

论坛五十一：AI 赋能新材料设计与智造论坛

分论坛主席：张锦，鄂维南，韩高荣

51-01

理实交融的机器化学家探索

江俊*

化学与材料科学学院，中国科学技术大学，安徽省合肥市，230000

*jiangj1@ustc.edu.cn

以量子力学代表的微观物质科学理论建立百年，应用于真实体系却过于复杂难以求解。实测数据通常珍贵稀疏，理论大数据缺失了现实复杂度，实验试错范式与理论计算范式在科研实践中常常理实脱节。

人工智能技术擅长从数据中探索变量之间的关联，通过多层次训练连接不同维度与复杂度的数据，为底层规则清晰而变量复杂的科学问题提供了新的工具。我们发展机器学习与量子化学计算结合的方法，挖掘基于谱学可观测量的描述符，在保持量子化学精度的前提下大幅度提升光谱计算的效率，实现蛋白质分子光谱、催化剂表面分子光谱的高效模拟。进一步推演光谱响应、微观结构、物化性质之间的数学关系，基于谱学观测量赋予机器人构建原子分子模型的能力，驱动理论模拟产生大数据并形成可解释的预训练模型，依托机器人的高质量实测小数据做迁移学习，建立面向真实体系的“理实交融”智能模型，研制具备科研智慧的机器化学家，推动数据智能驱动的科学新范式。

关键词：数据挖掘；光谱描述符；机器人化学家；

参考文献

- [1] Haitao, Z.; Wei, C.; Hao, H.; Zhehao, S.; Zijian, C.; Lingjun, W.; Baicheng, Z.; Fuming, L.; Zhuo, W.; Mukhtar, L. A.; Cheng, H. P.; Paul, K. C.; Yang, L.; Tao, W.; Jun, J.; Zongyou, Y.; Xue-Feng, Y. Nat. Syn. 2023, 2731-0582
- [2] Xijun, W.; Shuang, J.; Wei, H.; Sheng, Y.; Tairan, W.; Fan, W.; Li, Y.; Xiyu, L.; Guozhen, Z.; Xin, C.; Jun, J.; Yi, L. J. Am. Chem. Soc. 2022, 144, 35, 16069-16076
- [3] Baicheng, Z.; Xiaolong, Z.; Wenjie, D.; Zhaokun, S.; Guozhen, Z.; Guoqing, Z.; Yang, W.; Xin, C.; Jun, J.; Yi, L. Proc. Natl. Acad. Sci. U.S.A. 2022, 119 (41) e2212711119
- [4] Qing, Z.; Fei, Z.; Yan, H.; Hengyu, X.; LuYuan, Z.; XuChun, Z.; Tao, S.; XinSheng, T.; Xiang, L.; Guo, H.; BaoChen, C.; JunYi, Z.; YiHan, Z.; Baicheng, Z.; JiaQi, C.; Man, L.; Song, W.; GuiLin, Y.; WanJun, Z.; Xin, C.; Shuang, C.; Donglai, Z.; Huirong, L.; Jialei, L.; Gang, Z.; WeiWei, S.; Jun, J.; Yi,

51-02

ALKEMIE 赋能新材料发现与性能调控

孙志梅

北京航空航天大学材料科学与工程学院

Email: zmsun@buaa.edu.cn

本次报告将分享我们自主开发的可视化多尺度集成的高通量智能计算和数据管理平台 ALKEMIE，ALKEMIE 基于 AMDIV 设计理念，包含了自动化、模块化、数据库、人工智能和可视化 workflow 等五个核心要素，为高效高精度研发新材料提供了技术支撑。基于 ALKEMIE，我们设计出了多类新型信息材料和新能源材料，在国际上引领了 MBene 等新材料研究。ALKEMIE 作为中国代表性成果与 Materials Project、AFlow 等入选由美国科学院、

工程院和医学院编写的全球材料基因组计划 10 年成就。最后分享 ALKEMIE 在快速发现新材料和性能调控方面的几个典型案例。

51-03

高效筛选新型发光材料：结合机器学习和计算分析的研究

程正 1, 刘佳鹏 1, 赵国江 2, 柯国霖 2, 高志峰 2*, 赵子丰 1*, 欧琪 1,3*

1 北京科学智能研究院, 北京市海淀区成府路 150 号, 100084

2 北京深势科技有限公司, 北京市海淀区海淀东三街 2 号, 100080

3 中石化石油化工科学研究院有限公司, 北京市海淀区学院路 18 号, 100083

*Email: gaozf@dp.tech; zhaozf@bjaisi.com; ouqi.ripp@sinopec.com;

与液晶显示相比, OLED 显示材料能够实现更广的色域、更高的对比度,是目前显示器技术的新宠。但就发光效率和色域而言, OLED 发光分子尚有提升空间。利用计算机高通量地对数百万种可能的材料进行虚拟筛选能够高效地给出具有潜力的新型 OLED 分子。本工作将分子表示学习 (molecular representation learning, MRL) 手段应用于目标 OLED 发光体系,以自动搭建的百万级别分子的 3D 构型直接作为输入,同时以粗精度的半经验方法进行预训练得到预训练模型,之后对于 1000 个左右的分子进行高精度量子化学计算,得到的结果用于机器学习模型的微调 (fine-tune),微调后的模型能够应用于百万级别分子量子化学精度的发光性质预测。针对铱配合物这一传统磷光 OLED 显示材料,本工作实现了分子自动化搭建→发光性质自动化计算→机器学习模型自动化训练→潜力分子自动化筛选这一完整的工作流,并成功筛选出了能够分别用于发光和照明的潜力新分子。此外,这一套流程能够迁移至前景广阔的第三代 OLED 显示材料多重共振热活化延迟荧光分子中,助力第三代显示材料的研发过程。

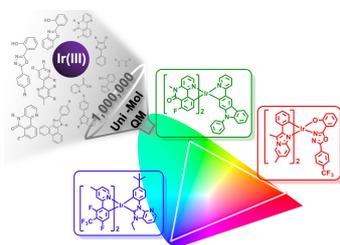


Fig. 1 Virtual screening of novel Ir(III) complex for displaying purpose.

关键词: 有机发光二极管; 高通量筛选; 分子表示学习; 铱配合物; 热活化延迟荧光

51-04

人工智能加速从头算电化学

AI2 electrochemistry

(AI2 = AI × Ab initio)

程俊*

1 固体表面物理化学国家重点实验室

厦门大学化学化工学院

嘉庚创新实验室, 厦门 361005

*Email: chengjun@xmu.edu.cn

电化学是一门历史非常悠久的学科,然而基于第一性原理的计算电化学近二十年才慢慢发展起来。究其原因,主要是电化学界面的高度复杂性造成的,计算方法既要考虑固体电极的量子力学电子结构,也要兼顾电解质溶液的动态统计力学效应。针对复杂电化学体系的原位电势条件和动态特征,我们发展了基于从头算分子动力学 (ab initio molecular dynamics,

AIMD) 的计算新方法, 对电化学环境下界面动态结构和反应过程进行理论研究。我们近期发展人工智能方法对 AIMD 实现百万倍加速, 将 *ab initio electrochemistry* 升级为 AI2 *electrochemistry* ($AI2 = AI \times ab\ initio$), 通过人工智能加速的 AI2MD 可在保持第一性原理精度的同时, 复杂电化学体系的长时间计算模拟。一些前期进展包括实现对电解质和电极材料等结构、谱学和性质的高效计算。

51-05

"Construct exchange-correlation functional via machine learning and delta-learning method"

陈冠华 香港大学

WANG Hong Kong Quantum AI Lab

Density-functional theory has been widely used in quantum mechanical simulations. Despite of its success, the universal exchange-correlation (xc) functional has been elusive. About twenty years ago, neural networks has been introduced to construct the xc functional or potential. Due to the emergence of deep learning, this effort has gained the renewed momentum in recent years. In this perspective, I review the early efforts to approximate the xc functional or potential with neural networks. A key challenge was the transferability from the knowledge learnt from small molecules to larger systems. The transferability problem was recently resolved by adopting quasi-local density-based descriptors, which is rooted rigorously in the holographic electron density theorem. I discuss then the recent developments to employ the deep-learning techniques to learn the exact xc functional. It is important that the high-level *ab initio* molecular energy and as well as the corresponding electron density are targeted for the training. All these efforts can be encompassed under a general framework. In addition, the delta-learning method will be discussed.

51-06

基于 AI4S 的化学材料高效设计合成表征与智造平台

王笑楠

清华大学

wangxiaonan@tsinghua.edu.cn

开发具有自主知识产权的高效化学品和新材料对我国国民经济发展, 实现碳达峰、碳中和目标至关重要。利用人工智能 (AI) 来优化和加速新材料、新过程的设计和开发过程可以减少传统方式中大量耗时费力的试错和实验, 对化学品和新材料的结构、功能、反应机制等进行深入研究, 构建出更加高效精确的模型。通过融合高通量计算和高通量制备和表征等关键技术, 结合自动化平台, 突破“试错式、地毯式”的传统材料研发模式, 研发效率可以得到显著提高。本报告将介绍多层次、多尺度、融合知识的化学材料数据平台构建方法, 进一步探讨跨尺度机器学习模型构建及化学材料快速精准生成方法, 并基于此实现面向碳中和的一系列重要技术, 如高性能催化剂、膜材料和新能源关键材料等的发现和突破, 实现原子级别的精准调控。研究搭建了高通量的实验和表征平台, 通过采集大量数据, 基于在线主动学习方法可以有效地指导实验并实现对全设计空间的理解。当前, 具有普适性的通用人工智能正迎来重要的发展拐点, 预训练大模型等技术使其能够在不同领域和任务中学习并发挥应用价值, 有望在科学领域取得突破性发现。最后展望未来 AI 赋能碳中和关键化学材料和技术研发的发展趋势和面临的挑战。

参考文献:

[1] Hippalgaonkar, K., Li, Q., Wang, X., Fisher III, J.W., Kirkpatrick, J. and Buonassisi, T., 2023. Knowledge-integrated machine learning for materials: lessons from gameplaying and robotics.

Nature Reviews Materials, 8(4), pp.241-260.

[2] Chen, H., Zheng, Y., Li, J., Li, L. and Wang, X., 2023. AI for Nanomaterials Development in Clean Energy and Carbon Capture, Utilization and Storage (CCUS). *ACS nano*.

[3] Yang, H., Li, J., ..., Wang, X.* & Chen, P. Y.* (2022). Automatic strain sensor design via active learning and data augmentation for soft machines. *Nature Machine Intelligence*, 4(1), 84-94.

[4] Xu, S., Li, J., ..., Liu, B*, & Wang, X.* (2021). Self-improving photosensitizer discovery system via Bayesian search with first-principle simulations. *Journal of the American Chemical Society*, 143(47), 19769-19777.

[5] Li, Jiali, Mykola Telychko, ..., Lu, J*, & Wang, X.* "Machine vision automated chiral molecule detection and classification in molecular imaging." *Journal of the American Chemical Society* 143, no. 27 (2021): 10177-10188.

51-07

AI-assisted materials modeling: from multi-scale to pre-trained models

张林峰

北京科学智能研究院 北京深势科技有限公司

Rapid advancements in artificial intelligence (AI) and machine learning (ML) have led to significant transformations in the field of materials modeling and simulation. In this talk, we will delve into the latest breakthroughs and advancements in AI-assisted materials modeling, placing emphasis on the transition from multi-scale methods to pre-trained models. The potential of AI-driven approaches to address the inherent complexity and multi-scale nature of molecular systems will be discussed, alongside case studies that demonstrate how these methods are enabling more accurate and efficient simulations. The transition to and application of pre-trained models will then be scrutinized through various examples. Finally, we will contemplate the future of materials modeling and the role of AI and cloud computing in shaping this field.

51-08

机器学习方法加速钙钛矿材料与光伏器件优化

刘哲

西北工业大学

钙钛矿材料具有优异的载流子扩散性能，较低的缺陷态浓度且易于溶液加工等优势，被广泛应用于光伏太阳能电池、发光二极管、光电探测器等光电器件中。其中，钙钛矿光伏器件有望成为下一代低成本、高效率的太阳能电池技术。本报告主要围绕融合材料领域知识的机器学习方法，讨论钙钛矿材料研发相关的三个重要环节的应用：制备工艺的自主优化、表征数据的高通量分析和钝化层材料的智能筛选。首先，面对钙钛矿材料制备工艺参数多、参数与性能关系不明确的问题，贝叶斯优化能够快速解决多工艺参数同时优化的高维度问题，实现高通量钙钛矿喷涂工艺技术的开发；其次，针对钙钛矿材料光谱表征数据分析过程冗长、专业知识要求高的问题，深度迁移学习能够在学习大量的理论模拟数据后，仅仅需要少量实验数据二次训练，就可以准确地从反射/透射光谱中获得薄膜厚度，大幅减少了数据分析所用的时间；最后，为解决钙钛矿表面钝化材料种类繁多、筛选标准不明确的问题，机器学习回归模型可建立前驱体材料特征与器件性能的联系，再通过夏普利分析框架量化材料筛选标准。综上所述，这些针对材料数据的特点机器学习方法，结合了材料相关的领域知识和经验，在减少样品数、缩短研究周期等方面初见成效。

关键词：钙钛矿光伏；机器学习；材料人工智能

51-09

大模型发展现状与未来展望

黄铁军 北京大学

大模型是用海量数据训练的大型人工神经网络，其基本特征是：规模大，涌现性，通用性。语言大模型 ChatGPT 具有强大的智能，影响深远，未来 3 年，除了语言，大模型正在迅速扩展视觉、听觉、具身、行动等通用智能，影响将更大。未来 10 年，智力革命已经打响，就像工业革命解放体力，就像电力革命解决能源流通，是全新生态的构建，开源开放生态终将胜利。他表示，未来 20 年，ChatGPT 是数据驱动的静态智能，未来是时空环境驱动的具身智能，智能载体将是类脑的脉冲神经网络，有望像生物大脑一样涌现出更强的智能。

51-10

深度势能准确预测钛和镍金属中的缺陷性质

文通其

香港大学

金属钛和镍在工业中具有很高的重要性，它们的独特性质使其在航空航天工业及建筑和汽车工业领域有着广泛的应用。该报告将讨论钛和镍金属中的缺陷性质，以及如何利用深度势能方法对其进行准确预测和模拟。缺陷性质包括点缺陷、位错、晶界等在金属材料的力学、电子和热力学性能等方面具有重要影响，因此准确预测和控制缺陷性质对于提高金属材料的性能和可靠性具有重要意义。同时，报告指出了深度势能方法在预测复杂金属材料和多尺度问题方面所面临的挑战，以及未来的研究方向。

51-11

锂键化学推动锂电池高质量发展

张强，清华大学

我国提出力争 2030 年前二氧化碳排放达到峰值，努力争取 2060 年前实现碳中和。电化学能源是构筑太阳能-电能-氢能/动力/热能系统的新途径。发展基于锂离子的锂电池技术是电化学领域的长期关注的目标。采用理论与实验相结合的方法，系统地研究了多硫化物与氮掺杂碳材料之间形成的锂键的几何结构、键能、电荷分布、偶极等性质，提出锂键是一种偶极-偶极相互作用，并通过理论和实验核磁表征指认复杂体系中锂键的形成过程。锂键主要用于解释多硫化物与正极宿主材料之间的相互作用，但锂键的概念可以被广泛应用锂电池研究的各个方面，也为锂电池的机理研究提供了一种新的视角。本报告将锂键的概念引入到锂电池的研究中，并基于多硫化物与正极宿主材料相互作用的体系，系统地研究了锂键的几何结构、电子结构、键能、偶极等性质。希望锂键的概念在锂电池研究中取得更大的应用，因此将这一概念引申到电解液、锂金属负极等体系。基础原理上的新认识会更加清晰的认识自然界的本质，能够助力基于锂的化学电源探索和开发。

参考文献：

- [1] Chen, X.; Bai, Y.-K.; Zhao, C.-Z.; Shen, X.; Zhang, Q., Lithium bond in lithium batteries. *Angew. Chem. Int. Ed.*, 2020, 59, 11192–11195.
- [2] Hou, T. Z.; Xu, W. T.; Chen, X.; Peng, H. J.; Huang, J. Q.; Zhang, Q., Lithium bond chemistry in lithium-sulfur batteries. *Angew. Chem. Int. Ed.* 2017, 56, 8178–8182.
- [3] Lu, Y.; Zhao, C.-Z.; Zhang, R.; Yuan, H.; Hou, L.-P.; Fu, Z.-H.; Chen, X.; Huang, J.-Q.; Zhang, Q. The carrier transition from Li atoms to Li vacancies in solid-state lithium alloy anodes. *Sci. Adv.* 2021, 7, eabi5520.

-
- [4] Chen, X.; Chen, X.-R.; Hou, T.-Z.; Li, B.-Q.; Cheng, X.-B.; Zhang, R.; Zhang, Q., Lithiophilicity chemistry of heteroatom-doped carbon to guide uniform lithium nucleation in lithium metal anodes. *Sci. Adv.* 2019, 5, eaau7728.
- [5] Yao, Y.X.; Wan, J.; Liang, N.Y.; Yan, C.; Wen, R.; Zhang, Q. Nucleation and growth mode of solid electrolyte interphase in Li-ion batteries. *J. Am. Chem. Soc.* 2023, 145, 8001