

基于机器学习的异质界面合金化设计机理研究

王倩¹ 陈夜¹ 肖亚开¹ 王建炜¹ 张凌燕¹ 汪明亮²

王浩伟²

(1 上海卫星工程研究所, 上海 201109)

(2 上海交通大学, 上海 200240)

文 摘 针对复合材料界面合金化设计中有效合金元素筛选缺乏理论指导的问题, 本文基于第一性原理计算和机器学习方法, 筛选合金元素影响异质界面性能的重要特征, 构建界面合金化趋势预测模型, 加速复合材料的合金化设计研究。以二硼化钛(TiB_2)颗粒增强铝合金(Al)复合材料为例, 构建系列 $\text{TiB}_2(0001)/\text{Al}(111)$ 共格和 $\text{TiB}_2(0001)/\text{Al}(001)$ 半共格界面模型。结果表明: 将系列合金原子掺入界面模型后, 第一性原理计算结果表明, 两种界面的界面能变化趋势近乎相反, 尤其是 Mg 、 Ca 、 Sc 、 Y 、 Zr 、 Ce 、 Hf 原子掺入后, 共格界面的界面能会大幅下降, 而半共格界面的界面能大幅增加; 其次, 机器学习分析结果表明界面能的变化规律在共格界面中以合金原子的尺寸效应, 即合金原子的剪切模量、Voronoi 体积、原子半径为主; 而在半共格界面中则以合金原子的电子效应, 即合金原子的功函数、电负性和原子电荷为主。合金元素对界面能的影响主要取决于界面结构和原子性质, 且通过合金原子的 Voronoi 体积、剪切模量和电负性可以快速预测出合金元素对异质界面性能的影响程度。

关键词 陶瓷/金属界面, 合金化, 第一性原理计算, 机器学习

中图分类号: TB3; TG14

DOI: 10.12044/j.issn.1007-2330.2025.S1.005

Machine Learning Analysis Methods for Alloying Design at Heterogeneous Interfaces

WANG Qian¹ CHEN Ye¹ XIAO Yakai¹ WANG Jianwei¹ ZHANG Lingyan¹

WANG Mingliang² WANG Haowei²

(1 Shanghai Institute of Satellite Engineering, shanghai 201109)

(2 Shanghai Jiaotong University, Shanghai 200240)

Abstract Addressing the lack of theoretical guidance in screening effective alloying elements for composite interfacial alloying design, a predictive model for interfacial alloying tendencies was developed based on first-principles calculations and machine learning methods. By identifying critical characteristic parameters of alloying elements that influence heterogeneous interfacial properties, this approach accelerates the alloying design of composite materials. In this study, TiB_2/Al composites are taken as a case example, with $\text{TiB}_2(0001)/\text{Al}(111)$ coherent and $\text{TiB}_2(0001)/\text{Al}(001)$ semi-coherent interface models being constructed. After adding a series of alloying atoms, first-principles calculations revealed that the variation trends in the interfacial energy for the two types of interfaces were nearly opposite. Specifically, after adding Mg , Ca , Sc , Y , Zr , Ce , and Hf atoms, the interfacial energy of the coherent interface decreased significantly, whereas that of the semi-coherent interface increased substantially. Furthermore, machine learning analysis demonstrated that the variation in the interfacial energy for the coherent interface was primarily governed by the size effects of the alloy atoms (i. e., shear modulus, Voronoi volume, and atomic radius). Conversely, for the semi-coherent interface, the variation was dominated by the electronic effects of the alloy atoms (i. e., work function, electronegativity, and atomic charge). Therefore, it is revealed that the

收稿日期: 2025-05-19

基金项目: 上海市科技计划项目扬帆专项(23YF1444800)

第一作者简介: 王倩, 1992年出生, 博士, 主要从事航天结构材料、机器学习、第一性原理计算、复合材料界面调控等方面的研究工作。E-mail: wangqian_8329@126.com

influence of alloying elements on interfacial energy primarily depends on interfacial structure and atomic properties. The impact degree of alloying elements on the performance of heterogeneous interfaces can be rapidly predicted using the Voronoi volume, shear modulus, and electronegativity of the alloy atoms.

Key words Ceramic/metal interface, Alloying, First-principles study, Machine learning

0 引言

随着航天技术的飞速发展,结构材料更轻更强的需求愈发紧迫^[1]。为实现航天器结构高承载、轻量化、高效能的发展目标,结构材料的力学性能要求不断提升。陶瓷颗粒增强金属基复合材料应时而生,其凭借轻质、高强、高韧等优点被广泛应用于仪器支架、装备制造等航天领域中^[2-3]。该类复合材料中,陶瓷/金属异质界面具有传递载荷、连接基体等关键功能^[4],界面性能状态及其连接方式会直接影响复合材料性能^[5]。实验研究发现,将微量合金元素添加到复合材料中,可以通过调控陶瓷/金属异质界面性能来改善复合材料的力学性能^[6-8]。例如,在原位自生二硼化钛(TiB_2)颗粒增强铝(Al)基(TiB_2/Al)复合材料中,添加少量的 Mg 、 Sc 、 Ce 等合金元素可以通过提高 TiB_2/Al 界面的稳定性,来提升复合材料的强塑性^[9-11]。但在此类实验中,有效合金元素的筛选过程缺乏相关依据,具有盲目性和偶然性。

众所周知,复合材料制备过程中,影响因素数量繁杂,如何能够排除实验过程对合金化效果的干扰,获得大量合金元素影响异质界面的影响规律和相关机理,从而在源头上探寻提高复合材料强塑性的合金化方法,是当前亟需解决的关键问题。其次,异质界面结构的探究方法主要采用高端的显微表征方法,如透射电子显微镜、同步辐射X射线衍射等。故而,探究大批量合金化效果的实验成本是非常高昂的。

近年来,随着计算机性能的飞速提升,高通量计算、人工智能与大数据分析技术蓬勃发展。在众多材料计算方法中,基于密度泛函理论的第一性原理计算凭借计算时仅需考虑原子种类、位置坐标而成为新材料设计、机理解释的首选方法^[12]。通过第一性原理计算分析,大量异质界面性能及相关机理被广泛探究。相关研究内容已在文献^[13-14]中详细陈述了^[13-14]。然而,高通量计算会产生大量的数据,如何在众多数据中提取关键信息,并结合原子特性来判断影响材料性能的主要特征,并进行性能预测是第一性原理研究中急需解决的难点。随着人工智能的飞速发展,机器学习为该难题提供了有效的解决方法^[15-17]。通过提取关键性能参数,构建特征值与材料性能的定性关系,采用不同的机器学习算法,可加速材料性能预测与合金化成分设计。

综上所述,结合第一性原理计算和机器学习方法联合探究系列合金元素影响陶瓷/金属异质界面性能的本质机理,构建有效的合金化界面能预测模型,为界面合金化快速设计提供指导,是当前复合材料界面合金化急需解决的关键问题。本文以 TiB_2/Al 复合材料为例,基于第一性原理计算,构建系列 TiB_2/Al 界面模型,将系列合金元素引入界面模型后,量化合金元素对界面性能影响的演化规律,并结合机器学习方法揭示合金元素影响界面性能的关键物理量,选择合适的算法建立合金原子影响界面能的预测模型。

1 计算参数

第一性原理计算采用 Vienna Ab initio Simulation Package (VASP) 软件包^[18],选用缀加投影平面波赝势^[19]及平面波基组^[20],并采用广义梯度近似的 Perdew-Burke-Ernzerhof (PBE) 势函数来描述关联作用^[21-22]。计算时,平面波截断能设置为 450 eV,能量收敛标准为 10^{-5} eV/atom,力收敛标准为 0.02 eV/Å。选取 Γ 中心网格进行布里渊区采样的 k 空间积分,网格密度小于 0.03/Å。Al、B 和 Ti 原子采用的赝势价电子分别为 $3s^23p^1$ 、 $2s^22p^1$ 和 $3s^23p^63d^4s^2$ 。结构弛豫时,界面晶胞参数固定,所有原子的位置完全弛豫。

2 计算模型

为探究系列合金元素对 TiB_2/Al 界面特性的影响规律,构建两类 TiB_2/Al 复合材料界面模型,包括:(1) $\text{TiB}_2(0001)/\text{Al}(111)$ 共格界面(错配度为 5.71%,以下简称共格界面);(2) $\text{TiB}_2(0001)/\text{Al}(001)$ 半共格界面(错配度为 8.27%,以下简称半共格界面)。结合前期研究可知,Ti-心位的 TiB_2/Al 共格和半共格界面模型是热力学稳定性最高的模型^[13-14,23]。

将 37 种合金元素,即 7 种主族(MG)元素(Mg 、 Ca 、 Ga 、 In 、 Si 、 Ge 和 Sn)和 30 种过渡金属(TM)元素(3d-TM、4d-TM 和 5d-TM)以置换方式掺入两种界面模型中。合金原子(X)掺入时,依次在 Al 体相一侧、Al/Ti 原子界面处和 TiB_2 体相一侧,选取 5 种置换位置(即 Al_{i-2} 、 Al_{i-1} 、 Al_i 、 Ti_i 、 Ti_{i+2})来筛选 37 种合金原子的最优置换位置。在保证计算精度和效率的平衡下,选用 $2\times 1\times 1$ 的 Ti-心位 TiB_2/Al 界面模型[图 1(a)],即合金浓度为 2.00%,进行系列合金化研究。

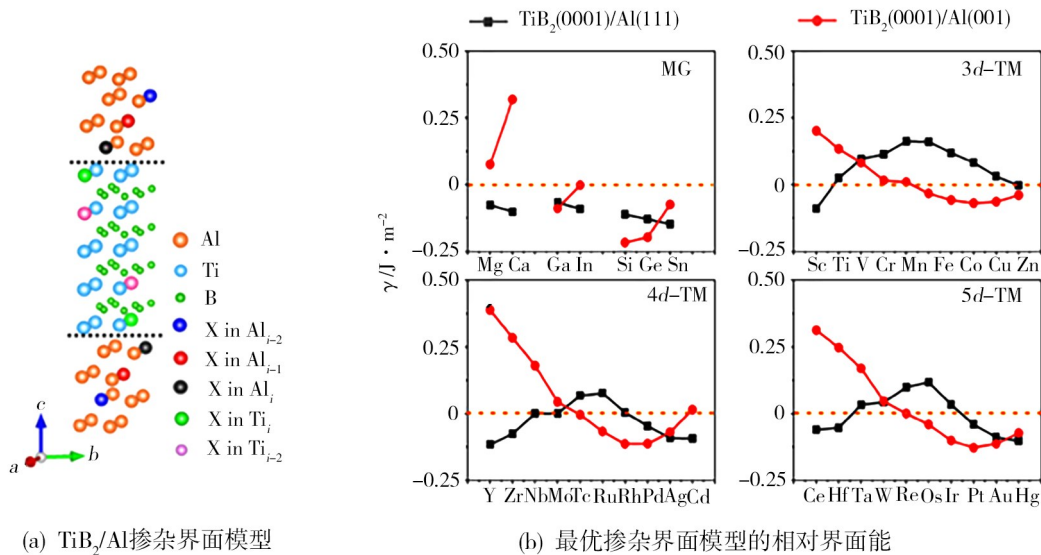


图1 Ti-心位TiB₂/Al掺杂界面模型的掺杂位置示意图和最优掺杂界面的相对界面能

Fig. 1 Schematic diagram of atomic substitution sites of alloying elements and relative interface energies of alloyed Ti-center TiB₂/Al interface models

3 计算结果与讨论

将37种合金元素依次掺入TiB₂/Al共格和半共格界面模型后,将合金原子放置在最优掺杂位置(位置筛选过程见文献[13–14,23]中的研究),根据界面模型的相对界面能变化情况可以发现:合金元素掺入后,两种掺杂界面模型的界面能变化趋势近乎相反。以3d-TM中的元素为例,Sc在共格界面中具有最低的界面能,而在半共格界面中具有最高的界面能。为进一步预测合金元素掺入后,共格与半共格界面的界面能变化情况,采用机器学习方法对两种掺杂界面的界面能进行预测。

3.1 影响界面能的有效特征提取

通常,合金元素对界面特性的影响因素主要依赖于合金原子的尺寸效应和电子效应。基于前期的研究^[14]发现,合金原子掺入后,模型的电荷分布和应变分布都会发生相应的变化。因此,分别计算了37种掺杂共格(半共格)界面的Voronoi体积和Bader电荷,并结合数据库(Materials Project^[24],Ptable^[25]等)和文献中合金原子的相关性质数据(功函数、金属半径、模量等),选取10种特征对两种掺杂界面模型的界面能进行相关性分析,为便于分析,将相关特征进行重新命名(表1)。其中,5种特征源自合金原子基础性质。例如:原子的金属半径^[25]、电负性^[25]、功函数^[24]、体模量^[26]和剪切模量^[26]。5种特征源自掺杂界面模型的VASP计算结果。例如:模型中掺杂原子的Voronoi体积、Bader转移电荷值和界面模型中Al_i层、Al_{i-1}层和Al_{i-2}层中Al原子的Bader电荷转移平均值。

表1 界面周围掺杂原子和Al原子的元素特征和VASP计算特征集

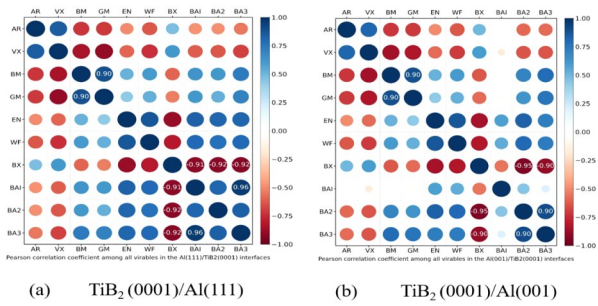
Tab. 1 List of VASP-calculated and elemental features for doping atoms and Al atoms around the interface

元素特征		VASP计算特征集	
AR	合金原子的原子半径	VX	合金原子的Voronoi体积
EN	合金原子的电负性	BX	合金原子的Bader转移电荷
WF	合金原子的功函数	BA1	第 <i>i</i> 层Al原子的Bader转移电荷
BM	Al ₃₁ X原子模型的体模量	BA2	第 <i>i</i> -1层Al原子的Bader转移电荷
GM	Al ₃₁ X原子模型的剪切模量	BA3	第 <i>i</i> -2层Al原子的Bader转移电荷

为确保所选特征的有效性,应避免特征之间具有高相关性。因此,先采用皮尔逊相关系数法(PCC)^[27]分别分析两种界面结构中,10种特征之间的相关性。分析时,皮尔逊相关系数(*r*)的计算公式如下所示:

$$r = \frac{\sum_{i=1}^n (X_i - \bar{X})(Y_i - \bar{Y})}{\sqrt{\sum_{i=1}^n (X_i - \bar{X})^2} \sqrt{\sum_{i=1}^n (Y_i - \bar{Y})^2}} \quad (1)$$

分析结果如图2所示。结果表明:共格界面中[图2(a)],BM与GM,以及BX分别与BA1、BA2、BA3特征之间的PCC相关系数大于0.90。即特征的相关性过高。类似的现象也展现在半共格界面中[图2(b)]。因此,后续进行界面能预测时,只采用GM, VX, AR, WF, BX, EN特征。值得注意的是,这6种特征中,GM, VX, AR均可反应合金原子的尺寸效应, WF, BX, EN均可反应合金原子的电子效应。



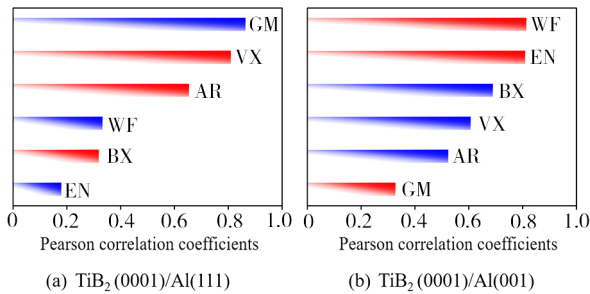
注:蓝色和红色分别代表正相关和负相关。
图2 不同界面结构中,10个特征之间的皮尔逊相关系数
Fig.2 Pearson correlation coefficient (PCC) correlation map of 10 features in different interface model

3.2 分析特征对界面能的影响程度

根据6种有效特征与两种界面模型界面能的PCC相关性分析结果可知:共格界面中,特征与模型界面能的相关程度[图3(a)]排序应为:GM>VX>AR>WF>BX>EN。由此可知,GM,VX和AR特征与界面能的相关程度均大于WF,BX和EN特征。这表明界面能变化程度对原子尺寸效应(即GM,VX和AR)的依赖性要高于其对原子电子效应的(即WF,BX和EN)。此外,共格界面的界面能与GM、WF、EN特征呈正相关关系,而与VX、AR、BX特征呈负相关关系。这表明大尺寸、低电负性的合金原子掺杂可降低共格界面的界面能。

在半共格界面中,情况近乎相反[图3(b)],且特征与界面能相关性排序转变为:WF>EN>BX>VX>AR>GM。即界面能变化程度对原子电子效应(即WF,EN和BX)的依赖性要高于其对原子尺寸效应的(即VX,AR和GM)。此外,共格界面的界面能与GM、WF、EN特征呈负相关关系,而与VX、AR、BX特征呈正相关关系。这表明小尺寸、高电负性合金原子的掺入可降低半共格界面的界面能。

综上可知:合金原子掺入后,TiB₂/Al界面能的增加或减少主要依赖于原始界面结构。但界面能变化程度在共格界面中主要取决于合金原子的尺寸效应;在半



注:蓝色和红色分别代表正相关和负相关。
图3 不同界面结构中,6种特征与界面能皮尔逊相关性分析
Fig.3 Pearson correlation coefficient (PCC) correlation map between 6 features and interface energy in different interface structures

共格界面中主要取决于合金原子的电子效应。

3.3 找出预测界面能的有效表达式

为预测更多合金元素对TiB₂/Al界面能的影响作用,采用6种相关性低的特征(即GM,VX,AR,WF,BX,EN)对两种掺杂界面的界面能进行机器学习分析。分析时,采用最小二乘线性回归(Least-squares linear regression)方法^[28],选取不同数量的特征对共格界面和半共格界面的界面能依次进行回归分析。采用决定系数(coefficient of determination, R^2)分析回归结果的相关程度。 R^2 的计算公式如下所示:

$$R^2 = 1 - \frac{\sum_i (y_{\text{true}} - y_{\text{pre}})^2}{\sum_i (y_{\text{true}} - \bar{y}_{\text{true}})^2} \quad (2)$$

式中, y_{true} 为真实值, y_{pre} 为预测值, $\bar{y}_{\text{true}}$ 为真实数据的平均值。 R^2 值约接近1,预测值与真实值的相关性越高。

分析过程示意图如图4所示,其详细步骤如下。

(1)对6个特征进行8种函数变换(即 $x, x^{-1}, x^2, x^{-2}, x^3, x^{-3}, e^x, e^{-x}$),得到48个特征特征算符。

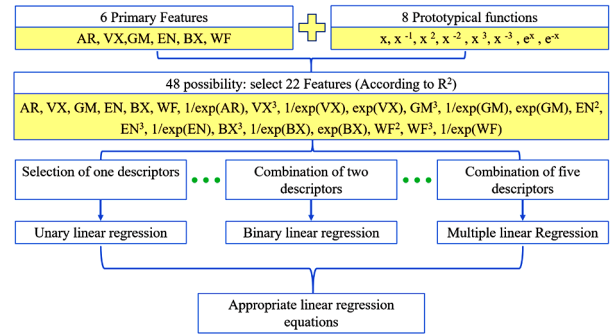


图4 机器学习方法示意图

Fig.4 Schematic diagram of machine learning methods

(2)将48个特征算符与两种界面模型的界面能进行一元线性回归分析,并据回归结果的决定系数将特征算符与界面能的相关性进行排序。分别找出共格界面(表2)和半共格界面(表3)中影响程度较高的前30个特征算符。并综合找出两种界面中共存的22个影响程度较大的特征算符(即AR,VX,GM,EN,BX,WF,1/exp(AR),VX³,1/exp(VX),exp(VX),GM³,1/exp(GM),exp(GM),EN²,EN³,1/exp(EN),BX³,1/exp(BX),exp(BX),WF²,WF³,1/exp(WF))。

(3)采用22个特征算符分别对两种界面模型的界面能依次进行多元(2~5)线性回归分析。综合回归结果,选出最合适的线性回归方程。

将2种界面模型界面能的多元(2~5)线性回归结果根据 R^2 数值进行从高到低排序。随后在每组结果中,选出前50组回归结果,进行结果分析(图5)由图可知,界面能的线性回归结果 R^2 随选用特征算符

表2 掺杂TiB₂(0001)/Al(111)界面中,48种特征算符一元线性回归的决定系数R²值

Tab. 2 The coefficient of determination R^2 in the unary linear regressions with 48 kinds of features in the TiB ₂ (0001)/Al(111) alloying interface						
函数	$R^2(\text{AR})$	$R^2(\text{VX})$	$R^2(\text{GM})$	$R^2(\text{EN})$	$R^2(\text{BX})$	$R^2(\text{WF})$
x	0.43	0.66	0.75	0.03	0.10	0.11
x^{-1}	0.01	0.01	0.02	0.01	0.00	0.04
x^2	0.10	0.00	0.04	0.10	0.00	0.14
x^{-2}	0.01	0.00	0.00	0.01	0.01	0.02
x^3	0.13	0.36	0.58	0.04	0.12	0.07
x^{-3}	0.01	0.00	0.00	0.01	0.00	0.02
e^x	0.15	0.34	0.63	0.00	0.11	0.01
e^{-x}	0.51	0.71	0.61	0.09	0.07	0.16

表3 掺杂TiB₂(0001)/Al(001)界面中,48种特征算符一元线性回归的决定系数R²值

Tab. 3 The coefficient of determination R^2 in the unary linear regressions with 48 kinds of features in the TiB ₂ (0001)/Al(001) alloying interface						
函数	$R^2(\text{AR})$	$R^2(\text{VX})$	$R^2(\text{GM})$	$R^2(\text{EN})$	$R^2(\text{BX})$	$R^2(\text{WF})$
x	0.27	0.37	0.11	0.66	0.48	0.66
x^{-1}	0.06	0.02	0.05	0.06	0.05	0.01
x^2	0.02	0.33	0.00	0.23	0.13	0.16
x^{-2}	0.08	0.01	0.02	0.02	0.01	0.01
x^3	0.01	0.38	0.06	0.47	0.26	0.55
x^{-3}	0.08	0.05	0.02	0.02	0.01	0.01
e^x	0.01	0.39	0.08	0.28	0.55	0.34
e^{-x}	0.34	0.17	0.09	0.70	0.16	0.65

数量(1~5)的增加而增大。其中,在共格界面中[图5(a)],每组特征算符数量下,R²的最大值依次为0.75,0.81,0.86,0.92,0.94。在半共格界面中[图5(b)],R²的最大值依次为0.70,0.77,0.79,0.81,0.83。由此可知,当描述符号数超过2个时,界面能的回归结果均可以达到较好的效果。

详细对比两种界面3~5元的线性回归结果发现,当特征算符选取VX、GM和EN时,共格界面和半共格界面模型的界面能可采用同一个公式进行预测,即:

$$\gamma=\beta_1\text{VX}+\beta_2\text{GM}+\beta_3\text{EN} \quad (3)$$

式中,共格界面能的R²为0.83(图5),半共格界面能的R²为0.75(图5)。虽然2个界面的R²值低于更高元的线性回归结果,但该公式可统一预测两种界面模型的界面能。

综上可知,将6种特征,进行8种函数变化后,可得到48种特征算符。基于这些特征算符与共格、半

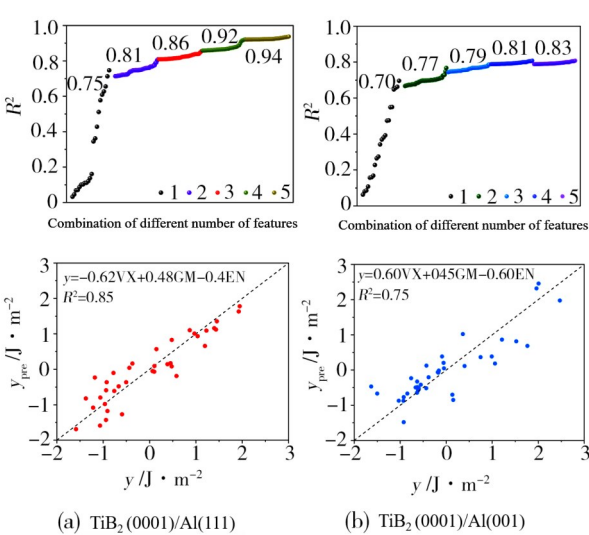


图5 采用不同数量特征后,两种掺杂界面模型界面能的最小二乘线性回归结果

Fig. 5 Least-squares linear regression results for the interface energy of two doped interface models with different number of features

共格界面模型界面能的最小二乘回归结果,可找到预测界面能的公式($\gamma=\beta_1\text{VX}+\beta_2\text{GM}+\beta_3\text{EN}$)。由此可知,合金原子在界面结构中的Voronoi体积(VX)、合金原子在体相结构中的剪切模量(GM)以及合金原子的电负性(EN)可较好的预测界面能。

4 结论

(1)合金元素对陶瓷/金属异质界面的影响主要取决于界面原子结构和合金原子性质,其中大尺寸、低电负性的合金原子可降低TiB₂(0001)/Al(111)共格界面的界面能;小尺寸、高电负性的合金原子可降低TiB₂(0001)/Al(001)半共格界面的界面能

(2)合金元素添加后,界面能的变化规律在共格界面中以合金原子的尺寸效应为主,在半共格界面以合金原子的电子效应为主。

(3)综合原子的尺寸效应(如合金原子的Voronoi体积、剪切模量)和电子效应(如电负性)可较好地预测合金元素对TiB₂/Al界面的影响程度。

参考文献

[1] 周亦人,沈自才,齐振一,等. 中国航天科技发展对高性能材料的需求[J]. 材料工程,2021,49(11):41-50.
ZHOU Yiren, SHEN Zicai, QI Zhenyi, et al. Demand for high performance materials in development of China's aerospace science and technology [J]. Journal of Materials Engineering, 2021, 49(11): 41-50.
[2] MOYA J S, LOPEZ-ESTEBAN S, PECHARROMAN C. The challenge of ceramic/metal microcomposites and nanocomposites [J]. Progress in materials science, 2007, 52(7): 1017-1090.
[3] RAWAL S P. Metal-matrix composites for space applications[J]. Jom, 2001, 53(4): 14-17.

- [4] KUMAR G B V, RAO C S P, SELVARAJ N. Mechanical and tribological behavior of particulate reinforced aluminum metal matrix composites—a review [J]. *Journal of Minerals and Materials Characterization and Engineering*, 2011, 10(1): 59–91.
- [5] 屈伟, 范同祥. 金属/陶瓷润湿性的实验表征和理论预测研究进展[J]. *材料导报*, 2019, 33(21): 3606–3612.
- QU Wei, FAN Tongxiang. Advances in the wettability research of metal/ceramic systems: experimental characterization and theoretical estimation [J]. *Materials Reports*, 2019, 33(21): 3606–3612.
- [6] DENG C, XU B, WU P, et al. Stability of the Al/TiB₂ interface and doping effects of Mg/Si [J]. *Applied Surface Science*, 2017, 425: 639–645.
- [7] HAN S Z, CHOI E A, LIM S H, et al. Alloy design strategies to increase strength and its trade-offs together [J]. *Progress in Materials Science*, 2021, 117: 100720.
- [8] CHWN L Y, XU J Q, CHOI H, et al. Processing and properties of magnesium containing a dense uniform dispersion of nanoparticles [J]. *Nature*, 2015, 528(7583): 539–543.
- [9] YOUSSEF Y M, DASHWOOD R J, LEE P D. Effect of clustering on particle pushing and solidification behaviour in TiB₂ reinforced aluminum PMMCs [J]. *Composites Part A: Applied Science and Manufacturing*, 2005, 36(6): 747–763.
- [10] SUN J, WANG X, GUO L, et al. Synthesis of nanoscale spherical TiB₂ particles in Al matrix by regulating Sc contents [J]. *Journal of Materials Research*, 2019, 34(07): 1258–1265.
- [11] XUE J, WANG J, HAN Y, et al. Effects of CeO₂ additive on the microstructure and mechanical properties of in situ TiB₂/Al composite [J]. *Journal of Alloys and Compounds*, 2011, 510(5): 1573–1578.
- [12] GONZE X, AMADON B, ANGLADE P M, et al. Abinit: First-principles approach to material and nano system properties [J]. *Computer Physics Communications*, 2009, 180(12): 2582–2615.
- [13] WANG Q, LI Y, CHEN S, et al. Interface alloying design to improve the dispersion of TiB₂ nanoparticles in Al composites: A First-Principles Study [J]. *Journal of Physical Chemistry C*, 2021, 125: 5937–5946.
- [14] WANG Q, LI Y, CHEN Z, et al. Understanding alloying mechanism of Sc, Ni, Zn additions on the Al/TiB₂ interfaces based on interface orientation and solute properties [J]. *Surfaces and Interface*, 2021, 26: 101427.
- [15] JABLONKA K M, ONGARI D, MOOSAVI S M, et al. Big-data science in porous materials: materials genomics and machine learning [J]. *Chemical Reviews*, 2020, 120(16): 8066–8129.
- [16] SHI Z, YANG W, DENG X, et al. Machine learning assisted high-throughput computational screening of high performance metal-organic frameworks [J]. *Molecular Systems Design Engineering*, 2020, 5(4): 725–742.
- [17] WU Y, DUAN H, XI H, Machine learning-driven insights into defects of zirconium metal-organic frameworks for enhanced ethane-ethylene separation [J]. *Chemical of Materials*, 2020, 32(7): 2986–2997.
- [18] HAFNER J. Ab-initio simulations of materials using VASP: Density-functional theory and beyond [J]. *Journal of Computational Chemistry*, 2008, 29(13): 2044–2078.
- [19] BLOCH P E. Projector augmented-wave method [J]. *Physical review B*, 1994, 50(24): 17953–17979.
- [20] FEYNMAN R P. Forces in molecules [J]. *Physical Review*, 1939, 56(4): 340–343.
- [21] PERDEW J P, BURKE K, ERNZERHOF M. Generalized gradient approximation made simple [J]. *Physical Review Letters*, 1996, 77(18): 3865–3868.
- [22] KRESSE G, JOUBERT D. From ultrasoft pseudopotentials to the projector augmented-wave method [J]. *Physical Review B*, 1999, 59(3): 1758–1775.
- [23] WANG Q, LIU C, YAO R, et al. First-principles study on the stability and work function of low-index surfaces of TiB₂ [J]. *Computational Materials Science*, 2020, 172: 109356.
- [24] JAIN A, ONG S P, HAUTIER G, et al. Commentary: The materials project: A materials genome approach to accelerating materials innovation [J]. *APL Materials*, 2013, 1(1): 011002.
- [25] FESZ M. Ptable [J]. *Reference Reviews*, 2018, 32(4): 30.
- [26] CHEN S, WANG Q, LIU X, et al. First-principles studies of intrinsic stacking fault energies and elastic properties of Al-based alloys [J]. *Materials Today Communications*, 2020, 24: 101085.
- [27] SCHOBER P, BOER C, SCHWARTE L A, Correlation coefficients: Appropriate use and interpretation [J]. *Anesthesia and Analgesia*, 2018, 126(5): 1763–1768.
- [28] RAPOSO F. Evaluation of analytical calibration based on least-squares linear regression for instrumental techniques: A tutorial review [J]. *Trac-Trends in Analytical Chemistry*, 2016, 77: 167–185.