

综述

## 数据驱动与机器学习辅助的铁电材料\*

王昌锐 周健 孙志梅†

(北京航空航天大学材料科学与工程学院, 北京 100191)

(2025 年 12 月 26 日收到; 2026 年 1 月 23 日收到修改稿)

随着传统半导体技术逐渐逼近其物理极限, 铁电材料凭借可调控的自发极化特性, 在下一代信息存储与神经形态计算器件中展现出广阔的应用前景. 然而, 材料性能优化与物理机制阐释仍是制约其发展的核心挑战. 机器学习与数据科学的快速发展正推动铁电材料研究从经验试错向数据驱动的智能范式转型. 本文系统阐述了机器学习在铁电材料研究中的应用进展: 基于高通量筛选、构效关系建模与物理信息融合, 机器学习显著加速了新型铁电材料的发现与性能优化, 实现了从成分设计到结构预测的系统性突破; 结合机器学习势函数与物理信息增强的相场模型, 多尺度计算模拟有效揭示了铁电相变与畴结构演化的微观机制, 有助于弥合原子尺度模拟与宏观性能之间的认知鸿沟. 最后, 本文探讨了数据驱动方法与物理模型深度融合的潜在路径, 并对功能材料智能化研发方向予以展望.

**关键词:** 铁电材料, 机器学习, 高通量筛选, 多尺度模拟

**DOI:** 10.7498/aps.75.20251772

**CSTR:** 32037.14.aps.75.20251772

## 1 铁电材料研究进展

以机器学习为核心的人工智能技术快速迭代与全球数据量的指数级增长, 对高性能计算系统提出了日益迫切的需求<sup>[1,2]</sup>. 在器件持续微缩的背景下, 传统互补金属氧化物半导体 (CMOS) 技术正趋近其物理极限<sup>[3]</sup>. 铁电材料凭借自发极化、非易失性、低功耗及快速开关特性, 在下一代存储与神经形态计算中展现出显著优势<sup>[4-6]</sup>.

铁电性定义为材料中自发极化可被外电场可逆翻转的特性. 晶体学上铁电性产生的必要条件包括非中心对称点群与可反转的对称操作, 这同时赋予材料压电、热释电及非线性介电响应等功能特性<sup>[7]</sup>. 铁电研究可追溯至 1912 年<sup>[8]</sup>, 并于 1921 年在罗谢耳盐中首次获得实验验证<sup>[9]</sup>. 1945 年发现钛酸钡兼具室温稳定性和高介电常数 ( $\epsilon_r > 1000$ )<sup>[10]</sup>, 引发了铁电材料的研究热潮. 此后, 朗道-金兹堡-

德文希尔唯象理论、软模理论、赝自旋理论、振动电子理论等相继建立, 为描述铁电性与相变行为提供了坚实的理论框架. 然而, 传统钙钛矿铁电材料在纳米薄膜化及硅基集成过程中面临极化退化、CMOS 工艺兼容性差、疲劳与印记效应等可靠性问题<sup>[11]</sup>. 此外, 高性能钙钛矿体系通常含铅, 其环境与健康风险成为大规模应用的主要障碍<sup>[12]</sup>.

上述挑战促使研究焦点从传统钙钛矿转向新兴铁电体系. 2011 年, 硅掺杂氧化铪 ( $\text{HfO}_2$ ) 薄膜中铁电性的发现成为重要转折点<sup>[13]</sup>. 与钙钛矿不同, 氧化铪基铁电体的极化翻转机制更为复杂, 涉及缺陷、应力及界面效应的协同作用<sup>[14]</sup>. 铪基材料具有良好的 CMOS 工艺兼容性、高介电常数、适中剩余极化与较高矫顽场, 尤其在超薄状态下仍保持结构稳定性与可靠极化翻转<sup>[15]</sup>, 有力推动了铁电随机存取存储器 (FeRAM)<sup>[4,16,17]</sup>、铁电隧道结 (FTJs)<sup>[18-20]</sup>、铁电场效应晶体管 (FeFETs)<sup>[21-24]</sup> 及铁电存储电容器 (FeCAPs)<sup>[25]</sup> 等新型器件的发

\* 国家自然科学基金重点项目 (批准号: 52332005) 资助的课题.

† 通信作者. E-mail: zmsun@buaa.edu.cn

展<sup>[11,26-30]</sup>. 2019年, Fichtner等<sup>[31]</sup>报道了钪(Sc)掺杂氮化铝(AIN)中的铁电性. 其极化源于纤锌矿结构固有的 $c$ 轴极性, 而Sc掺杂打破了能量简并, 使两种极性取向产生能量分异从而实现可控翻转<sup>[32]</sup>. Sc掺杂AIN兼具高居里温度、优异剩余极化与高矫顽场, 为高温稳定型铁电器件拓展了设计空间<sup>[24,33]</sup>.

传统铁电体在纳米尺度面临退极化场增强引发的极化失稳问题<sup>[34]</sup>. 随着微电子技术发展对器件微型化的需求, 铁电薄膜厚度减薄所引发的退极化效应日益凸显. 二维范德瓦耳斯铁电材料从机制上另辟蹊径, 因其特有的面内共价键-面外范德瓦耳斯力作用机制, 展现出区别于三维体系的量子受限效应, 迅速成为研究热点. 典型二维本征铁电体如 $\text{CuInP}_2\text{S}_6$ <sup>[35,36]</sup>,  $\alpha\text{-In}_2\text{Se}_3$ <sup>[37,38]</sup>中, 层间弱范德瓦耳斯作用使其在单层极限下保持结构完整性与铁电性, 通过界面屏蔽效应解决了退极化场干扰问题, 实现了单层厚度的室温铁电性. 然而, 其极化机制受限于晶格畸变与离子迁移, 难以进一步降低极化切换能耗. 更值得关注的是, 通过调控范德瓦耳斯异质结层间平移自由度, 可在非极性二维材料中诱导面外极化, 构建新型滑移铁电体<sup>[39]</sup>. 这类滑移铁电的极化特性源于层间电荷重分布, 能垒低至 $\text{meV}/\text{晶胞}$ 量级, 兼具超快响应与优异抗疲劳性, 且通过外场调控滑移动力学过程可实现极化态非易失性切换. 这些体系将铁电临界厚度推进至单原子层, 催生了“滑移电子学”范式, 契合后摩尔时代器件对高速、低功耗与高密度集成的需求. 图1总结了关键铁电材料及铁电极化理论的发展历程.

尽管前景广阔, 铁电材料的器件化仍面临多重挑战. 研究最深入的钙钛矿铁电材料存在难以克服的临界尺寸效应, 且伴随疲劳、印记效应、高介电

常数导致的集成挑战、与CMOS工艺兼容性差等问题<sup>[11]</sup>. 氧化铅基材料则面临耐久性与相稳定性双重挑战, 存在唤醒、印记、疲劳效应及漏电流增加等问题<sup>[40-42]</sup>. 另外, 其铁电相(正交相)通常为亚稳态, 依赖掺杂<sup>[43-49]</sup>、应变<sup>[50]</sup>或界面工程<sup>[51]</sup>稳定, 工艺敏感性高. Sc掺杂AIN的铁电性能高度依赖Sc掺杂浓度(通常为20%—40%), 但工艺中精确调控Al/Sc比例困难; 较高矫顽场不利于低功耗设计, 厚度低于10 nm时漏电流急剧上升, 氮空位等缺陷削弱材料可靠性<sup>[52]</sup>. 二维铁电材料则存在化学稳定性差、极化强度较弱、可控的规模化生产技术不成熟等瓶颈, 其实际器件应用尚处探索阶段. 表1总结了不同铁电材料体系的核心性能优势、关键技术瓶颈与器件化挑战.

数据科学与材料科学的深度融合为应对上述挑战提供了新途径. 机器学习通过算法从数据中学习规律, 实现智能预测与优化; 数据驱动范式则以数据为中心指导研究决策, 机器学习是其核心技术手段. 本文结合铁电材料领域最新进展, 从高通量筛选、材料设计、机器学习势函数、相场模拟等多尺度研究方法出发, 系统综述了数据驱动与机器学习辅助的代表性工作, 旨在梳理智能计算在铁电材料研究中的创新应用, 为功能材料的理性设计与器件开发提供参考.

## 2 数据驱动的铁电材料静态性质研究

机器学习正深刻变革铁电材料的研究范式. 这不仅是技术工具的升级, 更是方法论层面的系统性革新, 其影响贯穿于材料发现、性能预测与优化设计等关键环节<sup>[53-55]</sup>. 传统研发高度依赖试错法和经验模型, 过程耗时费力且成本高昂. 面对钙钛矿

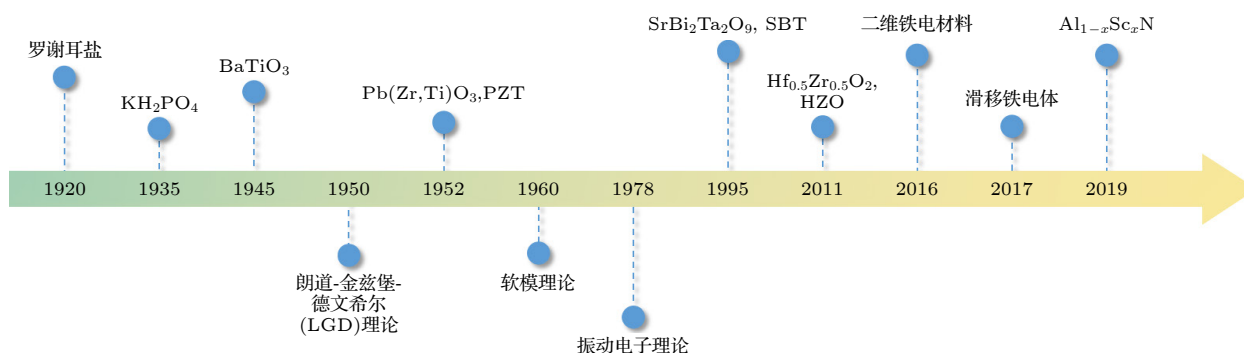


图1 铁电材料及极化理论的历史发展节点

Fig. 1. Key historical developments in ferroelectric materials and polarization theory.

表 1 不同铁电材料体系的核心性能优势、关键技术瓶颈与器件化挑战对比

Table 1. Comparison of core performance advantages, key technical bottlenecks, and device integration challenges for different ferroelectric material systems.

铁电体系	核心性能优势	关键技术瓶颈	器件化核心挑战	集成友好度
钙钛矿结构铁电体 BaTiO <sub>3</sub> , PZT	高剩余极化强度, 高居里温度, 高介电/压电系数, 技术成熟度较高	去极化场限制厚度微缩, 疲劳机制难以抑制, 铅元素毒性限制应用	高温工艺不兼容CMOS, 微缩至10 nm以下性能退化	与CMOS工艺不兼容, 微缩困难
氧化铪基铁电体 HZO, HfO <sub>2</sub>	CMOS工艺完全兼容, 可微缩至纳米尺度高矫顽场	唤醒-疲劳效应共存, 多晶相随机分布, 氧空位迁移难以抑制	循环耐久性不足, 器件均匀性较差	与CMOS工艺完全兼容, 可微缩至纳米尺度
纤锌矿结构铁电体 Sc:AlN	高剩余极化强度, 高居里温度, 可低温制备	矫顽场与击穿场矛盾, Sc掺杂相变敏感性高, 工艺窗口窄	工作电压过高, 疲劳机制尚不明确	与CMOS工艺兼容, 可微缩至10纳米级
二维本征铁电体 CuInP <sub>2</sub> S <sub>6</sub>	多轴铁电性, 无悬挂键表面, 高机械柔韧性	界面电荷捕获主导退化, 环境稳定性差, 作用机制不清晰	界面质量退化, 环境稳定性不足	与CMOS工艺潜在兼容, 可微缩至原子级厚度
滑移铁电体 hBN, MoS <sub>2</sub>	抗疲劳性能优异, 低翻转能垒, 多物性耦合	大面积制备困难, 剩余极化强度较低, 动态机理复杂	大面积集成困难, 性能权衡矛盾突出	与CMOS工艺潜在兼容, 可微缩至原子级厚度

材料的临界尺寸效应与界面失稳、铪基铁电体的多相共存与工艺敏感性、纤锌矿铁电体的组分调控难题以及二维材料的制备与兼容瓶颈,传统实验方法难以系统解析“成分-工艺-结构-性能”间多尺度耦合机制,更无法实现高效的全局优化.数据驱动方法通过构建四要素之间的定量关联,显著加速了新材料的探索与开发.机器学习指导材料设计的核心在于揭示构效关系,并据此预测新材料性能.其关键在于构建信息全面的特征集并识别决定性描述符,而特征集的有效建立源于对材料物理性质的深入理解.一方面,研究人员依据材料知识指导模型构建;另一方面,也期望通过机器学习发掘潜在物理化学规律,最终优化材料性能,建立从组分、结构到宏观性能的定量关联.

## 2.1 机器学习辅助的高通量筛选

铁电材料的计算发现长期依赖密度泛函理论(DFT)与现代极化理论<sup>[56-61]</sup>.虽然这些方法能够可靠预测自发极化、翻转势垒等关键性质,但其高昂计算成本严重限制了对广阔材料空间的探索.近年来,高通量计算与材料数据库的蓬勃发展,为系统筛选新材料奠定了基础,而机器学习技术的引入则进一步推动了从“经验试错”到“理性设计”的范式转变<sup>[57,58,60,62]</sup>.

判断铁电性的经典物理前提是存在可翻转的极性结构,通常通过寻找对应的高对称性非极性参考相来实现<sup>[63-67]</sup>.尽管存在纤锌矿型等例外<sup>[68]</sup>,基于对称性分析的策略已被证明是有效的发现途

径<sup>[57,58,69,70]</sup>.研究者发展了一系列自动化高通量筛选方案.Garrity<sup>[62]</sup>采用对称性搜索算法从无机晶体结构数据库(ICSD)中筛选极性化合物,并寻找其可能的高对称非极性结构.在此基础上,Smidt等<sup>[71]</sup>建立了首个面向铁电材料的自动化发现流程,通过对称性关系筛选极性-非极性结构对,并自动计算极化值<sup>[72,73]</sup>,预测误差普遍低于10%.该流程最终从数据库中筛选出200种铁电材料,其中126种为新预测候选材料,部分已获实验证实<sup>[74,75]</sup>,验证了基于规则筛选的可靠性.

为突破现有数据库限制,Ricci等<sup>[76]</sup>开发了基于赝对称性原理的高通量计算流程(图2),借助PSEUDO工具<sup>[77]</sup>为缺乏参考结构的极性材料自动生成非极性相,从1978种极性材料中筛选出182个潜在铁电候选材料,并系统评估了其极化强度、能量差、稳定性与可合成性<sup>[78]</sup>.Zhang和Zhu<sup>[79]</sup>进一步摒弃对非极性相的依赖,提出基于对称操作的直接筛选策略,通过分析极性结构的对称性直接推导极化翻转态,从Materials Project数据库的153235种材料中筛选出数十种具有应用前景的新型铁电候选材料,其自发极化和翻转势垒与已知铁电体相当.此方法不仅显著提升了筛选效率,还能有效识别具有大原子位移的结构,极大扩展了可探索的材料空间.

Frey等<sup>[80]</sup>融合机器学习与高通量计算,直接根据化学成分预测铁电性.该方法采用多层机器学习模型,依次预测材料的热力学稳定性、绝缘性及极性结构,从而大幅缩减候选材料范围.基于

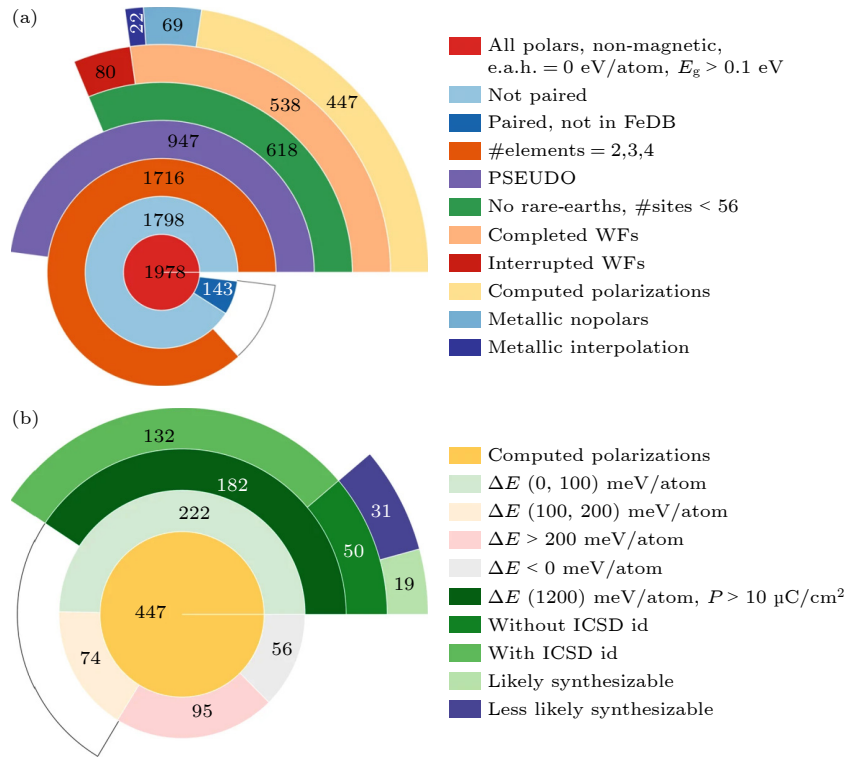


图 2 高通量筛选流程及各步骤输出结构数量汇总<sup>[76]</sup> (a) 选出的候选铁电材料子集及其规模; (b) 基于极性-非极性相能量差  $\Delta E$ 、极化强度、ICSD 编号及可合成性的后续分类

Fig. 2. High-throughput screening workflow and summary of the number of output structures at each step<sup>[76]</sup>: (a) The subset of candidate ferroelectric materials identified and their scale; (b) subsequent classification based on the energy difference between polar and non-polar phases  $\Delta E$ , polarization intensity, ICSD collection codes, and synthesizability.

预测的结构对称性, Ricci 等<sup>[77]</sup> 利用 PSEUDO 工具自动生成非极性母结构, 进而估算自发极化强度. 该框架不仅成功重新发现了已知铁电体, 还在四元硫化物中发现多个新型候选材料, 其中  $\text{SrBiNbSe}_5$  的预测极化强度高达  $18.9 \mu\text{C}/\text{cm}^2$ . 机器学习模型通过初筛, 将需重点研究的候选材料数量从数千个锐减至平均约 73 个, 显著加速了对数据库外化学空间的探索.

仅识别铁电性尚不足以满足应用需求. 研究终极目标是获得具有优异综合性能的材料, 核心挑战在于平衡多个相互制约的性能指标. 机器学习通过构建从材料特征到目标性能的定量映射模型, 为性能预测提供了新路径, 其中描述符的构建与选择是关键. Pilania 等<sup>[81]</sup> 利用 LASSO 回归筛选出影响双钙钛矿能带的关键描述符. Yuan 等<sup>[82]</sup> 在优化钛酸钡储能性能时, 依据梯度提升树模型的特征重要性排序, 选取关键特征构建模型, 并用于指导实验验证. Lu 等<sup>[83]</sup> 结合高通量计算与机器学习, 从大量候选组分中筛选出带隙合适的稳定铁电光伏钙钛矿, 并提出新的描述符加速材料发现. He 等<sup>[84]</sup>

通过机器学习筛选出影响铁电性能的 3 个核心描述符: Matyionov-Batsanov 电负性、价电子数与标称电荷之比, 以及核心电子距离. 该研究整合了多个典型铁电体系的实验数据, 采用相关性分析与封装法进行特征选择, 在预测剩余极化强度时平均误差低于  $3.64 \mu\text{C}/\text{cm}^2$ , 在反铁电/非反铁电分类任务中准确率达 96%, 显著优于传统判据. Lu 等<sup>[85]</sup> 进一步通过主动学习流程, 结合基于树的集成模型与 Shapley 可解释性方法, 在巨大的无铅钙钛矿组分空间中筛选出高潜力候选材料, 并通过第一性原理计算与实验验证. He 等<sup>[86]</sup> 针对多组分铁电系统, 通过机器学习模型筛选出八面体因子、电负性等 4 个关键描述符, 在广阔成分空间中直接预测高精度相图及相边界共存相比例, 提供了量化相边界细节的新方法. Van Lich 等<sup>[87]</sup> 则结合高通量相场模拟与机器学习算法, 提出高效的组分梯度铁电体设计策略. 该方法首先利用高通量相场模拟生成关于畴结构、极化强度和极化-应变关系的数据集, 再通过神经网络训练模型, 最终实现性能预测与优化, 设计出具有最优电-机械性能的新材料组分.

尽管“黑箱”预测模型在一定程度上加速了筛选,但其通常局限于单一属性预测,且严重依赖大量高质量数据.为了以有限数据实现多性能可靠预测并增强模型可解释性,融合物理模型与机器学习的“物理信息机器学习”新范式应运而生.该范式不再直接拟合难以获取的终端性能数据,而是学习并预测底层物理模型参数.一旦获得这些参数,便可通过解析运算自然导出一系列铁电、介电与热力学性质,将朗道理论的应用从对已知材料的“事后解释”,转变为对未知材料的“先验预测”,实现了从有限数据到多性能曲线预测的跨越.例如, Yuan 等<sup>[88]</sup>提出基于机器学习的朗道系数预测方法,对约 2700 个虚拟的钛酸钡基组分进行多性能计算后,通过三维帕累托前沿分析筛选出具有优异制冷性能的最优候选材料.最终实验合成的 8 种材料中,5 种制冷性能优于文献<sup>[88]</sup>报道值,其中两种材料的制冷容量提升 40%—50%,验证了该预测框架的有效性.

机器学习与高通量计算的深度融合已深刻变革铁电材料研究范式,但该领域仍面临若干关键挑战.数据质量、一致性与覆盖面是模型可靠性的基础;面向复杂多元体系,如何设计兼具高预测力与明确物理意义的描述符仍属开放性问题;现有方法多聚焦于基态静态性质,对动态过程与时效行为的预测能力薄弱;计算预测与实验合成之间的“制备鸿沟”有待弥合.必须审慎看待这些成功案例的局限性:机器学习预测准确率往往被高估,在二元分类任务中即使准确率达 90% 以上,假阳性率仍可高达 30%—50%,这意味着大量预测材料实际并不具备铁电性或无法合成.更严重的是, DFT 计算本身的系统误差(如泛函选择导致的能量误差在 0.1—0.2 eV/atom)会通过训练过程传递给机器学习模型,使预测结果产生系统性偏离.当这些模型指导相图构建时, DFT 误差的随机性无法像传统方法那样相互抵消,导致凸包距离预测精度显著降低,热力学稳定性判断不可靠.

## 2.2 数据驱动的铁电材料设计:从成分调控到结构预测

从筛选已知结构到设计全新成分与结构,是数据驱动范式从材料“发现”走向“发明”的关键跃迁.尽管高通量筛选已成功识别大量候选材料,但其本质上仍是对已知候选物的评估与排序.真正的设计

需要主动调控成分以创造前所未有的性能,并进一步反推稳定晶体结构,这是比筛选更具挑战性的逆向问题.

在成分调控层面,机器学习的关键贡献在于高效探索近乎无限的化学空间,并解析复杂的成分-性能-相结构关系.传统相图的建立严重依赖密集的实验或计算采样,而机器学习模型通过从有限数据中学习物理化学规律,能够快速预测多组分系统的相图与相界,显著加速高性能成分地发现. Pradhan 等<sup>[89]</sup>结合聚类分析及高斯回归实现了弛豫铁电薄膜的相图预测. Liu 等<sup>[90]</sup>以极化序参量作为输入,建立分类模型预测无铅铁电陶瓷薄膜的相图. Ali 等<sup>[91]</sup>利用深度神经网络回归研究了卤族钙钛矿的立方相稳定性随掺杂阳离子浓度的变化规律,并绘制了掺杂相图. FerroAI 模型<sup>[92]</sup>通过自然语言处理从大量文献中提取 2838 条相变数据,构建涵盖 846 种铁电材料的训练集,在缺乏明确热力学参数的情况下利用深度学习成功预测材料相图,并指导合成了具有高介电常数的新型铁电材料.该模型不仅重现了经典铁电体系的相边界,还预测了未知体系中的相变与形变相界(图 3),凸显了数据驱动方法在信息不完备时揭示复杂关联的独特优势.

对于掺杂这一关键性能调控手段,机器学习正帮助研究人员从理解复杂微观机制走向实现理性设计.早期研究通过高通量计算揭示了掺杂效应的复杂性,例如在氧化铪基薄膜中,不同掺杂剂间的相互作用可导致能量景观剧烈变化,进而影响相稳定性并解释了实验中常观察到的纳米畴与扩散相变等现象<sup>[47]</sup>. Yan 等<sup>[93]</sup>融合机器学习与第一性原理计算,从原子尺度描述符预测氧化铪基铁电材料的掺杂效应,成功筛选出新型高效掺杂剂镓(Ga),并通过实验验证了其性能变化趋势.这些进展表明,机器学习不仅是一个加速筛选的工具,更通过提供成分-结构-性能的定量关联,深化了对微观调控机制的理解.

成分的优化最终取决于具体的原子排列,这使得晶体结构预测成为一个更根本且更具挑战性的科学问题.理性设计的终极目标之一,是直接根据目标性能反推稳定的晶体结构.但基于第一性原理的晶体结构预测极具难度,其搜索空间涵盖原子在三维空间中近乎无穷的可能构型,且对应高度复杂的能量曲面<sup>[94-96]</sup>.在此背景下,机器学习势函

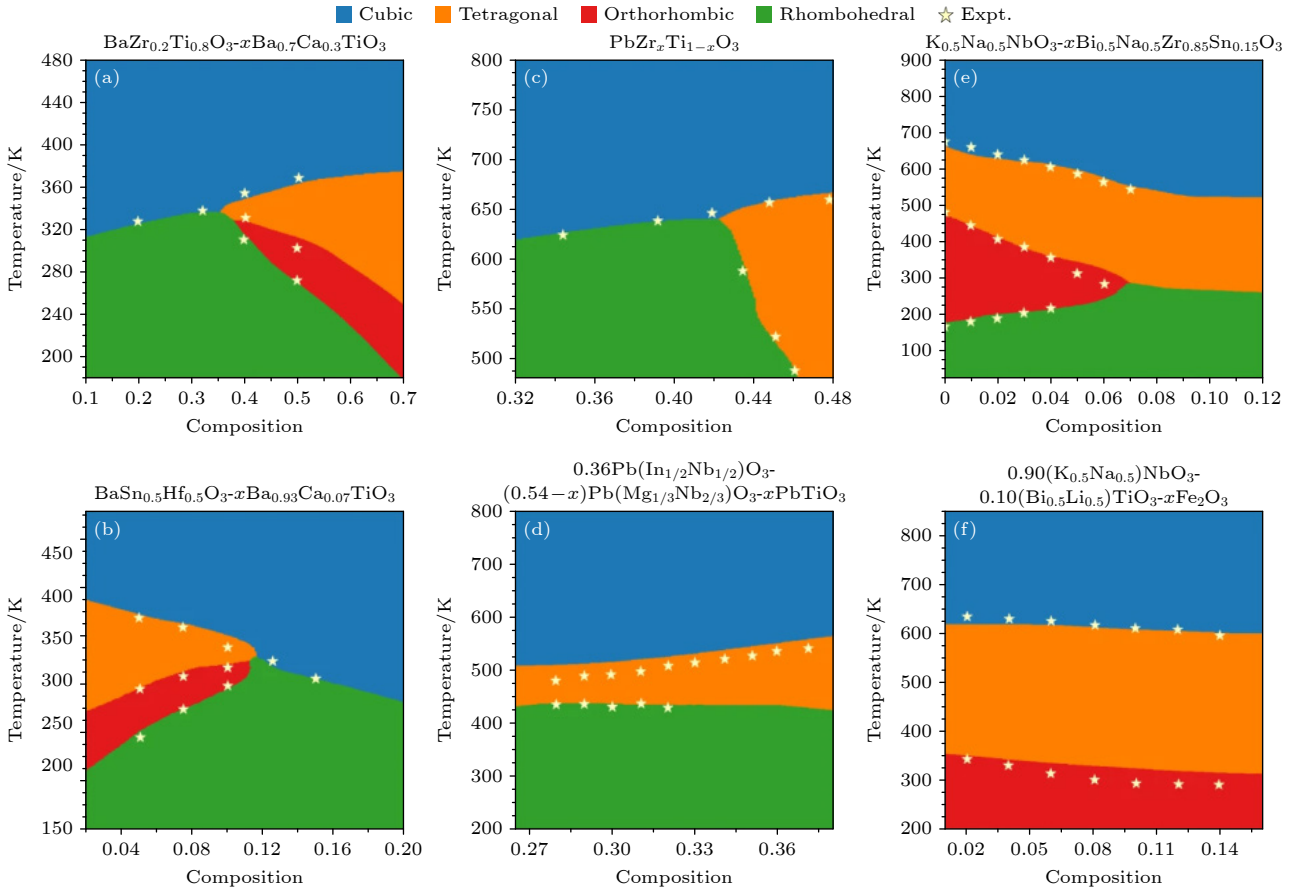

 图 3 FerroAI 模型预测的不同铁电材料体系的成分-温度相图<sup>[92]</sup>

 Fig. 3. Composition-temperature phase diagrams of different ferroelectric material systems predicted by the FerroAI model<sup>[92]</sup>.

数成为实现跨尺度模拟的关键桥梁. 其能够以接近 DFT 的精度近似势能面, 将电子尺度的量子力学计算效率提升数个量级, 从而实现了对庞大构型空间的快速采样与自由能计算. 这种“电子尺度-原子尺度”的跨尺度建模推动了新一代结构预测工具的发展, 如 USPEX<sup>[97]</sup>, CALYPSO<sup>[98]</sup>, MAGUS<sup>[99]</sup>, CrySPAI<sup>[100]</sup> 等. 例如, 在氧化铪的研究中, Kruglov 等<sup>[101]</sup> 利用 USPEX 成功识别出已知相及可能的铁电候选相. 但研究也明确指出, 在自由能差异极小的情况下, 交换关联泛函的选择会显著影响预测结果<sup>[102]</sup>. 这凸显了微观尺度上能量竞争的敏感性, 也揭示了当前数据驱动结构预测的核心矛盾: 方法效率虽因机器学习而大幅提升, 但预测的物理可靠性仍深刻依赖于基础物理模型的准确性.

综上, 数据驱动的铁电材料设计已在成分与结构两个维度展现出变革性潜力. 与前述静态性质筛选相比, 成分调控与结构预测更强调动态演化与跨尺度耦合: 前者聚焦“性能评估”, 后者关注“过程设计”; 前者处理已有结构, 后者探索未知构型. 然

而, 该范式迈向成熟仍面临系列挑战: 高质量、覆盖多组分与亚稳相的数据稀缺; 当前许多描述符的物理可解释性与跨体系普适性有待提升; 结构预测在能量近简并情形下的结果对计算参数过于敏感; 如何协同优化成分与结构, 实现闭环逆向设计, 仍是亟待突破的瓶颈.

### 3 多尺度计算模拟驱动铁电材料动态性质研究

传统研究范式在应对铁电材料多尺度、多物理场耦合挑战时存在明显局限. “试错法”在研究复杂化学组分、调控微观结构及优化工艺参数时效率低、成本高、周期长. 第一性原理计算虽能从原子尺度揭示铁电极化机制, 但难以直接用于包含大量原子的实际体系, 也无法有效模拟动态畴结构演化. 此外, 铁电器件实际工作中常涉及电场、应力场与热场之间的复杂耦合, 而传统解析模型或简化物理模型往往难以精确描述这类多场耦合下的材

料响应. 因此, 如何在兼顾效率与精度的前提下, 快速、精准地调控材料的化学组成、制备工艺与微观结构, 从而高效开发高性能铁电材料, 一直是该领域的研究热点.

### 3.1 机器学习势函数在铁电材料研究中的应用

原子尺度模拟是研究铁电材料在有限温度下动力学行为的关键手段, 可用于揭示介电响应<sup>[103]</sup>、机电响应<sup>[104]</sup>、相变<sup>[105]</sup>以及畴壁的成核与生长<sup>[106]</sup>等重要物理过程. 然而, 此类过程通常涉及较大的时空尺度, 对模拟方法的计算精度与效率构成了双重挑战. 传统经验势函数计算效率高但精度有限, 而基于第一性原理的分子动力学则受限于巨大的计算成本<sup>[107,108]</sup>. 为平衡精度与效率, 研究者常采用基于物理建模的解析方法, 即通过提取体系物理特征构建包含少量可调参数的解析表达式来近似描述体系能量. 这类模型参数需通过第一性原理计算结果或实验数据进行拟合, 且对研究者的物理洞察力有较高要求. 代表性方法包括键价模型<sup>[109]</sup>、电荷优化多体 (COMB) 势<sup>[110]</sup>、反应力场 (ReaxFF) 模型<sup>[111,112]</sup>、有效哈密顿量模型<sup>[113-115]</sup>和核-壳模型<sup>[116]</sup>等. 然而, 受限于预设的解析函数形式和有限的参数量, 此类模型的精度和泛化能力通常不足.

与传统“模型驱动”的思路不同, 机器学习采用“数据驱动”途径, 能够从海量第一性原理计算数据中自动学习势能面, 从而在精度与效率之间实现更优平衡<sup>[117,118]</sup>. 机器学习势的核心在于将原子的局域结构信息编码为满足平移、旋转和置换不变性的高维描述符, 进而利用神经网络或核方法对系统能量和原子受力进行高精度拟合, 其中描述符的设计直接决定了模型性能<sup>[119]</sup>. 常见描述符类型包括原子中心对称函数 (ACSF)<sup>[120]</sup>、加权原子中心对称函数 (wACSF)<sup>[121]</sup>、多体张量表示 (MBTR)<sup>[122]</sup>、原子簇展开 (ACE)<sup>[123]</sup>、平滑重叠原子位置描述符 (SOAP)<sup>[124]</sup>以及矩张量描述符<sup>[125]</sup>等. 近年来, 基于图神经网络的端到端方法日益受到关注. 将原子或分子体系抽象为图结构 (原子为节点、相互作用为边) 的建模范式已成为广泛共识, 其中消息传递框架展现出显著的研究价值<sup>[126]</sup>. 该方法无需显式构造描述符, 而是依托对称性约束与等变性设计, 在多层消息传递中隐式学习原子环境特征, 从而兼顾物理合理性与模型精度, 具备更强的自动化能力和

体系适应性. 在此基础上, 研究者已开发出 SchNet<sup>[127]</sup>、NequIP<sup>[128]</sup>、MACE<sup>[129,130]</sup> 等多个性能优异的等变图神经网络力场模型.

目前, 已发展形成多种代表性的机器学习势框架, 包括基于高斯过程回归的高斯近似势 (GAP)<sup>[131]</sup>、基于线性矩张量展开的矩张量势 (MTP)<sup>[125]</sup>、基于谱邻域分析的谱近邻分析势 (SNAP)<sup>[132]</sup>、以及基于神经网络的深度势 (DP)<sup>[133]</sup>、神经演化势 (NEP)<sup>[134]</sup>和图神经网络势<sup>[135]</sup>等. 这些方法各有特点, 并在不同材料体系和模拟场景中得到应用.

在铁电材料研究领域, 早期工作主要聚焦于为特定体系构建高精度势函数. 例如, Wu 等<sup>[136]</sup>构建了精确且可迁移的氧化铪多相深度势模型, 该模型对不同铪氧化物晶型的多种结构性质的预测精度可与 DFT 计算相媲美. 机器学习势在预测铁电材料相变行为方面也展现出巨大潜力. Thong 等<sup>[137]</sup>为铌酸钾体系构建了高精度深度势模型, 并成功应用于畴壁和温度诱导相变的模拟研究. Wu 等<sup>[138]</sup>基于深度势模型开发了适用于多种金属元素的钙钛矿氧化物统一力场 UniPero, 实现了对包括复杂组分固溶体在内的多种铁电氧化物温度驱动相变序列的准确预测 (图 4). Wu 等<sup>[139]</sup>提出了模块化深度势开发 (ModDP) 策略, 通过复用端元材料的收敛训练数据库和自动化并发学习流程, 实现了对复杂固溶体 (如  $\text{Pb}_x\text{Sr}_{1-x}\text{TiO}_3$  和  $\text{Hf}_x\text{Zr}_{1-x}\text{O}_2$ ) 的高精度力场构建. 该方法不仅显著提升了力场开发效率和迁移性, 还成功预测了成分驱动相变、拓扑纹理 (如极化涡旋) 以及新型相变路径, 为原子尺度研究材料动态行为和特性提供了强大工具.

凭借其高效处理大体系与长时程模拟的能力, 机器学习势驱动分子动力学模拟在揭示铁电材料微观机制方面展现出独特优势. Ma 等<sup>[140]</sup>基于深度势模型揭示, 单向偏压可驱动氧化铪发生“极性-反极性”相循环并显著提升氧离子迁移率, 这凸显了分子动力学模拟能够在无需任何先验假设的前提下提供详细的原子尺度机理. Zhang 等<sup>[141]</sup>利用深度势模型复现了铋酸铅的多种物相结构, 揭示了自由能在决定低温相时的关键作用, 阐明了电场诱导相变的结构演化机制, 从而解决了实验观测与理论预测之间的矛盾. Chen 等<sup>[142]</sup>将深度势模型与 ZBL 势相结合, 开发了用于研究氧化铪铁电薄膜辐照位移损伤的模型, 精确描述了辐照过程中的原子碰撞与离位过程, 为深入理解缺陷形成机制提

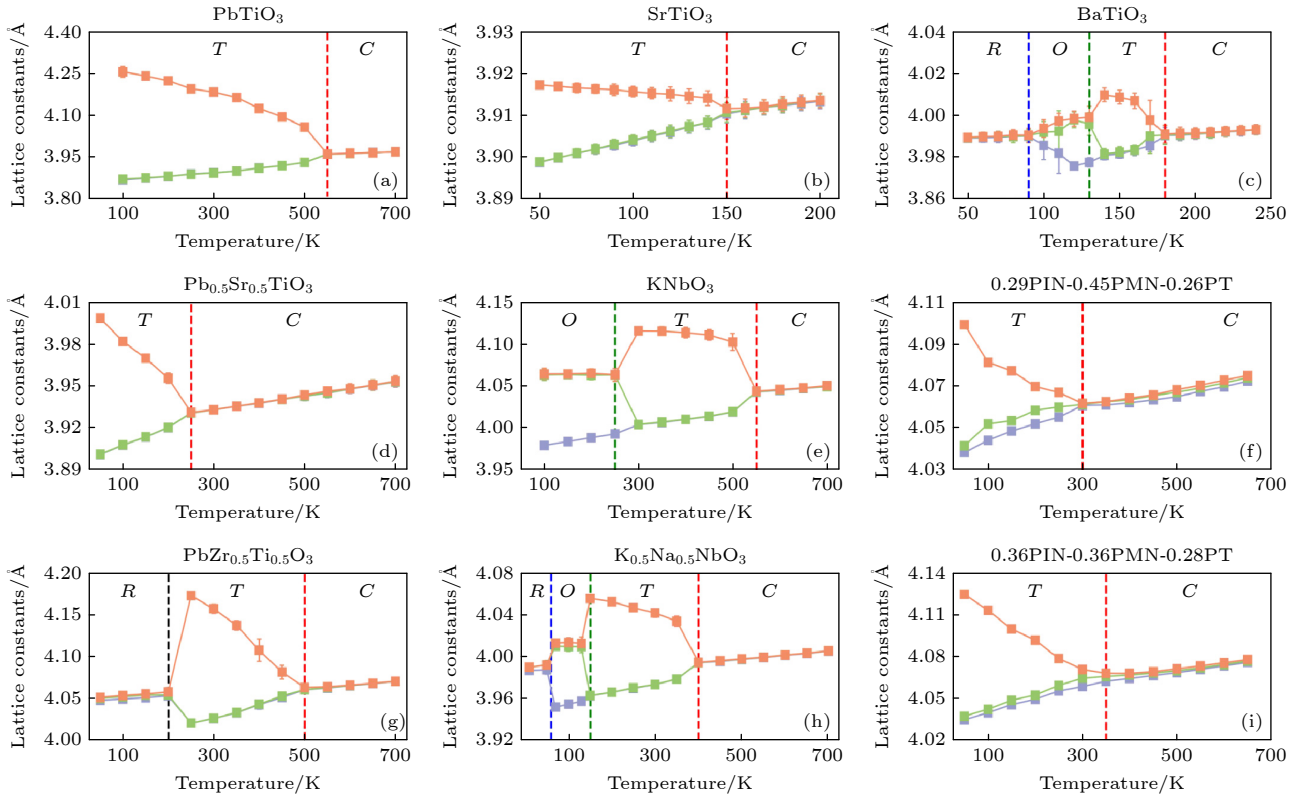


图 4 利用通用原子间势, 通过 NPT 系综的深度势分子动力学模拟得到的多种铁电/钙钛矿氧化物的温度依赖性晶格常数<sup>[138]</sup>

Fig. 4. Temperature-dependent lattice constants of various ferroelectric/perovskite oxides obtained via deep potential molecular dynamics (MD) simulations using the NPT ensemble with a universal interatomic potential<sup>[138]</sup>.

供了全面见解. Wen 等<sup>[143]</sup>采用深度势模型驱动分子动力学模拟, 揭示了铌酸钾-钽酸钾固溶体中化学成分与有序度通过弹性和静电失配调控多型相界的机制, 解决了长期存在的微观结构争议, 并构建了一个可推广的相边界工程框架. 在近期工作中, Hong 等<sup>[144]</sup>基于主动学习构建了高精度深度势模型, 并通过大规模分子动力学模拟揭示了 300 K 下带电  $180^\circ$  畴壁与中性  $90^\circ$  畴壁在能量和迁移率方面的显著差异. 模拟进一步观察到了铌单层中存在的棋盘状拓扑畴结构, 其畴壁通过运动、合并与交叉等行为实现从原子尺度到介观尺度的结构演化. 此外, 模拟还成功预测了铌单层的二阶铁电相变, 揭示了居里温度附近晶格常数与极化的连续演化行为.

尽管现有方法已取得显著进展, 但大多数机器学习势模型尚未显式考虑原子局部电荷的影响, 限制了对铁电材料中电子贡献极化响应的准确刻画. 研究者尝试引入多种电荷描述方法, 例如最大化 Wannier 函数中心法<sup>[145]</sup>和玻恩有效电荷近似法<sup>[146]</sup>. 然而, 前者计算成本高昂且难以表征电荷对外场的动态响应; 后者通常将有效电荷近似为各向

同性的标量, 忽略了玻恩有效电荷张量的各向异性, 导致在模拟电场方向相关的铁电/压电响应时出现显著误差<sup>[72,147]</sup>. Zhang 等<sup>[148]</sup>将各向异性玻恩有效电荷张量嵌入深度势模型, 构建了能够精确描述电场-极化耦合且保持第一性原理精度的计算框架, 系统研究了铌酸钾钠晶体的极化-电场回线等铁电压电特性, 揭示了其压电性能随钠含量升高的变化规律及其微观机理, 为克服各向同性电荷近似导致的模拟误差提供了解决方案.

目前, 将长程相互作用整合到机器学习势函数的主流方法, 通常依赖于能量和力之外的特定类型的训练数据. 这一额外要求限制了这些方法在标准数据集 (通常只包含原子位置、能量和力) 上的应用. 一种解决策略是基于消息传递机制, 通过多层信息传播间接扩展作用范围, 从而隐式捕捉长程效应. 另一个值得探索的方向是在模型构建中显式引入长程相互作用项. Gao 等<sup>[149]</sup>提出一种融合可极化长程相互作用的机器学习势框架 (图 5), 其通过耦合等变图神经网络与显式物理驱动的电荷平衡方案, 直接优化静电能量而非原子电荷, 有效捕获传统方法难以处理的长程效应与极化响应. 该框架

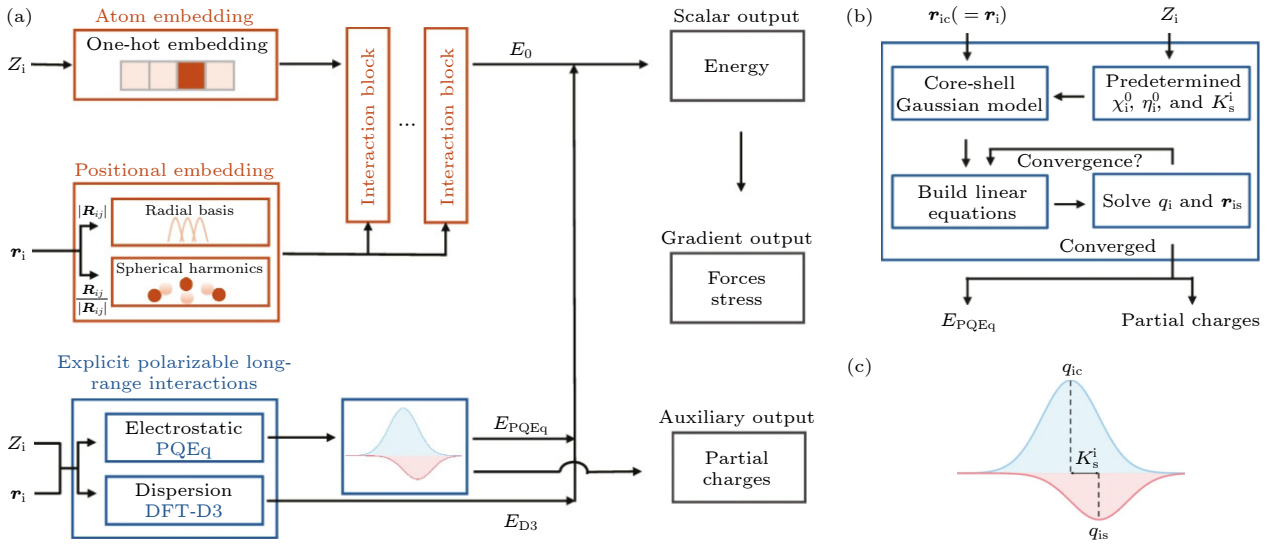


图 5 可极化长程相互作用机器学习势框架概述<sup>[149]</sup> (a) 框架以原子序数 ( $Z_i$ ) 和坐标 ( $r_i$ ) 为输入, 包含一个神经网络模块与一个显式可极化长程作用模块. 神经网络通过等变图网络输出标量势能  $E_0$ ; 长程模块则通过可极化电荷平衡 (PQEq) 方法和 DFT-D3 方法, 分别计算静电项 ( $E_{\text{PQEq}}$ ) 与色散项 ( $E_{\text{D3}}$ ). 总能量为三者之和, 其梯度用于计算原子受力和应力. (b) PQEq 方法的计算流程: 基于原子参数构建核心-壳层高斯模型, 通过求解线性方程组实现原子电荷与壳层位置的自洽迭代计算. (c) 高斯电荷分区模型: 每个原子的局部电荷为核心电荷与壳层电荷之和, 二者通过谐波弹簧常数耦合

Fig. 5. Overview of the machine learning potential framework incorporating polarizable long-range interactions<sup>[149]</sup>. (a) Framework architecture and energy composition: The framework takes atomic numbers ( $Z_i$ ) and coordinates ( $r_i$ ) as inputs, combining a neural network module with an explicit polarizable long-range interaction module. The neural network outputs the scalar potential energy  $E_0$  via an equivariant graph network, while the long-range module calculates the electrostatic term ( $E_{\text{PQEq}}$ ) using the polarizable charge equilibrium (PQEq) method and the dispersion term ( $E_{\text{D3}}$ ) via the DFT-D3 approach. The total energy is the sum of these three terms, and its gradient is used to compute atomic forces and stress. (b) PQEq computational workflow: The PQEq method uses atomic parameters to build a core-shell Gaussian model. A system of linear equations is solved to achieve self-consistent iterative calculations of atomic charges and shell positions. (c) Core-shell charge partitioning model: The local charge of each atom is the sum of the core charge and the shell charge, coupled through a harmonic spring constant.

在多种带电体系中表现优异, 已成功应用于离子扩散、铁电相变及电极-电解质界面反应模拟. Kim 等<sup>[150]</sup> 则开发了通用隐式埃瓦尔德求和 (LES) 框架, 作为一个独立库可与多种短程机器学习势结合, 仅基于能量与力数据即可推断原子电荷, 无需依赖显式电荷标签进行训练, 避免了重复构建训练数据集的困扰. 这些方法使得计算电响应特性 (包括介电常数、离子电导率、铁电性和红外光谱) 成为可能, 并使得基于机器学习势的分子动力学可在施加电场的情况下进行模拟.

随着第一性原理计算数据与公共数据库的持续积累, 机器学习势正朝着通用化、大模型化的方向发展. 通用势模型 (或称“预训练原子大模型”, 如 eSEN<sup>[151]</sup>, MatterSim<sup>[152]</sup>, DPA-3<sup>[153-155]</sup>, MACE-MP-0<sup>[156]</sup> 及 NEP89<sup>[157]</sup> 等) 通过在大规模、多元素、多结构的数据集上进行预训练, 获得了具备广泛预测能力的基准模型. 这些通用模型可基于特定体系的少量数据进行微调, 从而快速得到高精度的

专用势函数. 这种“通用-专用”相结合的模式, 大幅降低了高精度原子模拟的技术门槛与计算成本, 正推动机器学习势从解决特定问题的计算工具向材料数字化研发的基础设施演进.

当前方法仍存在系统性局限. 通用模型普遍存在“软化”问题: 预训练数据大多采自近平衡态构型, 导致势函数在描述远离平衡态的表面、缺陷、离子迁移等高能构型时, 系统地低估能量与力, 超过 90% 化合物出现力欠预测, 势能面曲率偏低<sup>[158]</sup>. 这一缺陷对铁电畴壁成核、相变路径等关键动态过程尤为致命, 可能严重低估能量势垒并错误预测动力学速率. 更严重的是, 传统评估指标存在根本性缺陷: 训练集由近平衡构型主导 (>97%), 而决定动力学的稀有事件 (如畴壁迁移) 占比极低, 其巨大预测误差在均方根误差统计中被严重掩盖<sup>[159]</sup>, 导致势函数虽能精确预测晶格常数等平衡性质, 却在模拟电场驱动畴翻转时出现显著偏差.

多目标优化困境进一步加剧挑战. 对 2300 个

模型的分析表明, 缺陷形成能、弹性常数与稀有事件力预测精度难以兼得, 形成明显的“帕累托前沿”权衡关系——同时满足多种性质精度的全能模型几乎不存在, 随着要求性质数量增加, 模型达标概率急剧下降<sup>[160]</sup>. 此外, 跨体系迁移性严重不足: 即使能量误差  $< 2 \text{ meV/atom}$ 、力误差  $< 30 \text{ meV/\AA}$ , 在成分无序或结构复杂的体系中, 从简单结构训练的模型迁移到拓扑不同的体系时, 能量误差可增大一个数量级<sup>[161]</sup>. 这些局限揭示了数据驱动方法的根本问题: 外推能力不足、物理约束缺失, 以及 DFT 训练数据误差 (如泛函选择导致的能量差异) 会系统性传递并放大至分子动力学模拟结果中, 导致动力学预测的可靠性远低于静态性质预测. 未来的研究方向包括开发标准化的高质量数据集、平衡模型的精度与复杂性, 以及持续提升模型的可迁移性和泛化能力等<sup>[118]</sup>.

### 3.2 相场模拟在铁电材料研究中的应用

理解铁电材料在介观尺度下的畴壁运动、畴结构演变及其与宏观物理性能之间的关联, 对材料设计与性能优化具有重要意义. 然而, 实验手段在直接观测瞬态过程时存在局限; 原子尺度模拟方法则受限于其固有的空间与时间尺度. 相场方法作为一种介观尺度的数值模拟技术, 通过对序参量进行“粗粒化”处理, 可在微米尺度描述畴结构的几何形貌, 并能耦合多种物理场, 直观揭示畴结构的动态演化规律, 因而在铁电材料研究中获得广泛应用<sup>[162,163]</sup>.

在铁电体的相场模拟中, 热力学势的构建是决定材料热力学性质的关键. 根据朗道-德文希尔理论, 体系的自由能密度通常表述为极化强度的多项式展开, 其展开系数决定了材料的基本热力学性质. Noh 等<sup>[164]</sup> 对  $\text{Hf}_{0.5}\text{Zr}_{0.5}\text{O}_2$  (HZO) 进行了相场模拟, 采用包含六阶项的朗道自由能展开形式, 并根据实验数据校准了朗道系数. Saha 等<sup>[165]</sup> 通过相场模拟观察到, 畴壁即使在没有外加电场的情况下也能自发移动, 从而引发对累积性极化翻转至关重要的自发极化激发与弛豫过程. Zhou 等<sup>[166]</sup> 利用从电滞回线数据推导的朗道系数, 探究了  $90^\circ$  尾对尾畴壁对多晶 HZO 薄膜唤醒效应的影响. Sugathan 等<sup>[167]</sup> 采用遗传算法优化了描述 HZO 自由能的有效朗道系数, 重现了多晶薄膜的实验电滞回线. 相场模拟结果表明, 可通过整合运用晶粒形貌与晶体

结构来优化 HZO 薄膜的铁电性能.

为描述铁电畴结构的形成与演化, 需在朗道能量基础上引入序参量的空间梯度项, 从而建立包含梯度能贡献的总自由能泛函. 基于此, 极化动力学的演化由时间依赖的金兹堡-朗道方程描述. 在实际物理体系中, 极化场会与长程电场和弹性场发生强耦合. 因此, 完整的相场模型必须自洽地联立求解金兹堡-朗道方程、静电学中的泊松方程以及连续介质力学中的力学平衡方程. 这种多物理场双向耦合的求解过程计算成本高昂, 在很大程度上制约了传统相场方法在较大尺度或复杂体系中的应用.

近年来, 机器学习特别是深度学习技术的发展, 为构建高效代理模型、加速数值计算以及直接从数据中挖掘演化规律提供了新途径, 有望突破传统相场模拟的计算瓶颈. Montes de Oca Zapiain 等<sup>[168]</sup> 开发了机器学习代理模型预测相场模拟中的微观结构演化. 该方法通过相场模拟生成数据, 利用自相关函数表征结构并采用主成分分析降维, 将问题转化为低维时间序列预测; 随后用长短期记忆神经网络学习历史依赖, 实现快速预测. 该模型在秒级时间尺度内完成预测, 相对误差小于 5%, 速度提升超过 4 万倍. 此外, 代理模型输出可通过相位恢复算法嵌入相场模拟, 实现“时间跳跃”加速. Peivaste 等<sup>[169]</sup> 则利用 U-Net 卷积神经网络构建了相场模型的代理模型, 用于模拟晶粒生长过程, 验证了卷积神经网络在简单微结构预测中的有效性. Oommen 等<sup>[170]</sup> 提出了另一种用于学习两相微结构演化规律的机器学习框架. 该方法融合了自编码器与深度算子网络 DeepONet<sup>[171]</sup>, 其中自编码器将数据压缩至潜在空间, DeepONet 则在潜在空间中控制相场方程的非线性算子. 该框架在训练效率、数值稳定性及噪声鲁棒性方面表现优异.

在铁电材料研究领域, 机器学习与相场模拟的结合也取得了显著进展. Alhada-Lahbabi 等<sup>[172]</sup> 开发了一种基于机器学习的代理模型, 在保持物理规律自洽的前提下显著加速了铁电相场模拟. 该模型以 U-Net 网络架构为基础, 融合了监督学习与非监督学习, 通过引入基于朗道能量最小化和泊松方程约束的物理启发损失函数, 以残差预测方式高效演化极化场、静电势和机械位移场. 研究表明, 该代理模型能够从初始状态开始实现稳定的长序列预测, 相对误差控制在 5% 以内, 计算速度提升达 685 倍. 进一步地, Alhada-Lahbabi 等<sup>[173]</sup> 将该框

架拓展至三维场景, 开发了针对针尖诱导电切换过程的机器学习代理模型. 该模型采用三维 U-Net 架构, 并通过动态边界条件处理机制, 能够准确捕捉不同针尖位置和施加电压下的极化切换轨迹, 实现对极化场和静电势演化的高效预测, 展现出优异的泛化能力.

与此同时, Kévin 等<sup>[174]</sup>提出了一种基于图神经网络的机器学习框架, 用于高效预测多晶氧化铈铁电的迟滞行为. 该模型将多晶结构嵌入图表示,

其中节点代表晶粒, 边代表晶界, 并利用图注意力层捕捉晶粒间静电相互作用. 研究显示, 模型在预测迟滞曲线时平均相对误差仅为 4%, 计算速度较传统相场方法提升超过 6 个数量级. 近期, Alhada-Lahbabi 等<sup>[175]</sup>又开发了一种强化学习辅助的铁电畴壁设计框架 (图 6), 通过集成机器学习相场代理模型来加速畴壁动力学模拟. 该研究致力于解决在扫描探针显微镜实验中实时优化针尖轨迹以精确控制畴壁构型的挑战. 框架采用目标增强的强化学

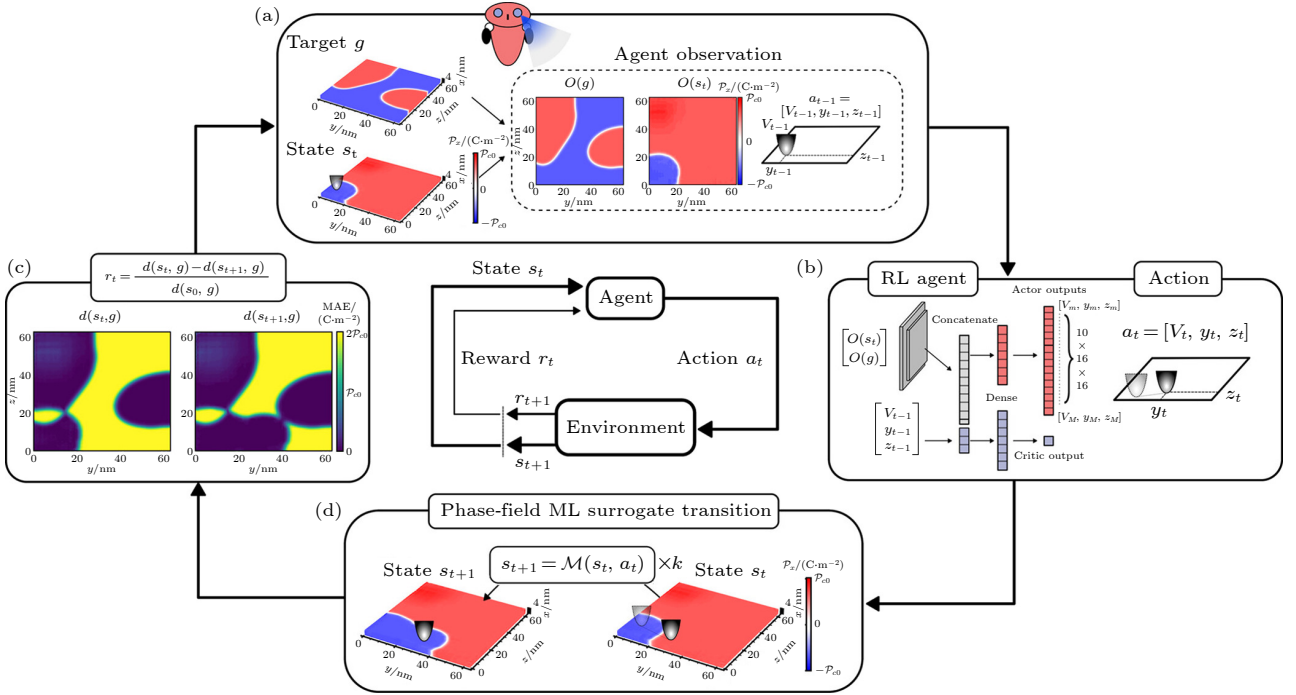


图 6 强化学习框架概览: 基于相场动力学的针尖辅助畴壁控制. 该图展示了将强化学习与机器学习相场代理模型相结合, 用于自主设计铁电畴壁的完整工作流程<sup>[175]</sup> (a) 相场仿真环境: 扫描探针针尖通过在薄膜表面施加电场诱导畴结构演化, 状态空间由三维极化分布  $P(\mathbf{r})$  定义, 观测空间  $O(s_t)$  为表面的二维极化分布, 目标结构  $g$  为期望的畴壁构型. (b) 强化学习智能体采用 Actor-Critic 架构: 观测  $O(s_t)$  和目标  $O(g)$  经三层卷积神经网络 (CNN) 提取特征后, 与前一步动作  $a_{t-1} = [V_{t-1}, y_{t-1}, z_{t-1}]$  拼接, 分别输入 Actor 网络 (输出动作概率  $\pi_\theta(a_t|s_t, g)$ ) 和 Critic 网络 (输出状态价值  $V(s_t)$ ). (c) 奖励机制: 智能体执行动作  $a_t = [V_t, y_t, z_t]$  (含针尖偏压  $V_t$  与位置  $[y_t, z_t]$ ) 后, 环境状态由  $s_t$  转移至  $s_{t+1}$ , 奖励  $r_t$  基于状态-目标距离的变化计算, 即  $r_t = [d(s_t, g) - d(s_{t+1}, g)] / d(s_0, g)$ , 其中  $d$  为平均绝对误差 (MAE), 用于量化当前构型与目标构型的偏差. (d) 该框架通过相场代理模型  $\mathcal{P}_{t+1} = \mathcal{M}(\mathcal{P}_t, V_t, y_t, z_t)$  实现快速环境动力学预测, 支持实时优化针尖轨迹以精准调控畴壁结构

Fig. 6. Overview of the reinforcement learning framework for tip-assisted domain wall control based on phase-field dynamics. The figure illustrates the complete workflow that integrates reinforcement learning with a machine-learned phase-field surrogate model for the autonomous design of ferroelectric domain walls<sup>[175]</sup>. (a) Phase-field simulation environment: a scanning probe tip induces domain structure evolution by applying electric fields on the film surface, where the state space is defined by the three-dimensional polarization distribution  $P(\mathbf{r})$ , the observation space  $O(s_t)$  is the 2D surface polarization map, and the target structure  $g$  represents the desired domain wall configuration. (b) The RL agent adopts an Actor-Critic architecture: observations  $O(s_t)$  and target  $O(g)$  are processed by three convolutional neural network (CNN) layers, concatenated with the previous action  $a_{t-1} = [V_{t-1}, y_{t-1}, z_{t-1}]$ , and fed into the Actor network (outputting action probabilities  $\pi_\theta(a_t|s_t, g)$ ) and Critic network (outputting state value  $V(s_t)$ ). (c) Reward mechanism: upon executing action  $a_t = [V_t, y_t, z_t]$  (comprising tip bias  $V_t$  and position  $[y_t, z_t]$ ), the environment transitions from state  $s_t$  to  $s_{t+1}$ , and the reward  $r_t$  is calculated based on the change in state-target distance as  $r_t = [d(s_t, g) - d(s_{t+1}, g)] / d(s_0, g)$ , where  $d$  denotes the mean absolute error (MAE) quantifying the deviation between current and target configurations. (d) This framework leverages the phase-field surrogate model  $\mathcal{P}_{t+1} = \mathcal{M}(\mathcal{P}_t, V_t, y_t, z_t)$  for rapid environment dynamics prediction, enabling real-time optimization of tip trajectories to precisely manipulate domain wall structures.

习策略,使智能体能够通过自主调整针尖位置和电压偏压,设计出多样化的畴壁结构.研究表明,智能体在单目标和多目标场景下均能实现高效畴壁设计,泛化误差低于15%,且计算速度获得显著提升.该方法为铁电材料的逆设计提供了实时优化工具,推动了畴壁纳米电子学的发展.

总之,相场模拟凭借其多物理场耦合能力以及对介观动力学过程的可视化揭示,已成为铁电材料设计与机理研究的核心模拟工具.机器学习与相场模拟的深度融合,正推动铁电材料研究向“高通量计算”范式演进.融入物理约束的代理模型不仅实现了数量级的计算加速,还通过嵌入物理方程保持了预测的物理可靠性.随着物理信息神经网络与量子学习等技术的持续发展,未来有望构建从原子尺度到器件级别的统一多尺度模拟框架.这种“物理引导的机器学习”方法具有显著普适性,其在铁电材料领域的成功实践,也为其他复杂材料体系的模拟计算提供了可借鉴的技术范式.

## 4 总结与展望

数据驱动方法与机器学习技术的深度融合,正以前所未有的方式推动铁电材料研究的范式革新.从高通量计算筛选与性能预测,到微观机制的原子尺度解析,再到连接微观物理与宏观性能的多尺度建模,这些智能计算工具极大地拓展了研究边界与理解深度,不仅加速了新型铁电体的探索与优化,更致力于揭示其背后“构-效-序”关系的物理本质,为理性设计性能更优、可靠性更高的铁电器件提供了关键见解.

迈向真正精准、可预测的“计算驱动发现”之路仍面临核心挑战.当前,高质量、标准化数据集的匮乏,特别是涵盖实际制备条件、缺陷态及器件服役环境下可靠性能的数据,构成了模型训练与泛化能力提升的首要瓶颈.其次,铁电现象本质上是多物理场强耦合的动力学过程,而现有机器学习模型大多侧重于单一物理性质或静态结构的预测,在捕捉复杂场耦合效应和非平衡态动力学方面能力尚显不足.此外,许多先进模型的“黑箱”特性,使其预测结果难以直接提炼为清晰的物理图像或机制,阻碍了与传统物理理论的深度融合.未来的发展迫切需要开发能够同时处理多种有序参量、耦合场效应及动力学过程的可解释模型,并建立与实验表征

数据更紧密对接的数据桥梁.

随着高质量数据库的持续积累、算法创新对多物理场建模与动力学模拟能力的突破,以及“物理信息”与先验知识的更深层次嵌入,数据驱动与机器学习必将在铁电材料研究中扮演更加核心的角色.可以预见,一个由智能计算引领的新时代正在到来——其有助于我们更透彻地理解从简单二元氧化物到复杂钙钛矿的广阔铁电体系,更精准地设计面向下一代存储、传感与能源转换的功能材料,最终弥合从原子结构到实用器件之间的认知与设计鸿沟.

## 参考文献

- [1] Najafabadi M M, Villanustre F, Khoshgoftaar T M, Seliya N, Wald R, Muharemagic E 2015 *J. Big Data* **2** 1
- [2] Faizan M, Qian Z, Zhu H, Fan S, Abas N, Rauf S, Khan G A, Huzaibi H U 2025 *ACS Appl. Electron. Mater.* **7** 7473
- [3] Gonzalez-Zalba M F, de Franceschi S, Charbon E, Meunier T, Vinet M, Dzurak A S 2021 *Nat. Electron.* **4** 872
- [4] Schroeder U, Park M H, Mikolajick T, Hwang C S 2022 *Nat. Rev. Mater.* **7** 653
- [5] Ismail M N, Abbas E S, Hussein A J, Kanbar A B, Aljanabi Y I H 2024 *RENSIT* **16** 745
- [6] Liu Y H, Tang W Y, Zeng J H, Bai C Y, Zhou K J, Zhang X M, Liu Q, Huang Z C, Wu G J, Wang J L 2025 *Nat. Rev. Electr. Eng.* **2** 773
- [7] Mikolajick T, Slesazek S, Mulaosmanovic H, Park M H, Fichtner S, Lomenzo P D, Hoffmann M, Schroeder U 2021 *J. Appl. Phys.* **129** 100901
- [8] Busch G 1987 *Ferroelectrics* **74** 267
- [9] Valasek J 1921 *Phys. Rev.* **17** 475
- [10] Forrester W F, Hinde R M 1945 *Nature* **156** 177
- [11] Hwang H, Youn S, Kim H 2025 *Nano Converg.* **12** 55
- [12] Fatima S K, Alzard R H, Amna R, Alzard M H, Zheng K, Abdellah M 2025 *Mater. Adv.* **6** 7634
- [13] Böske T S, Müller J, Bräuhaus D, Schröder U, Böttger U 2011 *Appl. Phys. Lett.* **99** 102903
- [14] Noheda B, Nukala P, Acuautila M 2023 *Nat. Mater.* **22** 562
- [15] Kim M K, Lee J S 2019 *Nano Lett.* **19** 2044
- [16] Mikolajick T, Schroeder U, Lomenzo P D, Slesazek S, Lancaster S 2024 *2024 IEEE International Electron Devices Meeting (IEDM) San Francisco, CA, USA, December 7–11, 2024* p1
- [17] Shen B W, Yang B J, Shi M C, Sun W, Liu H N, Ding Y, Gao B, Qian H, Wang Y Y, Tang J S, Wu H Q 2025 *ACS Appl. Electron. Mater.* **7** 4675
- [18] Garcia V, Fusil S, Bouzehouane K, Enouz-Vedrenne S, Mathur N D, Barthélemy A, Bibes M 2009 *Nature* **460** 81
- [19] Hwang J, Goh Y, Jeon S 2024 *Small* **20** 2305271
- [20] Shin J, Seo E, Youn C, Kim S 2025 *J. Alloys Compd.* **1036** 181869
- [21] Khan A I, Keshavarzi A, Datta S 2020 *Nat. Electron.* **3** 588
- [22] Mulaosmanovic H, Breyer E T, Dünkel S, Beyer S, Mikolajick T, Slesazek S 2021 *Nanotechnology* **32** 502002
- [23] Xu H J, Sun F P, Li E L, Guo W Q, Hua L N, Wang R X, Li W W, Chu J H, Liu W, Luo J H, Sun Z H 2025 *Adv.*

- Mater.* **37** 2414339
- [24] Xu B Q, Cai Y, Wang Z K, Xu Q W, Ren Y Q, Chen X, Hu C X, Li X H, Shi J P, Sun C L, Guo S H 2026 *Small Methods* **10** 2500842
- [25] Zhou Z P, Jiao L M, Zheng Z J, Chen Y, Han K Z, Kang Y Y, Zhang D, Wang X L, Kong Q W, Sun C, Xie J W, Gong X 2025 *Nano Converg.* **12** 3
- [26] Park M H, Lee Y H, Mikolajick T, Schroeder U, Hwang C S 2018 *MRS Commun.* **8** 795
- [27] Kum H S, Lee H, Kim S, Lindemann S, Kong W, Qiao K, Chen P, Irwin J, Lee J H, Xie S, Subramanian S, Shim J, Bae S H, Choi C, Ranno L, Seo S, Lee S, Bauer J, Li H, Lee K, Robinson J A, Ross C A, Schlom D G, Rzechowski M S, Eom C B, Kim J 2020 *Nature* **578** 75
- [28] Kim I, Lee J 2023 *Adv. Mater.* **35** 2206864
- [29] Park J Y, Choe D, Lee D H, Yu G T, Yang K, Kim S H, Park G H, Nam S, Lee H J, Jo S, Kuh B J, Ha D, Kim Y, Heo J, Park M H 2023 *Adv. Mater.* **35** 2204904
- [30] Wang A J, Chen R, Yun Y, Xu J, Zhang J X 2025 *Adv. Funct. Mater.* **35** 2412332
- [31] Fichtner S, Wolff N, Lofink F, Kienle L, Wagner B 2019 *J. Appl. Phys.* **125** 114103
- [32] Liu M R, Li D, Liu Z R, Gao Y, Zang H, Shi Z M, Ben J W, Jiang K, Lai B, Zhang W, Wang S, Lü W, Sun X J, Tian H, Li D B 2025 *Adv. Mater.* **37** 2505988
- [33] Zhang Y L, Zhu Q X, Tian B B, Duan C G 2024 *Nano-Micro Lett.* **16** 227
- [34] Fong D D, Stephenson G B, Streiffer S K, Eastman J A, Auciello O, Fuoss P H, Thompson C 2004 *Science* **304** 1650
- [35] Belianinov A, He Q, Dziaugys A, Maksymovych P, Eliseev E, Borisevich A, Morozovska A, Banys J, Vysochanskii Y, Kalinin S V 2015 *Nano Lett.* **15** 3808
- [36] Liu F C, You L, Seyler K L, Li X B, Yu P, Lin J H, Wang X W, Zhou J D, Wang H, He H Y, Pantelides S T, Zhou W, Sharma P, Xu X D, Ajayan P M, Wang J L, Liu Z 2016 *Nat. Commun.* **7** 12357
- [37] Zhou Y, Wu D, Zhu Y H, Cho Y, He Q, Yang X, Herrera K, Chu Z D, Han Y, Downer M C, Peng H L, Lai K J 2017 *Nano Lett.* **17** 5508
- [38] Zheng C X, Yu L, Zhu L, Collins J L, Kim D, Lou Y D, Xu C, Li M, Wei Z, Zhang Y P, Edmonds M T, Li S Q, Seidel J, Zhu Y, Liu J Z, Tang W X, Fuhrer M S 2018 *Sci. Adv.* **4** eaar7720
- [39] Li L, Wu M H 2017 *ACS Nano* **11** 6382
- [40] Kim H J, Park M H, Kim Y J, Lee Y H, Moon T, Kim K D, Hyun S D, Hwang C S 2016 *Nanoscale* **8** 1383
- [41] Zeng B J, Xie S C, Zhang S R, Huang H L, Ju C F, Zheng S Z, Peng Q X, Yang Q, Zhou Y C, Liao M 2024 *Acta Mater.* **272** 119920
- [42] Kumar G, Paul A, Das A, Larrieu G, De S 2025 *Phys. Status Solidi A* **222** 2500376
- [43] Mueller S, Mueller J, Singh A, Riedel S, Sundqvist J, Schroeder U, Mikolajick T 2012 *Adv. Funct. Mater.* **22** 2412
- [44] Martin D, Müller J, Schenk T, Arruda T M, Kumar A, Strelcov E, Yurchuk E, Müller S, Pohl D, Schröder U, Kalinin S V, Mikolajick T 2014 *Adv. Mater.* **26** 8198
- [45] Wang L G, Xiong Y, Xiao W, Cheng L, Du J, Tu H, Van De Walle A 2014 *Appl. Phys. Lett.* **104** 201903
- [46] Xu L, Nishimura T, Shibayama S, Yajima T, Migita S, Toriumi A 2017 *J. Appl. Phys.* **122** 124104
- [47] Falkowski M, Kühneth C, Materlik R, Kersch A 2018 *npj Comput. Mater.* **4** 73
- [48] Xu X, Huang F T, Qi Y, Singh S, Rabe K M, Obeysekera D, Yang J, Chu M W, Cheong S W 2021 *Nat. Mater.* **20** 826
- [49] Yao L L, Liu X, Cheng Y H, Xiao B 2021 *Nanotechnology* **32** 215708
- [50] Song T F, Tan H, Robert A C, Estandia S, Gázquez J, Sánchez F, Fina I 2022 *Appl. Mater. Today* **29** 101621
- [51] Li T, Dong J C, Zhang N, Wen Z C, Sun Z Z, Hai Y, Wang K W, Liu H Y, Tamura N, Mi S B, Cheng S D, Ma C S, He Y B, Li L, Ke S M, Huang H T, Cao Y G 2021 *Acta Mater.* **207** 116696
- [52] Yazawa K, Evans C, Dickey E C, Tellekamp M B, Brennecke G L, Zakutayev A 2025 *Phys. Rev. Applied* **23** 014036
- [53] Madika B, Saha A, Kang C, Buyantogtokh B, Agar J, Wolverson C M, Voorhees P, Littlewood P, Kalinin S, Hong S 2025 *ACS Nano* **19** 27116
- [54] Otyepka M, Pykal M, Otyepka M 2025 *Appl. Mater. Today* **47** 102981
- [55] Osaro E, Karpinski N, Alornyo S, Ighalo J O 2025 *Mater. Today Chem.* **49** 103115
- [56] Bennett J W 2012 *Phys. Procedia* **34** 14
- [57] Bennett J W, Garrity K F, Rabe K M, Vanderbilt D 2012 *Phys. Rev. Lett.* **109** 167602
- [58] Bennett J W, Rabe K M 2012 *J. Solid State Chem.* **195** 21
- [59] Markov M, Alaerts L, Miranda H P C, Petretto G, Chen W, George J, Bousquet E, Ghosez P, Rignanese G M, Hautier G 2021 *Proc. Natl. Acad. Sci. U. S. A.* **118** e2026020118
- [60] Khan A C, Cook A S, Leginze J A, Bennett J W 2022 *J. Mater. Res.* **37** 346
- [61] Lee C W, Din N U, Yazawa K, Brennecke G L, Zakutayev A, Gorai P 2024 *Matter* **7** 1644
- [62] Garrity K F 2018 *Phys. Rev. B* **97** 024115
- [63] Abrahams S C 1988 *Acta Crystallogr. B Struct. Sci.* **44** 585
- [64] Abrahams S C 1989 *Acta Crystallogr. B Struct. Sci.* **45** 228
- [65] Abrahams S C 1999 *Acta Crystallogr. B Struct. Sci.* **55** 494
- [66] Kroumova E, Aroyo M I, Pérez-Mato J M, Igartua J M, Ivantchev S 2000 *Ferroelectrics* **241** 295
- [67] Kroumova E, Aroyo M I, Perez-Mato J M 2002 *Acta Crystallogr. B Struct. Sci.* **58** 921
- [68] Lee C W, Yazawa K, Zakutayev A, Brennecke G L, Gorai P 2024 *Sci. Adv.* **10** ead10848
- [69] Bennett J W, Garrity K F, Rabe K M, Vanderbilt D 2013 *Phys. Rev. Lett.* **110** 017603
- [70] Benedek N A, Fennie C J 2011 *Phys. Rev. Lett.* **106** 107204
- [71] Smidt T E, Mack S A, Reyes-Lillo S E, Jain A, Neaton J B 2020 *Sci. Data* **7** 72
- [72] Spaldin N A 2012 *J. Solid State Chem.* **195** 2
- [73] Vanderbilt D 2018 *Berry Phases in Electronic Structure Theory: Electric Polarization, Orbital Magnetization and Topological Insulators* (Cambridge: Cambridge University Press) pp75–122
- [74] Acharya M, Mack S, Fernandez A, Kim J, Wang H, Eriguchi K, Meyers D, Gopalan V, Neaton J, Martin L W 2020 *Chem. Mater.* **32** 7274
- [75] Acharya M, Banyas E, Ramesh M, Jiang Y, Fernandez A, Dasgupta A, Ling H, Hanrahan B, Persson K, Neaton J B, Martin L W 2022 *Adv. Mater.* **34** 2105967
- [76] Ricci F, Reyes-Lillo S E, Mack S A, Neaton J B 2024 *npj Comput. Mater.* **10** 15
- [77] Capillas C, Tasci E S, De La Flor G, Orobengoa D, Perez-Mato J M, Aroyo M I 2011 *Z. Kristallogr.* **226** 186
- [78] Jang J, Gu G H, Noh J, Kim J, Jung Y 2020 *J. Am. Chem. Soc.* **142** 18836
- [79] Zhang X Z, Zhu Y Z 2025 *J. Mater. Chem. A* **13** 27577

- [80] Frey R, Grosso B F, Fandr e P, M achler B, Spaldin N A, Mansouri Tehrani A 2023 *Phys. Rev. Res.* **5** 023122
- [81] Pilania G, Mannodi-Kanakkithodi A, Uberuaga B P, Ramprasad R, Gubernatis J E, Lookman T 2016 *Sci. Rep.* **6** 19375
- [82] Yuan R H, Tian Y, Xue D Z, Xue D Q, Zhou Y M, Ding X D, Sun J, Lookman T 2019 *Adv. Sci.* **6** 1901395
- [83] Lu S H, Zhou Q H, Ma L, Guo Y L, Wang J L 2019 *Small Methods* **3** 1900360
- [84] He J J, Li J J, Liu C B, Wang C X, Zhang Y, Wen C, Xue D Z, Cao J L, Su Y J, Qiao L J, Bai Y 2021 *Acta Mater.* **209** 116815
- [85] Lu T, Li H Y, Li M J, Wang S H, Lu W C 2022 *ACS Omega* **7** 21583
- [86] He J J, Su X P, Wang C X, Li J J, Hou Y X, Li Z H, Liu C B, Xue D Z, Cao J L, Su Y J, Qiao L J, Lookman T, Bai Y 2022 *Acta Mater.* **240** 118341
- [87] Van Lich L, Nguyen T H, Hong Hue D T, Bui T Q, Nguyen T G, Dinh V H, Phan M H 2023 *Mater. Res. Bull.* **167** 112433
- [88] Yuan R H, Wang B, Li J S, Sun P, Liu Z, Ding X D, Xue D Z, Lookman T 2025 *Acta Mater.* **286** 120760
- [89] Pradhan D K, Kumari S, Strelcov E, Pradhan D K, Katiyar R S, Kalinin S V, Laanait N, Vasudevan R K 2018 *npj Comput. Mater.* **4** 23
- [90] Liu D S, Bai G, Gao C F 2020 *J. Appl. Phys.* **127** 154101
- [91] Ali A, Park H, Mall R, Aissa B, Sanvito S, Bensmail H, Belaidi A, El-Mellouhi F 2020 *Chem. Mater.* **32** 2998
- [92] Zhang C B, Chen X 2025 *npj Comput. Mater.* **11** 282
- [93] Yan S A, Xu P, Li G, Li Y C, Zhu Y F, Zhu X N, Yang Q, Li M, Tang M H, Lu H L, Liu S, Li Q J, Zhang D W, Chen Z G 2025 *npj Comput. Mater.* **11** 2
- [94] Oganov A R, Pickard C J, Zhu Q, Needs R J 2019 *Nat. Rev. Mater.* **4** 331
- [95] Wang Y C, Lv J, Gao P Y, Ma Y M 2022 *Acc. Chem. Res.* **55** 2068
- [96] Cheng G J, Gong X G, Yin W J 2022 *Nat. Commun.* **13** 1492
- [97] Glass C W, Oganov A R, Hansen N 2006 *Comput. Phys. Commun.* **175** 713
- [98] Wang Y C, Lv J, Zhu L, Ma Y M 2012 *Comput. Phys. Commun.* **183** 2063
- [99] Wang J J, Gao H, Han Y, Ding C, Pan S N, Wang Y, Jia Q H, Wang H T, Xing D Y, Sun J 2023 *Natl. Sci. Rev.* **10** nwad128
- [100] Wang Z G, Chen Z Y, Yuan Y, Wang Y Y 2025 arXiv: 2501.15838v1 [cond-mat.mtrl-sci]
- [101] Kruglov I A, Yanilkin A V, Propad Y, Mazitov A B, Rachitskii P, Oganov A R 2023 *npj Comput. Mater.* **9** 197
- [102] Fan S Y, Singh S, Xu X H, Park K, Qi Y B, Cheong S W, Vanderbilt D, Rabe K M, Musfeldt J L 2022 *npj Quantum Mater.* **7** 32
- [103] Grinberg I, Shin Y H, Rappe A M 2009 *Phys. Rev. Lett.* **103** 197601
- [104] Zeng X, Cohen R E 2011 *Appl. Phys. Lett.* **99** 142902
- [105] Sepiarsky M, Phillpot S R, Stachiotti M G, Migoni R L 2002 *J. Appl. Phys.* **91** 3165
- [106] Shin Y H, Grinberg I, Chen I-W, Rappe A M 2007 *Nature* **449** 881
- [107] Burke K 2012 *J. Chem. Phys.* **136** 150901
- [108] Cohen A J, Mori-S anchez P, Yang W 2012 *Chem. Rev.* **112** 289
- [109] Shin Y H, Cooper V R, Grinberg I, Rappe A M 2005 *Phys. Rev. B* **71** 054104
- [110] Shan T R, Devine B D, Kemper T W, Sinnott S B, Phillpot S R 2010 *Phys. Rev. B* **81** 125328
- [111] Akbarian D, Yilmaz D E, Cao Y, Ganesh P, Dabo I, Munro J, Van Ginhoven R, Van Duin A C T 2019 *Phys. Chem. Chem. Phys.* **21** 18240
- [112] Kelley K P, Yilmaz D E, Collins L, Sharma Y, Lee H N, Akbarian D, Van Duin A C T, Ganesh P, Vasudevan R K 2020 *Phys. Rev. Mater.* **4** 024407
- [113] Zhong W, Vanderbilt D, Rabe K M 1994 *Phys. Rev. Lett.* **73** 1861
- [114] Wojdeł J C, Hermet P, Ljungberg M P, Ghosez P,  niguez J 2013 *J. Phys. Condens. Matter* **25** 305401
- [115] Paul A, Sun J, Perdew J P, Waghmare U V 2017 *Phys. Rev. B* **95** 054111
- [116] Sepiarsky M, Wu Z, Asthagiri A, Cohen R E 2004 *Ferroelectrics* **301** 55
- [117] Voulodimos A, Doulamis N, Doulamis A, Protopapadakis E 2018 *Comput. Intell. Neurosci.* **2018** 1
- [118] Wang G J, Wang C R, Zhang X G, Li Z F, Zhou J, Sun Z M 2024 *iScience* **27** 109673
- [119] Himanen L, J ager M O J, Morooka E V, Federici Canova F, Ranawat Y S, Gao D Z, Rinke P, Foster A S 2020 *Comput. Phys. Commun.* **247** 106949
- [120] Behler J 2011 *J. Chem. Phys.* **134** 074106
- [121] Gastegger M, Schwiedrzik L, Bittermann M, Berzsenyi F, Marquetand P 2018 *J. Chem. Phys.* **148** 241709
- [122] Huo H, Rupp M 2022 *Mach. Learn. Sci. Technol.* **3** 045017
- [123] Drautz R 2019 *Phys. Rev. B* **99** 014104
- [124] Bart ok A P, Kondor R, Cs anyi G 2013 *Phys. Rev. B* **87** 184115
- [125] Shapeev A V 2016 *Multiscale Model. Simul.* **14** 1153
- [126] Reiser P, Neubert M, Eberhard A, Torresi L, Zhou C, Shao C, Metni H, Van Hoesel C, Schopmans H, Sommer T, Friederich P 2022 *Commun. Mater.* **3** 93
- [127] Sch utt K, Kindermans P J, Felix H E S, Chmiela S, Tkatchenko A, M uller K R 2017 arXiv: 1706.08566 [stat.ML]
- [128] Batzner S, Musaelian A, Sun L, Geiger M, Mailoa J P, Kornbluth M, Molinari N, Smidt T E, Kozinsky B 2022 *Nat. Commun.* **13** 2453
- [129] Batatia I, Kov acs D P, Simm G N C, Ortner C, Cs anyi G 2022 arXiv: 2206.07697 [stat.ML]
- [130] Kov acs D P, Moore J H, Browning N J, Batatia I, Horton J T, Pu Y, Kapil V, Witt W C, Magd au I B, Cole D J, Cs anyi G 2025 arXiv: 2312.15211 [physics.chem-ph]
- [131] Bart ok A P, Payne M C, Kondor R, Cs anyi G 2010 *Phys. Rev. Lett.* **104** 136403
- [132] Thompson A P, Swiler L P, Trott C R, Foiles S M, Tucker G J 2015 *J. Comput. Phys.* **285** 316
- [133] Zhang L F, Han J Q, Wang H, Car R, E W 2018 *Phys. Rev. Lett.* **120** 143001
- [134] Fan Z Y, Zeng Z H, Zhang C Z, Wang Y Z, Song K K, Dong H K, Chen Y, Ala-Nissila T 2021 *Phys. Rev. B* **104** 104309
- [135] Han J Q, Cen J C, Wu L M, Li Z Z, Kong X Z, Jiao R, Yu Z Y, Xu T Y, Wu F D, Wang Z H, Xu H T, Wei Z W, Zhao D L, Liu Y, Rong Y, Huang W B 2025 *Front. Comput. Sci.* **19** 1911375
- [136] Wu J, Zhang Y Z, Zhang L F, Liu S 2021 *Phys. Rev. B* **103** 024108
- [137] Thong H C, Wang X Y, Han J, Zhang L F, Li B, Wang K, Xu B 2023 *Phys. Rev. B* **107** 014101
- [138] Wu J, Yang J Y, Liu Y J, Zhang D, Yang Y D, Zhang Y Z,

- Zhang L F, Liu S 2023 *Phys. Rev. B* **108** L180104
- [139] Wu J, Yang J Y, Ma L Y, Zhang L F, Liu S 2023 *Phys. Rev. B* **107** 144102
- [140] Ma L Y, Wu J, Zhu T Y, Huang Y W, Lu Q Y, Liu S 2023 *Phys. Rev. Lett.* **131** 256801
- [141] Zhang H Z, Thong H C, Bastogne L, Gui C R, He X, Ghosez P 2024 *Phys. Rev. B* **110** 054109
- [142] Chen H, Zhang Y J, Zhou C, Zhou Y C 2024 *npj Comput. Mater.* **10** 270
- [143] Wen W R, Zeng F D, Xu B, Bi K, Xing Z P, Thong H C, Wang K 2025 *npj Comput. Mater.* **11** 343
- [144] Hong Y F, Deng J K, Yang Y, He R, Zhong Z C, Ding X D, Sun J, Liu J Z 2025 *Phys. Rev. Lett.* **135** 216802
- [145] Xie P C, Chen Y X, Xu X Y, Yao Z, E W, Car R 2022 arXiv: 2205.11839 [cond-mat.mtrl-sci]
- [146] Shi Y B, He R, Zhang B W, Zhong Z C 2024 *Phys. Rev. B* **109** 174104
- [147] Zhong W, King-Smith R D, Vanderbilt D 1994 *Phys. Rev. Lett.* **72** 3618
- [148] Zhang X, Li B, Wang M, Liu B, Lv W J, Liu H X, Liu K 2025 *Ceram. Int.* **51** 47675
- [149] Gao R Z, Yam C, Mao J J, Chen S G, Chen G H, Hu Z Y 2025 *Nat. Commun.* **16** 10484
- [150] Kim D, Wang X, Zhong P, King D S, Inizan T J, Cheng B 2025 arXiv: 2507.14302 [physics.chem-ph]
- [151] Fu X, Wood B M, Barroso-Luque L, et al. 2025 arXiv: 2502.12147 [physics.comp-ph]
- [152] Yang H, Hu C X, Zhou Y C, Liu X X, Shi Y, Li J L, Li G Z, Chen Z K, Chen S Z, Zeni C, Horton M, Pinsler R, Fowler A, Züchner D, Xie T, Smith J, Sun L X, Wang Q, Kong L Y, Liu C, Hao H X, Lu Z H 2024 arXiv: 2405.04967 [cond-mat.mtrl-sci]
- [153] Zhang D, Bi H, Dai F Z, Jiang W, Zhang L, Wang H 2022 arXiv: 2208.08236 [physics.chem-ph]
- [154] Zhang D, Liu X, Zhang X, Zhang C, Cai C, Bi H, Du Y, Qin X, Huang J, Li B, Shan Y, Zeng J, Zhang Y, Liu S, Li Y, Chang J, Wang X, Zhou S, Liu J, Luo X, Wang Z, Jiang W, Wu J, Yang Y, Yang J, Yang M, Gong F Q, Zhang L, Shi M, Dai F Z, York D M, Liu S, Zhu T, Zhong Z, Lv J, Cheng J, Jia W, Chen M, Ke G, E W, Zhang L, Wang H 2024 *npj Comput. Mater.* **10** 293
- [155] Zhang D, Peng A Y, Cai C, Li W T, Zhou Y C, Zeng J Z, Guo M Y, Zhang C Q, Li B W, Jiang H, Zhu T, Jia W L, Zhang L F, Wang H 2025 arXiv: 2506.01686 [physics.comp-ph]
- [156] Batatia I, Benner P, Chiang Y, et al. 2024 arXiv: 2401.00096 [physics.chem-ph]
- [157] Liang T, Xu K, Lindgren E, Chen Z R, Zhao R, Liu J H, Berger E, Tang B, Zhang B H, Wang Y Z, Song K K, Ying P H, Xu N, Dong H K, Chen S D, Erhart P, Fan Z Y, Al-Nissila T, Xu J B 2025 arXiv: 2504.21286 [cond-mat.mtrl-sci]
- [158] Deng B W, Choi Y, Zhong P C, Riebesell J, Anand S, Li Z H, Jun K, Persson K A, Ceder G 2025 *npj Comput. Mater.* **11** 9
- [159] Liu Y S, He X F, Mo Y F 2023 *npj Comput. Mater.* **9** 174
- [160] Liu Y S, Mo Y F 2024 *npj Comput. Mater.* **10** 159
- [161] Maxson T, Soyemi A, Zhang X, Chen B W J, Szilvási T 2025 *J. Chem. Inf. Model.* **65** 8097
- [162] Chen L 2008 *J. Am. Ceram. Soc.* **91** 1835
- [163] Xu K, Yang L T, Wang J, Huang H B 2025 *J. Mater. Inf.* **5** 24
- [164] Noh Y, Jung M, Yoon J, Hong S, Park S, Kang B S, Ahn S E 2019 *Curr. Appl. Phys.* **19** 486
- [165] Saha A K, Ni K, Dutta S, Datta S, Gupta S 2019 *Appl. Phys. Lett.* **114** 202903
- [166] Zhou P A, Zeng B J, Yang W Z, Liao J J, Meng F Q, Zhang Q H, Gu L, Zheng S Z, Liao M, Zhou Y C 2022 *Acta Mater.* **232** 117920
- [167] Sugathan S, Thekkepat K, Bandyopadhyay S, Kim J, Cha P R 2022 *Nanoscale* **14** 14997
- [168] Montes De Oca Zapiain D, Stewart J A, Dingreville R 2021 *npj Comput. Mater.* **7** 3
- [169] Peivaste I, Siboni N H, Alahyarizadeh G, Ghaderi R, Svendsen B, Raabe D, Mianroodi J R 2022 arXiv: 2205.02121 [cond-mat.mtrl-sci]
- [170] Oommen V, Shukla K, Goswami S, Dingreville R, Karniadakis G E 2022 *npj Comput. Mater.* **8** 190
- [171] Lu L, Jin P Z, Pang G F, Zhang Z Q, Karniadakis G E 2021 *Nat. Mach. Intell.* **3** 218
- [172] Alhada-Lahbabi K, Deleruyelle D, Gautier B 2023 *ACS Appl. Electron. Mater.* **5** 3894
- [173] Alhada-Lahbabi K, Deleruyelle D, Gautier B 2024 *npj Comput. Mater.* **10** 197
- [174] Kévin A L, Damien D, Brice G 2024 *Nanoscale Adv.* **6** 2350
- [175] Alhada-Lahbabi K, Deleruyelle D, Gautier B 2025 *ACS Appl. Electron. Mater.* **7** 1130

## REVIEW

# Data-driven and machine learning-assisted research on ferroelectric materials<sup>\*</sup>

WANG Changrui   ZHOU Jian   SUN Zhimei<sup>†</sup>*(School of Materials Science and Engineering, Beihang University, Beijing 100191, China)*

( Received 26 December 2025; revised manuscript received 23 January 2026 )

## Abstract

As conventional semiconductor technology approaches its fundamental physical limits, ferroelectric materials, with their electrically switchable spontaneous polarization, have emerged as promising candidates for next-generation information storage and neuromorphic computing devices. However, optimizing material performance and elucidating the underlying physical mechanisms remain central challenges in this field. Rapid advances in machine learning and data science are driving a paradigm shift in ferroelectric materials research, transitioning from empirical trial-and-error approaches toward an intelligent, data-driven framework. This review systematically summarizes recent progress in applying machine learning to ferroelectric materials research. Through high-throughput screening, structure-property relationship modeling, and physics-informed approaches, machine learning has significantly accelerated the discovery and performance optimization of novel ferroelectric materials, enabling systematic breakthroughs ranging from compositional design to crystal structure prediction. Furthermore, by integrating machine learning interatomic potentials with physics-enhanced phase-field models, multiscale computational simulations have effectively revealed the microscopic mechanisms governing ferroelectric phase transitions and domain structure evolution, thereby bridging the knowledge gap between atomistic-scale simulations and macroscopic properties. Finally, this article discusses potential pathways for the deep integration of data-driven methods with physical models and provides an outlook on the future direction of intelligent research and development for functional materials.

**Keywords:** ferroelectric materials, machine learning, high-throughput screening, multiscale simulationDOI: [10.7498/aps.75.20251772](https://doi.org/10.7498/aps.75.20251772)CSTR: [32037.14.aps.75.20251772](https://cstr.cn/32037.14.aps.75.20251772)

---

<sup>\*</sup> Project supported by the Key Program of the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 52332005).

<sup>†</sup> Corresponding author. E-mail: [zmsun@buaa.edu.cn](mailto:zmsun@buaa.edu.cn)

## 数据驱动与机器学习辅助的铁电材料

王昌锐 周健 孙志梅

### Data-driven and machine learning-assisted research on ferroelectric materials

WANG Changrui ZHOU Jian SUN Zhimei

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 75, 090701 (2026) DOI: 10.7498/aps.75.20251772

CSTR: 32037.14.aps.75.20251772

在线阅读 View online: <https://doi.org/10.7498/aps.75.20251772>

当期内容 View table of contents: <http://wulixb.iphy.ac.cn>

---

## 您可能感兴趣的其他文章

### Articles you may be interested in

#### 基于机器学习的无机磁性材料磁性基态分类与磁矩预测

Classification of magnetic ground states and prediction of magnetic moments of inorganic magnetic materials based on machine learning

物理学报. 2022, 71(6): 060202 <https://doi.org/10.7498/aps.71.20211625>

#### 基于机器学习和第一性原理计算的Janus材料预测

Prediction of magnetic Janus materials based on machine learning and first-principles calculations

物理学报. 2024, 73(23): 230201 <https://doi.org/10.7498/aps.73.20241278>

#### 生物分子模拟中的机器学习方法

Machine learning in molecular simulations of biomolecules

物理学报. 2023, 72(24): 248708 <https://doi.org/10.7498/aps.72.20231624>

#### 机器学习辅助的WC-Co硬质合金硬度预测

Hardness prediction of WC-Co cemented carbide based on machine learning model

物理学报. 2024, 73(12): 126201 <https://doi.org/10.7498/aps.73.20240284>

#### 机器学习在光电子能谱中的应用及展望

Application and prospect of machine learning in photoelectron spectroscopy

物理学报. 2024, 73(21): 210701 <https://doi.org/10.7498/aps.73.20240957>

#### 新型四元硫族化合物光伏特性的高通量筛选和第一性原理研究

Photovoltaic properties of novel quaternary chalcogenides based on high-throughput screening and first-principles calculations

物理学报. 2024, 73(17): 176301 <https://doi.org/10.7498/aps.73.20240795>