材料行为。

1.2.3 当前面临的挑战与未来方向

然而,即使有了这些先进的工具,电子材料的研发仍然面临诸多挑战。①复杂性与多目标优化:材料的电学性质往往由多个相互关联的因素共同决定,例如有效质量、带隙宽度、载流子迁移率等参数之间存在复杂的耦合关系^[8-9]。传统方法很难实现多目标的同步优化。②庞大的材料空间:即便只考虑最基本的元素组

合,可能的材料构型数量就已经达到了天文数字。以烧绿石氧化物结构($A_2B_2O_7$)为例,仅 A 位和 B 位的元素选择就分别有 33 种和 44 种可能性,这意味着理论上可以形成数千种不同的化合物。③实验验证的高成本与长周期:传统的试错式研发不仅需要消耗大量的时间和资源,而且成功率相对较低。从一个新材料的实验室发现到最终实现产业化应用,平均需要 15~20 年的时间。④数据可用性与质量:AI/ML 方法的有效性高度依赖于高质量、大规模的材料数据库。目前,材料数据的收集、标准化和共享仍是瓶颈。

1.2.4 新型电子材料与技术

尽管面临挑战,新的电子材料和技术仍在不断涌现。以石墨烯为代表的二维材料,因其原子级的厚度和可调谐的性能,在未来电子器件中展现出巨大潜力^[10-12]。它们在柔性电子、生物电子学等领域有广阔的应用前景^[13]。钙钛矿材料以其高光吸收系数、可调带隙、高迁移率和低成本等特点,成为下一代太阳能电池的有力竞争者^[14-16]。尽管稳定性仍是商业化的瓶颈,但通过数据驱动优化和机器学习分析,有望发现兼容的分子以提高其稳定性^[17]。其他的电子材料,如柔性电子器件中的有机材料因可兼容高通量、低成本的加工技术以及通过有机合成精确功能化的能力而备受关注。在锂离子电池领域,硅基材料因其极高的理论容量,被视为下一代锂离子电池商业石墨负极最有前途的替代品^[18]。其他新兴材料,如非离子表面活性剂模板化合成多孔金属氧化物半导体,可用于气体传感应用^[19]。

AI 和计算材料科学的融合正在深刻改变材料研发的范式。从 AI 方法的综合框架到具体的材料设计应用,这些技术正在加速材料发现、优化和制造的全过程。未来,电子材料的研发将更加依赖于跨学科的协同,结合先进的计算工具、大数据分析 and 自动化实验平台,以期更快地将创新材料推向市场,支撑人工智能、物联网、先进传感和量子计算等前沿技术的进一步发展。

1.3 理性设计的内涵与框架

在材料科学领域,理性设计正引领一场范式变革,其核心理念在于通过结合先进的理论预测与计算模拟,系统性地指导新材料的发现、设计及优化过程^[20]。这一现代化框架深度融合了高通量计算、人工智能以及实验验证三大核心要素,共同构建了一个高效、精确且具有自优化能力的材料研发循环。

1.3.1 高通量计算：原子尺度上的预测基石

高通量计算 (high-throughput computation, HTC) 是理性设计的基础, 通过大规模并行计算, 快速筛选和预测材料的潜在性质。第一性原理计算方法如 DFT, 能够从量子力学基本原理出发, 在不依赖任何实验参数的情况下, 精确预测材料的电子结构、晶格振动、热力学稳定性以及各种物理化学性质^[21-22]。例如, DFT 被广泛应用于电池电解质的溶剂化结构研究中。通过第一性原理计算, 研究人员能够揭示材料在原子和电子层面的行为机制, 为新材料的设计提供深刻洞察。分子动力学模拟通过追踪原子和分子的运动轨迹, 研究材料在宏观条件下的动态行为, 如扩散、相变和力学响应^[23-24]。这种方法尤其适用于探索复杂体系中的动态过程, 例如氢分子在材料表面的吸附行为。此外, 将机器学习原子间势函数 (machine learning interatomic potential, MLIP) 引入分子动力学模拟, 能够有效平衡计算精度与效率, 使其在复杂物理化学体系中展现出强大能力。

这些计算工具能够模拟材料在不同条件下的行为, 例如预测氢在铁基材料表面的吸附位点, 从而指导开发抗氢脆材料^[25]。在对黏土矿物的分子建模研究中, 分子动力学和蒙特卡罗模拟被广泛应用于研究其性质, 并且近年来已开始集成机器学习和 AI 技术以提高模拟效率和准确性^[26]。

图 1-1 展示了四种科学范式——经验科学、理论科学、计算科学和数据驱动科学——及其对预测模型发展的贡献。数据驱动科学结合了来自实验和计算/模拟的大数据, 并利用 AI 技术 (包括机器学习和深度学习) 来构建预测模型, 实现对材料行为的精确预测。

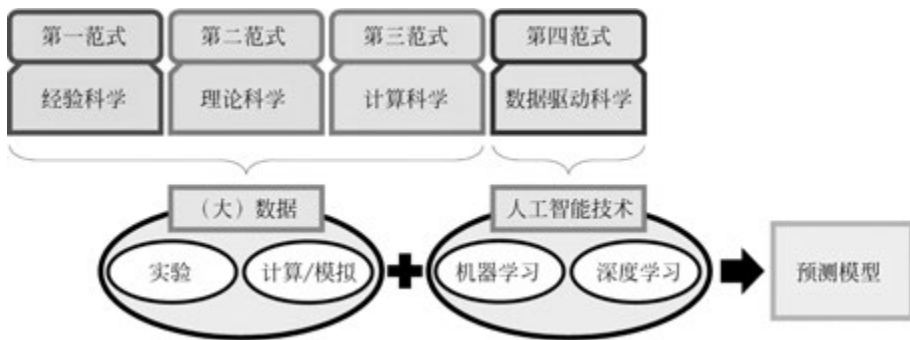


图 1-1 四种科学范式对预测模型发展的贡献

(图片来自 Gupta 等^[27], CC-BY 4.0 许可)

1.3.2 人工智能：从数据中学习规律，加速材料发现

AI是理性设计框架中的智能引擎，特别是机器学习和深度学习(deep learning, DL)技术，通过从海量材料数据中学习复杂的结构-性能关系，从而实现对新材料性质的精准预测，极大地加速了材料发现的进程。AI技术能够处理高维度、非线性的复杂数据，例如在镁合金设计中，AI、机器学习和深度学习技术能够快速且准确地预测和优化材料性能，减少实验工作量，加速高性能合金的开发。AI、机器学习和深度学习的关系可以用同心圆来表示，其中AI是最外层也是最广泛的概念，机器学习是AI的一个子集，而深度学习又是机器学习的子集^[28-31]。这意味着深度学习是机器学习的一种高级形式，而机器学习则是实现AI的一种重要方法。

通过训练AI模型，可以从已有的实验或计算数据中学习材料的内在规律，例如，利用机器学习设计具有异质晶粒结构的高熵合金，以优化其力学性能^[32]。此外，AI辅助平台(如ALKEMIE)旨在加速先进材料的发现与设计。在催化剂设计与合成领域^[33]，AI正在通过数据驱动的范式转型，实现理性设计、智能表征分析和自动化合成^[34]。AI模型可以预测未知材料的性能，并指导实验合成。例如，在钙钛矿带隙预测中，AI驱动的计算方法能够克服传统方法的局限性^[35]。在单晶高温合金的设计中，研究人员构建了具有物理约束的深度迁移学习神经网络，用于超高温蠕变寿命预测，并在外推空间中验证了模型的泛化能力^[36]。

图1-2展示了AI驱动合金成分设计流程^[36]，包括构建深度迁移学习模型、模型辅助合金设计、实验验证和蠕变机理研究。AI与自动化技术的结合，使得材料的“手眼脑”过程数字化，能够自动进行大量材料实验，并通过图像识别观察，进而生成材料模型^[37]。

研究发现，通过结合机器人自动化、图像处理和AI，无需先验知识即可生成材料模型^[37]。在组分调制无铅铁电体设计中，高通量相场模拟结合机器学习算法，能够有效设计出具有优异机电响应的材料^[38]。此外，对于电解质设计，高通量筛选和数据驱动设计方法结合了盐、溶剂和添加剂的结构-性质-性能关系，并通过AI实验室进行建模和模拟。在电解质的高通量筛选和数据驱动设计方法中^[39]，强调了结构、性质、性能之间的关系，并利用AI进行建模和模拟。

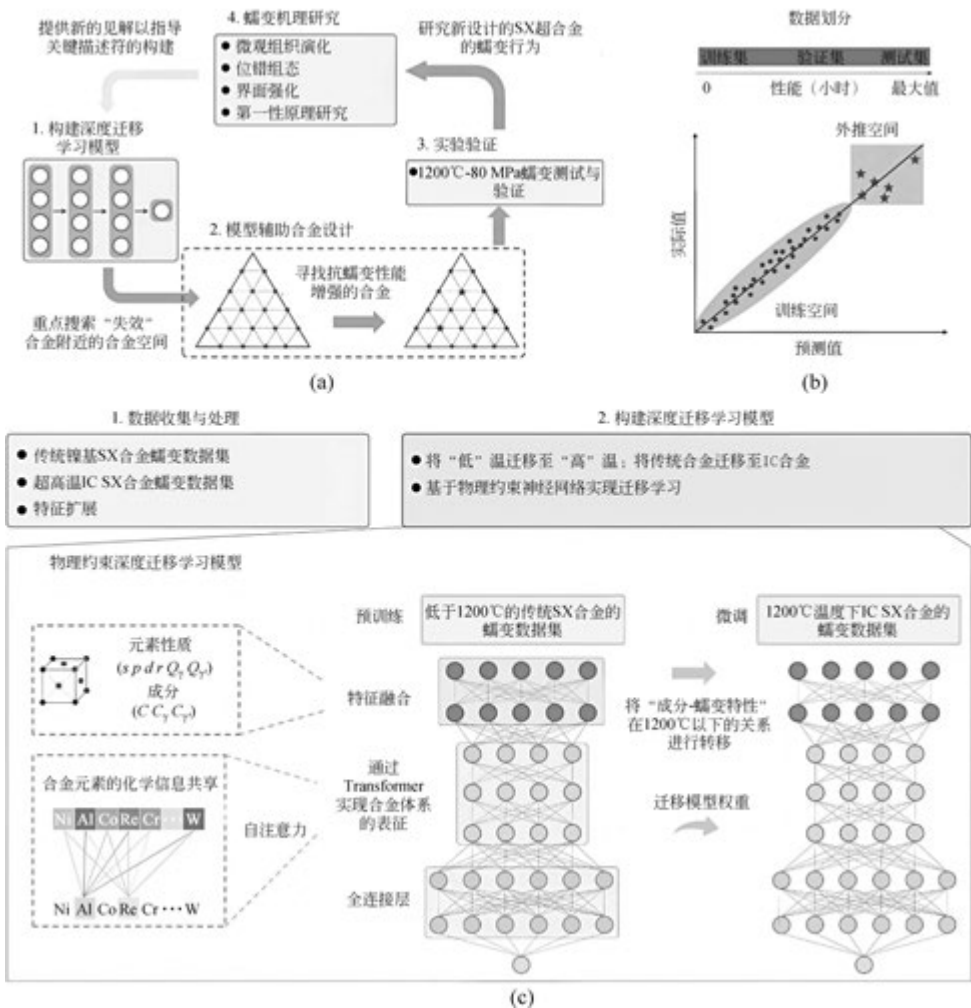


图 1-2 AI 驱动的合金成分设计流程

(a) 完整合金成分设计流程, 包含深度迁移学习模型构建、合金设计、实验验证及超高温蠕变机理研究; (b) 数据划分策略, 将高性能数据作为测试集以评估模型外推效能; (c) 基于迁移学习的深度学习模型构建方法, 标注了必要的收集与处理步骤, 图示展示了模型中的关键特征融合与元素交互表征模块 (图片来自 Yang 等^[36], CC-BY 4.0 许可)

1.3.3 实验验证：闭环反馈，提升设计精度

实验验证是理性设计框架不可或缺的一环。它将理论预测和计算模拟的结果付诸实践, 形成一个持续优化的闭环反馈系统。高通量实验 (high-throughput experimentation, HTE) 技术能够快速制备、表征和评估大量的材料样品, 从而高效

验证计算预测的结果。例如,在催化剂设计中,HTE与AI的集成正在革新传统方法,加速催化剂的发现和优化^[40]。通过实验对模拟和预测进行验证,可以及时发现模型中的不足,并利用实验数据反馈给计算模型进行修正和优化,从而提高未来设计的准确性。在材料信息学中,计算工具、实验工具和数字数据之间的三向交叉,共同支持高通量材料研发,并强调了验证与确认(实验/模型耦合)的重要性,以确保计算模型与实验结果的一致性^[41]。

围绕“高通量”,强调了计算工具、实验工具和数字数据在材料科学和工程中的交叉作用,以及验证和确认的重要性^[41]。清洁能源材料平台(Clean Energy Materials Platform,CEMP)这类开放获取平台,集成了高通量计算 workflow、多尺度机器学习模型和快速验证所需的在线计算,进一步推动了材料设计的智能化发展^[42]。通过这种紧密结合,理性设计能够显著缩短材料研发周期,降低成本,并克服传统试错法所面临的巨大挑战。高熵材料(high-entropy materials,HEMs)就是一个很好的例子,其巨大的成分设计空间使得传统方法效率低下,而多尺度模拟和机器学习等计算技术则成为探索其成分设计、结构和性能的有效途径^[43-44]。最终,理性设计将材料科学研究从“经验指导实验”模式转变为“理性设计与计算模拟-实验验证”的新范式。

1.4 典型应用场景

理性设计在电子材料领域的应用主要集中在以下几个方面。①能源存储材料,包括锂离子电池正负极材料、固态电解质等。例如,通过AI预测发现的高熵正极材料 LiNiCoMnFePO_4 展现出优异的循环稳定性和高容量特性^[45]。②半导体材料,涵盖传统硅基半导体的改性以及新型宽禁带半导体的开发。宽禁带材料如 Ga_2O_3 、SiC在高功率器件中展现出巨大潜力^[46-47]。③光电材料,主要包括太阳能电池材料、发光二极管材料等。钙钛矿太阳能电池通过AI辅助的组分优化,效率已突破25%^[48-49]。

材料科学基础

2.1 关键材料体系的结构-性能关系

烧绿石氧化物是一类重要的功能材料,其结构通式为 $A_2B_2O_7$,空间群为 $Fd\bar{3}m$ 。在这种结构中,A位原子形成八配位的扭曲立方体,B位原子形成六配位的三角双锥。这种独特的结构赋予了烧绿石材料优异的电催化性能。根据最新研究,烧绿石材料的电子输运性质主要由以下因素决定:A位和B位原子的电负性差异、氧空位的浓度和分布、晶格参数的调控。通过软投票集成学习方法,研究人员成功预测了1166种潜在的烧绿石氧化物,预测准确率达到91.7%。这种方法有效避免了单一模型的过拟合问题,缩短了材料研发周期约22年^[50]。

钙钛矿结构材料,特别是有机-无机杂化钙钛矿,在太阳能电池领域展现出巨大潜力^[51]。其带隙可通过A位、B位离子和X位卤素离子的组合进行精确调控。带隙工程的关键在于:A位有机阳离子的尺寸效应、B位金属离子的d轨道能级、X位卤素离子的电负性。稳定性问题是钙钛矿结构材料面临的主要挑战,包括:热稳定性——高温下的相分解;湿度稳定性——水分子的侵入导致结构破坏;光稳定性——长期光照下的离子迁移。

高熵材料代表了材料设计的新理念,通过引入多种主要元素来稳定单一相结构。在电池材料领域,高熵氧化物正极材料如 $Li(Ni_{0.2}Co_{0.2}Mn_{0.2}Fe_{0.2}Ti_{0.2})O_2$ 展现出优异的结构稳定性和电化学性能。 $Li(Ni_{0.2}Co_{0.2}Mn_{0.2}Fe_{0.2}Ti_{0.2})O_2$ 是一种多组分层状氧化物,其作为锂离子电池正极材料的研究,旨在探索具有更高能量密度、更好循环稳定性和更低成本的替代材料。这类材料的复杂组分设计,通过掺杂如铁(Fe)和钛(Ti)等元素,以期在镍钴锰酸锂(NCM)材料的基础上,优化其电化学性能,并降低对稀有贵金属的依赖^[52-54]。高熵效应的核心机制包括构型熵的增加稳定高温相、晶格畸变强化材料性能、鸡尾酒效应产生协同作用。