



您现在的位置: 首页 > 新闻动态 > 科研进展

福建物构所材料功能基元获得最新进展

更新日期: 2022-03-08

新材料的发明和应用是人类社会发展的里程碑,为此人们渴望发展新的理论和方法来指导特定功能新材料的研究。结构与性能的定量关系规律被列为21世纪四大化学难题之一。2001年,中科院福建物构所郭国聪研究员率先提出“功能基元”的学术思想,以期突破此难题(化学进展,2001,13,151-155)。“功能基元”是指对材料功能起关键作用的微观结构单元,通过对功能基元的研究和有序组装可获得高性能材料,以缩短功能材料的研究周期(图1)。同样的研究愿景近年来也引起了各国政府的广泛重视,如国际上,美国布局了“材料基因组计划”,欧盟启动了“联合技术计划”,日本提出了“元素战略”。我国也陆续发布了一些相关的研究计划和重点专项,如“功能导向晶态材料的结构设计和可控制备”重大研究计划(2016)、“结构与功能导向的新物质创制”中科院先导专项(2016)、“材料基因工程关键技术与支撑平台”国家重点研发计划(2016)和“功能基元序构的高性能材料基础研究”重大研究计划(2019),这些项目旨在从实验和理论方面揭示材料起功能作用的结构本质,并结合高通量实验和计算以及大数据挖掘技术,推动材料学研究范式的变革。

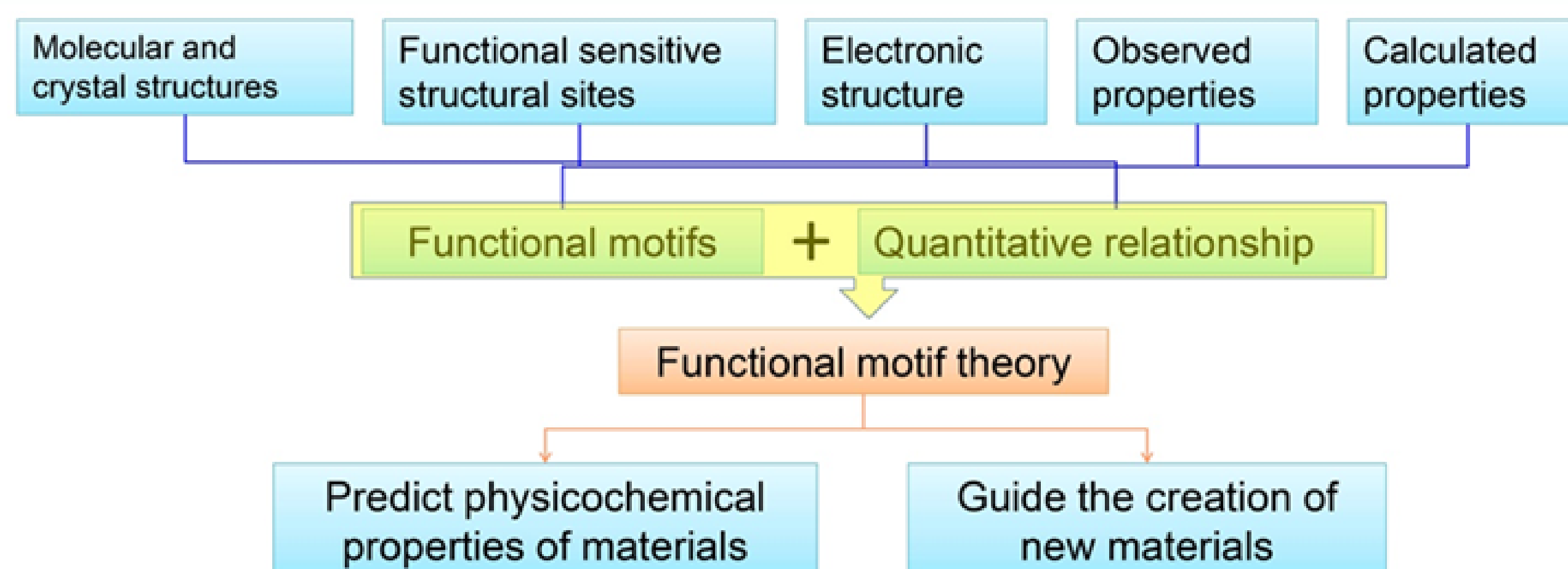


图1:“功能基元”学术思想:功能基元是指对材料功能起关键作用的微观结构单元,材料的性能决定于功能基元及其功能基元的排列。通过研究材料分子结构、晶体结构和电子结构等微观结构信息以及宏观物理化学性能,推导总结出对某项性能起主导作用的功能基元并建立结构与性能的定量关系规律。对功能基元和定量关系的深入研究和规律总结将逐步形成功能基元理论,从而可以高效地结构设计特定功能的新材料,或者预测已知材料的新性能,达到缩短新材料研发周期的目的。

在国家自然科学基金重大科研仪器研制、创新研究群体等项目的资助下,福建物构所结构化学国家重点实验室郭国聪研究员领导的研究团队,通过系统性阐述决定材料本征性能的六种主要微观结构类型(晶体结构、非周期性结构(也称调制结构)、磁结构、缺陷结构、局域结构和电子结构)的结构特点(图2),并针对每种微观结构类型,以具有相应结构特征的典型功能材料为例,分析总结出具有一定普适性的结构与性能关系规律,为基于“功能基元”思想的材料设计与创制方法奠定基础。

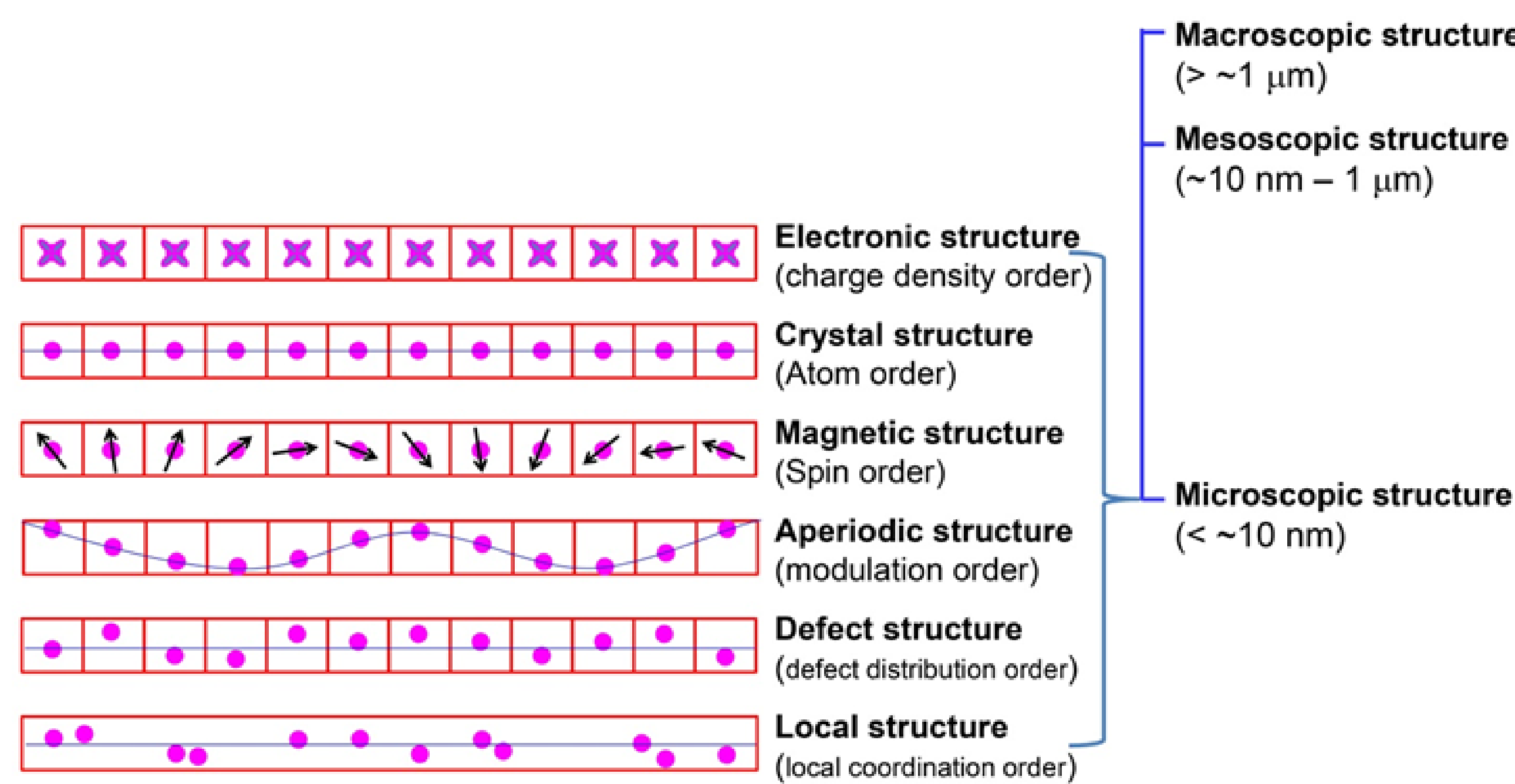


图2:决定材料本征性能的六种主要微观结构类型:电子结构(电子密度分布、密度矩阵和电子波函数)、晶体结构(单胞中的分子和原子的三维周期性排列结构)、非周期性结构(也称为调制结构,是指晶体结构中一些原子的坐标、占据数或温度因子等结构参数发生有规律的畸变,而这种有规律的畸变可使用调制函数来描述)、磁结构(自旋的排列结构)、缺陷结构(缺位或替代原子等缺陷中心形成具有统计学规律分布的结构)和局域结构(只在一个或几个配位层内具有短程序的结构)等,其中只有局域结构没有长程序,其他结构类型都具有长程序。

郭国聪团队重点以红外非线性光学(NLO)晶体材料为例,详细阐述“功能基元”学术思想的应用过程。为红外NLO材料大NLO系数和高激光损伤阈值难以兼得的结构设计难题,提出双“功能基元”的结构设计思路,即把“抗激光损伤功能基元”(由电负性差异大的元素构建聚阳离子基团以增加带隙进而提高激光损伤阈值)和“NLO活性功能基元”(引入共价性为主的单元来增大NLO系数)在分子水平上组装成无心结构的思路,研制出系列高性能红外NLO材料(图3)。

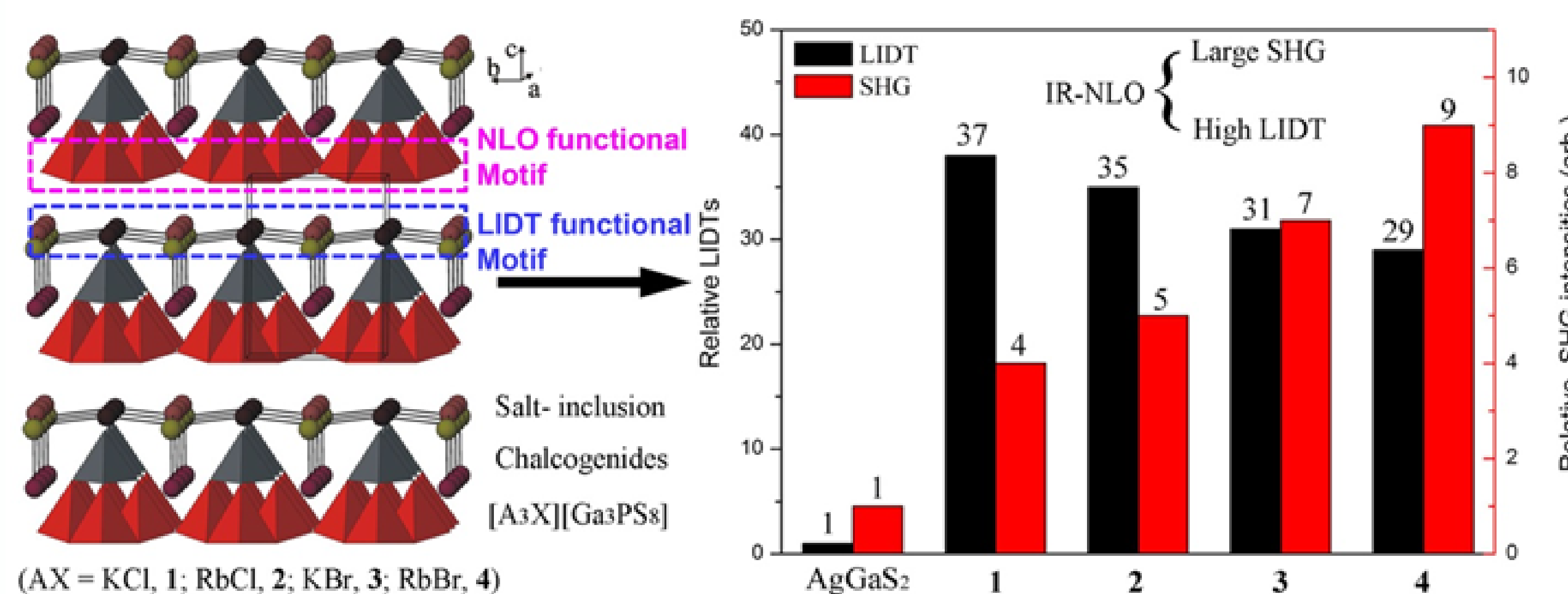


图3:高性能红外NLO材料[A₃X][Ga₃PS₆] (A = K, Rb; X = Cl, Br)中的NLO与抗激光损伤功能基元

郭国聪团队对大数据技术在材料学研究中的作用进行了讨论。通过人工神经网络或贝叶斯网络对材料结构与性能数据库进行机器学习,获得的网络模型可用于材料结构与性能的预测,并指导新材料的设计。为了获得可靠的预测结果,需要具备一定的可信的材料结构与性能数据库,通常样本量越大,网络模型预测结果越可信。目前材料结构相关的大型数据库比较完善,但材料性能相关的数据库尚有不足,这主要是由于材料性能的实验数据一般比较难获得。机器学习在材料学中的应用也存在一些问题,比如网络模型是一个“黑盒子”,从里面提取出有效的结构与性能关系规律富有挑战性;另外,为了弥补目前材料性能数据库的缺乏,一些研究人员通过理论计算(如第一性计算)获得该类数据库,然后通过机器学习,但这样得到的预测结果可信度很大程度上取决于理论计算本身的可靠性。基于材料结构的实验数据,并结合理论计算,郭国聪团队建立了NLO材料和催化材料的功能基元数据库(<http://www.functional-motif.com/>)。“功能基元”学术思想是中国学者在化学领域提出的、获得国际同行高度认同的原创学术思想。

相关工作以《Material Research from the Viewpoint of Functional Motifs》为题,以综述形式发表在*Nat. Sci. Rev.* 2022, DOI: 10.1093/nsr/nwac017上,姜小明副研究员为该论文第一作者,郭国聪研究员为通讯作者。该论文在修改与讨论过程中得到了福建物构所邓水全研究员和美国北卡罗来纳州立大学M.-H. Whangbo教授的支持。该工作得到审稿人的高度评价,指出“功能基元”学术思想凝聚了晶体学、化学和材料学多学科信息,为材料的理性设计提供思想(combining information from many disparate branches of crystallography, chemistry and Materials Sciences and providing ideas for rational design of materials)。

研究详情请见原文:

Material research from the viewpoint of functional motifs

<https://doi.org/10.1093/nsr/nwac017>

此前,该研究团队在功能基元研究及其指导高性能红外NLO、光致变色和催化材料设计和工程应用方面取得了一些重要进展(*Angew. Chem.* 2021, 60, 11799; *Nat. Horiz.* 2021, 8, 3394; *JACS.* 2020, 142, 10461; *Angew.* 2020, 58, 4856; *CCS Chem.* 2020, 2, 946; *Chem. Sci.* 2018, 9, 5700; *Adv. Optical Mater.* 2018, 1800156; *Coord. Chem. Rev.* 2017, 335, 44; *JACS.* 2021, 143, 2232; *Angew.* 2021, 60, 2; *Nat. Commun.* 2020, 11, 1179; *Angew.* 2019, 58, 2692; *Angew.* 2019, 58, 9475; *Angew.* 2019, 58, 8087; *JACS.* 2018, 140, 2805; *Angew.* 2017, 56, 554; *ACS Catalysis.* 2019, 9, 3595; *ACS Catal.* 2017, 7, 4519; *Angew.* 2016, 55, 514)。

(郭国聪课题组供稿)

上一篇:福建物构所Chem Rev综述:功能性多核稀土超分子结构的配位导向自组装

下一篇:本页是最后一篇

