

激光与光电子学进展

玻璃基因工程在激光玻璃等光功能玻璃领域的研究进展

董国平^{1*}, 万天择¹, 吴敏波¹, 潘绮雯^{1,2}, 邱建荣³, 杨中民^{1,2}

¹华南理工大学材料科学与工程学院发光材料与器件国家重点实验室, 广东省激光光纤材料与
应用重点实验室, 广东 广州 510640;

²华南理工大学物理与光电学院, 广东 广州 510640;

³浙江大学光电科学与工程学院, 浙江 杭州 310027

摘要 随着激光玻璃及光功能玻璃应用需求的快速增长,对光功能玻璃在光学性能和机械性能的要求越加趋向于多元化,而玻璃结构的不确定性和组分连续可调的特性阻碍了新型光功能玻璃材料的快速研发,为了摆脱传统的“试错型”设计模式,缩短玻璃材料开发的成本与周期,提升玻璃材料设计与制备过程的可预测性,“材料基因组计划”应运而生。“材料基因组计划”将高性能计算、数据和实验相结合,根据材料的组分对材料的特性进行定量地准确预测,从而指导新型材料的设计与开发。本文归纳并总结了目前应用于激光玻璃及光功能玻璃领域中的“材料基因工程”的不同理论与建模流程,分为基于物理定义推导的物理性方法、对实验数据进行统计分析的经验性方法、理论和经验相结合的理论-经验结合方法。在此基础上,从激光玻璃和光功能玻璃材料出发,重点介绍“材料基因工程”在该领域的最新进展,并对未来的发展方向进行了展望。

关键词 材料; 材料基因组计划; 玻璃; 理论计算; 成分-结构-性质关系

中图分类号 TB484.5

文献标志码 A

DOI: 10.3788/LOP202259.1516002

Recent Applications of Glass Genetic Engineering in Laser Glasses and Other Advanced Optical Glasses

Dong Guoping^{1*}, Wan Tianze¹, Wu Minbo¹, Pan Qiwen^{1,2}, Qiu Jianrong³, Yang Zhongmin^{1,2}

¹State Key Laboratory of Luminescent Materials and Devices, Guangdong Provincial Key Laboratory of Fiber Laser Materials and Applied Techniques, School of Materials Science and Engineering,

South China University of Technology, Guangzhou 510640, Guangdong, China;

²School of Physics and Optoelectronics, South China University of Technology,

Guangzhou 510640, Guangdong, China;

³College of Optical Science and Engineering, Zhejiang University, Hangzhou 310027,

Zhejiang, China

Abstract With the rapid growth of applications requiring laser and optical functional glasses, the optical and mechanical properties of optical functional glass have become more diversified. Furthermore, the uncertainty of glass structure and the continuously adjustable properties of components hinder the rapid research and development of new optical functional glass materials. To eliminate the traditional “trial-and-error” research mode, reduce the cost and cycle of glass material development, and improve the predictability of glass material design and preparation process, the “material genome initiative” was proposed. The material genome initiative combines high-performance computing, data, and experiments to quantitatively and accurately predict the properties of materials using their components, thereby guiding the design and development of new materials. This paper summarizes different theories and current modeling processes of material genetic engineering used in laser and optical functional glasses. These approaches can be divided into physical approaches using the derivation of physical definitions, empirical methods using statistical analysis of experimental data, and theory-empirical approaches that combine theory and experience. Therefore, with respect to laser glass and optical functional

收稿日期: 2022-05-24; 修回日期: 2022-06-13; 录用日期: 2022-06-15

通信作者: *dgp@scut.edu.cn

glass materials, this paper focuses on the latest progress in material genetic engineering and discusses directions for future development.

Key words materials; materials genome initiative; glass; theoretical computation; composition-structure-property relationship

1 引言

玻璃材料诞生至今,一直在国计民生和科学研究中具有相当重要的地位,在建筑、医药生物、电子通信、光学工业以及现代技术等领域有着重要的应用前景^[1-5]。由于玻璃材料的应用无处不在,我们所生活的时代又被称为玻璃时代^[6],而联合国也将 2022 年定为“国际玻璃年”。由基质玻璃和激活离子构成的激光玻璃对激光技术的发展起到了重要的推进作用,稀土离子掺杂玻璃光纤作为增益介质的光纤激光器具有输出功率高、光束质量高、转化效率高等独特优势^[7-8],在众多领域发挥着不可或缺的作用,而掺钕激光玻璃广泛应用于激光惯性约束聚变装置中^[9-13],数千片大尺寸激光钕玻璃成功应用于美国国家点火装置(NIF)和中国的神光 III 主机装置,前者在 2021 年获得 1.3 MJ 的聚变能,使该装置处于聚变点火的门槛上^[14]。

随着对激光玻璃及其他光功能玻璃日益增长的应用需求,人们对其光学性能和机械性能的要求越加趋向于多元化,因此需要加速研发性能优异的新型光功能玻璃。但玻璃态材料的固有属性使得新型玻璃材料的开发难度极大。玻璃是热力学亚稳态的非晶态物质^[15],具有长程无序性,元素周期表中几乎所有元素都可以形成玻璃,可能的组分数量多达 10^{52} 种^[16],已经研究过的组分只是其中的冰山一角。玻璃在组成上不需要遵循化学计量的要求,通过微调组分,玻璃的光学、热学、机械性质等大多具有连续可调性^[17-18],这是玻璃相对于晶体材料的巨大优势。同时,如何在广阔的组分空间中找到最佳组分以适应特定的应用场景,也成为了新型玻璃材料开发过程的挑战。此外,玻璃态还具有非遍历性和非平衡性^[15],其观测尺度远小于其结构弛豫时间,而且难以用平衡热力学或统计力学来描述。传统的材料研究以及新材料开发方式是实验试错法,基于科研人员多年的直觉以及文献中的经验与数据,对初始成分进行试错实验,属于渐进式的缓慢改良^[19-20]。但面对海量的玻璃配方,这种方法过于低效,具有一定的盲目性且很难筛选出最优化成分。对于新型光功能玻璃的研究与开发,迫切需要摆脱传统的经验设计模式,缩减新材料研发周期,降低研发成本,从需求出发对玻璃的成分、结构和属性进行设计、预测与优化。

为解决材料设计周期太长且成功率低的问题,实现将先进材料的发现、开发、制造和使用的速度提高一倍的目标,2011 年美国拟定了名为“材料基因组计划”(MGI)的国家性计划,旨在结合计算、数据和实验的方式,根据材料的组分对材料的特性进行定量地准确

预测并指导新型材料的设计与开发,进而改变传统的材料科研范式,缩短材料设计研发周期^[21-23]。材料基因组计划在十几年的发展里取得了许多振奋人心的成果,比如有机发光二极管分子的高通量筛选、薄膜分子结构研究、新型磁相的预测等^[24-26]。在玻璃领域,著名成果之一便是已经发展到第七代、应用于无数智能设备的康宁大猩猩玻璃(Gorilla Glass[®])^[27-28]。从第三代开始,康宁便采用了与传统的新型材料研发模式完全不同的研发路线,其组分的确定完全基于理论设计。研究人员首先从性能需求出发,结合拓扑约束理论和基于康宁专有数据库的材料计算工程识别出超过 50 种的候选成分,对其进行筛选后探索其制造工艺,最终在 22 个月内完成从设计到市场应用^[29]。

本文从玻璃结构的理论出发,围绕激光玻璃及光功能玻璃材料,归纳并总结了“材料基因组计划”中用于计算、预测玻璃性能的不同建模方法,以及这些方法在激光玻璃及其他光功能玻璃领域应用的最新进展。如图 1 所示,本文将海量的计算与建模方法分为三类:1)直接从物理定律出发,根据物理定律推导的物理性方法;2)在实验数据的基础上归纳和总结规律,统计分析函数关系进而作出演绎预测的经验性方法;3)将经

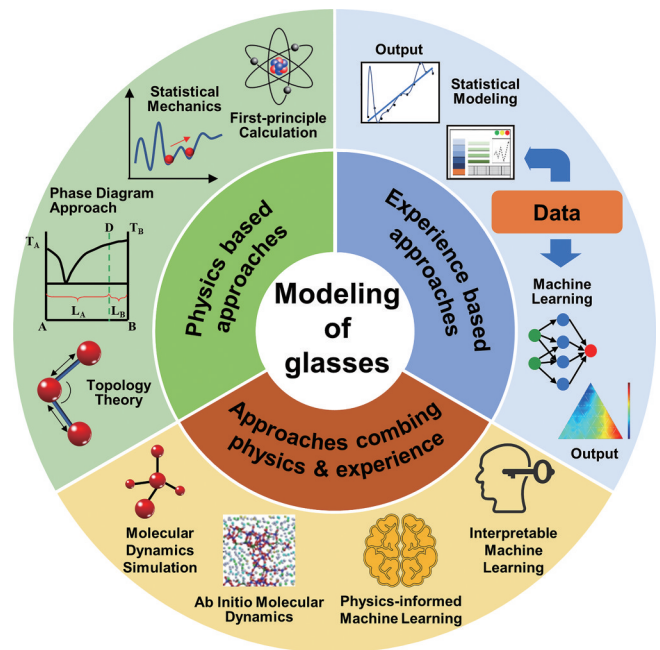


图 1 用于计算预测玻璃特性的不同建模方法,包括物理性方法^[48]、经验性方法^[81]和理论-经验结合法^[87]

Fig. 1 Different modeling approaches for calculating and predicting the property of glass, including physics based approaches^[48], experience based approaches^[81], and approaches combining physics and experience^[87]

验、数据与物理定律结合进行建模分析的理论-经验结合法。这三类方法将在第三部分进行介绍。第四部分综述了以上方法在激光玻璃及光功能玻璃领域应用的研究进展,并对其未来发展进行了展望。

2 玻璃的理论计算

为了预测玻璃性能,进一步扩宽现有玻璃性能的优化空间,实现玻璃性能设计的可定制性,需要充分理解玻璃材料中成分-结构-性能(C-S-P)之间的关系。但是,由于玻璃态的非晶态、非遍历性和非平衡性,玻璃结构一直是科学界的焦点问题,被视为最有挑战的物理问题之一^[30-31]。经典的玻璃结构理论主要有晶子学说和无规则网络学说。晶子学说由 Lebedev^[32]提出,该学说将石英玻璃的结构看成微晶子的聚集,用于解释石英玻璃在升温过程中折射率的突变。随着时间的推移,晶子学说经历一定的发展后,逐渐被另一种理论,即无规则网络学说所取代^[33]。无规则网络(CRN)学说最早由 Zachariassen^[34]提出,将玻璃的结构描述为短程有序、长程无序的网络结构,这一里程碑式的理论对后世产生了深远的影响^[35]。随着研究的不断深入,无规则网络学说也在进一步发展,Dietzel^[36]提出根据离子电子场强度的不同,将离子分为网络形成体、网络中间体和网络修饰体,解释了玻璃配位数对玻璃形成和物理性质的影响,而孙观汉则是从键强的不同来区分网络形成体、网络中间体和网络修饰体^[37]。Greaves^[38-39]根据X射线吸收精细结构谱(XAFS)观察到的轻碱金属离子聚集现象,修正了CRN模型,并提出了改进的无规则网络

模型(MRN)以及补偿的连续无规网络(CCRN)。随着人们对玻璃结构的理解逐步加深,多种用于计算玻璃的结构与特性、建立玻璃C-S-P关系的研究方法应运而生,这些计算方法将在下一部分进行介绍。

3 理论研究产生的计算模型

基于对玻璃C-S-P关系的理论推导、物理仿真或者大量的实验数据,发展出了多种建模方法以及由模型驱动的研究方法,根据其理论原理来源,这些方法大致可以分为三类:1)直接从物理定律出发,根据物理定律推导的物理性方法;2)在实验数据的基础上归纳和总结规律,统计分析函数关系进而作出演绎预测的经验性方法;3)将经验、数据与物理定律结合进行建模分析的理论-经验结合法。

3.1 物理性方法的理论与建模计算

新型激光玻璃材料的开发很大程度上取决于对材料特性的清晰认识,以及这些特性背后的科学原理,从材料特性背后的物理定律出发建模可以得到具有更好外推能力和更广泛适用性的模型。在这一小节中,我们选择了几种基于物理的建模计算方法,介绍它们的背景、原理及在玻璃领域的应用。作为一种非平衡材料,玻璃的性能不仅仅取决于成分和结构,还与其热历史有关。遍历性是一种统计特性,表示系统的时间平均与系统平均等价,具有遍历性的系统在实验尺度内会遍历所有可能的状态^[40],即“所有可能出现的状态均会出现”^[41]。如图2(a)中I所示,由于玻璃化转变过程中动力学的减速,玻璃态材料完全弛豫的时间远大

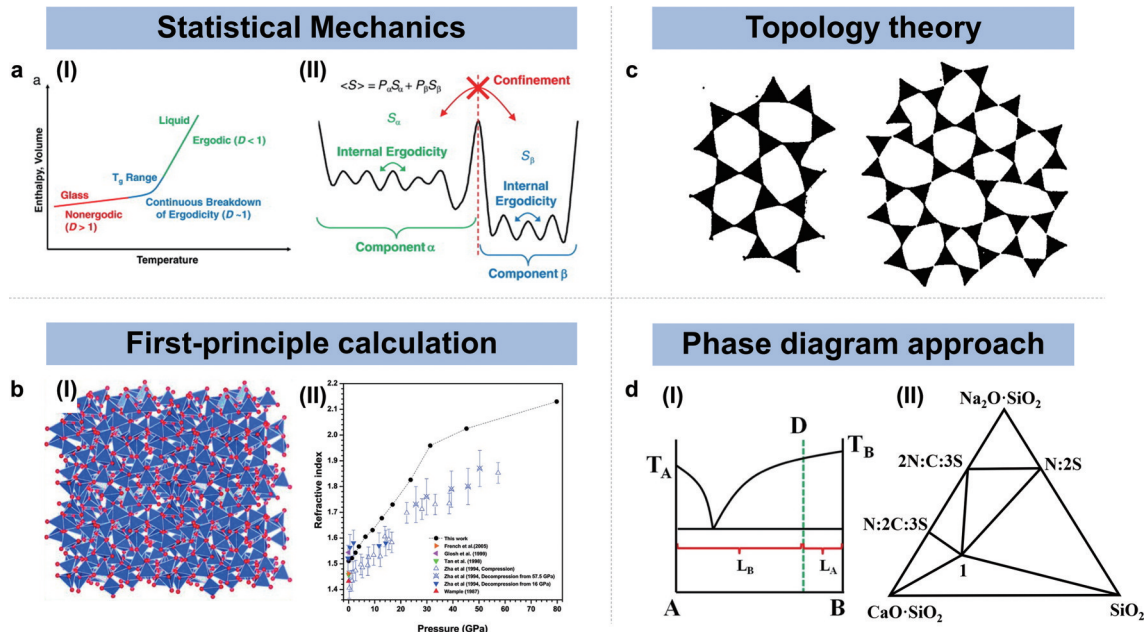


图2 基于物理的计算方法。(a)玻璃态的遍历破缺理论^[45];(b)SiO₂玻璃的CRN模型与第一性原理计算^[46];(c)由刚性三角形组成的一般拓扑有序网络和拓扑无序网络^[47];(d)玻璃结构的相图模型^[48-49]

Fig. 2 Physics based approaches. (a) Broken ergodicity theory of glassy state^[45]; (b) CRN model of SiO₂ glass and first-principle calculation^[46]; (c) genetic but topologically ordered and topologically disordered networks made of rigid triangles^[47]; (d) phase diagrams of glasses structure^[48-49]

于观察的尺度,系统丧失遍历性而呈现出遍历性破缺的状态^[42]。在遍历性破缺的状态下,系统的相空间划分为一组不相交的分量,每个分量内部仍具有遍历性,而不同分量之间的转变则极为缓慢^[43],如图 2(a)中 II 所示。为了描述这种状态,Mauro 等^[43]从统计力学出发,提出了连续破缺遍历性理论,解释了玻璃在不同微观状态间的实际跃迁速率并计算在跃迁过程中熵的损失,作为对玻璃进行建模的统计力学框架。基于遍历性破缺理论,Stevanović 等^[44]提出将玻璃系统描述为势能面上局部最小值附近的同种组分晶体构象的系综平均,而玻璃体系的径向分布函数(RDF)和 X 射线衍射(XRD)数据则由这些构象各自的 RDF 和 XRD 线性加和得到,分别用于描述玻璃的中/短程结构和长程结构。通过与实验数据以及模拟数据比较,证明这种理论很好地预测了玻璃系统的短程和长程结构,为计算玻璃的功能特性打开了大门。

在激光玻璃及光功能玻璃领域,常见的物理性方法是基于量子化学的第一性原理计算,该方法从描述微观粒子的薛定谔方程出发,计算过程几乎不依赖经验性的参数。然而多电子体系的粒子之间相互作用非常复杂,对薛定谔方程进行精确的数值求解是非常困难的,因此第一性原理计算发展出了多种用于简化计算的近似,这些近似方法大致分为两类:一类是 Hartree-Fock (HF) 近似,另一类是密度泛函理论(DFT)。HF 方法是将多电子体系的波函数转化为单电子体系进行求解,考虑某个电子的运动时,将其余电子的作用视为一个平均势。HF 方法需采用变分法求解,计算过程中考虑体系所有的原子核及电子,计算量很大,因此常以分子系统作为研究对象,对于原子数较少的系统来说,是一种方便的近似方法。DFT 方法则跳出了以电子波函数作为变量的框架,基于粒子密度能唯一地确定波函数的假设,以电子密度取代波函数研究体系的一系列特征,显著地降低了计算复杂度。在量子化学计算领域,在 1987 年以前的量子化学计算中 HF 方法占据主导,而从 1995 年至今,采用 DFT 的工作的数量已经远远超出用 HF 方法,而且 DFT 同分子动力学方法结合成为了计算材料领域的重要技术^[50]。在第一性原理计算中,基组是计算的基础,体系的波函数由基组展开,而 HF 和 DFT 对于基组有着截然不同的要求,对于不同的体系和计算任务需要慎重选择不同的基组。图 2(b)展示了利用第一性原理计算研究 α -SiO₂ 玻璃的过程, Li 等^[46]搭建了如图 2(b)中 I 所示的几乎不包含缺陷的 α -SiO₂ 玻璃 CRN 模型,并在 DFT 水平上计算了该模型在不同压力下的电子结构。通过一个包含未占据原子轨道的壳层的扩展基组,计算了 α -SiO₂ 玻璃的复介电函数并从中得到折射率,各压力下模型的折射率均与实验数据吻合良好,如图 2(b)中 II 所示,折射率随着压力的增加而平稳上升。

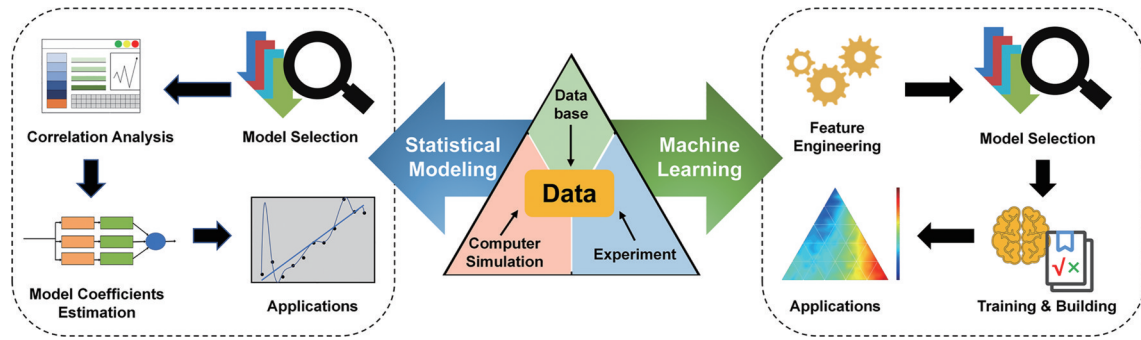
第一性原理计算着重关注玻璃的电子结构,而拓

扑理论则是从网络拓扑特性研究玻璃的结构与性质,是一种可用于研究玻璃网络结构的强大理论。玻璃拓扑无序网络存在的一般条件最开始由 Gupta 等^[51]推出,将 CRN 模型建立在严格的数学基础之上。CRN 模型理论认为氧化物形成玻璃有四个必备条件:1)一个氧离子与不超过两个阳离子连接;2)阳离子配位数尽量小;3)氧多面体共顶角相连;4)每个氧多面体至少有三个顶角为共有的。Gupta 等^[51]从拓扑的角度分析后认为,仅由前两个条件就足以形成玻璃网络结构,并从严格的数学基础推导出任意维度拓扑无序网络存在的网格自由度条件,为玻璃的拓扑理论奠定了基础。图 2(c)^[47]为一般拓扑有序网络和拓扑无序网络的示意图。当玻璃的成分与结构得到确定后,Phillips^[52-53]提出的拓扑约束理论(TCT),可以很好地将复杂无序的原子网络结构简化为简单网络,并用于揭示非晶材料宏观性质与组成、原子结构之间的关系。TCT 理论是一种粗粒化的理论,专注于控制玻璃态的关键物理基础,即键约束网络,通过将系统中原子自由度的数量与原子间力场约束的数量进行比较得到玻璃的形成趋势以及计算网络的刚性^[52-53],可以绕过传统建模方法的一些限制,是一种用于预测 C-S-P 关系的强大工具^[54-55]。

基于对玻璃结构理论的理解和分析,结合二元和三元玻璃体系的相图与结构表征结果,有科学家提出了另外一种新的玻璃结构模型,即玻璃结构的相图模型^[56-59]。该模型将玻璃视作相图中最近邻一致熔化合物混合熔体的产物,从相图的角度解释玻璃的结构,并在无须采用经验拟合公式的情况下应用相图原理计算和预测玻璃的形成区及其机械与光学等属性^[57-58]。图 2(d)中的 I 为一个最简单的二元相图模型^[48],具有一个低共熔点, A、B 两种化合物不发生反应。根据相图的杠杆原理,成分为 D 的玻璃的某种性质可以由 A、B 两种玻璃性质乘以其在 D 中的摩尔分数并加和得到。图 2(d)中的 II 为 Na₂O-CaO-SiO₂ 玻璃的一致化合物示意图。基于相图模型和一致化合物计算的 Na₂O-CaO-SiO₂ 玻璃密度与实测结果良好吻合^[49],证实了相图模型计算方法的适用性。

3.2 经验性方法的理论与建模计算

尽管基于物理模型可以对玻璃的属性进行很好的预测,提供可靠的成分-结构-性质关系,但如前文所述,玻璃的非晶态、非遍历性和非平衡性等特性使得玻璃具有高度的复杂性和无序性,因此对于某些特性,例如液相线温度、断裂韧性等的预测颇具挑战性^[19]。对于这些复杂的特性,结合实验数据的经验建模方法可以对物理建模方法起到补充。基于经验的建模方法往往从实验数据或者数据库数据出发,将玻璃的某一种特性表示为化学成分或者结构特征的函数,从而建立 C-S-P 关系模型,并基于此进行新型玻璃的设计与优化。如图 3 所示,基于以往的数据分析 C-S-P 关系的

图3 基于经验的计算方法^[60,81]Fig. 3 Experience-based approaches^[60,81]

方法可以大致分为统计建模方法和机器学习方法,前者侧重于对现有数据组之间的关系进行分析,而后者则在对未知属于的预测方面表现突出^[60]。最早用于计算和预测玻璃性能的统计模型是 Winkelmann 和

除了统计建模之外,近年来,受“材料基因组工程”的推动,依靠人工智能(AI)和机器学习(ML)来加速新材料研发、优化新型材料性能的方法开始逐步应用在玻璃领域^[62]。ML使用的算法可以分成监督式学习和无监督式学习:监督式学习使用包括特征值和目标值的数据集,并推断两者之间的函数关系,从而对数据集之外的数据做出预测,在玻璃科学领域常常使用这类算法;无监督式学习则是对无标签的数据(不区分特征值的目标值)进行聚类分析。除此之外还有半监督学习、半监督聚类算法,本文主要讨论的是监督式学习算法。使用监督式学习算法,由特征值和目标值组成的现有数据往往被随机区分成训练集和验证集,通过分析训练集数据,拟合算法模型中的参数,并依据验证集计算模型的准确率,最终得到预测模型。在基于经验的实际应用中,往往以玻璃材料的组分为特征值,而将需要优化的属性,例如杨氏模量、剪切模量、热膨胀系数、折射率、阿贝数、玻璃化转变温度等作为目标值,得到的预测模型可以预测现有数据集之外组分的相关属性^[63-65]。另一方面,不同于统计建模对于目标值与特征值之间函数关系的分析,ML预测则是属于“黑盒方法”,即虽然可以给出可靠的预测结果,但其中的原理难以解释,在一些复杂算法(例如人工神经网络)中,算法的开发者也无法得知在训练过程中发生了什么^[19,66-68]。

无论是统计建模方法还是机器学习方法,数据集的质量很大程度上决定了其结果的可靠性^[61,66,69],公开、高质量的材料信息数据库以及数据管理平台更是美国 MGI 计划中材料创新平台的三大组成之一^[70]。早在几十年前,欧美便开始了建立材料数据库的部署,国外著名的数据库包括由美国国家标准与技术研究院维护的无机晶体结构数据库(ICSD)、加州伯克利大学劳伦斯实验室、麻省理工学院建立的基于理论计算的 Materials Project 数据库^[71-72]。我国在这方面的建设起

Schott 提出的多元回归模型^[61],该模型假设玻璃的成分与某种特定的性质是线性相关的。图3的左侧部分说明了统计建模方法的大致步骤,包括模型选择、相关性分析、模型参数评估和模型应用。

步较晚,目前可用的材料数据库包括中国科学院数据科学中心^[73]、材料学科领域基础科学数据库等^[74],且目前普遍面临着数量不足、质量评价机制有待完善、获取程度复杂、产权问题严峻等一系列问题^[75],与发达国家的数据库建设水平存在着较大的差距。针对这些现存的问题,应当首先加大材料信息收集力度,制定详细的材料数据库行业标准,建立知识产权保障体系,一步步缩小与发达国家之间的差距。对于玻璃科学领域,实验数据往往集中于特定的组分区域,而且由于热历史不同以及测量方法存在差异,不同课题组得到的结果也不尽相同,难以保证数据的一致性、连续性和可靠性。对玻璃的组分和性能数据建立数据库的尝试最早可以追溯到1932年出版的 *Glass Technical Tables*^[76],1956年出版了包含一系列相图的 *Phase Diagrams for Ceramists*^[77],后来成为研究玻璃常用的 Phase Equilibria Diagrams 数据库^[78]。此外,玻璃数据库还有分别始于1991年和1993年的 Interglad 数据库和 SciGlass^[79-80]。这些数据库的建立为研究人员整理数据带来了巨大便利,但另一方面,这些数据库信息汇编自文献数据或者基于组分氧化物特点的简单估算,其中包含许多异常值,而且对于许多属性来说存在条目重复或者不完整的问题^[63],在应用这些数据库之前应当进行细致的数据清洗。作为得到数据集的另一种手段,高通量分子动力学模拟为建立大型、一致和准确的玻璃性能数据集提供了方便和可靠的途径。例如,在 Yang 等^[81]的工作中,通过高通量分子动力学模拟得到组分跨度均匀的231个 CaO-Al₂O₃-SiO₂玻璃组分的密度和杨氏模量,随后以组分为特征值、密度和杨氏模量为目标值,应用三种监督式 ML 算法进行预测并讨论了每种算法的准确性、复杂度以及可解释性,预测值与实验值的良好吻合证实了高通量模拟数据作为 ML 数据集的可行性。

3.3 理论与经验结合的计算方法

基于经验的建模方法对真实实验环境下材料的属性可以进行很好的预测,但外推性和可解释性往往较差,通常只在特定的体系内适用;基于物理的建模方法可以得到更好的外推能力和更广泛的适用性,但由于对玻璃结构与性质的理解始终不够透彻而采用了许多近似与简化,常常难以满足复杂的应用需求。综合经验建模方法与物理建模方法,则可以产生强大的材料科学研究模型,组合不同的建模方法,对材料的特定属性得到更全面的了解^[82-83]。近些年来,利用分子动力学(MD)方法对玻璃进行原子尺度建模和计算机模拟取得了巨大的成功,大部分玻璃的模拟研究都是在MD的基础上实现的^[84]。MD是一种按照体系内部的内禀动力学规律计算原子的坐标与动量,确定体系结构变化的热力学计算方法^[50]。由于玻璃结构是一种拓扑无序的原子网络,缺乏类似晶体结构的长程有序性,玻璃的结构适合用统计量来描述,例如对分布函数(PDF)和RDF^[45]。MD模拟给出了玻璃结构中每个原子的坐标信息,从中可以方便地计算出

PDF和RDF,MD模拟在玻璃研究的很多方面都取得了重要进展,在理解玻璃的结构和结构-性质关系方面发挥着越来越重要的作用。基于MD模拟,系统的宏观特性,如压力、能量等可以通过统计力学原理计算得到,而玻璃的中程、近程结构则通常由概率分布函数表示^[84-86]。图4(a)为Chen等^[87]利用MD方法研究了Tb³⁺掺杂氟铝硅酸盐相分过程。如图4(a)中的I所示,由黑线圈出的氟化物聚集区域分散在硅铝酸盐玻璃相中,作为析出氟化物纳米晶的起始阶段。MD模拟的结果也可以为物理模型提供支持,当物理模型所研究的玻璃属性的相关结构特征无法从实验中直接观察到时,MD可以提供相关结构的数值表示(例如,用于验证玻璃网络结构的拓扑约束理论^[54],用于验证玻璃态固体作为晶体微态的统计系综理论^[44]),这种方法被称为定量结构-性质关系(QSPR)分析^[88-90]。随着算法计算效率的提高和计算能力的不断提升,利用MD技术可以对更大的系统尺寸、更慢的冷却速度和更复杂的玻璃成分进行建模,成为工业研究和开发的重要工具^[91]。

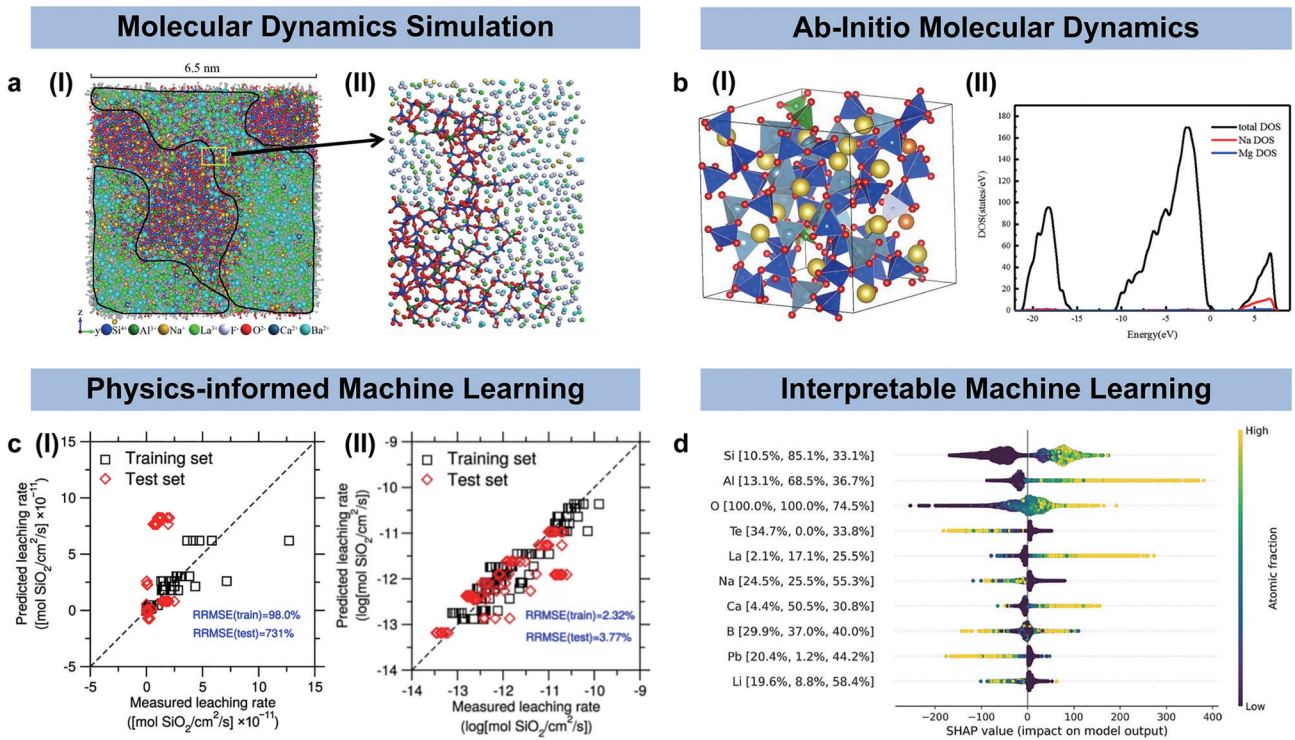


图4 理论与经验结合的计算方法。(a)MD研究Tb³⁺掺杂氟铝硅酸盐玻璃的相分过程^[87]; (b)AIMD方法研究硼铝硅酸盐的结构和电子特性^[92]; (c)使用引入玻璃网络拓扑特征的机器学习预测硅酸盐玻璃的溶解动力学^[93]; (d)利用SHAP框架解释ML预测模型^[94]

Fig. 4 Approaches combining physics and experience. (a) Phase separation of Tb³⁺ doped fluoroaluminosilicate glass using MD simulation^[87]; (b) structural and electronic properties of aluminoborosilicate glass using AIMD^[92]; (c) dissolution kinetics of silicate glasses by topology-informed machine learning^[93]; (d) ML prediction model by SHAP framework^[94]

MD模拟的一个关键要素是描述原子间相互作用的势函数。随着理论的发展,势函数的范围从简单的两体间的对势(如Lennard-Jones 6-12势、包含三个参数的Buckingham势)到复杂的用于描述不同玻璃的多

体Mayer-Huggins势^[84-85],这些势能函数中的参数通常来自量子化学的计算以及对经验数据的拟合。传统的MD方法过于依赖经验势,而构造的势函数无法精确考虑电子的量子效应,当模拟过程中电子状态发生变

化时,势函数则不能正确地描述原子间相互作用^[50]。另一方面,在一些复杂的体系中,特别是对于那些结构复杂、涉及不同组成原子种类的玻璃,获得可以准确描述原子相互作用的势函数难度极大。对于这些复杂系统来说,MD 模拟需要对原子间的化学键进行更真实的量子化学建模,基于 DFT 的从头算分子动力学(AIMD)在这类复杂系统中是更有利的工具^[95]。在玻璃建模中使用 AIMD 的一个显著优势是避免了经典 MD 中使用的经验势函数,并且能够研究涉及断裂或形成共价键的反应。AIMD 通常会大量经验方法无法提供的信息,例如电子态密度^[84]。但是,由于需要在模拟过程中对电子自由度进行量子力学计算,AIMD 的计算量远大于经典的 MD 方法,通常只能对 1000 个原子以内的体系进行计算。图 4(b)为利用 AIMD 研究硼铝硅酸盐玻璃的结构和电子特性^[92]。如图 4(b)中的 I 所示,计算模型为包含 220 个原子的硼铝硅酸盐玻璃,图 4(b)中的 II 则是对模型进行 AIMD 计算后玻璃的总电子态密度,表明 Na 原子和 Mg 原子对总电子态密度的价带没有贡献,但仍然以电荷转移的方式与玻璃形成体之间存在着相互作用。

ML 技术为新型玻璃材料的设计与优化提供了独特的、强大的方法,但这一过程在很大程度上仍是基于以往的经验。而与物理性方法相结合,开发基于物理的机器学习模型,可以使 ML 方法在较小量的数据中使用简单的算法作出准确预测,并且具有更好的可外推性^[19]。图 4(c)展示了当机器学习与玻璃网络拓扑特征结合时,对硅酸盐玻璃溶解动力学(浸出率)的预测准确率得到显著提升^[93]。当引入拓扑特征作为特征值时,机器学习预测模型的相对均方根误差从仅仅以玻璃的组分为特征值时的 731% 降低到了 3.77%。另外,随着 2017 年 SHAP (SHapley Additive exPlanations) 框架的开发与应用^[96],原本为“黑盒”的传统 ML 模型具备了一定的可解释性,开发可解释型机器学习模型可以使研究人员了解模型中每个特征值对目标值的贡献程度。Zaki 等^[64]针对玻璃的折射率和阿贝数开发了可以准确预测属性的 FFNN 模型,通过 SHAP 值计算每种氧化物对折射率和阿贝数的贡献程度,并对 ML 的结果进行了详细的解释,图 4(d)为利用 SHAP 框架解释机器学习预测模型^[94],展示了 10 种对氧化物玻璃的玻璃化转变温度影响最大的元素,玻璃化转变温度随着 Si、Al、La、Ca 浓度的增加而上升,而 Te、Na、Pb、Li 则会降低玻璃化转变温度。

4 “材料基因工程”在激光玻璃及光功能玻璃领域的应用

基于“材料基因工程”的物理性方法、经验性方法和理论-经验结合大大加深了我们对 C-S-P 关系的理解,为对玻璃性能的优化与预测提供了广阔的理论平台,为激光玻璃及光功能玻璃的设计与制备开启了

全新的大门。目前商业化的激光玻璃包括两类,一类是以石英玻璃为主体的稀土掺杂光纤,另一类是磷酸盐激光玻璃。此外,锆酸盐玻璃、硼化物玻璃等其他种类激光玻璃的特性也得到了研究人员的关注。在这一节,我们将结合这些激光玻璃的研究工作,阐述玻璃基因工程在激光玻璃领域的应用进展。前文所介绍的物理性方法中,在激光玻璃领域拓扑理论和玻璃相图模型应用得较多。基于拓扑理论,Zhou 等^[97-98]通过调控 Bi 离子周围的拓扑结构而改变其化学状态,实现了光学性能定向设计与优化[图 5(a)]。在相关工作中,—B—O—和—Si—O—两种玻璃结构单元由于具有类似的键能($B_{[B-O]}=497 \text{ kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$, $B_{[Si-O]}=443 \text{ kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$)和完全不同的拓扑组织方式(—B—O—为 BO_3 三角形/ BO_4 四面体,—Si—O—为 SiO_4 四面体),因此用于代表不同的拓扑结构。如图 5(a)中的 I 所示,MD 模拟表明随着玻璃中结构单元的不同,Bi 原子(在图中表示为红色圆球)所处的拓扑结构发生了从准二维(2D)到三维(3D)的显著转变,使得分离离子时的静电结合能和掺杂剂转移的应变能增大,从而导致势垒增高,如图 5(a)中的 II 所示。通过调整拓扑结构,他们在 Bi 掺杂玻璃中实现了显著的发射增强和超宽带光学放大。物理性方法的拓扑理论在新型激光玻璃的研究和开发中还取得了其他一些重要成果。对于石英玻璃光纤的传输损耗问题,一般的研究思路通过降低石英玻璃的假想温度来减少密度波动,从而降低瑞利散射,通常的处理方式包括降低冷却速率、改进退火工艺以及掺杂碱金属氧化物,前两者往往导致生产成本的增加,而成分的增加也会带来化学成分波动,导致传输损耗^[99]。应用玻璃网络结构的拓扑修建机制,Yang 等^[99]对石英玻璃在不同压力下淬冷的过程进行模拟研究,并计算了瑞利散射的变化,证明拓扑优化的结构可以带来理想的光学性能,减少玻璃光纤中的光传输损耗。而在 Cao 等^[98]的工作中,通过玻璃的组分控制桥氧与非桥氧的数量,调整玻璃网络的拓扑结构,有效减少了高 Er^{3+} 掺杂浓度下的荧光猝灭,并为其他稀土离子的高掺杂玻璃提供有用的指导。除了拓扑理论,相图模型理论也常用于激光玻璃的物理性质、发光性质以及玻璃形成区的计算。图 5(b)则展示了玻璃结构的相图模型是如何应用于激光玻璃的设计与研发的。基于相图模型的原理,稀土离子掺杂玻璃的特性可由相图中邻近的一致熔融玻璃态化合物计算得到。图 5(b)中 I 为 Qian 等^[100]计算 Tm^{3+} 掺杂 BaO-GeO_2 玻璃时应用的相图,基于此相图计算不同组分玻璃的折射率,计算值与实验值展现的变化趋势吻合良好,如图 5(b)中 II 所示,而对于 ${}^3\text{F}_4 \rightarrow {}^3\text{H}_6$ 跃迁的发光特性,包括有效线宽、半峰全宽、吸收截面和发射截面的计算值和实验值相对误差都在 10% 以内。类似地,对于 Tm^{3+} 掺杂的锆酸盐激光玻璃体系,其玻璃形成区、密度和折射率等物理性质,以及半峰全宽、有效线宽、吸收截面和发射

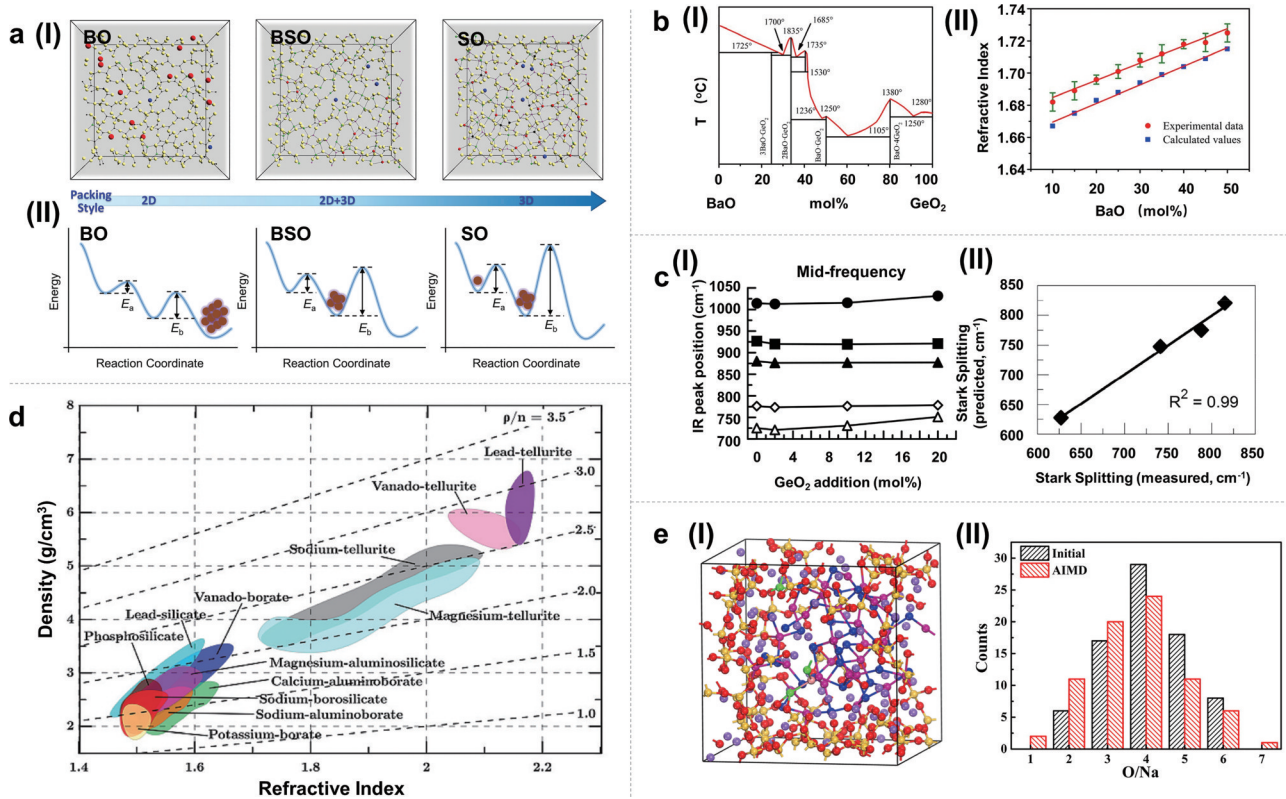


图 5 实验结果。(a)三种不同的拓扑结构对Bi掺杂激光玻璃发光性能的影响^[97]；(b)使用相图方法计算Tm³⁺掺杂BaO-GeO₂玻璃的特性^[100]；(c)不同浓度GeO₂的Yb³⁺掺杂磷酸盐激光玻璃的发光特性与其结构单元关系的统计建模^[104]；(d)基于ML模型开发的玻璃特性设计图表^[63]；(e)AIMD对CdSe量子点玻璃界面的重构过程^[105]

Fig. 5 Experimental results. (a) Effects of three different topological structure on luminescence properties of Bi doped laser glass^[97]; (b) calculation of properties of Tm³⁺ doped BaO-GeO₂ using phase diagram approach^[100]; (c) statistical modeling of the relationship between luminescence properties and structural units of Yb³⁺-doped phosphate laser glass with different concentrations of GeO₂^[104]; (d) glass selection charts based on ML model^[63]; (e) reconstruction process of CdSe quantum dot-glass interface by AIMD^[105]

截面等发光性质也可以准确地由相图中邻近的一致熔融玻璃态化合物的结构基因计算得到^[100],这些工作为低成本、高效率的新型掺铊锆酸盐激光玻璃的研发提供了一种有效的方法。另外,对于铊掺杂石英光纤的光暗化效应,有学者提出了使用DFT方法进行研究的思路。铊掺杂石英光纤是大功率石英光纤激光器的理想放大介质,但高浓度掺铊光纤的光暗化现象会导致其激光阈值增加及输出功率减小,成为掺铊光纤激光器发展的阻碍之一^[101-102]。从实验的角度,人们对石英光纤进行了广泛且深入的研究,而Sun等^[103]从Yb³⁺离子的微观结构出发,使用DFT方法研究了掺铊石英光纤中环结构对Yb³⁺光吸收的影响。在相关工作中,研究人员使用分子动力学模拟的方法建立石英玻璃的结构模型并表征其中的环尺寸分布,并利用DFT计算了Yb的电子密度分布、电子结构和光学吸收特性,一系列计算结果表明,石英玻璃中的六元环结构具有最低的形成能,为Yb离子可能存在的位点,Yb离子在其中的价态为+3.02,且模型在974.5 nm处的光学吸收峰为六元环中Yb离子 $4f^{13}-4f^{13}$ 跃迁引起的^[103]。这些工作加深了人们对于与光暗化效应相关的Yb离子

周围微观结构的认识,为新型光纤激光器增益材料的开发与优化提供了一定的理论基础。

利用实验数据或者现有数据库,对玻璃的C-S-P关系进行统计建模分析或者机器学习分析的经验性方法也常常用于激光玻璃的性质计算与预测以及组分设计优化。Yb³⁺掺杂激光玻璃是一类重要的激光器增益材料,然而Yb³⁺掺杂磷酸盐玻璃²F_{7/2}的窄Stark分裂会导致严重的热阻塞效应^[106]。通过修饰磷酸盐玻璃网络结构,例如引入网络形成体SiO₂、GeO₂等,这些具有高场强的阳离子可以与P-O竞争电子,并导致Yb³⁺的亚能级分裂,从而增大Stark分裂^[107]。对于Yb³⁺掺杂磷酸盐激光玻璃的基因设计,Zhang等^[104]研究了引入不同浓度GeO₂时的荧光寿命、有效线宽、Stark分裂等发光特性与其结构单元的关系。如图5(c)中I所示,当引入不同浓度的GeO₂时,由红外光谱表征的玻璃结构发生变化(图中为中频区的结果,低频和高频区也有类似的表征结果)。以红外光谱中不同峰位所表示的结构基团为“玻璃基因”,通过F值分析法筛选出对玻璃的Stark分裂、有效线宽和荧光寿命有着显著影响的红外峰位,建立多元线性回归模型分析每种特性与各

个峰的函数关系,得到 C-S-P 模型。如图 5(c) 中 II 所示,该模型很好地预测了 Stark 分裂。作为比较,研究人员还用拉曼光谱的峰位表征玻璃的结构基团并用同样的方法建立模型,得到了类似的预测结果。这样的预测模型应用于设计或者筛选新型玻璃材料时,可以大大缩短材料的研发成本与周期,比如在 Yan 等^[108]的研究工作中,通过测定不同 GeO₂ 添加量的 Yb³⁺ 掺杂磷酸盐玻璃的结构演变与结构-性能关系,提出了具有更佳化学稳定性、Stark 分裂和光谱特性的掺镱磷钨酸盐玻璃的组分范围。Zhang 等^[109]还研究了碱土二元磷酸盐玻璃的结构中 Qⁿ 的分布与组分的统计关系,以建立碱土金属氧化物含量与磷酸盐玻璃的结构与性质的关系模型。在磷酸盐玻璃中, Qⁿ 表示具有 n 个桥氧的 PO₄ 四面体单元,磷酸盐玻璃的网络结构基本由不同 n 值的 Qⁿ 组成,其分布可以由核磁共振技术进行精确表征。结合 RO-P₂O₅ (R=Mg, Ca, Sr, Ba) 玻璃的组分、Qⁿ 分布以及性质(弹性模量、玻璃化转变温度)的数据进行统计建模,研究人员建立了碱土磷酸盐玻璃的 C-S-P 模型,并用于预测 MgO-CaO-P₂O₅ 玻璃的性能,证明了玻璃成分、结构和性能之间的密切统计关系。这种基于玻璃结构基团的 C-S-P 研究称为“玻璃结构基因建模(GSgM)”^[110]。同样应用统计学建模的方法, Liu 等^[111]系统研究了钽掺杂磷酸盐激光玻璃的 C-S-P 模型,用于对玻璃化转变温度、热膨胀系数、非线性折射率和有效线宽的分析与预测。Liu 等选择组分中 Li₂O 和 Na₂O 的含量作为影响激光玻璃性质的基因研究钽掺杂磷酸盐激光玻璃的 C-S-P 关系模型,并从性能出发,遵循“P→S→C”的路径结合 GSgM 设计激光玻璃的组分,验证了模型的准确性和可靠性。作为一种强大的研究工具,ML 同样在激光玻璃的设计、优化和性质预测中发挥了重要的作用,特别是对激光玻璃应用过程中需要考虑的密度、折射率、玻璃化转变温度、机械磨损等性质。图 5(d) 为根据所需要的密度和折射率筛选氧化物玻璃组分的设计图表^[63], Ravinder 等通过对 SciGlass 和 Interglad 数据库中 37 种氧化物超过 10 万种玻璃组分建立和训练了前馈神经网络模型(FFNN),并基于此预测模型开发了可供所有科研人员根据需要的特性选择玻璃组分的软件 PyGGi。针对氧化物玻璃的折射率与色散, Tokuda 等^[112]使用来自 Interglad 的数据训练统计回归模型准确预测了实验结果,这些工作展示了如何使用统计回归来指导具有特定光学特征的新型玻璃材料的设计。而 Cassar 等^[65]通过神经网络算法和遗传算法结合的方法,建立预测模型并用于寻找具有高折射率和低玻璃化转变温度的玻璃组分,为机器学习引导的新型激光玻璃设计铺平了道路。ML 在固体材料的磨损行为研究中发挥着强大的作用,例如刀具磨损稳定阶段的预测^[113], 钢表面铁合金涂层的磨损量的预测等^[114]。对于激光玻璃,如固体激光器中常用的硼硅酸盐玻璃和磷酸盐玻璃, Qiao

等^[115]使用文献中的磨损数据作为数据集,采用包括线性回归、支持向量机回归、高斯过程回归、k-最近邻和人工神经网络等多种监督式 ML 算法进行预测,对两种玻璃机械力化学磨损的预测精度(R^2)达到 0.997 和 0.995。

对于一些复杂的 C-S-P 关系,有时物理性方法和经验性方法发挥的作用十分有限,而理论-经验结合法在这些情况下会更加适用。例如,对于稀土掺杂激光玻璃,其浓度猝灭现象与相分离密切相关^[116],分相引起的聚集导致稀土离子之间发生能量传递,使得激发态离子发生非辐射弛豫并返回基态。因此,描述这种具有相分离的玻璃系统的结构,对于激光玻璃的结构设计有很大的帮助。通过二次离子质谱和原子探针断层扫描测量等先进的实验表征手段可以确定分相的主要化学成分,但由于分相往往为纳米尺度而且掺杂的稀土离子浓度极低,很难从实验中获得详细的结构特性^[117],应用 MD 进行玻璃结构的数值模拟,可以获取实验难以得到的信息,例如稀土局部环境和配位数等,从而进一步了解分相结构,帮助设计激光玻璃的性能。对于 La 掺杂硅酸盐玻璃的分相现象, Park 等^[118-120]基于 MD 模拟研究了 La 在硅酸盐玻璃中的结构作用,聚集过程和聚集的驱动力。在研究 La 的结构作用时,研究人员计算了玻璃中的 La 的平均配位与平均键长,证明了 La 在玻璃中充当网络修饰体降低玻璃的连通性并与 Na 争夺非桥氧原子^[118]。随后通过玻璃成型和退火模拟,发现玻璃网络结构在 La 周围形成空腔,且空腔的相互聚集导致 La 离子发生聚集^[119],而且液体理论分析表明空腔聚集机制是钠硅酸盐玻璃中 La 离子聚集的驱动力^[120]。此外,由于钕掺杂光纤放大器给光纤通信带来了革命性变化,其中的钕掺杂玻璃的结构与性质受到了科研人员的广泛关注,许多研究工作借助了 MD 方法进行模拟研究来了解这些玻璃的结构。在这类应用中,玻璃基质通常为石英玻璃,其中 Er³⁺ 的溶解度有限,且由于 Er³⁺ 具有复杂的能级结构,各能级之间容易发生交叉弛豫以及激发态吸收,往往容易发生浓度猝灭^[121]。Du 等^[122]通过 MD 模拟掺钕石英玻璃发现,随着浓度的增加, Er³⁺ 离子的平均氧配位上升,聚簇 Er³⁺ 离子之间共享非桥氧。为了调节钕聚簇效应,通常会在掺钕石英玻璃中共掺氧化磷和氧化铝,这些共掺离子由于聚集在 Er³⁺ 离子周围而产生屏蔽效应,从而避免了钕离子的聚簇^[123],这一点在 Hoppe^[124]建立的稀土磷酸盐玻璃模型中得到了验证: Er³⁺ 离子和 Yb³⁺ 离子平均非桥氧配位数为 6.5,在模型中仅有少量稀土离子聚簇。Mountjoy 等^[125]使用分子动力学模拟研究了 (R₂O₃)_x (P₂O₅)_{1-x} 玻璃体系并将数据与实验对比,则证明了稀土离子的配位数总体上随着离子半径的减小而减小。另外,由于 Yb³⁺ 与 Er³⁺ 能级差匹配,两者之间可以发生能量传递,且磷酸盐中 Yb³⁺ 的 Stark 分裂不足,下能级寿命长^[106],有利于增加 Yb 到

Er 的能量传递,从而提高对泵浦光的吸收效率^[121,126],因此 Yb、Er 共掺的石英光纤中通常会掺入大量的磷^[121]。如前文所述,MD 模拟的可行性和准确性往往基于相互作用势的可靠性,而且由于采用了许多粗粒化的处理方法,计算精度有时难以满足研究的需求。例如,对于量子点掺杂玻璃界面缺陷的研究有助于了解其发光量子产率过低的原因^[105],实验研究由于受到分辨率的限制而难以对界面结构进行表征,MD 模拟则缺少合适的相互作用势,因此 Li 等^[105]利用 AIMD 方法对 CdSn 掺杂量子点玻璃的界面重构现象进行了研究。如图 5(e)中 I 所示,量子点玻璃的复合模型由 Na₂O-SiO₂ 玻璃基质和 CdSe 量子点模型拼接而成,其中玻璃基质由经典 MD 模拟得到,复合模型经过经典 MD 模拟进行弛豫后,使用 AIMD 方法模拟其淬火过程。图 5(e)中 II 展示了经过 AIMD 模拟前后 Na—O 原子对配位数的变化情况,证实在淬火过程中量子点/玻璃界面发生了显著的原子重排。进一步的结构分析揭示了玻璃基体对 CdSe 量子点的影响,并表明通过调整 Na 的含量可以减少量子点中不良的缺陷态发射,从而为玻璃基体成分的调整和高性能 CdSe 量子点掺杂玻璃的制造提供了指导。

5 结束语

本文从“材料基因工程”出发,围绕激光玻璃及光功能玻璃材料,首先阐述了玻璃理论研究的发展,然后根据现有计算模型的不同理论原理,将其归纳并总结为三种方法,即物理性方法、经验性方法及理论-经验结合法。在物理性方法中,本文重点介绍了第一性原

理计算、统计力学计算、拓扑理论和玻璃结构的相图模型。在经验性方法中,综述了统计建模方法和机器学习法。在理论-经验结合法中,则包含了基于物理的机器学习、可解释的机器学习、分子动力学模拟和从头算分子动力学模拟。目前,在激光玻璃与光功能玻璃领域,基于上述三种方法的“材料基因工程”为新型玻璃材料的设计与制备提供了广阔的理论平台,有利于进一步优化玻璃性能,为定制性设计特种光功能玻璃开启了新的大门。

随着材料基因组计划在玻璃科学中的研究发展,利用模型驱动的研究方法对新型激光玻璃进行设计优化,有望极大地缩短新型玻璃材料的研发周期,降低研发成本,避免试错性的研究。玻璃态的复杂性以及激光玻璃的光学特性与组分、结构之间复杂的函数关系给传统研究方法造成了巨大困难,随着高性能计算(HPC)在材料科学界的应用发展和对“材料基因工程”概念的深入研究,这些困难有望被材料基因概念下各种模型驱动的研究方法所克服,科学研究向数据密集型的“科研第四范式”发展的步伐愈发加快^[127-128],如图 6 所示。在现代科学中,“范式”的概念由 Kuhn^[129]率先提出,描述了在一个历史时期构成一门科学学科的基本概念的总和。Agrawal 等^[130]总结了随着人们的认知和技术的进步,科研范式的发展由实验总结型研究、理论描述研究和近现代发展起来的计算机模拟研究,并提出现代科学已经发展至第四范式,即“数据密集型研究”,科研活动围绕数据展开。为了实现这样的目标,需要玻璃科学的研究与固体物理、统计力学以及数据科学的融合,推进各种理论计算与仿真模拟在玻璃

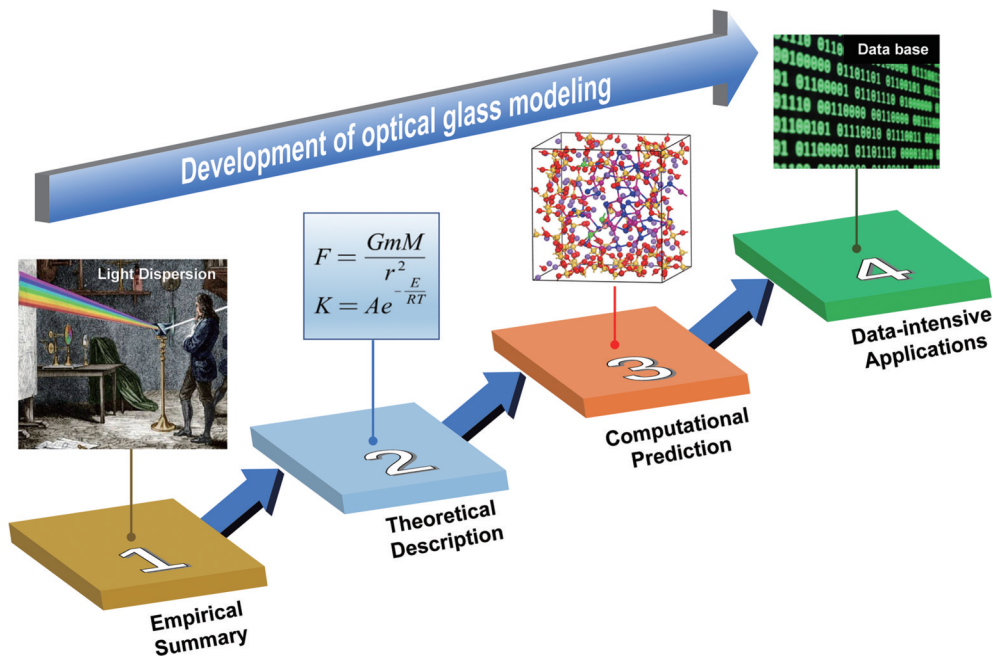


图 6 光学玻璃建模的发展,包括实验总结型研究、理论描述研究、计算机模拟研究^[105]和数据密集型研究

Fig. 6 Development of optical glass modeling, including empirical summary, theoretical description, computational prediction^[105], and data-intensive applications

科学界的发展。

尽管我们已经有了许多可以准确预测玻璃性能、一定程度上实现玻璃组分设计的模型,但模型自身的局限性和激光玻璃的光学特性与组分复杂的函数关系往往限制了其在工业生产中的应用^[131]。基于计算机模拟的方法往往受到算力的限制,如在使用 HF 或者 DFT 等第一性原理计算方法时,由于周期性边界条件的使用,模型必须足够大以包含玻璃的长程无序性,这就要求算法具备强大的算力,而且第一性原理计算对于一些温度依赖的属性以及长程结构缺陷也无能为力^[84]。传统分子动力学模拟在玻璃模拟领域占据了几十年的主导地位,但目前仍缺少具有普适性、可以准确描述玻璃结构原子间复杂的离子性、共价性相互作用的势函数,而且由于采用粗粒化的近似方法,MD 也难以对玻璃的光学性质进行模拟预测。机器学习方法可以有针对性地预测不同玻璃的结构和性能,但其依赖大量的实验数据或者模拟数据,预测的准确性很大程度上取决于数据的准确性和一致性。基于玻璃微观拓扑结构的 TCT 已经成功应用于多种体系的玻璃性能计算与预测,但该理论仍处于起步阶段,而且由于只关注拓扑结构而忽略不同元素、键性的区别,计算结果比较模糊^[58]。玻璃结构的相图模型将玻璃视为相图中邻近一致熔融化合物的混合物,成功预测了玻璃的密度、折射率等特性,但预测的准确性受相图误差的影响,而且对于玻璃的热光系数、应力光系数等性质还需要优化改进。要想摆脱传统的基于经验与直觉的“试错型”研究,玻璃基因工程概念在应用的过程会遇到很多重大挑战,包括克服当前模型的局限性、适当的数据管理以及持续开发具有可外推性的新模型。

参 考 文 献

- [1] Arbab M, Finley J J. Glass in architecture[J]. *International Journal of Applied Glass Science*, 2010, 1(1): 118-129.
- [2] Hench L L. The story of bioglass[J]. *Journal of Materials Science: Materials in Medicine*, 2006, 17(11): 967-978.
- [3] Dymshits O, Shepilov M, Zhilin A. Transparent glass-ceramics for optical applications[J]. *MRS Bulletin*, 2017, 42(3): 200-205.
- [4] Bolt M. Glass: the eye of science[J]. *International Journal of Applied Glass Science*, 2017, 8(1): 4-22.
- [5] 王伟, 古权, 陈钦鹏, 等. 中红外宽带荧光 PbSe 量子点掺杂玻璃光纤研究[J]. *中国激光*, 2022, 49(1): 0101013. Wang W, Gu Q, Chen Q P, et al. Investigation of PbSe quantum dot-doped glass fibers with broadband mid-infrared emission[J]. *Chinese Journal of Lasers*, 2022, 49(1): 0101013.
- [6] Morse D L, Evenson J W. Welcome to the glass age[J]. *International Journal of Applied Glass Science*, 2016, 7(4): 409-412.
- [7] 徐昌骏, 张集权, 刘墨, 等. 基于钛掺杂 ZBYA 玻璃光纤的中红外激光研究[J]. *中国激光*, 2022, 49(1): 0101016.
- [8] Xu C J, Zhang J Q, Liu M, et al. Midinfrared laser in Ho³⁺-doped ZBYA glass fiber[J]. *Chinese Journal of Lasers*, 2022, 49(1): 0101016.
- [9] 张豪, 郭海涛, 许彦涛, 等. 用于红外激光传输的硫系玻璃光纤研究进展[J]. *中国激光*, 2022, 49(1): 0101007. Zhang H, Guo H T, Xu Y T, et al. Research progress in chalcogenide glass fibers for infrared laser delivery[J]. *Chinese Journal of Lasers*, 2022, 49(1): 0101007.
- [10] 姜中宏, 杨中民. 中国激光玻璃研究进展(邀请论文)[J]. *中国激光*, 2010, 37(9): 2198-2201. Jiang Z H, Yang Z M. Progress on research and development of laser glass in China(invited paper)[J]. *Chinese Journal of Lasers*, 2010, 37(9): 2198-2201.
- [11] Naseer K A, Marimuthu K. The impact of Er/Yb co-doping on the spectroscopic performance of bismuth borophosphate glasses for photonic applications[J]. *Vacuum*, 2021, 183: 109788.
- [12] Shang M M, Li C X, Lin J. How to produce white light in a single-phase host? [J]. *Chemical Society Reviews*, 2014, 43(5): 1372-1386.
- [13] El-Maaref A A, Badr S, Shaaban K S, et al. Optical properties and radiative rates of Nd³⁺ doped zinc-sodium phosphate glasses[J]. *Journal of Rare Earths*, 2019, 37(3): 253-259.
- [14] Djamal M, Yuliantini L, Hidayat R, et al. Spectroscopic study of Nd³⁺ ion-doped Zn-Al-Ba borate glasses for NIR emitting device applications[J]. *Optical Materials*, 2020, 107: 110018.
- [15] Zylstra A B, Hurricane O A, Callahan D A, et al. Burning plasma achieved in inertial fusion[J]. *Nature*, 2022, 601(7894): 542-548.
- [16] Mauro J C, Allan D C, Potuzak M. Nonequilibrium viscosity of glass[J]. *Physical Review B*, 2009, 80(9): 094204.
- [17] Zanotto E D, Coutinho F A B. How many non-crystalline solids can be made from all the elements of the periodic table? [J]. *Journal of Non-Crystalline Solids*, 2004, 347(1/2/3): 285-288.
- [18] Xiao X L, Kong D Y, Qiu X Y, et al. Shape-memory polymers with adjustable high glass transition temperatures [J]. *Macromolecules*, 2015, 48(11): 3582-3589.
- [19] Zhang X H. Chalcogenide glass-molds thermal imaging [J]. *Laser Focus World*, 2002, 38(7): 73.
- [20] Liu H, Fu Z P, Yang K, et al. Machine learning for glass science and engineering: a review[J]. *Journal of Non-Crystalline Solids*, 2021, 557: 119419.
- [21] 张丽艳, 李洪, 胡丽丽, 等. 玻璃成分-结构-性质的“基因结构”模拟法 [J]. *无机材料学报*, 2019, 34(8): 885-892. Zhang L Y, Li H, Hu L L, et al. Structure modeling of genes in glass: composition-structure-property approach [J]. *Journal of Inorganic Materials*, 2019, 34(8): 885-892.
- [22] 刘梓葵. 关于材料基因组的基本观点及展望[J]. *科学通报*, 2013, 58(35): 3618-3622. Liu Z K. Basic viewpoint and prospect of material genome [J]. *Chinese Science Bulletin*, 2013, 58(35): 3618-3622.

- [22] National Research Council, Division on Engineering and Physical Sciences, National Materials Advisory Board, et al. Integrated computational materials engineering: a transformational discipline for improved competitiveness and national security[M]. Washington: National Academies Press, 2008.
- [23] 钱国权, 唐国武, 钱奇, 等. 玻璃基因工程研究[J]. 中国科学: 技术科学, 2020, 50(5): 582-592.
Qian G Q, Tang G W, Qian Q, et al. Glass genetic engineering[J]. Scientia Sinica (Technologica), 2020, 50(5): 582-592.
- [24] Gómez-Bombarelli R, Aguilera-Iparraguirre J, Hirzel T D, et al. Design of efficient molecular organic light-emitting diodes by a high-throughput virtual screening and experimental approach[J]. Nature Materials, 2016, 15(10): 1120-1127.
- [25] Khaira G, Doxastakis M, Bowen A, et al. Derivation of multiple covarying material and process parameters using physics-based modeling of X-ray data[J]. Macromolecules, 2017, 50(19): 7783-7793.
- [26] Landis D D, Hummelshoj J S, Nestorov S, et al. The computational materials repository[J]. Computing in Science & Engineering, 2012, 14(6): 51-57.
- [27] Ball P. Concrete mixing for gorillas[J]. Nature Materials, 2015, 14(5): 472.
- [28] Onbaşı M C, Tandia A, Mauro J C. Mechanical and compositional design of high-strength corning gorilla® glass[M]//Andreoni W, Yip S. Handbook of materials modeling. Cham: Springer, 2018: 1-23.
- [29] National Institute of Standards and Technology. Materials innovation case study: corning's gorilla glass 3 for consumer electronics. [EB/OL]. (2018-06-26)[2022-05-24]. https://www.nist.gov/system/files/documents/2018/06/26/materials_innovation_case_study_gorilla_glass_3_020816.pdf.
- [30] Anderson P W. Through the glass lightly[J]. Science, 1995, 267(5204): 1615-1616.
- [31] Kennedy D, Norman C. What don't we know? [J]. Science, 2005, 309(5731): 75.
- [32] Lebedev A A. Über polymorphismus und das kühlen von glas[J]. Staatl Opt Inst Leningr., 1921, 2(10): 3.
- [33] Wright A C. The great crystallite versus random network controversy: a personal perspective[J]. International Journal of Applied Glass Science, 2014, 5(1): 31-56.
- [34] Zachariasen W H. The atomic arrangement in glass[J]. Journal of the American Chemical Society, 1932, 54(10): 3841-3851.
- [35] Wright A C, Thorpe M F. Eighty years of random networks[J]. Physica Status Solidi (b), 2013, 250(5): 931-936.
- [36] Dietzel A. The cation field strengths and their relation to devitrifying processes, to compound formation and to the melting points of silicates[J]. Zeitschrift für Elektrochemie und angewandte physikalische Chemie, 1942, 48: 9-23.
- [37] Sun K. Fundamental condition of glass formation[J]. Journal of the American Ceramic Society. 1947, 30(9): 277-281.
- [38] Greaves G N, Fontaine A, Lagarde P, et al. Local structure of silicate glasses[J]. Nature, 1981, 293(5834): 611-616.
- [39] Greaves G N, Sen S. Inorganic glasses, glass-forming liquids and amorphizing solids[J]. Advances in Physics, 2007, 56(1): 1-166.
- [40] Wang Y, Ren X B, Otsuka K, et al. Evidence for broken ergodicity in strain glass[J]. Physical Review B, 2007, 76(13): 132201.
- [41] Buchanan M. Capturing chaos[J]. Nature, 2005, 435(7040): 281.
- [42] Bantilan F T, Jr, Palmer R G. Magnetic properties of a model spin glass and the failure of linear response theory [J]. Journal of Physics F: Metal Physics, 1981, 11(1): 261-266.
- [43] Mauro J C, Gupta P K, Loucks R J. Continuously broken ergodicity[J]. The Journal of Chemical Physics, 2007, 126(18): 184511.
- [44] Jones E B, Stevanović V. The glassy solid as a statistical ensemble of crystalline microstates[J]. Npj Computational Materials, 2020, 6: 56.
- [45] Mauro J C, Smedskjaer M M. Statistical mechanics of glass[J]. Journal of Non-Crystalline Solids, 2014, 396/397: 41-53.
- [46] Li N, Sakidja R, Aryal S, et al. Densification of a continuous random network model of amorphous SiO₂ glass[J]. Physical Chemistry Chemical Physics: PCCP, 2014, 16(4): 1500-1514.
- [47] Gupta P K. Topologically disordered networks of rigid polytopes: applications to noncrystalline solids and constrained viscous sintering[M]//Thorpe M F, Duxbury P M. Rigidity Theory and Applications. Fundamental materials research. Boston: Kluwer Academic Publishers, 2005: 173-190.
- [48] Zhang Q Y, Zhang W J, Wang W C, et al. Calculation of physical properties of glass via the phase diagram approach[J]. Journal of Non-Crystalline Solids, 2017, 457: 36-43.
- [49] Jiang Z H, Zhang Q Y. The structure of glass: a phase equilibrium diagram approach[J]. Progress in Materials Science, 2014, 61: 144-215.
- [50] 江建军. 计算材料学设计实践方法[M]. 北京: 高等教育出版社, 2010.
Jiang J J. Computational materials science: design practice method[M]. Beijing: Higher Education Press, 2010.
- [51] Gupta P K, Cooper A R. Topologically disordered networks of rigid polytopes[J]. Journal of Non-Crystalline Solids, 1990, 123(1/2/3): 14-21.
- [52] Phillips J C. Topology of covalent non-crystalline solids I : short-range order in chalcogenide alloys[J]. Journal of Non-Crystalline Solids, 1979, 34(2): 153-181.
- [53] Phillips J C. Topology of covalent non-crystalline solids II : medium-range order in chalcogenide alloys and A - Si (Ge)[J]. Journal of Non-Crystalline Solids, 1981, 43(1): 37-77.
- [54] Bauchy M. Deciphering the atomic genome of glasses by

- topological constraint theory and molecular dynamics: a review[J]. *Computational Materials Science*, 2019, 159: 95-102.
- [55] Mauro J. Topological constraint theory of glass[J]. *American Ceramic Society Bulletin*, 2011, 90(4): 31-37.
- [56] 张勤远, 王伟超, 姜中宏. 玻璃态物质的本质[J]. *科学通报*, 2016, 61(13): 1407-1413.
Zhang Q Y, Wang W C, Jiang Z H. What is the nature of glassy state? [J]. *Chinese Science Bulletin*, 2016, 61(13): 1407-1413.
- [57] 姜中宏, 胡丽丽. 玻璃的相图结构模型[J]. *中国科学 E 辑: 技术科学*, 1996, 26(5): 395-404.
Jiang Z H, Hu L L. Phase diagram structure model of glass[J]. *Science in China (Series E)*, 1996, 26(5): 395-404.
- [58] 张勤远, 姜中宏. 玻璃结构的相图模型[M]. 北京: 科学出版社, 2020.
Zhang Q Y, Jiang Z H. Phase diagram model of glass structure[M]. Beijing: Science Press, 2020.
- [59] Zanutto E D, Mauro J C. The glassy state of matter: its definition and ultimate fate[J]. *Journal of Non-Crystalline Solids*, 2017, 471: 490-495.
- [60] Boulesteix A L, Schmid M. Machine learning versus statistical modeling[J]. *Biometrical Journal. Biometrische Zeitschrift*, 2014, 56(4): 588-593.
- [61] Fluegel A. Statistical regression modeling of glass properties: a tutorial[J]. *Glass Technology*, 2009, 50(1): 25-46.
- [62] de Pablo J J, Jackson N E, Webb M A, et al. New frontiers for the materials genome initiative[J]. *npj Computational Materials*, 2019, 5: 41.
- [63] Ravinder R, Sridhara K H, Bishnoi S, et al. Deep learning aided rational design of oxide glasses[J]. *Materials Horizons*, 2020, 7(7): 1819-1827.
- [64] Zaki M, Venugopal V, Ravinder R, et al. Unveiling the glass veil: elucidating the optical properties in glasses with interpretable machine learning[EB/OL]. (2021-03-05)[2022-05-24]. <https://arxiv.org/abs/2103.03633>.
- [65] Cassar D R, Santos G G, Zanutto E D. Designing optical glasses by machine learning coupled with a genetic algorithm[J]. *Ceramics International*, 2021, 47(8): 10555-10564.
- [66] Ravinder, Venugopal V, Bishnoi S, et al. Artificial intelligence and machine learning in glass science and technology: 21 challenges for the 21st century[J]. *International Journal of Applied Glass Science*, 2021, 12(3): 277-292.
- [67] Gilpin L H, Bau D, Yuan B Z, et al. Explaining explanations: an overview of interpretability of machine learning[C]//2018 IEEE 5th International Conference on Data Science and Advanced Analytics, October 1-3, 2018, Turin, Italy. New York: IEEE Press, 2018: 80-89.
- [68] Anoop Krishnan N M, Mangalathu S, Smedskjaer M M, et al. Predicting the dissolution kinetics of silicate glasses using machine learning[J]. *Journal of Non-Crystalline Solids*, 2018, 487: 37-45.
- [69] 谢建新, 宿彦京, 薛德祯, 等. 机器学习在材料研发中的应用[J]. *金属学报*, 2021, 57(11): 1343-1361.
- Xie J X, Su Y J, Xue D Z, et al. Machine learning for materials research and development[J]. *Acta Metallurgica Sinica*, 2021, 57(11): 1343-1361.
- [70] Materials genome initiative for global competitiveness [EB/OL]. (2011-06)[2022-05-24]. https://obamawhitehouse.archives.gov/sites/default/files/microsites/ostp/materials_genome_initiative-final.pdf.
- [71] Bergerhoff G, Hundt R, Sievers R, et al. The inorganic crystal structure data base[J]. *Journal of Chemical Information and Computer Sciences*, 1983, 23(2): 66-69.
- [72] 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.
- [73] Scientific Data Center of CAS[EB/OL]. [2022-05-24]. <http://www.csdb.cn/>.
- 中国科学院数据科学中心[EB/OL]. [2022-05-24]. <http://www.csdb.cn/>.
- [74] Material Science Database [EB/OL]. [2022-05-24]. <http://www.matsci.csdb.cn/>.
- 材料学科领域基础科学数据库[EB/OL]. [2022-05-24]. <http://www.matsci.csdb.cn/>.
- [75] 李姿昕, 张能, 熊斌, 等. 材料科学数据库在材料研发中的应用与展望[J]. *数据与计算发展前沿*, 2020, 2(2): 78-90.
- Li Z X, Zhang N, Xiong B, et al. Materials science database in material research and development: recent applications and prospects[J]. *Frontiers of Data & Computing*, 2020, 2(2): 78-90.
- [76] Eitel W, Pirani M S, Scheel K. *Glastechnische tabellen: physikalische und chemische Konstanten der Gläser*[M]. Cham: Springer, 1932.
- [77] Levin E M. *Phase diagrams for ceramists*[M]. Westerville: The American Ceramic Society, 1956.
- [78] The American Ceramic Society. Phase equilibrium diagram. [EB/OL]. (2022-5-14)[2022-05-24]. <https://ceramics.org/publications-resources/phase-equilibrium-diagrams>.
- [79] EPAM Systems Inc. SciGlass. [EB/OL]. (2019-05-27)[2022-05-24]. <https://github.com/epam/SciGlass>.
- [80] New Glass Forum. INTERGLAD Ver. 8. [EB/OL]. (2020-10-06) [2022-05-24]. http://www.newglass.jp/interglad_n/.
- [81] Yang K, Xu X Y, Yang B, et al. Predicting the Young's modulus of silicate glasses using high-throughput molecular dynamics simulations and machine learning[J]. *Scientific Reports*, 2019, 9: 8739.
- [82] Mauro J C, Tandia A, Vargheese K D, et al. Accelerating the design of functional glasses through modeling[J]. *Chemistry of Materials*, 2016, 28(12): 4267-4277.
- [83] Mauro J C. Decoding the glass genome[J]. *Current Opinion in Solid State and Materials Science*, 2018, 22(2): 58-64.
- [84] Musgraves J D, Hu J J, Calvez L. *Springer handbook of glass*[M]. Cham: Springer, 2019.
- [85] Massobrio C, Du J C, Bernasconi M, et al. Molecular

- dynamics simulations of disordered materials[M]. Cham: Springer, 2015.
- [86] Varshneya A K, Mauro J C. Fundamentals of inorganic glasses[M]. Amsterdam: Elsevier, 2013.
- [87] Chen S, Zhang W N, Teng L M, et al. Design, simulation, elaboration and luminescence of Tb³⁺-doped Ba_{0.84}Gd_{0.16}F_{2.16} fluoroaluminosilicate scintillating glass ceramics[J]. Journal of the European Ceramic Society, 2021, 41(13): 6722-6728.
- [88] Karelson M, Lobanov V S, Katritzky A R. Quantum-chemical descriptors in QSAR/QSPR studies[J]. Chemical Reviews, 1996, 96(3): 1027-1044.
- [89] Kuo P H, Du J C. Atomistic understanding of ion exchange strengthening of boroaluminosilicate glasses: insights from molecular dynamics simulations and QSPR analysis[J]. The Journal of Physical Chemistry B, 2022, 126(9): 2060-2072.
- [90] Lu X N, Deng L, Gin S, et al. Quantitative structure-property relationship (QSPR) analysis of ZrO₂-containing soda-lime borosilicate glasses[J]. The Journal of Physical Chemistry B, 2019, 123(6): 1412-1422.
- [91] Du J C, Cormack A N. Atomistic Simulations of Glasses: Fundamentals and Applications[M]. Hoboken: John Wiley & Sons, 2022.
- [92] Gong H M, Song B, Yang Y T, et al. Ab initio molecular dynamics simulation of the structural and electronic properties of aluminoborosilicate glass[J]. Journal of the American Ceramic Society, 2021, 104(7): 3198-3211.
- [93] Liu H, Zhang T, Anoop Krishnan N M, et al. Predicting the dissolution kinetics of silicate glasses by topology-informed machine learning[J]. Npj Materials Degradation, 2019, 3: 32.
- [94] Cassar D R, Mastelini S M, Botari T, et al. Predicting and interpreting oxide glass properties by machine learning using large datasets[J]. Ceramics International, 2021, 47(17): 23958-23972.
- [95] Probert M. Electronic structure: basic theory and practical methods, 2nd edition[J]. Contemporary Physics, 2020, 61(4): 312.
- [96] Lundberg S, Lee S I. A unified approach to interpreting model predictions[EB/OL]. (2017-05-22) [2021-02-03]. <https://arxiv.org/abs/1705.07874>.
- [97] Zhou S F, Guo Q B, Inoue H, et al. Topological engineering of glass for modulating chemical state of dopants[J]. Advanced Materials, 2014, 26(47): 7966-7972.
- [98] Cao W Q, Huang F F, Wang Z, et al. Controllable structural tailoring for enhanced luminescence in highly Er³⁺-doped germanosilicate glasses[J]. Optics Letters, 2018, 43(14): 3281-3284.
- [99] Yang Y J, Homma O, Urata S, et al. Topological pruning enables ultra-low Rayleigh scattering in pressure-quenched silica glass[J]. Npj Computational Materials, 2020, 6: 139.
- [100] Qian G Q, Tang G W, Qian Q, et al. Quantitative prediction of the glass-forming region and luminescence properties in Tm³⁺-doped germanate laser glasses[J]. Journal of the American Ceramic Society, 2020, 103(8): 4203-4213.
- [101] Koponen J J, Söderlund M J, Hoffman H J, et al. Measuring photodarkening from single-mode ytterbium doped silica fibers[J]. Optics Express, 2006, 14(24): 11539-11544.
- [102] 刘超平, 廖雷, 李进延. 掺镱光纤激光器光子暗化现象的研究进展[J]. 激光与光电子学进展, 2016, 53(7): 070002.
- Liu C P, Liao L, Li J Y. Research progress on photodarkening of Yb-doped fiber lasers[J]. Laser & Optoelectronics Progress, 2016, 53(7): 070002.
- [103] Sun S H, Jia B N, Han L H, et al. Influence of ring structures on optical absorption of trivalent ytterbium in Yb-doped silica fiber[J]. Journal of Luminescence, 2021, 239: 118370.
- [104] Zhang L Y, Li H, Hu L L. Statistical structure analysis of GeO₂ modified Yb³⁺: phosphate glasses based on Raman and FTIR study[J]. Journal of Alloys and Compounds, 2017, 698: 103-113.
- [105] Li W K, Zhao X J, Liu C, et al. Ab initio molecular dynamics of CdSe quantum-dot-doped glasses[J]. Journal of the American Chemical Society, 2020, 142(8): 3905-3912.
- [106] Haumesser P H, Gaumé R, Viana B, et al. Spectroscopic and crystal-field analysis of new Yb-doped laser materials [J]. Journal of Physics: Condensed Matter, 2001, 13(23): 5427-5447.
- [107] Yang B H, Liu X Q, Wang X, et al. Compositional dependence of room-temperature Stark splitting of Yb³⁺ in several popular glass systems[J]. Optics Letters, 2014, 39(7): 1772-1774.
- [108] Yan S S, Yue Y, Wang Y J, et al. Effect of GeO₂ on structure and properties of Yb: phosphate glass[J]. Journal of Non-Crystalline Solids, 2019, 520: 119455.
- [109] Zhang L Y, Li H, Hu L L. Statistical approach to modeling relationships of composition-structure-property I: alkaline earth phosphate glasses[J]. Journal of Alloys and Compounds, 2018, 734: 163-171.
- [110] Zhang L Y, Xu Y C, Li H. "Gene" modeling approach to new glass design[J]. International Journal of Applied Glass Science, 2020, 11(2): 294-306.
- [111] Liu W X, Yan S S, Wang Y J, et al. Composition-structure-property modeling for Nd³⁺ doped alkali-phosphate laser glass[J]. Optical Materials, 2020, 102: 109778.
- [112] Tokuda Y, Fujisawa M, Packwood D M, et al. Data-driven design of glasses with desirable optical properties using statistical regression[J]. AIP Advances, 2020, 10(10): 105110.
- [113] Yang Y F, Guo Y L, Huang Z P, et al. Research on the milling tool wear and life prediction by establishing an integrated predictive model[J]. Measurement, 2019, 145: 178-189.
- [114] Altay O, Gurgenc T, Ulas M, et al. Prediction of wear loss quantities of Ferro-alloy coating using different machine learning algorithms[J]. Friction, 2020, 8(1): 107-114.

- [115] Qiao Q, He H T, Yu J X, et al. Applicability of machine learning on predicting the mechanochemical wear of the borosilicate and phosphate glass[J]. *Wear*, 2021, 476: 203721.
- [116] McGahay V, Tomozawa M. Phase separation in rare-earth-doped SiO_2 glasses[J]. *Journal of Non-Crystalline Solids*, 1993, 159(3): 246-252.
- [117] Turlier J, Fourmont J, Bidault X, et al. *In situ* formation of rare-earth-doped nanoparticles in a silica matrix from Molecular Dynamics simulations[J]. *Ceramics International*, 2020, 46(16): 26264-26272.
- [118] Park B, Li H, Corrales L R. Molecular dynamics simulation of La_2O_3 - Na_2O - SiO_2 glasses. I. The structural role of La^{3+} cations[J]. *Journal of Non-Crystalline Solids*, 2002, 297(2/3): 220-238.
- [119] Park B, Corrales L R. Molecular dynamics simulation of La_2O_3 - Na_2O - SiO_2 glasses. II. The clustering of La^{3+} cations[J]. *Journal of Non-Crystalline Solids*, 2002, 311(2): 107-117.
- [120] Corrales L R, Park B. Molecular dynamics simulation of La_2O_3 - Na_2O - SiO_2 glasses. III. The driving forces of clustering[J]. *Journal of Non-Crystalline Solids*, 2002, 311(2): 118-129.
- [121] Vienne G G, Caplen J E, Dong L, et al. Fabrication and characterization of $\text{Yb}^{3+}:\text{Er}^{3+}$ phosphosilicate fibers for lasers[J]. *Journal of Lightwave Technology*, 1998, 16(11): 1990-2001.
- [122] Du J C, Cormack A N. Structure study of rare earth doped vitreous silica by molecular dynamics simulation [J]. *Radiation Effects and Defects in Solids*, 2002, 157(6/7/8/9/10/11/12): 789-794.
- [123] Nakazawa M. Evolution of EDFA from single-core to multi-core and related recent progress in optical communication[J]. *Optical Review*, 2014, 21(6): 862-874.
- [124] Hoppe U. Rare-earth site distributions in $\text{R}(\text{PO}_3)_3$ ($\text{R}=\text{La, Nd, Er, Yb}$) metaphosphate glasses by reverse Monte Carlo simulations[J]. *Journal of Physics: Condensed Matter*, 2008, 20(16): 165206.
- [125] Mountjoy G. Molecular dynamics, diffraction and EXAFS of rare earth phosphate glasses compared with predictions based on bond valence[J]. *Journal of Non-Crystalline Solids*, 2007, 353(18/19/20/21): 2029-2034.
- [126] 董贺贺. 1018 nm 同带泵浦 Yb^{3+} 掺杂石英光纤光谱性能研究[D]. 南京: 南京邮电大学, 2021.
Dong H H. Study on the spectral performance of Yb^{3+} doped silica fiber for 1018 nm tandem-pumping technology [D]. Nanjing: Nanjing University of Posts and Telecommunications, 2021.
- [127] Shapere D. The structure of scientific revolutions[J]. *The Philosophical Review*, 1964, 73(3): 383.
- [128] Hey A J G, Tansley S, Tolle K M. The fourth paradigm: data-intensive scientific discovery[M]. Redmond: Microsoft Research, 2009.
- [129] Kuhn T S. The structure of scientific revolutions[M]. Chicago: University of Chicago Press, 1970.
- [130] Agrawal A, Choudhary A. Perspective: materials informatics and big data: realization of the “fourth paradigm” of science in materials science[J]. *APL Materials*, 2016, 4(5): 053208.
- [131] Mauro J C, Philip C S, Vaughn D J, et al. Glass science in the United States: current status and future directions [J]. *International Journal of Applied Glass Science*, 2014, 5(1): 2-15.