

中国材料大会 2025

暨新材料科研仪器与设备展

7 月 5-8 日, 2025

福建 厦门

E12-人工智能化学与材料学
E12-Artificial Intelligence for Chemistry
and Materials Science

主办单位

中国材料研究学会

会议网址: <https://cmc2025.scimeeting.cn>



E12 人工智能化学与材料学分会摘要集

分会主席：何晓、方国勇、江俊、杨小渝、程俊、李卫东

交流类型：主题报告

E12-KN-01

Detecting Deformation Mechanisms of Metals from Acoustic Emission Signals through Knowledge-Driven Unsupervised Learning

丁向东

西安交通大学

Timely detection of deformation mechanisms in metallic structural materials is essential for early-warning alerts on potential damages and fractures. Acoustic emission (AE) technologies are commonly used for this purpose due to their non-destructive nature. However, traditional methods often struggle with distinguishing AE signals associated with multiple co-existing deformation mechanisms. To address this challenge, we propose a knowledge-driven unsupervised learning approach. The novel method leverages a family of gradient-driven supervised base learners and integrates them with a knowledge-infused aggregate loss function, effectively transforming the approach into an unsupervised learning framework. Compared to existing methods, our approach excels in identifying co-existing deformation mechanisms associated with AE signals. Experiments on porous 316L stainless steel during tensile process show that the avalanche statistics of the identified dislocation and crack AE signals align closely with classical statistical methods and fracture theory. By integrating with the avalanche theory, our proposed approach can continuously monitor material deformation mechanisms in real-time and provide dynamic early failure warnings. Additionally, the framework demonstrates strong transferability in recognizing multiple co-existing deformation mechanisms in new materials, leveraging its unsupervised learning capability.

交流类型：主题报告

E12-KN-02

锂离子电池健康状态的人工智能预测

赵焱

四川大学

本报告聚焦于锂离子电池健康状态（SOH）估计方法的创新，以优化电池管理系统、延长电池寿命并提高能源效率。针对传统方法忽视局部退化模式和跨领域适应性差的问题，我们提出了几种新的 SOH 估计框架。通过引入局部特征增强、增量容量分析等先验知识，以及基于自注意力机制的双流传输网络，显著提升了估计的准确性，并在多种电池化学成分和操作条件下展现了优异的跨域适应能力。各方法的设计不仅注重高精度估计，还考虑到实际应用中的计算效率与硬件适应性，提供了一种更为精准、可拓展的 SOH 估计解决方案。

交流类型：主题报告

E12-KN-03

高分子材料大语言模型

孙昭艳

中国科学院长春应用化学研究所

大语言模型在计算机视觉和自然语言处理领域已经日渐成熟，但在诸如性质预测、材料设计、分子描述等科学任务中的作用还亟待突破。在聚合物领域，基于 LLMs 开发的聚合物模型包括 TransPolymer、polyBERT、以及 PolyNC 等。这些模型可以利用自注意力和交叉注意力机制来更新聚合物材料的特征提取范式，使聚合物领域模型的预测精度和泛化性能得到了一定提升，但其在不同分支领域的应用仍需进一步开发。本报告将介绍高分子材料大模型的相关研究进展，并针对通用大模型在材料性质预测准确性低、逆向设计实用性不足等关键问题进行了优化，提升了大模型在高分子材料专业任务上的性能表现，为高分子材料研发提供了可用的工具。

交流类型：主题报告

E12-KN-04

分子间相互作用势能面与动力学

谢代前

南京大学化学化工学院

分子间的非弹性散射过程是最基本的化学过程之一。量子态分辨的分子碰撞动力学研究可以提供分子间运动及其相互作用的本质规律和最细致的微观机制，在大气化学、化学激光、星际化学和燃烧过程等重要领域都有着广泛的应用。近年来，对冷分子碰撞过程的研究已成为国内外化学动力学研究的前沿和热门课题。这是因为冷分子碰撞动力学只能通过一个或少数几个分波进行，量子效应得到了显著的增强，使其成为研究量子现象的一个极佳平台。这些研究有助于探究原子分子碰撞过程的量子本质，从而实现原子分子碰撞传能及化学反应过程的精准量子调控。但目前冷分子碰撞过程的理论研究仍面临诸多挑战，例如如何构建涵盖短程与长程区域的高精度势能面以及如何提高现有量子动力学计算方法的计算精度与效率等。本报告将介绍我们在小分子体系相互作用势能面的构建以及相关体系态-态量子动力学研究方面的新进展，包括精确计算分子间长程相互作用能的新方法以及高效的包含最近邻耦合的非含时碰撞传能动力学新方法的发展。基于上述方法，我们计算了多个重要体系的振转光谱与传能过程的速率常数，并对立体动力学等低温条件下的态-态动力学性质进行了研究，揭示了新的微观动力学机制。

交流类型：主题报告

E12-KN-05

基于机器学习的金属掺杂 CeO₂ 表面氢物种稳定性预测

龚学庆

上海交通大学

二氧化铈（CeO₂）因其在新能源生产和污染物处理等非均相催化领域中展现出的优异性能，近年来受到广泛关注，具有广阔的应用前景。氢气（H₂）在 CeO₂ 表面发生独特的异裂解离过程，能够生成氢化物中间体，进一步转化为稳定的羟基化表面，这一转变对于催化反应具有重要意义。金属掺杂被认为是一种有效调控其表面氢物种稳定性及催化性能的策略，然而，不同金属掺杂对 CeO₂ 表面氢物种吸附稳定性的影响机制仍不明确，相关的定量预测仍面临挑战。针对金属掺杂引入的复杂变量特性，本研究结合密度泛函理论（DFT）和机器学习方法，开发了一种多尺度特征工程策略。我们系统构建了包含 43 种金属掺杂的 CeO₂(111) 表面数据集，全面提取了掺杂金属的电子结构特征与局域几何环境信息，包括原子局部环境相似性（SOAP）描述符、原子中心对称函数（ACSF）等多维特征，其中 SOAP 描述符能够有效捕捉次近邻原子的调控效应。基于随机森林和 XGBoost 等集成学习模型，实现了对 CeO₂ 表面氢吸附稳定性的高精度预测。进一步的模型解释分析表明，掺杂金属的电荷分布

与吸附位点的局部几何环境协同作用，共同调控氢的吸附行为。本研究提出的“电子-几何跨尺度特征融合”范式为金属掺杂 CeO_2 催化剂的理性设计提供了新思路，同时也为机器学习辅助催化材料的逆向设计奠定了理论基础。

交流类型：主题报告

E12-KN-06

AI-Driven Molecular Modelling of Materials for Clean Energy Conversion

Yan Jiao

The University of Adelaide

The goal of achieving zero-carbon emissions by 2050 has driven the search for alternative industry solutions that can replace the traditional fossil fuel-based economy. With the technology and infrastructure in place to produce clean electricity from renewable sources such as solar or wind, the ability to generate it on a large scale is rapidly increasing. This presents a prime opportunity for the production of carbon-free fuels and chemicals through the use of electrocatalysis. This method enables the conversion of green electricity into chemicals and fuels, and vice versa, providing a path towards a sustainable future.

A central challenge in electrocatalysis remains the design of catalyst materials that are both highly active and selective. Traditionally, molecular modelling has helped address this by offering insights into reaction mechanisms and guiding material design. Increasingly, artificial intelligence is playing a transformative role in this space. AI models trained on quantum mechanical data or experimental results can rapidly screen material candidates, identify structure-performance relationships, and uncover hidden patterns that may not be obvious through conventional approaches.

My talk will highlight how we have used molecular modelling in the past for clean energy conversion reactions, the emerging shift toward machine learning, and how it is expected to drive the next wave of breakthroughs in predicting and optimising electrocatalysts for clean energy applications.

交流类型：主题报告

E12-KN-07

人工智能驱动的高分子材料设计制备

林嘉平

华东理工大学

先进聚合物材料在航空、航天和民用领域发挥着越来越重要的作用。然而，传统试错法很难解决某些长期困扰材料设计制备的难题，实现颠覆性的变革。科学研究已从实验观察、理论推演、计算模拟进入到基于人工智能（AI）的第四范式，基于 AI 的新研究范式已在生命、药学等领域取得重要进展。近年来，一个极具挑战的课题，就是将 AI 应用到材料领域。使材料研究手段发生变革，实现原始创新。报告人及团队针对聚合物材料，通过收集数据，发展数字化方法，构建数据库。发展适用于聚合物特点的机器学习方法，建立 AI 性能预测模型。创建了基于基因组合概念的结构设计新方法。运用全新的研究范式，设计制备了一系列新型聚合物材料。例如，建立了环氧基体树脂的数据库，发展描述交联结构的描述符，基于高斯过程回归建立了环氧树脂力学性能的机器学习预测模型，在此基础上，设计出力学性能优异的树脂，其复合材料的力学性能大幅提高。此外，还将这一方法应用于生物大分子材料，如设计抗菌聚合物，通过建立了抗菌聚合物的数据库，发展结构描述符，基于深度学习

建立了抗菌聚合物性能预测模型，在此基础上，发展基于强化学习的反向设计策略，设计出性能优异的抗菌聚合物，其相关性能大幅提高。

交流类型：主题报告

E12-KN-08

重构分子轨道的机器学习算法

段赛

复旦大学

分子轨道 (Molecular Orbital, MO) 是分子中最基本的概念之一，与化学的各个分支密切相关。扫描隧道显微镜 (Scanning Tunneling Microscope, STM) 以其测量分子轨道空间分布的潜力而广受认可。然而，由于 STM 探针头中功能化原子的高角动量贡献不可避免地产生干扰，要在实空间中实现对分子轨道的高分辨率精确表征一直是一项长期存在的挑战。本次报告中，我们利用课题组发展的簇模型 Bardeen 近似 STM 模拟框架以及人工智能在图像识别方面的最新进展，建立了一个基于物理驱动的深度神经网络，命名为 STM-Net，用于从使用功能化探针获得的高分辨率 STM 图像中重建分子轨道。该方法利用了不同角动量贡献的可分离特性，成功实现了分子轨道的精确重建。研究结果表明，STM-Net 可以直接应用于多种实验观测，成功重建出不同条件下分子的原始分子轨道特征。此外，STM-Net 还能适应各种功能化探针状态及不同类型的基底，展现出该物理驱动框架的广泛适用性。这些成果为实现高分辨率下对分子轨道的精准表征铺平了道路，预计将为该基础化学概念带来新的见解和应用。

交流类型：主题报告

E12-KN-09

聚合物分相结构和性能的人工智能研究

李卫华

复旦大学

聚合物分相材料的性能受到单元化学结构、链结构、介观分相结构等多尺度因素的影响。随着人们对聚合物分相材料性能的需求不断提高，仅采用传统的实验试错和高分子经典理论、模拟方法难以满足快速设计和优化综合性能的需求。人工智能 (AI) 方法作为科学研究的第四范式，能够从大量数据中学习到的复杂的多尺度构效关系，进而加速聚合物分相材料的设计和 optimization。近年来，我们通过发展理论方法，阐明了聚合物分相材料的分子结构（组成和链结构）对其自组装行为的影响机制，建立了聚合物分相体系的基本设计规则。在此基础上，我们结合人工智能方法，实现了新颖分相结构的自动搜索、以目标分相结构为导向的分相体系链结构反向设计等。目前，我们正在将此类方法应用于聚合物分相材料的性能预测和优化中，通过建立“AI+计算机模拟”的聚合物分相材料多尺度性质预测及优化设计平台，推动聚合物分相材料的快速设计和应用。

交流类型：主题报告

E12-KN-10

基于扩散模型的极化子结构生成框架及应用

刘利民

北京航空航天大学

针对目前极化子体系缺乏统一刻画整体构型多样性和耦合行为的现状，基于我们提出的极化子描述符，提出了一种基于扩散模型的极化子结构生成框架。该方法不仅能够显著提升

极化子构型采样效率，还实现了极化子状态的条件生成与结构预测，在实际材料设计与构型筛选中具有广阔应用前景。

交流类型：主题报告

E12-KN-11

二维材料断裂韧性及其化学与结构调控

张助华

南京航空航天大学

Two-dimensional materials (2DMs) are prone to brittle failure under load but a recent experiment has demonstrated intrinsic toughening in hexagonal boron nitride (h-BN), which calls for a general understanding of fracture toughness in 2DMs. In this report, we used atomistic calculations combined with a developed linear-scaling method to show that 2DMs with strong anisotropy of edge energy favor bifurcated cracks for intrinsic toughening as in h-BN, while those with weak edge energy anisotropy exhibit split cracks for brittle failure as in graphene. The interplay between chemical bond strength and fracture energy at bifurcated crack tips leads to alternate deflections and, thus, rough crack edges as observed in the previous experiment. We further develop a robust descriptor for identifying 2DMs exhibiting similar fracture behavior to that in h-BN. More interestingly, we reach a physically interpretable formula capable of quantitatively determining the toughness of 2DMs based on easily accessible intrinsic features of elements. We then also find that the toughness of bilayer h-BN significantly depends on the stacking registry and twist angle, achieving a variation magnitude of up to 80% by just twisting the bilayer by only 0.01 degree. These findings lay a solid foundation for nanodevice applications where controlled toughness is required.

交流类型：主题报告

E12-KN-12

数据与知识驱动的电化学储能材料精准制备

刘建军

中国科学院上海硅酸盐研究所

材料性能在很大程度上受其多尺度结构的影响，而对多尺度结构的精准调控对制备工艺提出了极高的要求，致使许多理论预测的材料难以在实验中实现。为应对这一挑战，有必要构建以材料智能体为核心驱动的全流程智能设计平台，融合智能计算、自动化实验、自动化建模与知识挖掘等关键技术，推动新材料研发从传统的“试错式”方法向高效、精准的“智能化”范式转变。本报告聚焦于融合数据与知识的材料大模型与智能体技术的开发与应用，旨在构建材料结构与物理化学性质数据库，研发面向电化学储能材料的结构设计与工艺优化的人工智能模型，并进一步推进材料科学大模型与自动化混合-压制-烧结固相合成实验技术的发展。通过构建集设计、制备与表征于一体的材料智能科学家系统，实现新型电化学储能材料从设计到制备的闭环式迭代优化，加速材料研发过程的智能化转型。

交流类型：主题报告

E12-KN-13

人工智能辅助电催化剂设计的思考

曹达鹏

北京化工大学

面对当前双碳政策的战略目标,发展清洁能源已成为各国政府、科研机构以及企业关注的焦点。然而发展高性能的催化材料是清洁能源催化转化的核心。人工智能已经广泛应用到了各个领域,尤其是生命以及药物的研究中。怎样把人工智能引入到催化材料的研发中值得我们深入研究。本报告将从人工智能的发展开始,结合本组提出的结构描述符新概念,以及描述催化表面的 **BASED** 新理论,对人工智能辅助催化材料的设计提出了一些思考,期望能将人工智能高效用于催化剂的筛选与设计。

交流类型: 主题报告

E12-KN-14

电子结构预测通用大模型

向红军

复旦大学

"大数据+人工智能"正在形成计算物质科学领域的新研究范式。本报告将介绍我们开发的电子结构预测通用大模型,主要包括:(1)开发了基于 E(3)等变图神经网络的 HamGNN 模型,该模型严格保持物理系统固有的对称性,能够精确拟合分子和固体的电子哈密顿矩阵,并在碳同素异形体、硅同素异形体、SiO₂ 异构体和 BixSe₃ 化合物等多种系统上展示出卓越的迁移性能和泛化能力;(2)基于 Materials Project 中几乎所有晶体结构的第一性原理计算数据训练的通用电子哈密顿量模型,该模型能够预测整个周期表范围内的电子结构,包括复杂的多元素系统、固态电解质、莫尔扭曲异质结构和金属有机框架;(3)通过将自旋轨道耦合(SOC)哈密顿量分解为自旋无关项和 SOC 修正项,实现对多样复杂系统中自旋轨道耦合效应的精确建模,为快速发现量子材料铺平了道路。这些方法已集成到我们自主开发的材料性质分析与模拟软件包 PASP 中,并建立了全球首个基于 AI 的大型电子结构库和在线预测开放平台(<https://sci-ai.cn>)。

交流类型: 主题报告

E12-KN-15

LiBs 正极原子分散催化剂的理论模拟与单原子催化电子描述符

武晓君

中国科学技术大学

锂硫电池(LSBs)因其高理论能量密度和低成本而被认为是下一代高能量密度电池系统的有前景的候选者。然而,复杂的多电子多步硫氧化还原过程,尤其是缓慢的固液相转化,降低了锂硫电池的整体性能。为了加速转化动力学并抑制严重的锂多硫化物(LiPS)穿梭效应,提出了催化效应的概念。在此,利用第一性原理计算,理论研究了在锂硫电池正极中负载的原子级分散催化剂,包括单原子催化剂、双原子催化剂和三原子催化剂。研究揭示了 C₂N 负载的单原子和多原子单簇催化剂在硫还原反应(SRR)中的催化机制和结构-活性关系。此外,不同金属之间的协同效应增强了金属位点的固有活性,有效调节了吸附结构,加速了多硫化物还原和 Li₂S 分解的反应动力学。在此基础上,进一步发展描述负载单原子催化的轨道描述符,描述单原子催化剂稳定性和活性。

交流类型: 主题报告

E12-KN-16

图神经网络方法的发展及应用

李有勇

苏州大学

我们在 CrystalGNN 中引入了动态的嵌入层，能够与神经网络训练过程中的消息传递层相联系，从而实现原子信息的自学习过程，发展出了自学习输入图神经网络方法 SLI-GNN。该自学习过程通过神经网络对嵌入层的反馈，能够捕捉原子之间的相互联系，并且实现原子特征的自我更新。SLI-GNN 在标准数据集上取得了与 CGCNN 相当且部分更优的性能，同时其需要的输入更少，具有更好的迁移性能。我们提出的 SLI-GNN 能够实现自学习原子输入，展现出了较高的准确性、良好的泛化能力以及出色的迁移学习性能，并且在表界面材料和功能材料设计中得到应用，加速了自下而上的新型材料的设计。

交流类型：主题报告

E12-KN-17

凝聚相材料超快激发态动力学

龙闰

北京师范大学

非绝热效应显著影响着激发态动力学行为，在光物理与光化学过程中发挥着关键作用。本报告聚焦电子-声子耦合、自旋-轨道耦合与库伦耦合等多种复杂相互作用，深入探讨了一系列典型材料体系中的电荷与自旋弛豫动力学。这些研究为实验和理论上长期存在的争议问题提供了清晰的物理图像，对于深入理解非绝热效应主导的激发态动力学过程具有重要的科学意义。

交流类型：主题报告

E12-KN-18

AI 加速 ZSM-5 分子筛催化长链烯烃芳构化过程中活性位点的筛选

王宝俊

太原理工大学

轻质芳烃苯、甲苯和二甲苯（BTX）是重要的有机化工原料。甲醇制芳烃工艺（MTA）是煤化工路线生产芳烃的重要途径。目前，MTA 工艺中主要存在芳烃产物和 BTX 选择性低的问题。本研究采用密度泛函理论（DFT）和机器学习（ML）相结合的方法，针对 C6、C7 和 C8 长链单烯芳构化过程，明确了脱氢反应和环化反应的活性中心分别为 Lewis 酸和 Brønsted 酸。基于 DFT 计算的 C6 和 C7 烯烃在不同 L 酸落位的催化剂上脱氢反应建立高质量数据集，ML 对计算密集的 C8 烯烃脱氢反应的活性位点进行预测，快速筛选出高脱氢活性的 L 酸落位，并用 DFT 验证了预测结果的准确性。进一步探究了高脱氢活性的催化剂上 C6、C7 和 C8 长链二烯至环单烯的环化过程，得出六元环是关键环状中间体。微观动力学分析了 C6、C7 和 C8 单烯生成不同芳烃产物的 logTOF 值，并得到不同芳烃产物生成的最可能芳构化路径。同时，计算得到高脱氢活性位点的催化剂上 BTX 的选择性高达 64.1%。最后探究了孔道择形效应对芳烃产物扩散的影响，发现对二甲苯在分子筛孔道中展示出更小的位阻效应，更容易从分子筛孔道扩散出去。

交流类型：主题报告

E12-KN-19

B 基催化剂配位结构及其催化功能

傅钢

厦门大学

交流类型：主题报告

E12-KN-20

金属催化剂的工况模拟与理性设计

高崑

中国科学院上海高等研究院

构效关系是催化科学的核心问题，也是催化剂理性设计的前提。传统催化研究基于实验前后观测的催化剂结构的理论模拟对理解催化反应机制起到了巨大的推动作用，但理论和实验之间在定量上的数量级差异使得现有催化机制的可靠性存在很大的不确定性。特别是近年来大量原位实验表明纳米催化剂的结构形貌在真实工况条件下动态变化，对于原有基于静态构效关系的催化理论形成了巨大冲击。为了解决上述问题，近年来我们聚焦于金属纳米催化剂的原位模拟的理论框架和模拟方法发展，原创性的提出了工况条件下的多尺度结构重构模型（MSRM），不仅在相同的实验条件下精确的模拟再现了纳米催化剂的形貌变化，而且理论预测了在宏观时空尺度下的催化剂表面结构演变、烧结等多个全新的分子机制及相应的催化性能。目前，我们正将上述方法和人工智能算法相结合，积极推进催化剂在工况条件下的理性设计。

交流类型：主题报告

E12-KN-21

Feature learning: Dimensionality augmentation via attention-based embedding features

刘轶

上海大学

In feature engineering, one often reduces redundant dimensionality of raw feature space through selection. However, feature reduction poses a risk of removing critical yet unknown influence factors. In this work, we develop a general dimensionality augmentation approach for feature learning using attention-based embedding vectors constructed by transfer learning, to represent materials' compositions and elementary physiochemical descriptors beyond conventional concatenation to achieve more accurate prediction of materials properties. Firstly, the high-dimensional embedded features (explicit Learnable Parameter Attention, LPA and implicit Transformer-based Self-Attention, TSA) were constructed by attention-based pretrained self-supervised learning using deep neural network models (multi-layer perceptron, MLP) with materials descriptor labels calculated analytically where attention scores can be used as feature importance. Next, the MLP models equipped with these embedded features were further fine-tuned by transfer learning to high-value property regions, which outperformed the MLP and tree-based baseline models with conventional features of concatenated compositions and descriptors in predicting melting temperatures of Ni-based superalloys as a case study. Finally, the inverse design via global optimization using genetic algorithm (GA) combined with the embedded features (GA-MLP_LPA/TSA) was performed with the attention-based feature importance as crossover probability. The integrated protocol surpassed the baseline Bayesian optimization in several statistical metrics. The proposed embedded feature models can capture correlations and couplings among features, providing a robust and efficient high dimensional materials representation generally applicable to both forward property prediction and inverse materials design via machine learnings.

交流类型：邀请报告

E12-I-001

超快合成与人工智能

陈亚楠

天津大学

交流类型：邀请报告

E12-I-002

基于量子光研究电子的动力学过程：高时间-能量分辨的光谱理论和方法

张哲东

香港城市大学

激发态动力学是理解光化学过程的重要一环，其关键的研究工具是超快光谱学。然而随着研究尺度的深入，现有方法展现出了诸多限制，例如瞬态光谱的能量-时间分辨无法兼顾：超短脉冲具有高时间分辨但谱宽很大。这给飞秒尺度下电子过程研究(如锥形交叉)在原理上带来极大的瓶颈。此外，复杂分子与光的耦合动力学难以用现有的商业算法来描述。沿着此条线，本次报告将介绍我们最近在分子体系的高激发态动力学及其多维光谱的工作，其中光量子态将给出新的光学信号和分子谱学指纹。主要包括：(1) 基于纠缠光子的飞秒受激拉曼散射的微观理论；(2) 基于高增益压缩光的分子暂态吸收光谱。我们基于量子电动力学和随机动力学发展了有机分子体系的量子光光谱的微观理论和计算方法。结果给出基于量子光的（如量子关联、单光子等）泵浦-探测谱，其能够兼顾时间-能量分辨并超越经典极限。这些清晰展示出电子穿越锥形交叉的实时过程，以及给出了量子光学信号与分子激发态结构之间的定量关系。

交流类型：邀请报告

E12-I-003

金属团簇催化还原 NO 生成 N₂ 反应机制研究

李晓娜

北京理工大学

将有毒的氮氧化物(如 NO)和 CO 催化转化为 N₂ 和 CO₂ 是缓解空气污染的重要途径之一。NO 还原过程会不可避免生成中间产物 N₂O，其比 CO₂ 具有更严重的温室效应。科学家一直致力于将 NO 选择性还原为 N₂。在原子分子水平认识催化活性位的结构特征和 NO 还原反应机制，是理性设计和精准调控催化材料的科学基础。但实际催化剂表面结构多样、反应网络复杂、活性位结构模糊，反应机理不明确。原子团簇可作为模拟实际催化剂上活性位的理想模型，可在真空条件下认识活性位的结构和本征反应，通过结合理论模拟可获得催化反应的机制。近期，我们利用飞行时间质谱技术结合量子化学模拟，研究了系列气相金属团簇催化还原 NO 的反应，成功设计制备得到了 RhCe₂O₃-团簇，其可 100%将 NO 还原为 N₂，结合理论分析，获得了关于异核金属团簇上三原子“Ce δ^+ -Rh δ^- -Ce δ^+ ”路易斯酸碱对选择性还原 NO 生成 N₂ 的新机制。并进一步通过理论模拟证实，此机理在 RhTa₂O₃-和 RhV₂O₃-团簇催化还原 NO 生成 N₂ 过程仍使用。

交流类型：邀请报告

E12-I-004

超复数泛函理论的建立与发展

苏乃强

南开大学

Kohn-Sham 密度泛函理论 (KS-DFT) 和约化密度矩阵泛函理论 (RDMFT) 是处理多电子问题的两大独立且精确的泛函理论。然而, 它们在应对强关联和动态关联效应时均存在局限。为此, 本课题组在超复数维度下构建泛函理论框架 (HCKS), 实现了 KS-DFT 与 RDMFT 的统一, 并在此框架下提出了第三种精确泛函理论——1-HCKS, 为复杂体系电子结构的高精度预测开辟了全新路径; 为了提升 HCKS 与 RDMFT 的计算效率, 我们开发了“以隐为显” (EBI) 和耦合优化 (CO) 算法; 同时, 通过引入短程修正轨道泛函 (wP22), 提高了强关联体系的计算精度。该报告将系统介绍本课题组在探索这一新理论框架的研究进展, 展示超复数泛函理论的潜在价值及其广阔的应用前景。

交流类型: 邀请报告

E12-I-005

机器学习加速氢能源材料理论设计

张亮

清华大学

“双碳目标”下, 氢能作为同时满足清洁低碳和灵活高效的能源载体近年来被广泛研究。利用可再生能源, 通过电催化制取和利用氢气是氢能高效安全利用和实现可持续发展的关键途径。然而, 目前用于电催化水分解和氢燃料电池的催化剂严重依赖于贵金属催化剂 (例如 Pt, Ir, Ru 等金属)。开发寻找高性能低成本的电催化剂用于氢电转化显得尤为必要且迫切的。合金催化剂可以有效降低贵金属载量, 甚至进一步推高催化剂性能。不同元素原子占据晶格位点的有序度是合金催化剂原子排布的关键特征之一, 对催化剂的活性和稳定性有重要影响。本工作将介绍我们近期若干基于主动学习加速合金催化剂的理论工作。1-3 通过将密度泛函理论方法和贝叶斯优化相结合, 我们可以快速、高效地搜索和优化新型合金催化剂的组成和结构。利用该模型, 我们对电解水制氢和燃料电池中关键反应氧还原催化剂、氢氧化催化剂、析氧催化剂等进行了优化设计。优化后的合金催化剂表现出优异的活性和稳定性, 并且相比于传统贵金属催化剂具有更低的成本和更好的可持续性。

交流类型: 邀请报告

E12-I-006

机器学习加速新材料设计开发

杨利明

华中科技大学

交流类型: 邀请报告

E12-I-007

极端服役环境高熵合金智能研发及材料知识挖掘

张周然

国防科技大学

面向极端服役环境下活性高熵合金结构毁伤一体化应用需求, 本研究针对材料设计中的小数据集挑战, 构建了多层次、多策略、多目标的活性高熵合金智能设计优化体系, 特别是开发了 (1) 基于改进样本迁移学习的合金强度智能优化算法; (2) 整体论视角下信息融合驱动的合金塑性精准预测模型; (3) 物理约束嵌入的生成对抗网络数据增强方法。在此基础上, 跳出机器学习通过挖掘数据寻找相关性的模式识别和预测框架, 回归科学研究的理论建构本质, 初步构建了融合思维链微调 and 专家反馈强化学习的材料应用场景大模型, 有望促

进实现从数据相关性挖掘向科学认知理论构建的范式跃迁,为材料科学研究提供了科学人工智能驱动的新理解框架和理论发现新路径。

交流类型: 邀请报告

E12-I-008

基于人工智能的铁电材料逆向设计

黄厚兵

北京理工大学

交流类型: 邀请报告

E12-I-009

人工智能加速电池研发: 从小样本到大模型

万佳雨

上海交通大学

准确预测电池寿命对于确保电池的及时维护与安全运行至关重要。尽管数据驱动方法近年来取得了显著进展,但其预测精度常常受到标注数据稀缺的限制。为应对这一挑战,我们提出了一种半监督学习技术,称为部分贝叶斯协同训练(PBCT),用于提升电池寿命预测建模能力。该方法利用低成本的未标注数据,挖掘其中潜在信息,从而加深对数据内在模式的理解,并显著提高寿命预测的准确性。PBCT在寿命预测精度方面相比现有方法最高提升达21.9%,同时对数据采集的额外开销几乎可以忽略。此外,研究还表明,在训练过程中引入未标注数据有助于揭示影响电池寿命的重要因素,而这些因素在仅依赖少量标注数据时可能被忽视。本研究提出的半监督方法为实现高效且可解释的数据驱动电池状态评估提供了新的研究方向。

交流类型: 邀请报告

E12-I-010

AI for Science 新基建赋能材料研发

孙伟杰

北京深势科技有限公司

基于 AI for Science 的科研新范式,掀起材料研发基础设施革新浪潮,构建贯穿“读”“算”“做”的全流程科研生态,为全球科研人员的创新研究注入强劲动能。“读”指科学智能导航,整合1.6亿篇文献专利知识、2000万活跃学者信息,实现科研文献多态检索与智能问答;“算”为科学智能大脑,依托自研深势·宇知 AI4S 大模型体系,打造丰富多元的计算模拟应用矩阵,内置开箱即用的软件工具,支持多元算力资源的灵活调配与高效协同;“做”即科学智能本体,为智能化实验室建设与共享搭建统一接口、营造开放生态。依托 AI“读 - 算 - 做”闭环,推出全球材料研发专属解决方案,全方位赋能材料研发全产业链。

交流类型: 邀请报告

E12-I-011

AI 辅助的集成电路功能材料开发与设计

鞠生宏

上海交通大学

随着集成电路的纳米制程工艺逐渐逼近物理极限,芯片3D堆叠工艺对集成电路功能材料热、力、电等性能均提出了极高要求。目前集成电路功能材料优化设计方法还主要依赖于

传统的试错法，且考虑参数局限，整体设计效率低、成本高。本报告讲主要介绍以下内容，

(1) 基于可解释机器学习的多元互连合金材料开发：融合主动学习与第一性原理计算，实现了基于可解释机器学习的二元互连合金材料开发，筛选出了 100 种具有高内聚能和低 $\rho \times \lambda$ 值的二元金属间化合物，包括 VMo、IrRh₃、PtRh₃、NbRu 和 CrIr₃，有望成为传统 Cu 互连材料的潜在替代品；(2) 基于可解释 Transformer 的介电化合物高通量设计与物理机制挖掘：构建了 Transformer 变分编码器，动态解析正交维度上的样本-特征交互，实现了介电化合物高通量设计与筛选，探索了 22 种 high-k 材料 ($\epsilon > 25$) 以及 16 种 low-k 材料 ($\epsilon < 3.9$)。以上方法与结果可为新一代集成电路功能材料的开发提供理论与方法支撑。

交流类型：邀请报告

E12-I-012

机器学习加速的晶格热导率计算

胡振芑

南开大学

晶格动力学是固体物理的基础研究内容之一，通过晶格动力学和玻尔兹曼输运方程可以计算材料的晶格热导率。多项研究表明考虑四声子过程能够提高材料晶格热导率的计算精度，但是往往需要大量的计算开销。针对这一问题，本课题组基于机器学习势方案，开发自适应学习流程，提升高阶力常数计算精度，加速材料晶格热导率的计算和预测。

交流类型：邀请报告

E12-I-013

功能材料在芯片元件中外场响应的多尺度模拟

陈爽

南京大学

忆阻器是神经形态芯片的基本电路元件，致力于突破冯·诺依曼瓶颈，来实现数据的并行处理和存算一体。我们围绕两类典型忆阻器——金属导电细丝型和铁电极化型，发展多尺度模拟方法来揭示阻变层功能材料外场驱动下的“0”态与“1”态的开关，最终提出了新器件设计思路与器件性能提升的策略。针对金属导电细丝型忆阻器，我们发展了动力学蒙特卡罗 (kinetic Monte Carlo, KMC) 方法，考虑存储介质的非均匀性，即通过阻变层纳米微结构的调控动态再现了该类忆阻器中三种不同的细丝生长模式；还进一步发展了重整化群求解的限制性渗流模型，将三种生长模式处理为二级相变，预测了其转变点。随后，我们进一步修正 KMC 模型，模拟了在活性金属电极和介电层间引入含尺寸可控纳米孔的离子阻挡层后细丝的生长，提出了提升该类忆阻器稳定性的策略。针对铁电忆阻器，我们选取 α -In₂Se₃ 作为阻变层材料，设计了活性层厚度大于 20 nm 的多通道忆阻器，基于铁电极化关联的肖特基发射发展了器件 I-V 曲线的计算方法，来证实这些器件潜在的神经突触功能；我们以 CuInP₂S₆ 作为阻变层材料，设计了活性层厚度小于 5 nm 的铁电隧道结，并基于铁电极化开关的隧穿导电发展了结合铁电极化动力学模型和非平衡格林函数的 I-V 曲线的计算方法，成功证实了该忆阻器的神经突触功能。我们关于芯片元件的多尺度模拟，动态再现其内部外场响应的阻态开关过程，计算了其宏观性能参数，并提出了器件性能提升的纳米调控策略，也设计了基于二维铁电半导体的多通道忆阻器，为加速神经形态芯片元件的研发提供了理论依据。

交流类型：邀请报告

E12-I-014

固态电池材料界面 AI 计算

杨孟昊
同济大学

构筑高稳定固态界面是实现固态电池优异性能的关键科学问题。申请人致力于构建多尺度智能模型优化界面,通过材料大数据学习来阐明界面的结构与性能关系,大幅度加快了全固态电池的研发速度。取得如下创新性成果:1)建立了从微观到介观的跨尺度界面模型,开发了电池充放电循环新算法;2)揭示了离子哑铃状传输路径,构建了界面结构扩散性能数据库;3)阐明了无序原子层对界面结晶促进作用,发展了固态界面形核生长理论。今后将进一步构建生成式人工智能模型设计界面,深入研究固态界面的时空动态演变机制,建立新概念材料知识图谱数据平台。

交流类型:邀请报告

E12-I-015

基于物理信息嵌入的分子表示学习:实现高分子材料多目标性质精准预测

钱虎军
吉林大学

机器学习方法已在材料领域展现出了巨大潜力。分子表示作为一种将化学分子结构转化为计算机可读的数据结构的方法,是机器学习中不可或缺的一步并且对与机器学习模型的性能起决定性作用。SMILES、分子图和分子指纹等是常见的几类分子表示。近年来人们也专注于将更多的分子拓扑结构细节或化学常识等嵌入到分子表示中以提高性能。然而,在高分子材料的研究中,由于材料的构-效关系往往呈现出典型的多尺度特征,同时由于受到小数据集的影响,使得上述传统方法在多目标优化方面进展缓慢。针对该问题,我们提出了MolCLIP方法,该方法将MD模拟中获得的多维度数据作为输入,从而嵌入了高分子体系中特有的长程时空关联信息,是一个利用对比学习对性质相关的时空关联性计算数据进行整合的分子表示学习框架。MolCLIP采用基于CLIP的预训练模型,将分子拓扑结构与模拟获得的结构、动力学等多尺度物理信息融合,并将其应用于回归或分类任务。该方法有效解决了传统方法由于小数据集问题带来的多目标预测困难、泛化能力差等问题。MolCLIP作为一种将物理和化学知识嵌入到分子表示的全新架构,在特定领域可以提供更好的性能和更佳的可解释性,从而在有限的材料数据中实现准确的多目标性质预测。

交流类型:邀请报告

E12-I-016

化学驱动的机器学习势构建方案

郁琦
复旦大学

机器学习势目前已经成为化学、物理、生物和材料科学等领域进行计算模拟的重要工具。目前,主流的构建方案基于原子能量分解或多体展开理论,旨在实现对复杂高维体系相对高效准确的描述。然而,原子能量分解所得的原子能量缺乏实际化学意义,而多体展开方法通常面临高阶展开项致计算复杂度指数增长的挑战。我们提出了一种全新的机器学习势构建框架MB-PIPNet,成功实现了势函数模型在匹配第一性原理精度的同时,能与传统分子力场方法计算效率的高度融合。本方法摒弃了传统的原子能量展开方案,将复杂体系的总势能分解成有效分子单体能量之和,可以具有更好的化学意义,同时能够直接描述分子自身结构变化及其对外界环境的响应程度。MB-PIPNet框架已在不同气相和凝聚相复杂体系中进行了系统测试,为开发兼具传统力场速度和第一性原理精度的机器学习势提供了全新的思路。

交流类型：邀请报告

E12-I-017

离子铁电中的高电致应变、负压电和负热膨胀

吴梦昊

华中科技大学

在 Mooser-Pearson 图中, 由于离子键和共价键的不同特性, 二元离子化合物形成具有高配位数的非极性对称结构, 而纤锌矿结构应出现在共价区。纤锌矿结构的四面体键合构型打破了反转对称性产生电极化, 但翻转过程中会发生共价键的断裂和重组, 高势垒使其极化难被电场翻转。通过第一性原理计算辅以机器学习势, 我们发现了一些高电离度体系可产生具有方向性的类共价离子键, 形成纤锌矿等极性结构, 比如由超卤素、超碱组成的超盐, 或阴阳离子半径过于悬殊的卤化锂等体系。由于库仑作用的长程特性, 类共价离子键不仅降低了它们的铁电翻转势垒, 还降低了极性相和非极性相之间的相变势垒。加上两者之间可观的密度差和熵差, 这种具有超低势垒的相变可以通过施加压力、电场或温度变化来驱动, 从而产生各种奇异效应, 包括前所未有的巨大电致应变、负压电性和负热膨胀, 甚至压卡效应。类似这些效应也存在于 AgCrX_2 等离子导体中。

交流类型：邀请报告

E12-I-018

机器学习在气相团簇与氮气反应研究中的应用

李子玉

中国科学院化学研究所

机器学习作为数据驱动的研究新范式, 正在成为推动科学发现的重要工具, 尤其在有机合成、材料设计和光谱分析等领域展现出显著优势。在化学反应研究领域, 通过构建结构-活性关系模型, 机器学习不仅能够预测新型反应体系, 还可为实验设计提供理论指导。气相团簇因其明确的活性位点结构和清晰的基元反应路径, 被视为揭示凝聚相催化反应微观机制的重要模型体系。然而, 传统研究多聚焦于单一团簇体系的活性解析, 缺乏普适性反应描述符和定量预测模型, 难以系统阐明结构-活性关联规律并预测反应速率。基于本团队在金属团簇与氮气反应机制的前期研究成果, 本研究成功开发了具有预测功能的机器学习模型。研究采用多级特征提取策略, 从团簇整体结构、局部化学环境及活性位点三个维度系统构建电子与结构特征集, 通过特征工程筛选出调控团簇反应性的关键参数, 并揭示了其影响反应活性的物理化学机制。为提升模型性能, 创新性地引入数据增强与特征增强的双重策略: 前者通过特征空间插值扩展数据集, 增强模型鲁棒性; 后者通过构建特征差异矩阵, 建立了团簇间特征差异与反应速率差异的定量关联, 最终构建了基于深度神经网络的预测模型。该研究提出的专家知识引导的机器学习框架, 实现了对金属团簇亲氮特性影响因子的有效提取与量化分析, 突破了传统单案例解析的局限性。

交流类型：邀请报告

E12-I-019

基于 AutoML 特征删除实验解释化学吸附强度

贺玉莲

上海交通大学

反应物在催化剂表面的化学吸附能 (E_{ads}) 是理解并确定最优催化剂的重要特征之一。然而, 催化剂表面和化学吸附反应本身的复杂性, 使得识别决定 E_{ads} 的关键物理量面临重大挑战。为应对这一问题, 本研究提出了一种全新的方法——特征删除实验 (feature deletion

experiment)。该方法基于自动化机器学习 (AutoML)，用于从高通量密度泛函理论 (DFT) 数据库中提取知识。研究发现，对于二元合金表面而言，与催化剂合金的电子和物理化学性质相比，局部吸附位点的几何信息是决定 E_{ads} 的主要物理量。通过将特征剔除实验与基于实例的变量选择方法 (INVASE) 相结合——一种基于神经网络的可解释人工智能 (XAI) 工具，研究构建出一组表现最佳的特征集，该特征集包含 21 个内在的、非 DFT 计算获得的性质，并在包含 1600 多种合金表面和 8400 个化学吸附反应的全元素周期表化学空间中，实现了 0.23 eV 的平均绝对误差 (MAE)。本研究展示了基于 AutoML 的特征剔除实验在开发简洁、可预测且具有理论意义的模型方面的稳定性、一致性及其在处理复杂化学问题时最小化人为干预的潜力。

交流类型：邀请报告

E12-I-020

面向材料性能预测的大语言模型：弹性常数张量预测与材料设计

文通其

香港大学

高效且准确地预测材料性能对于推动材料设计与应用至关重要。借助大语言模型 (Large Language Models, LLMs) 的快速发展，我们提出了一个领域专用的大语言模型——ElaTBot，用于弹性常数张量预测，并以此为案例探索材料发现的新路径。ElaTBot 能够同时完成多项任务，包括弹性常数张量预测、有限温度下的体积模量计算，以及具有目标性能的新材料生成。该模型通过集成通用型大语言模型 (如 GPT-4o) 和检索增强生成 (Retrieval-Augmented Generation, RAG) 技术，进一步提升了其性能预测能力。

我们还开发了专用于 0 K 弹性常数张量预测的模型变体 ElaTBot-DFT，相较于在同一数据集上训练的材料科学专用大语言模型 Darwin，其预测误差降低了 33.1%。这一基于自然语言的方法展示了大语言模型在材料性能预测与逆向设计中的广泛潜力。其多任务能力为多模态材料设计奠定了基础，有望实现更加集成且多样化的材料体系探索。

交流类型：邀请报告

E12-I-021

ByteQC: Towards large-scale, high accuracy quantum chemistry simulation

吕定顺

字节跳动

Applying quantum chemistry algorithms to large-scale systems requires substantial computational resources scaled with the system size and the desired accuracy. To address this, ByteQC, a fully-functional and efficient package for large-scale quantum chemistry simulations, has been open-sourced at <https://github.com/bytedance/byteqc>, leveraging recent advances in computational power and many-body algorithms. Regarding computational power, several standard algorithms are efficiently implemented on modern GPUs, ranging from mean-field calculations (Hartree-Fock and density functional theory) to post-Hartree-Fock methods such as Møller-Plesset perturbation theory, random phase approximation, coupled cluster methods, and quantum Monte Carlo methods. For the algorithmic approach, we also employ a quantum embedding method, which significantly expands the tractable system size while preserving high accuracy at the gold-standard level. All these features have been systematically benchmarked. We further use ByteQC to study adsorption energy for a series of large scale system with the advanced feature 'embyte' in ByteQC at CCSD(T) level accuracy for $\text{MgO}(001) + \text{CO}$, graphene + small

organic molecules, and the metal-organic framework CPO-27-Mg + CO/CO₂. The results show that the adsorption energies calculated align within chemical accuracy with experimental values, achieving sub-chemical accuracy in the cases of MgO(001) + CO and CPO-27-Mg + CO/CO₂. Subsequently, we attempted to calculate graphene + water monomer by expanding the substrate under both PBC and OBC to eliminate finite size errors. We scaled up to graphene model consisting of 600 carbon atoms, and achieve some surprisingly finding.

交流类型：邀请报告

E12-I-022

AI + Automation 驱动化学与材料研发范式革新

王珺琚

深圳晶泰科技有限公司

交流类型：邀请报告

E12-I-023

AI platforms for atomistic simulations and beyond

Pavlo O. Dral

Xiamen University

AI is increasingly used for molecular and materials simulations and design. The development of the AI platforms for such AI + atomistic ("atomistic") simulations is, hence, indispensable for the progress in this field. For over a decade, our work focused on developing such platforms. MLatom is one of such platforms specifically designed for AI-enhanced atomistic simulations, it is an open-source software ecosystem seamlessly combining atomistic and quantum chemical simulations. Examples of simulations are accurate and fast infrared, Raman, and UV/vis spectra simulations, molecular dynamics, structure optimizations, and reaction mechanism exploration. This platform formed a basis for the online computing platforms Aitomistic Hub and Xiamen Atomistic Computing Suite (XACS), which enable atomistic simulations via a web browser. In addition, our Aitomia is an intelligent assistant with the knowledge of atomistic and quantum mechanical calculations, helping in setting up, performing simulations, and their analysis.

交流类型：邀请报告

E12-I-024

理论化学计算结合机器学习探究过硫酸盐催化活化及新污染物降解

敖志敏

北京师范大学（珠海校区）

交流类型：邀请报告

E12-I-025

机器学习赋能荧光探针理性设计

郑小燕

北京理工大学

NIR-II 成像技术因其高成像对比度在疾病诊断和手术导航中显示出巨大潜力。然而，现阶段缺乏明确的设计策略用以指导其开发。采用“聚集诱导发光（AIE）分子设计-量化计算-特征描述符筛选-实验验证”的研究思路，以多芳基吡咯（MAPs）荧光分子为模板，通过改

变取代基类型、位置、数量等设计了 62 个具有 AIE 特性的给体-受体型 (D-A) 分子, 系统的量化计算表明, 所设计的 MAPs 分子的光谱跨越可见光区到 NIR-II 区整个光谱范围, 并基于此提出了表征 NIR-II 荧光染料的关键描述符— ΔE_{gs} (基态前线轨道能隙) 和 μ_{gs} (基态电偶极矩)。进一步拓展计算, 表明这两个关键描述符不仅适用于 MAPs 类荧光染料分子, 也适用于国内外已报道的其它非 MAPs 类的 NIR-II 荧光染料分子, 具有很好的普适性。在对 62 个分子基态、激发态结构和吸收、发射光谱系统理论计算的基础上, 从与光谱性质相关的 16 个描述符中筛选出两个关键描述符 (ΔE_{gs} 和 μ_{gs}), 它们与最大发射波长之间存在强相关性, 可用于预测 NIR-II 区的发射光谱, 并根据拟合的线性曲线, 提出了 NIR-II 染料的判定标准: ΔE_{gs} 和 μ_{gs} 的阈值分别为 2.50 eV 和 22.55 D, 即当 $\Delta E_{gs} \leq 2.50$ eV, $\mu_{gs} \leq 22.55$ D 时, 分子的发射光谱可到达 NIR-II 区。对十个 MAPs 进行了实验吸收和发射光谱的测试, 表明这些 MAPs 的光谱范围与理论预测完全一致, 只有 MAP23-BBT 具有 NIR-II 发射。进一步计算从文献中收集近期国内外报道的 50 个非 MAPs 系列的 NIR-II 染料, 证明了所提出的两个关键描述符具有普适性。最后, 验证了 MAP23-BBT 在生物成像中的潜在应用。

交流类型: 邀请报告

E12-I-026

单原子催化及其能源环境应用的计算模拟

路战胜

北京化工大学

Recent years, heterojunction photocatalytic systems and transition metal-based catalysts have shown great potential in the fields of environmental remediation and energy conversion. Through density functional theory calculations and experimental studies, we have explored the activity mechanisms and performance optimization strategies of these catalytic systems. a) Experimental and theoretical calculations show that the Fe-CN/MoO₃ heterojunction regulates the local electron density through the interfacial electric field, and the interfacial bond between Fe-N4 sites and O at the built-in interface regulates the local electron density of Fe-N4 active center. The coordination between the Fe-N4 site and the MoO₃ interface promotes the directional transmission of electrons, thereby improving the CO₂ adsorption and H₂O₂ conversion efficiency. b) CoP/MXene catalysts exhibit excellent persulfate (PMS) activation ability and can efficiently degrade the plasticizer dibutyl phthalate (DBP) in the environment. DFT calculations reveal the adsorption sites of PMS on the CoP/MXene interface and the reaction paths of active species, further clarifying its degradation mechanism. c) single atom catalysis in the various application of Energy & Environment.

交流类型: 邀请报告

E12-I-027

数据与机制协同驱动的有机磷光材料设计

马会利

南京工业大学

磷光一般是指三线态激子的辐射跃迁, 常见于含有重原子的金属配合物, 广泛应用于光电器件和生物电子学等领域。但是这类材料被欧美等国家所垄断, 专利壁垒高。近年来, 有机磷光材料因具有质轻、价格低廉、环境友好等优势而迅速崛起, 为克服这一“卡脖子”问题提供了契机。然而, 由于不含重金属元素, 有机分子的自旋轨道耦合较弱, 难以突破单线态与三线态之间的自旋禁阻限制, 这一传统认知无法解释分子聚集体的室温磷光现象。针对这

一问题, 我们围绕分子聚集体与磷光性能之间的关联机制这一关键科学问题, 聚焦于电子结构、分子结构、聚集形态与磷光性质之间的关联机制, 从有机磷光材料的发光机理、构效关系和分子创制角度开展研究: (1) 建立了激发态组分主导磷光性能的理论模型, 阐明了有机分子的磷光来源, 解决了高效率与长寿命无法兼顾的难题; (2) 提出了抑制电子-振动耦合提升磷光性能的理论新机制, 阐明了聚集形态对磷光性质的影响规律; (3) 构建了表征磷光效率和寿命的分子描述符, 开发了机器学习辅助的高通量虚拟筛选软件, 为有机磷光分子的设计和筛选提供了理论依据和技术支撑。

交流类型: 邀请报告

E12-I-028

利用通用型势函数加速复杂催化反应体系研究

谢闻博

上海科技大学

Machine learning potentials (MLPs) have emerged as a promising technique to significantly enhance efficiency by replacing computationally expensive quantum mechanical calculations. However, there's a prevailing consensus that MLPs can only predict energies for structures similar to those in their training datasets, limiting their ability for exploring complex systems where encountering arbitrary structures is inevitable. Thus, it is fair to say generality is now the biggest challenge in MLP if they are to replace DFT as the main computational engine.

Our work addresses this critical gap by implementing a zero-shot learning EMLP training framework complemented by a novel sampling method, termed "Random Exploration via Imaginary Chemical Optimization" (REICO). Leveraging small systems composed of randomly generated "imaginary chemicals" and their subsequent optimization trajectories, our EMLP can proficiently navigate a vast array of unique local atomic environments. The resulting EMLP can tackle arbitrary reactive catalytic processes without needing to sample the structures nor reaction pathways.

Benchmarked across various representative calculations of heterogeneous catalysis, our EMLP achieves quantitative agreement with density functional theory (DFT) calculations. This demonstrates the potential of EMLP as a powerful, general, and ease-of-use tool for modeling complex chemical systems, setting the stage to significantly reduce reliance on DFT calculations.

交流类型: 邀请报告

E12-I-029

工业尺度新材料机器学习势能开发与应用

周天航

中国石油大学(北京)

交流类型: 邀请报告

E12-I-030

“NEP-MB-pol”——统一的高精度液态水机器学习势框架

徐克

香港中文大学

一直以来, 势函数的准确性和核量子效应是分子动力学中的两大难点。近年来, 迅速发展的机器学习势方法可以将势函数的准确性问题转化为训练数据集的准确性问题。这里我们

通过比较训练基于 MB-pol 方法的数据集（称为 NEP-MB-pol）和基于 SCAN 泛函的数据集（称为 NEP-SCAN）得到的 NEP 机器学习势模型，探讨了应用机器学习势描述液态水运输系数的准确性上限。结果表明，NEP-MB-pol 模型可以完美预测液态水的三个运输系数，包括自扩散系数、黏度系数和热导率。另一方面，NEP-SCAN 方法在准确描述液态水的质量和动量运输方面仍然存在不足，这主要是由于其对氢键强度的高估。这一问题可以通过温度平移法进行纠正。随后，我们尝试了两种量子校正方法来探索液态水中的核量子效应。包括，采用路径积分分子动力学对密度和粘度系数进行修正，以及使用频域量子修正可以在经典分子动力学结果的基础上得到量子修正的热导率，从而使得计算结构与实验值完美匹配。我们证明了基于机器学习势可以结合量子修正方法来准备描述液态水的物理性质，从而在计算模拟中准确获得了液态水的运输系数，并可以广泛应用于其他体系。

交流类型：邀请报告

E12-I-031

机器学习非绝热动力学揭示复杂体系光物理现象机制

李竞白

深圳职业技术大学

在微观层面理解分子的激发态动力学过程是解析光物理现象的关键。现有量子化学计算在非绝热动力学模拟的空间和时间尺度方面均存在算力瓶颈。近年来，机器学习势能模型的发展为克服非绝热动力学的模拟限制提供了新的方法，并显示出良好的多尺度方法兼容性。本工作报道了基于神经网络加速的多尺度非绝热动力学方法，展示了该方法在模拟分子聚集态激发态动力学的适用性，为聚集诱导发光现象提供了定量的机理解析。以分子晶体单重态分裂现象为例，进一步展示了该方法在解析分子晶体激发态超快动力学构效关系方面的特色。在此基础上，本工作提出了一种适用于孤立分子、静电嵌入体系和周期性体系的激发态势能面等变图神经网络架构，为模拟复杂体系的激发态动力学提供了基础。

交流类型：邀请报告

E12-I-032

人工智能均相催化反应设计

柯卓锋

中山大学

大数据驱动的人工智能催化反应设计为反应机理的研究带来新的机遇和挑战。传统的机理计算耗时费力，无法解决反应机理错综复杂、大规模数据通量巨大、高维空间的迁移和泛化带来的难题。针对上述挑战，我们开发了高效快速经济的反应机理自动化探索方法，发展虚拟合成智能设计策略，为促进机理和数据驱动的人工智能催化反应设计提供了新的工具和思路。通过智能设计指导实验，我们成功开发了系列原创的可持续催化体系，实现了高效、绿色、温和的均相可持续催化反应。

交流类型：邀请报告

E12-I-033

二维磁性材料的高通量设计及磁结构调控

孙家涛

北京理工大学

二维磁性材料凭借其超薄的原子级厚度在自旋电子学、太赫兹电子学等领域中展现出独特的优势。根据 Mermin-Wagner 理论，在有限的温度范围内，二维体系中各向同性 Heisenberg

模型不存在自发磁化,为了突破材料的各向同性磁结构的限制,如何挖掘具有各向异性磁结构的新型磁性材料并进行磁结构的调控是本领域的重要挑战。这里我们首先高通量搜索了材料数据库,发现了丰富的二维磁性材料并具有量子反常霍尔效应;发现顶位金属原子掺杂二维磁性材料可获得多铁材料;利用对称性给出了可能出现反常能谷霍尔效应的材料体系;指出二维磁性材料 NiI_2 具有新型螺旋磁结构且具有条纹电荷密度分布,与实验结果一致;预言了具有非共线非共面磁结构的二维层状结构具有高陈数的量子反常霍尔效应;发现了一类有机磁性材料具有光场可调的非平衡物态;验证了顶位 Li 掺杂的 CrTe_2 具有实空间尺寸最小的斯格明子磁结构,并具有应变可调控的拓扑磁结构,可用于高密度信息存储。以上研究为发现新型二维磁性材料设计新型自旋电子学器件提供了重要参考。

交流类型: 邀请报告

E12-I-034

Machine Learning-Driven Molecular Dynamics Insights into Nanobubble Coalescence Dynamics and Interfacial Stability: Environmental Modulation and Surface Effects

许雪飞

清华大学

Nanobubbles, with their anomalous stability and ultrasmall dimensions, play pivotal roles in diverse fields such as catalytic reactions, biomedical engineering, and microfluidic systems. Despite their technological promise, a fundamental gap persists in understanding their dynamic evolution and stability mechanisms at the molecular scale, particularly under complex interfacial and ionic environments. While existing studies on nanobubbles have utilized experimental approaches alongside computational methods such as coarse-grained and all-atom molecular dynamics (MD) simulations, the systematic application of high-fidelity MD simulations capable of resolving long-timescale dynamic evolution and molecular-scale mechanistic underpinnings remains limited. In this study, we employed a machine learning potential to investigate the dynamic behavior of two bulk nanobubbles of identical size, revealing that coalescence during their evolution significantly impacts bubble stability. The stability of such dual-bubble systems in pure water, hydrochloric acid, sodium hydroxide, and sodium chloride solutions aligns qualitatively with prior studies. Furthermore, we explored the detachment and stabilization of surface nanobubbles on various solid substrates, demonstrating that surface hydrophilicity and roughness critically influence the behavior of gas-liquid-solid contact lines, thereby modulating bubble detachment and stability. These findings advance the mechanistic understanding of nanobubble dynamics and coalescence regulation, offering potential applications in microfluidics, interfacial engineering, and energy-related technologies.

交流类型: 邀请报告

E12-I-035

OLED 发光材料的高通量筛选与逆向设计

宋丹丹

北京交通大学

OLED 显示技术作为当前主流显示技术之一,其显示性能主要取决于有机发光材料的特性,新型高性能发光材料的设计对于提升显示器件性能和实现技术自主创新具有重要战略意义。针对未来显示技术对发光材料在发光效率、器件稳定性和色纯度方面的更高要求,本研究融合机器学习与密度泛函理论(DFT)计算,构建了"分子结构-DFT 计算参数-实验性能"

的多层映射模型，系统解析了分子结构特征对材料光电和稳定性能的影响机制；基于该模型及分子生成算法，实现了发光材料的高通量虚拟筛选和面向特定性能目标的分子逆向设计，并筛选出多种高性能潜力的新材料。

交流类型：邀请报告

E12-I-036

基于“聚合基元”的有机聚合物能源材料机器学习研究

叶财超

南方科技大学

有机聚合物能源材料具备柔韧性、延展性和低成本等优势，在多个领域有着广泛的应用前景。研究有机聚合物材料的分子结构与性能之间的关系对于新型材料的开发至关重要。材料基因工程和人工智能机器学习方法为解决这一关键问题提供了有效途径。它们能够从海量数据中挖掘出结构与性能之间的内在联系，从而实现高效的材料设计和机理探索。在此背景下，针对有机聚合物能源材料的结构特点，作者提出了“聚合基元”的概念，并成功建立了有机聚合物功能材料的数据集及对应的“聚合基元”数据库，该数据库可应用于相关材料机器学习的“结构-性质”关系研究。基于聚合基元，创新地设计了“聚合基元分子指纹(PUFp)”和“聚合基元图(PU-Graph)”两种聚合物结构基元化表示新方法，数字化表示有机聚合物能源材料的本征结构，并应用机器学习研究有机聚合物的性能（迁移率、光电转换效率等）与聚合物结构的构效关系。开发了聚合物基元图神经网络可视化模型(PU-gn-exp)，提升了模型的训练效率，揭示了影响聚合物性能的关键聚合基元及优化策略，提升了聚合物构效关系机器学习模型的可解释性。

交流类型：邀请报告

E12-I-037

基于多模态数据融合神经网络的双层电磁干扰屏蔽复合气凝胶开发深度学习方法

谢兰

贵州大学

本研究采用化学沉积法在 ZnO 表面构建银修饰的 3D 导电网络(Ag@F-ZnO)，结合冷冻干燥和预铸工艺成功制备了非对称双层结构的 Ag@F-ZnO/WPU/BF 复合气凝胶。通过调控材料组成和结构，系统制备了 16 种不同配比的样品，并对其电磁屏蔽性能进行了详细研究。结果表明，厚度为 3 mm 的 Ag@F-ZnO4/WPU/BF6 样品在 X 波段表现出最优的屏蔽性能，平均屏蔽效能(EMI SET)高达 78.6 dB，吸收率(A)达到 0.96。为进一步优化材料设计，采用多模态数据融合模型对 Ag@F-ZnO/WPU/BF 复合气凝胶的性能进行预测分析。通过全连接神经网络(FCNN)和残差网络(ResNet)分别提取样品的数值特征和图像特征，构建了包括单模态和多模态融合在内的七种预测模型。研究发现，基于门控融合(GatedFusion)算法的 FCNN+ResNet 多模态模型预测效果最佳，对新样品电磁屏蔽性能预测的平均绝对百分比误差(MAPE)低于 5%，展现出优异的泛化能力。该研究不仅开发出高性能电磁屏蔽材料，更为功能材料的智能化设计提供了新的研究方法。

交流类型：邀请报告

E12-I-038

PaddleMaterial: A Data-Mechanism Dual-Driven Materials Development Platform

刘旭韦

百度公司

Traditional materials development is challenged by the complex structure-property relations in materials, multi-scale spatial features of materials, enormous materials search space, and high experimental costs. With continuous advancements in AI technology, AI is accelerating the resolution of these challenges in materials research and development. However, the AI-driven materials development field still faces issues such as diverse scenario tasks, rapid updates in model development, and a lack of a unified, user-friendly AI platform tailored for materials researchers, alongside the challenges posed by the integration of diffusion models, multimodal models, and other emerging techniques. To address these problems, this work proposes a novel materials development platform based on a data-mechanism dual-driven paradigm. The platform aims to deliver full-process intelligent support for tasks including material discovery, chemical synthesis, and alloy design through various deep learning models for multi-Scenario and multi-task, and the deep integration of intelligent algorithms and advanced simulation tools. At its core, the PaddleMaterial component utilizes a unified trainer architecture compatible with regression models, diffusion models, and multimodal models. By adopting a separated design for the trainer, sampler, and predictor, the platform achieves efficient model training and inference, catering to evolving research requirements and diverse scenario tasks. The underlying data encapsulation supports various data formats such as crystalline unit cells, molecular graphs, and multiple spectroscopic images, providing end users with a convenient and easy-to-use workflow—especially suited for integrating various simulation tools in material discovery scenarios. Furthermore, built on the PaddlePaddle deep learning framework, the platform is compatible with diverse hardware architectures and offers distributed training and inference capabilities. Experimental results indicate that this integrated platform significantly enhances the efficiency and accuracy of new materials development, providing robust support for the intelligent transformation of materials development and driving technological innovation in the industry. (PaddleMaterial: <https://github.com/PaddlePaddle/PaddleMaterial>)

交流类型：邀请报告

E12-I-039

聚海量算力高地 促创新产业生态

石鹏飞

国家高性能计算机工程技术研究中心

交流类型：邀请报告

E12-I-040

NEP89: 涵盖无机物和有机物的 89 元通用型机器学习势

樊哲勇

渤海大学

我们推出 NEP89, 一个基于神经进化势 (NEP) 架构的通用型机器学习力场, 能够在 89 种化学元素范围内实现媲美经验势的计算速度。NEP89 不仅在精度上与其他领先的大原子基础模型相当, 还在计算效率方面提升了 3-4 个数量级。NEP89 可广泛适用于多种体系, 包括非晶碳、液态水、固态电解质、成分复杂的合金、甲烷燃烧以及蛋白质-配体相互作用。更重要的是, NEP89 支持灵活微调, 大幅减少训练数据需求, 让用户能够快速针对特定应用场景获得高效与准确的机器学习力场。

交流类型：邀请报告

E12-I-041

基于 d-p 自旋耦合的室温磁性半导体设计

李星星

中国科学技术大学

磁性半导体作为自旋电子器件的核心单元，承担着自旋输运或调控的关键角色。然而，传统无机磁性半导体由于铁磁超交换耦合作用很弱，导致磁序通常只在低温下稳定，难以实际应用。因此，如何构建室温工作的磁性半导体材料一直是自旋电子学发展亟待解决的关键问题。为此，我们在理论上提出了通过调控配体分子自旋态和轨道杂化设计室温磁性半导体的新思路：将无机磁性半导体的中间磁耦合阴离子从单态调制为二重态，从单原子替换成共轭电子受体分子，在过渡金属和二重态有机分子之间建立起强的 d-p 直接交换耦合作用，这一作用比传统 d-p-d 铁磁超交换大一个量级，从而将磁序稳定在室温。基于此，我们通过第一性原理计算，选取反芳香性分子环、吡嗪及其类似物等典型共轭电子受体作为连接体，成功设计出多个室温工作的分子基磁性半导体材料。进一步，我们利用中心对称破缺六元环、五元环等，实现了室温多铁和多功能集成的磁性半导体材料。另一方面，通过在有机分子环上引入互变异构基元，实现了多个磁相变和拓扑相变材料。最后，我们对 2500 多个金属和共轭受体分子构成的框架结构进行了系统性筛选，并借助机器学习识别出了形成室温磁性的一些关键因素。

交流类型：邀请报告

E12-I-042

大规模机器学习探索材料设计边界

陆子恒

微软研究院

交流类型：邀请报告

E12-I-043

BioScore: 通用生物复合体系打分函数

谢昌谕

浙江大学

近年来，以 AlphaFold 系列为代表的深度学习算法不仅实现了单体蛋白的高精度结构解析，其最新一代的 AlphaFold3 更将预测范围扩展至蛋白质-小分子、蛋白质-蛋白质等各类生物复合体系。然而，进一步的生物复合构象评估与优化高度依赖于打分函数，打分函数的设计与优化已成为当前药物研发的核心挑战。现有的打分函数大多侧重蛋白与小分子的相互作用，缺乏对其他生物组分的建模与跨类型的灵活性，且通常仅适用于特定任务（如结合亲和力预测、虚拟筛选），无法满足多样化应用场景的需求。针对上述需求，我们提出了通用生物复合体系打分函数 BioScore，在三个关键维度上实现技术突破：1. 突破传统原子/残基的离散表征范式，将三维生物复合体系统一表示为不分层的几何集合图，通过全原子粗粒度表征方式实现统一的跨域分子表示；2. 使用通用的 E(3) 等变 Transformer 作为统一的模型编码框架，并利用双塔式建模实现打分、排名、对接、四种能力的平衡效果；3. 采用新型混合密度网络输出策略，做到不同生物复合体系的统一输出，实现全生物复合体系在一个模型框架下的有效打分。BioScore 在蛋白质-小分子、蛋白质-蛋白质等基准测试集上取得了良好表现，尤其是在蛋白质-蛋白质互作任务上效果显著优于传统对接工具与现有的深度学习算法。

交流类型：邀请报告

E12-I-044

基于量子点和机器学习的病毒感染检测方法

付浩浩

南开大学

本工作提出了一种基于量子点和机器学习的病毒感染检测方法，旨在快速判断核酸释放效率并实现病毒感染率的大规模计算。我们开发了高效双色定量单病毒追踪技术，该方法利用两种关键材料：生物素化的脂质（DSPE-PEG2000-biotin）和链霉亲和素修饰的量子点（streptavidin-modified quantum dots, SA-QDs）。首先，将生物素化的脂质插入病毒包膜，然后通过 SA-QDs 与生物素的特异性结合，实现对病毒包膜的标记（显示为绿色）。同时，结合 Cy5 标记的杂交链反应（hybridization chain reaction, HCR）技术标记病毒基因组（显示为红色）。通过全内反射荧光显微镜进行多色实时成像，记录荧光轨迹数据。在此基础上，我们设计了一套自动化程序，通过配对算法匹配绿色和红色轨迹，提取并归一化配对轨迹的坐标数据。利用人工标注的感染情况作为标签，采用 XGBoost 算法训练分类模型，实现轨迹的自动配对与感染状态分类。用户可输入大量轨迹数据，经配对和模型预测后，快速得出核酸释放的体系数量，计算病毒感染率。该方法通过全自动化流程显著降低人力、物力和时间成本，适用于大规模病毒感染评估。实验验证显示，XGBoost 在测试集上准确率超过 97%，并具高可解释性，其分类依赖轨迹起始与结束时的距离信息，与人类知识一致。程序基于 Python 开发，支持图形用户界面操作和轨迹可视化，为病毒感染研究提供了高效、自动化的工具。

交流类型：邀请报告

E12-I-045

功能肽生成与筛选平台的搭建

王颖

湖南师范大学

多肽广泛存在生物体内，迄今发现的多肽已达数万种，参与和调节机体内各系统、器官、组织和细胞的功能活动，在生命活动中发挥重要作用。百年来已经有 118 种多肽类药物获批上市，用于治疗多种疾病，包括内分泌调节、肿瘤疾病、免疫调节、骨质疏松、多发性硬化、HIV 感染和慢性疼痛等。为发现更多新型功能多肽分子，本课题组利用最新的深度学习模型，搭建了抗癌肽、抗糖尿病肽等多肽功能预测平台、创建了酸、甜、苦、咸、鲜等多种味觉肽生成模型，还基于高精度计算方法和机器学习框架建立了蛋白质-多肽相互作用能预测模型，为全面高效得开发功能肽提供了有力的技术支撑。本报告讲具体介绍课题组基于人工智能模型搭建的功能肽预测和生成模型，向同行汇报交流。

交流类型：邀请报告

E12-I-046

AI 驱动的纳米生物药物研发

王会

国家纳米科学中心

纳米生物材料在医药、能源、环境等领域具有广阔的应用前景。如何实现纳米自组装体系的可控构筑及功能是亟待解决的最具挑战性的重大科学问题之一。近年来课题组通过理论、计算和实验的互补努力，研究了多种新型无机、有机、生物组装基元的表界面结构、相互作用及催化机理，设计了一系列新型自组装纳米材料，在原子尺度精确解析了纳米材料的表界

面微观结构,揭示了其在生物医药等领域应用的微观机制,为从头设计和提高纳米材料的稳定性、活性、选择性、生物相容性等提供了理论依据和实验指导。结合人工智能(AI)技术,通过高通量理论计算结合机器学习方法进行组装基元模块化高通量筛选,构建高精度机器学习力场,通过自然语言处理结合大模型构建高质量的专业数据库,结合实验研究,揭示自组装纳米生物材料的构效关系,为解决制约复杂组装功能材料改进设计的关键科学问题提供了有效参考方案。

交流类型:邀请报告

E12-I-047

基于纳米孔轨道 DNA 机器人自主移动行为的模拟研究

孙李真

浙江工业大学

DNA 分子凭借其稳定的化学性质与精确的配对规则,已成为人工纳米机器人领域重要的构筑材料之一。近年来,DNA 纳米机器人在功能拓展方面取得突破性进展,在精准医疗、新能源开发及环境治理等领域均展现出令人瞩目的应用前景。然而,DNA 机器人有限的自主移动能力制约了其应用范围的进一步拓展。最新研究揭示,基于多纳米孔阵列平台的轨道化设计或将成为突破这一局限的关键路径。

本报告将系统介绍课题组基于纳米孔轨道驱动 DNA 机器人运动行为的模拟研究成果。在模拟中,我们利用 DNA 机器人的三足式设计,验证性地实现了其在纳米孔轨道上的自主移动。研究表明,在不同驱动方式、轨道结构以及溶液环境的协同调控下,DNA 机器人呈现出包括布朗运动主导的随机游走、自由能梯度驱动的定向迁移以及多种运动方式转换在内的复杂动力学特征。

交流类型:邀请报告

E12-I-048

根知识与小数据协同智能计算材料

于剑

天目山实验室

以人工神经网络为基础的深度学习需要大数据,材料是一个典型的小数据领域;高通量实验和计算在于大量生产数据,机器学习则用作数据筛选和映射关系分析的工具;传统计算仿真是求解动力学方程,不同力学理论导致跨尺度材料计算壁垒。为了克服数据驱动方法在数据量、解释性、泛化能力等方面的局限性,需要着力发展知识和数据双驱动智能计算新方法。本报告将展示一个根知识与小数据协同的材料智能计算架构,要点包括基于系统论和动力学方程对材料数据结构和关系进行梳理,构建与化学还原-物理涌现对应的非线性数据结构及其关系网;各尺度特征的数字化,特别是构建晶格尺度化学式、化学键等系综特征数字化描述符;融合算法模型与数理模型、发展小数据智能计算新算法。示例包括超高温陶瓷、碳纤维、金属与合金、钙钛矿氧化物等多种体系。晶格尺度系综特征的数字化不仅完备了材料的特征集,还实现了数理模型的降维与物理涌现行为的协同。

交流类型:邀请报告

E12-I-049

间断有限元密度泛函理论

胡伟

中国科学技术大学

高性能计算是现代异构超级计算机上加速第一性原理密度函数理论计算材料模拟的有力工具。在本次报告中,我们描述了间断有限元密度泛函理论 DGDFT 低标度计算软件在新一代神威·海洋之光超级计算机上如何实现超大规模 E 级高性能并行计算。DGDFT 方法采用在自洽场迭代过程中动态产生的自适应局域基函数 ALB (正交局域完备基组) 来求解全局 Kohn-Sham 方程,其精度媲美于标准平面波基组。同时, DGDFT 方法采用两级并行化策略,用来处理不同类型的数据分布、任务调度和数据通信,并结合申威处理器主从核多线程异构并行的特性,在新一代神威超级计算机上实现了 E 级超大规模高性能并行计算密度函数理论材料模拟。由于 DGDFT 具有高度可扩展性,可以在新一代神威超级计算机使用 39,087,360 个核心 (601,344 个 MPI 进程) 并行计算,依然保持 60% 的并行效率,可以用于研究包含数百万原子 (250 万原子锂钠合金) 复杂金属体系的电子结构性质。

交流类型: 邀请报告

E12-I-050

二维材料等温偏析生长的多尺度建模与催化衬底逆向设计

袁清红

华东师范大学

大面积、高质量、多层二维材料的可控制备一直是材料领域的核心挑战。传统的化学气相沉积和分子束外延等方法在层数精确控制、缺陷密度降低以及结构均匀性保障方面存在显著局限,严重制约了二维材料的规模化应用。近年来兴起的等温偏析法为解决这一难题提供了新的技术路径。该方法巧妙利用溶质原子在合金基底表面的富集现象,在恒定温度条件下实现二维材料的可控生长,具有三方面显著优势:工艺简化程度高,无需复杂的温度梯度控制;控制精度高,可通过精确调控基底组分及前驱体分子实现层数的精准控制;产品质量优,等温生长条件更接近热力学平衡,有利于形成高质量、均匀的二维结构。尽管该方法已成功应用于石墨烯、h-BN 和过渡金属硫族化合物等多种材料体系的制备,但针对不同材料体系设计最优偏析基底仍面临重大挑战,亟需从理论层面深入揭示原子偏析行为与合金基底间的构效关系。

本报告基于第一性原理计算,系统阐述了二维材料等温偏析生长的理论研究进展。首先,通过深入分析石墨烯在 CuNi 合金表面的成核生长过程,揭示了合金组成比例对石墨烯成核密度和碳原子迁移速率的精确调控机制,并探讨了 h-BN 在 N2 和 FeB 衬底上的成核生长规律。在机制研究基础上,构建了二维材料等温偏析生长的通用理论模型,并利用该模型成功筛选出适用于石墨烯制备的 PtNi 和 CuNi 合金衬底体系,阐明了偏析行为与合金组成及晶面取向的内在关联。进一步,通过机器学习力场加速的分子动力学模拟对理论模型进行了验证,模拟结果与第一性原理计算高度一致并得到实验证实,证明了模型的准确性和可靠性。该理论框架不仅适用于石墨烯体系,还与其他二维材料的等温偏析生长提供了普适性指导,构建了从理论设计到实验验证的完整研究范式,为实现高质量、层数可控二维材料的规模化制备奠定了重要的理论基础。

交流类型: 邀请报告

E12-I-051

基于神经网络势的催化大模型开发与应用

刘锦程

南开大学

基于神经网络势函数,我们开发了应用于催化领域的大原子模型 (Catalytic Large Atomic Model, CLAM), 在近似 DFT 的计算精度下对复杂多尺度催化体系进行了大规模、长时间

的计算模拟,用于深入研究催化反应网络的快速构建与催化剂在反应条件下的动态变化。并开发了局域微调算法,结合大模型加速结构优化、过渡态搜索等计算过程。

交流类型:邀请报告

E12-I-052

理论计算与人工智能 AI 赋能电化学谱学表征

汤富杰

厦门大学

“如何在微观层面测量界面现象?”是电化学的一个长期基本核心问题。为此人们发展了诸多表征手段去表征微观界面的结构与过程,其中谱学技术是其中典型代表。谱学技术基本上都是采用“激励-响应-检测”的模式,对电化学界面进行测量,然而由于受到诸多限制,对于相关实验结果的解析以及深入理解极具挑战。由理论计算与近年来快速发展的人工智能 AI 模型赋能的谱学智算方法成为了解决上述问题的方法之一,通过建立光谱与结构、性质之间关联的谱学 AI 模型,将有望实现对复杂电化学体系的从结构到光谱的智能预测与解析。本次报告将探讨如何建立谱学电化学的复杂谱学模型并介绍我们在界面振动光谱学计算、液体核磁谱计算、以及核磁谱 AI 模型等方面的进展。

E12-I-053

基于高精度机器学习势能面的气-固反应微观机制

陈俊

中国科学院福建物质结构研究所

在基于 ML-PES 的反应动力学研究中,电子结构计算的精度直接决定了势能面的可靠性,从而影响对反应路径、过渡态及动力学行为的准确刻画。构建具有光谱精度的高维势能面不仅依赖于高水平从头算方法生成的数据集,也要求高效且具泛化能力的机器学习模型进行精准拟合。因此,发展稳健的高精度 ML-PES 构建策略,已成为推动复杂界面反应动力学研究的关键。

我们以 CO 分子在金属表面的反应为研究对象,结合高精度 ML 势能面和增强采样分子动力学,系统分析了其在 Ru(0001)表面的吸附构型、表面扩散及热解离行为,量化了反应路径上的自由能差与动力学势垒,并揭示了温度对反应动态调控的影响。进一步地,我们利用准经典轨线模拟探讨了 CO 在 Pt(111)表面的转动态选择性特征,结合轨线行为与构型演化的关联,深入解析了“CO puzzle”的分子动力学起源。

交流类型:邀请报告

E12-I-054

MatCloudGPT: 面向材料结构与工艺生成、性能建模的大语言模型协同框架

杨小渝

中国科学院计算机网络信息中心

交流类型:邀请报告

E12-I-055

钉基 OER 催化剂的机制研究和理论设计

李晖

北京化工大学

RuO₂ 是 PEM 电解水中重要的 OER 催化剂,但是其较低的稳定性和亟需进一步活性的

提升是限制其大规模应用的主要限制因素。过往的研究表明，掺杂过渡金属元素、增加氧缺陷、以及羟基化等手段都可以有效改善 RuO₂ 在酸性 OER 中的表现。然而由于其结构复杂，掺杂和缺陷空间的巨大，使用常规实验试错手段，很难获得最优化的掺杂和缺陷结构。我们利用第一性原理计算结合机器学习模型，对 RuO₂ 的掺杂和缺陷空间进行采样并建立理论预测模型，揭示了单元素和多元素掺杂以及缺陷分布对 RuO₂ 的稳定性和 OER 活性的定量关系，实现了其最优结构的预测，并阐明了其催化表现规律背后的物理化学机制。为相关实验研究提供了重要理论支撑。

交流类型：邀请报告

E12-I-056

基于距离矩阵的分子描述符开发及其在材料与药物设计中的应用

周业成

中山大学

分子描述符是连接分子结构与性能的桥梁，在材料科学和药物设计中发挥着至关重要的作用。准确、高效且信息丰富的描述符能够显著提升预测模型的性能，加速新材料和药物的研发进程。近年来，随着机器学习技术的飞速发展，开发新型分子描述符并将其与机器学习相结合，已成为推动材料与药物设计领域进步的关键力量。

本研究聚焦于基于距离矩阵的分子描述符的开发与应用，提出了一系列创新的描述符，并在多个领域取得了突破性进展。在有机半导体领域，我们开发了分子间 3D-MoRSE 描述符，用于快速准确地预测电子耦合。传统方法如密度泛函理论（DFT）计算成本高昂，难以满足大规模模拟的需求。而我们的描述符通过引入分子间相互作用和 π 共轭原子的优化，不仅提高了预测精度，还将计算负担降低了数倍。在晶体薄膜中，平均绝对误差（MAE）降至 0.22 meV；在非晶薄膜中，MAE 为 4.57 meV，显著优于现有描述符（CIP，MAE 约为 5 meV）。

在钙钛矿太阳能电池领域，我们进一步优化了 3D-MoRSE 描述符，用于预测分子钝化后的光电转换效率（PCE）。通过调整比例因子和维度，我们实现了 0.87 的最高决定系数（ R^2 ），相较于现有模型有了显著提升。分析表明，富含碳氮单键或部分双键的分子可能实现良好的表面钝化，从而实现高 PCE。为钙钛矿太阳能电池新型钝化分子的发现提供了有力支持。

在药物设计领域，我们提出了基于电子衍射的优化 3D 分子结构描述符（opt3DM），用于快速准确地预测分配系数（log P）。log P 是衡量分子亲水性和疏水性平衡的关键参数，对药物的药代动力学、毒性和生物利用度具有重要影响。通过优化比例因子（sL）和维度（Ns），我们的描述符在 M 数据集上实现了最低的均方根误差（RMSE）0.31，显著优于现有的 OPERA 模型。在 SAMPL6 和 SAMPL9 挑战赛中，分别实现了 0.31 和 1.01 的 RMSE，位于所有模型前 3 位。证明了 opt3DM 在预测分子性质如 log P 方面的高效性和准确性。

综上所述，本研究通过开发基于距离矩阵的新型分子描述符，显著提升了机器学习模型在有机半导体、钙钛矿太阳能电池和药物设计领域的预测性能。这些描述符不仅具有高效性和准确性，还具备广泛的适用性，为材料科学和药物开发提供了强大的工具。

交流类型：邀请报告

E12-I-057

光转换材料的第一性原理计算与构效关系研究

张俊英

北京航空航天大学

光转换材料在许多领域有着广泛的应用,提高其性能是一项长期的研究工作。深入了解结构与性能的关系,对高性能材料的研制具有重要意义。本课题组第一性原理计算与实验相结合进行了光转换材料的理论设计、可控合成和光催化、光电探测性能研究,揭示材料和器件中的能量交换和电荷转移过程,并重点关注点缺陷对能带结构和光转换性能的影响。通过调制材料中的点缺陷、构建异质结构并优化界面状态,拓展光催化材料的吸收光谱、提高光生电荷利用率,增强太阳光光催化产氢性能。采用化学和物理静电掺杂调制半导体的载流子输运行为、引入等离激元效应增强光响应等手段提升了可见光和近红外光电探测性能。

交流类型: 邀请报告

E12-I-058

基于表面洁净纳米材料的高质量 SERS 谱学大数据积累

徐弋凯

华东理工大学

表面增强拉曼光谱(SERS)技术在物理化学研究和分析检测应用中皆有重大应用潜能。SERS 与 AI 技术的充分结合是实现 SERS 广泛应用的重要手段。相应的,开发构建新型 SERS 增强基底材料以获取高质量 SERS 谱学数据是 SERS 领域的关键科学问题。为此,我们开展了一系列实验和理论方面的研究探索:提出通用无修饰制备与稳定新机制,用于理性设计和构筑出多层次的洁净纳米表面,避免了所合成的纳米粒子表面常被各类表面修饰剂覆盖而影响其性能的困扰;以此独有的表面洁净等离激元纳米表面作为增强基底,发展了一套通用的原位 SERS 检测方法;利用该方法,可以显著拓展 SERS 的适用性和检测的可重复性,为高质量 SERS 数据集的建立提供了实验途径。

交流类型: 邀请报告

E12-I-059

Machine Learning-Guided Rational Design of Electrocatalytic NORR Catalysts for NH₃ Synthesis

王长洪

河北师范大学

Despite the exceptional atomic efficiency and well-defined active sites of singleatom alloy catalysts, establishing precise structure-activity correlations to guide clean energy driven electrocatalytic NO reduction (NORR) for synthesis remains challenging. Here, we investigate Ag-based SAAs via density functional theory (DFT) within an “AI+ energy catalysis” framework to derive a universal descriptor for NORR activity. Our calculations show that synergistic interaction between the dopant atom and the Ag substrate breaks traditional linear scaling relations, causing conventional descriptors fail. To solve this, we combine the energetic span model with grand canonical constant potential simulations to introduce the activity descriptor $\Phi_{\max}(\eta)$, then employ machine learning techniques to uncover intrinsic correlations. We find that extreme gradient boosting regression (XGBR) accurately predicts $\Phi_{\max}(\eta)$. Finally, the SISSO algorithm yields interpretable, quantitative relationships between $\Phi_{\max}(\eta)$ and key features, offering theoretical guidance for elucidating NORR mechanisms and rationally designing SAA catalysts.

交流类型: 邀请报告

E12-I-060

数据与知识驱动的新材料设计与制备

冉念

中国科学院上海硅酸盐研究所

材料研发是推动国家重大工程和国民经济的核心驱动力,但传统研发模式面临三大挑战:多尺度构效关系不清晰、制备工艺复杂、设计-制备流程非线性耦合等问题。中国科学院上海硅酸盐研究所针对上述挑战,开展以材料大模型为核心的人工智能赋能的材料研发,取得相关进展:①构建电化学反应的机器学习原子势函数,充放电动力学模拟发现 O_3^- 新物种形成;②构建析氧催化性能预测大模型,精准溯源催化活性位点,筛选出新型高性能催化材料;③建立“材料数据工厂”研发体系,构建 28B 高质量的 AI-Ready 数据集;④基于高质量 AI-Ready 数据集与本构理论知识嵌入,开展多任务增量预训练,融合多专家机制、CoT 与 RAG 等技术,构建了基于 DeepSeek-32B 的材料科学与工程大模型 MatMind。⑤以 MatMind 为认识核心,结合自动化实验室、多尺度计算、机器学习模型等多种工具,融入专家经验,建立了国内首个材料智能科学家系统。

交流类型:邀请报告

E12-I-061

高精度机器学习势方法的发展

董昊

南京大学

在量子化学精度下模拟溶液环境中复杂凝聚相分子体系的长时间动力学演化面临重大挑战:计算成本随体系规模急剧增加。虽然基于 DFT 的方法已取得一定进展,但在考虑电子关联效应的 post-HF 水平实现高精度计算仍具挑战性。为此,我们开发了结合机器学习算法的 PBC-GEFF/DP 方法(J. Chem. Theory Comput. 2023, 19, 4243)。该方法中,低标度量子力学方法 PBC-GEFF 高效处理周期性凝聚相体系,并生成高精度量子化学数据标签(如考虑电子关联效应的数据);同时采用基于原子中心对称函数(ACSF)的神经网络方法 DeepMD 训练高精度势能面。运用该方法,我们在 MP2 水平成功实现了含 1000 个水分子的周期性体系的纳秒级分子动力学模拟。结果表明,水中的质子与氢氧根离子具有显著不同的水合结构、热力学和动力学性质,导致质子转移行为存在明显差异。这些研究为纯水体系的微观动力学过程提供了详尽的分子层面认识。然而, PBC-GEFF/DP 方法仍需大量高精度数据标签进行训练,计算成本较高。为进一步降低成本,我们近期将 Δ -ML 方法与等变图神经网络(EGNN)结合,开发了 Δ -EGNN 方法(J. Phys. Chem. Lett., 2025, 16, 2080.)。该方法在保持化学精度的同时,将计算成本降低至少两个数量级。值得注意的是, Δ -EGNN 是适用于小分子、团簇和周期性体系等多种体系的通用模型,显著降低了数据集的生成成本,推动了对复杂体系的精确描述。

交流类型:邀请报告

E12-I-062

人工智能驱动的反应气氛下分子筛限域纳米金属颗粒动态演化机制研究

曹宵鸣

上海交通大学

90%以上化工过程都依赖于催化剂的参与,催化剂在整个反应过程中并非静止不变,实际上催化剂表面的金属原子、团簇、颗粒等经历着复杂的动态结构演化,特别是反应气氛下化学反应与纳米颗粒结构演化相互耦合易导致金属纳米颗粒的长大、氧化和碳化等。传统格点动力学蒙特卡洛(kMC)方法通过预先计算基元反应热力学和动力学参数,可快速高效模拟一些基元反应模式固定、化学组分价态不变的多相催化反应过程,基于该方法,我们揭

示了甲醇气氛下 Cu 纳米催化剂的逆奥斯特瓦尔德熟化机制。但格点 kMC 方法难以模拟价态变化、表面结构不规整的体系。而无格点 kMC 方法可以模拟化学组分价态变化、结构不规整体系，但须实时在线计算基元反应动力学和热力学参数，须通过极大量的基元步骤搜索，才可能实现动态结构演化的模拟，导致其计算耗费极其巨大，难以在有效时间内实现动态催化反应过程机理的模拟。我们发展了基于神经网络原子间势的等变图强化学习方法，通过神经网络原子间势实时高效准确计算单步热力学和动力学参数，并利用等变图神经网络所具有的对对称性优势和结构表达能力，结合 PPO 强化学习方法耦合表面反应和催化剂材料演化过程，显著提升有效反应空间的搜索效率，并揭示了分子筛限域 Pd 基纳米催化剂抗氧化性。

交流类型：邀请报告

E12-I-063

大语言模型驱动的材料智慧专家系统

张宝花

中国科学院计算机网络信息中心

大语言模型（LLMs）近年来在文本生成任务中展现出了强大的能力，但在材料科学等专业领域的应用仍然受到诸多限制，尤其是在信息的准确性和可靠性方面。现有工作往往难以有效结合领域知识和相关文献，导致专业领域问答系统表现不佳，难以满足科学研究对高准确性和权威性的需求。本研究旨在提升大语言模型在拓扑材料科学问答任务中的准确性和可靠性。为此，提出了一种结合拓扑材料知识图谱与文献聚类的统一框架——TopoChat 框架，创新性地构建的拓扑材料知识图谱（TopoKG）与文献聚类增强检索机制相结合。TopoKG 整合了来自权威数据库的 2.8 万余条拓扑材料数据，支持精确属性查询与智能推荐。文献检索部分基于语义相似性匹配、社区发现和中心性筛选，能够识别与问题相关的知识片段。同时，通过设计合理的提示词策略，实现结构化知识与非结构化文献信息的高效融合。在两个基准数据集（MaScQA 和 TopoQA）上，TopoChat 框架在多种主流大模型上均取得了显著的性能提升，显示出框架在提升材料科学问答任务的准确性与可靠性方面具有显著优势，为材料科学智能问答提供了统一且可扩展的解决方案。研究成果为知识增强型大模型的应用提供了有益经验，未来可进一步拓展至其他科学领域和更广泛的问题类型。

交流类型：邀请报告

E12-I-064

基于机器学习的大尺度有效哈密顿量计算方法

杨玉荣

南京大学

第一性原理计算方法是计算材料原子结构、电子结构等性质的可靠工具。然而，由于计算量巨大，第一性原理计算只能计算 100 原子数量级的小体系，大尺度计算以及有限温度下的计算仍是很大的挑战。分子动力学和有效哈密顿量方法可以计算大尺度的原子结构，但是分子动力学需要经过复杂的解析才能得到物理现象和物理模型；传统的有效哈密顿量方法的只能针对简单体系，并难以得到耦合系数。借助近年来的机器学习方法，我们发展基于机器学习的新型有效哈密顿量方法。新方法比传统分子动力学的计算能提高了 3 个数量级。利用发展的新方法，我们预言了界面引起的大尺度新物态——拓扑极化斯格明子，以及大尺度现象——电卡效应。基于机器学习的有效哈密顿量方法为表界面等材料科学计算的提供了有力工具。

交流类型：邀请报告

E12-I-065

从编辑的角度谈 Chemical Science 论文发表与写作

黄婷玉

英国皇家化学会 Chemical Science

本报告将简要概述英国皇家化学会(RSC)旗下期刊,尤其是 Chemical Science。Chemical Science 是涵盖化学科学各领域的跨学科综合性期刊,是英国皇家化学会的旗舰期刊,也是中科院一区的钻石开放获取期刊,对读者和作者全部免费。此报告将涵盖本期刊的发文范围和审稿流程,写作和投稿的注意事项,目前期刊在人工智能化学与材料方面的发文情况等,同时,也将介绍 RSC 作为学会对化学群体所提供的各项支持和活动,特别是针对年轻老师和学生。

交流类型：邀请报告

E12-I-066

新型光电材料的多尺度结构设计理论与理论筛选

孟令一

中国科学院福建物质结构研究所

本报告中,我们整合筛选策略与第一性原理多尺度模拟方法,开展热激活延迟荧光(TADF)材料及全无机双钙钛矿等光电材料的理论设计。我们理论分析了实验上已报道的 24 种 D- π -A 型空间电荷转移机制(TSCT)的 TADF 分子在薄膜中的热激活延迟荧光效率(Φ_{DF}),结果显示供体受体二面角(θ_{DA})小于 25°时,TSCT-TADF 分子具有更优异的发光性能。在此基础上,我们新设计了 14 种新型 TSCT-TADF 分子,理论分析了他们在甲苯溶液下的激发态性质及光物理数据,其中有新设计分子在薄膜环境下实现了高达 97%的 Φ_{DF} ,展现出较高的发光效率。我们深入分析了分子构型、激发态性质以及光物理之间的构效关系,揭示 TSCT-TADF 分子结构的 θ_{DA} 和 Φ_{DF} 之间的规律,为开发具有刚性结构的高性能 TSCT-TADF 材料提供了理论支持。在全无机双钙钛矿方面,我们通过第一性原理结合器件级连续介质模型,筛选获得两种新型卤素混配双钙钛矿 $Rb_2AgInCl_3I_3$ 和 $Cs_2AgInCl_3I_3$,其直接带隙分别为 0.98 eV 和 1.26 eV,可见光吸收系数大于 10^5 cm^{-1} 。其中 $Cs_2AgInCl_3I_3$ 展现 $20 \text{ cm}^2 \text{ V}^{-1} \text{ s}^{-1}$ 的载流子迁移率,单结器件理论效率达 25.54%。结合量子力学光电参数与连续介质模型,量化揭示非辐射复合对功率转换效率的影响,为低缺陷钙钛矿材料设计提供理论依据。

交流类型：邀请报告

E12-I-067

高熵正极材料高效建模方法

侯廷政

清华大学深圳国际研究生院

理解高熵无机非金属材料中的短程有序现象(SRO)对材料成分与结构设计至关重要。本研究开发了一种短程有序交换(SROS)方法,通过基于描述符的高效交换算法构建原子尺度短程有序模型。通过特征选择和贝叶斯优化,相较于传统需要显式拟合多体相互作用的方法(如团簇展开),SROS 方法在保持高精度的同时显著降低了计算资源消耗。所构筑的模型理论对分布函数与中子衍射实验对分布函数表现出很高的拟合程度,验证了 SROS 方法的准确性。我们将 SROS 方法应用于研究阳离子无序岩盐型正极材料(DRX)。具有高度结构复杂性的 DRX 材料是下一代高能量密度正极的有力候选者。借助 SROS 方法生成的结

构，我们阐明了高熵 DRX 中构型熵如何抑制短程有序，这种现象有助于降低无序化温度、增强扩散动力学并抑制材料脱嵌锂过程中的结构与体积变化。我们还将 SROS 方法应用于一种钙钛矿型材料的高效精准建模，证明其有潜力广泛应用于具有长程无序和短程有序特征的高熵无机非金属材料原子尺度建模。

交流类型：邀请报告

E12-I-068

NepTrainKit：面向神经进化势能的训练数据集可视化管理与高效构建工具

唐刚

北京理工大学

神经进化势能（NeuroEvolution Potential, NEP）方法作为新型机器学习势能模型，以其优异的计算效率在材料科学研究中展现出广泛的应用前景。然而，精准 NEP 模型的开发高度依赖于高质量训练数据集的构建，而训练集的制备与迭代过程在很大程度上依赖于研究者的经验，这为初学者使用 NEP 等机器学习势能方法设置了较高的门槛。为解决这一问题，我们开发了 NepTrainKit——一款面向 NEP 训练数据集的可视化管理工具。NepTrainKit 能够高效地实现训练数据集的初始化、管理与生成，其内置的可视化模块支持数据的直观编辑、展示和交互式探索。软件集成了异常值识别、最远点采样、非物理结构检测和配置类型选择等多种实用功能，显著提升了数据处理的效率与合理性。NepTrainKit 的一大亮点在于其数据集构建模块采用了灵活的卡片组合设计理念，用户可通过拖拽操作将不同功能卡片以串行或并行方式自由组合，快速构建个性化的初始训练数据集。系统内置多种常用处理卡片，包括晶胞扩展、原子微扰、晶格缩放、拉伸、原子置换和空位缺陷等操作，并支持插件式扩展，允许用户根据实际需求自定义卡片，实现高度灵活和定制化的数据处理流程。此外，借助 NepTrainKit 生成和筛选的训练集也可用于其它类型机器学习势能模型的训练。因此，NepTrainKit 将极大便利材料科学领域科研工作者在高精度 NEP 及相关机器学习势能模型的构建与应用。

交流类型：邀请报告

E12-I-069

分子模拟领域的驱动数据算法

苏茂

上海人工智能实验室

分子动力学（Molecular Dynamics, MD）模拟用于研究物质的结构、相行为和动力学等问题，已经成为了物理、化学、材料等多个领域不可或缺的研究手段之一。MD 模拟的准确度取决于原子间相互作用势函数或力场。机器学习势函数通过人工智能算法来拟合第一性原理级别的势能和受力信息，可以兼顾精度和速度，已经引起了广泛关注。然而，高性能的机器学习势函数依赖大量的第一性原理计算用于标注训练数据，训练集采样不够充分将导致机器学习势函数在测试集上的精度急剧下降，进而导致模拟的崩溃。我们提出了一系列人工智能新算法，包括自监督学习、不确定度分析等，致力于更好地获取数据以及提升数据利用效率，有利于促进高精度模拟方法在更多实际问题中的应用。

交流类型：邀请报告

E12-I-070

高通量标准化实验数据“生产”与智能利用

惠健

上海交通大学/苏州实验室

数据是材料智能研发的核心要素，其中高效构建高质量数据集是亟需解决的难题。开发集成材料基因工程领域共性颠覆性技术的 AI-ready 的“数据工厂”和“标准化材料大数据+AI”为特征的自主闭环研发模式是范式变革的重要实践。该基础设施通过标准化材料大数据与人工智能技术的高度融合，充分释放数据潜能，将数据转换为高维认知。本报告将聚焦 AI-ready 的材料大数据标准技术与高质量实验数据“生产”基础设施的开发进展及案例示范。

交流类型：邀请报告

E12-I-071

基于 Agent 的材料研发与应用场景定向优化

王诗童

北京航空航天大学

本报告将系统阐述基于 Agent 的新型材料研发与应用场景定向优化的最新进展。在材料研发方面，报告首先介绍大模型 Agent 科研探索系统，用于新机理的探索及新材料的开发；还会介绍低温电导率智能分析机器人，用于自动测试、研究并发掘新机制。在电池应用场景定向优化方面，构建以大数据、大算力与大模型为支撑的电池健康管理平台，平台包含了容量型、热力学、动力学和离散型健康指数的综合评价体系，并利用因果关系机器学习模型实现对电池全生命周期的精细预测与个性化优化；电池匹配工具通过多准则决策和深度学习方法，实现海量电池解决方案与多样化应用场景的智能匹配，为 3C 场景、车载场景、储能场景、特种场景等领域提供高效、定制化的技术支持。本报告展示了以 Agent 为驱动力的电池技术全链条创新，为实现电池研发与应用的协同优化提供了前瞻性解决方案。

交流类型：邀请报告

E12-I-072

软物质多尺度模拟软件的创制与应用

朱有亮

吉林大学

软物质体系结构与组分十分复杂，且具有多尺度、非平衡和非线性等特征，一直以来是分子动力学模拟研究领域的重要挑战¹。近十年来，我们针对以高分子为代表的软物质体系的多尺度模拟的迫切需求，发展了“动态键”等 9 个介观尺度创新分子模拟方法，并克服了软物质模拟算法与冯诺依曼计算机架构的适配性问题，设计了高效率的 GPU 算法，开发了具有自主知识产权的 GALAMOST 分子动力学模拟软件^{2, 3}，软件应用成果在 Science 等国际期刊发表论文超过 300 篇。针对分子模拟软件的定制化需求，我们进一步开发了分子模拟平台 PyGAMD4，支持用户自定义分子力场等功能，为软件的使用与再开发提供了极大的便利，作为“商品”已上线国家超算互联网平台。应用上述模拟软件，我们深入研究并揭示了氢键/配位键作用同时增强高分子材料强度和韧性的分子机理、配位键作用下的聚合物纤维空气纺丝机理、可逆反应（动态共价键）下的共价有机框架生长机理等^{5, 6, 7}，为开发高性能的弹性体、柔性电子材料和有机多孔材料等提供了理论支撑。

交流类型：邀请报告

E12-I-073

面向复杂催化体系的描述符研究

王嵩

中国科学技术大学

化学、化工、能源、环境等领域都离不开催化材料。然而，催化剂研究面临经验依赖性强、参数维度高、反应机制复杂等难题。机器学习因其强大的数据处理能力和相对较低的研究门槛，能够有效地降低催化剂设计过程中的学习成本，缩短研发周期。报告人以描述符为抓手挖掘复杂催化体系中的物理化学规律，揭示其中的构效关系和设计原则：（1）提出了几何结构描述符，揭示了金属-N-C 单原子催化剂的构效关系。（2）提出了偶极耦合描述符，实现了人工分子光催化系统的高通量筛选。（3）提出了谱学描述符，为催化反应中的微观化学性质与电场效应提供了数字理解，初步实现催化结构的按需生成。

交流类型：邀请报告

E12-I-074

机器学习力场加速解析催化剂表界面的动力学和热力学反应机理

王璐

苏州大学

通过结合机器学习力场（MLFF）与增强采样方法，开发了一种主动学习框架，用于在完全显式溶剂模型下探索单原子催化剂表面发生氧还原反应（ORR）的动力学过程。研究发现， O_2 在 Fe 活性位点的吸附是 ORR 的速率决定步骤，需克服 0.39 eV 的自由能垒，这归因于界面水分子与 O_2 间形成的氢键密度高于体相溶剂。通过统计分析质子耦合电子转移（PCET）过程中溶剂的构型，发现界面水分子的氢键数量和寿命显著影响反应效率：更多的氢键和更长的氢键寿命可使 PCET 过程无势垒发生。此外，MLFF 与元动力学模拟的结合实现了原子尺度下长时间、大尺度动力学的高效计算（速度较传统 AIMD 提升千倍），验证了溶剂微环境对反应自由能垒的决定性作用。本工作提出的 MLFF 与增强采样结合的主动学习框架，首次在完全显式溶剂模型中实现了 Fe-N₄/C-水界面 ORR 的高效动力学模拟，突破了传统从头算分子动力学的计算瓶颈，为催化剂的设计优化提供了新见解，并强调了溶剂构型在异相电催化中的重要性。

交流类型：邀请报告

E12-I-075

MSene：一个具有 MXene 结构的二维过渡金属硫化物大家族

路洪艳

曲阜师范大学

基于高通量计算，我们预测了一个具有 MXene 结构的二维过渡金属硫化物大家族 M₂S，分为 2H 和 1T 相，我们将其命名为 MSene。证明了 58 个 MSenes 结构中有 24 个是稳定的。该家族包括 12 种超导材料，7 种超导拓扑金属，4 种电荷密度波（CDW）材料，以及 5 种磁性材料，其中包括一种铁磁性材料和 4 种 A 型反铁磁性材料【Phys. Rev. B (Letter) 111, L041404 (2025)】。另外，Zr₂S 和 Hf₂S 是 MSene 家族中的 CDW 材料，因此，我们研究了 1T-Zr₂S 和 Hf₂S 中多种相的竞争与共存。一方面，2×2 CDW 基态和超导共存。另一方面，在双轴压缩应力下，在 Zr₂S 和 Hf₂S 中分别存在超导和 CDW 的弱竞争和强竞争相互作用，双轴压缩应变可以抑制 CDW，并出现各向异性单能隙超导和拓扑性质的共存【Adv. Funct. Mater. 35, 2502257 (2025)】。因此，预测的 MSene 家族展示出非常丰富的物理性质，并显著扩展了二维材料的范围。这个家族为研究二维材料中的超导、CDW、拓扑和磁性等多种量子相的竞争或共存提供一个新的平台，为开发新型量子器件提供了新思路。

交流类型：邀请报告

E12-I-076

AI 和物理双驱动的复杂气相反应网络构建

朱通

华东师范大学

地球生命的起源仍然是科学领域的一大未解之谜。尽管在前生物条件下进行的许多自下而上的实验为生命的自发化学起源提供了宝贵的见解,但对于其中复杂反应过程的理解仍存在显著的空白。在本研究中,我们提出了一种新颖的方法,使用以纯粹笛卡尔坐标形式化的旋转平移不变势(RTIP)来促进化学反应的自动化模拟。通过采用 RTIP 路径采样探索原始分子的反应性,我们识别出几种低能量的反应机制,如双氢转移氢化反应以及 HCOOH 催化的水合作用和氨基化作用。这些工作构建了一个全面的反应网络,展示了甘氨酸、丝氨酸和丙氨酸的合成路径。进一步的热力学分析突显了甲烯亚胺在氨基酸合成中的关键前体角色,因为与传统认知的氢氰酸相比,甲烯亚胺在偶联反应中的反应性更为有利。我们的研究表明,RTIP 方法结合分而治之的策略为复杂反应过程的模拟提供了新的视角,并为推进复杂体系化学反应机理研究提供了有价值的新工具。

交流类型：邀请报告

E12-I-077

基于强化学习与扩散模型的知识约束型 AI 分子生成模型研究

雷金平

中山大学

分子生成是新药研发的首要环节, AI 分子生成方法的发展使得化学家能够探索更大的化学空间,然而目前 AI 生成模型产生的分子往往生物活性与成药性不足。通过引入专业知识约束来提高 AI 分子生成模型效率,是当前药物分子设计领域的热点。我们在 transformer 架构的语言模型基础上,通过结合强化学习技术,开发了分子类药性质约束的片段连接模型 DRlinker,可以通过优化片段连接子来设计满足期望类药性质的分子;随后,我们将 DRlinker 中的 transformer 语言模型架构替换成门控图神经网络进行迭代产生采样动作来生成片段连接子和进行分子片段连接,进一步开发了模型 GRELinker,它在各种连接子生成和优化任务的性能优于 DRlinker,并成功将模型应用于抗肿瘤腺苷 A2A 受体拮抗剂的优化,获得了体外抗肿瘤活性比临床药物更强的候选药物分子。但是,这两个模型忽略了蛋白口袋环境对生成分子的影响。近期,我们基于去噪扩散概率模型开发了一种靶标口袋三维结构感知的药物分子骨架修饰算法 DiffDec,可以生成与靶标口袋进行几何互补和化学环境匹配分子;随后,我们在 DiffDec 基础上加入亲和力引导开发了 Diffleop 模型,可以在去噪采样过程的每一步通过亲和力梯度来指导原子坐标、原子和键类型的生成,所生成的分子亲和力比参考配体有显著提高且各项指标明显优于基准模型,并成功利用该模型进行了谷氨酰胺环化酶抑制剂的优化,获得了比临床药物细胞活性更强的先导药物分子。这些模型通过强化学习或扩散技术在分子生成过程中加入专业知识约束,有助于实现药物分子的高效设计与快速生成。

交流类型：邀请报告

E12-I-078

机器学习分子间激发态电荷转移与能量转移的电子耦合

白书明

中国科学院化学研究所

分子间激发态电子转移与能量转移是很多光功能化学体系的基础,而电子耦合强度是决

定其速率的重要微观参数。对于激发态电荷转移，已有电子耦合的轨道重叠描述。对于三重态能量转移等分子间自旋交换反应，我们从自旋电子交换机理出发，推导了 Dexter 型耦合强度的轨道重叠描述。我们使用最易得的单分子轨道来计算轨道重叠，通过与量化计算耦合强度的定量比较，验证了分子轨道重叠描述 Dexter 型耦合强度的有效性。在分子轨道重叠描述的基础上，提出基于分子轨道波函数的描述符，结合深层神经网络方法，实现不同分子间排布下耦合强度的机器学习。

交流类型：邀请报告

E12-I-079

大模型驱动的物质科学研究

李玉强

上海人工智能实验室

大模型作为人工智能领域的核心组成部分，通过预训练、迁移学习、强化学习等核心技术，构建了复杂而强大的数据处理系统。它们不仅能够高效处理海量数据，展现出卓越的泛化能力，还推动了人工智能在科学领域的广泛应用。本报告概述了上海人工智能实验室近年来在大模型赋能化学与材料科学研究方面的进展，涵盖了从计算模拟、科学语言模型到智能化实验结果分析的全链条成果。机器学习势函数使用机器学习技术模拟原子间相互作用力和体系能量，能高效预测材料性质并加速新材料研发，正逐步在化学与材料科学领域展现其强大潜力。化学大语言模型可以预测和生成分子性质，设计化学实验方案，以及通过与外部工具和数据库的融合，增强其在化学领域的专业性。谱学大模型作为化学与材料研究的“眼睛”，在物质结构解析、性质预测及反应机制理解方面发挥着至关重要的作用。将大模型技术应用于化学与材料科学研究，具有非常重要的意义，不仅能深度赋能化学研究中的智能调控与精准生成，也能加速我国高端科研仪器设备的突破性进展。

交流类型：邀请报告

E12-I-080

深度学习辅助的有机光伏给受体分子结构正向筛选和反向设计

高梁

华东理工大学

机器学习辅助的材料设计方法，是理性设计高性能聚合物的重要手段，可以克服传统“试错法”研究模式的局限，对高性能聚合物材料研发起到重要加速作用。我们开发了面向树脂设计的材料基因组方法，设计创制了耐高温、易加工含硅萘炔树脂，使复合材料基体树脂的使用温度进一步提升，加工性能得到改善。近期，我们进一步将深度学习辅助设计策略拓展至功能材料领域（Adv. Mater. 2025, 37, 2407613; Acc. Mater. Res. 2024, 5, 571）。针对有机光伏的性能和稳定性同步提升难题，聚焦聚合物给体和小分子受体的给受体组合设计，开发聚合物指纹数字化方法，结合图神经网络建立了高精度预测模型，实现了对各类给受体组合的快速、准确预测。利用该模型，对已有给体和受体的近百万组合空间进行高通量筛选，获得了一系列优选的具备高效率潜力的给受体组合。对优选组合进行实验验证，其中一种组合（D18:BTP-S11）实现了 19.3% 的光电转换效率。此外，开发了基于遗传算法的稠环受体反向设计方法。运用该方法，设计与 D18、PM6、P3HT 等聚合物给体组合的系列新型稠环受体。例如，与给体 D18 结合的某新型稠环受体其 PCE 可达 20.23%，有望实现 OPV 器件效率的进一步提升。从 OPV 器件的性能目标出发，以 AI 算法正向筛选、反向设计结构，在百亿级的结构空间中，快速、准确地获得具有优异性能潜力的给-受体结构，大大加快了高效率 OPV 材料的设计进程。

交流类型：邀请报告

E12-I-081

机器学习在分子光谱模拟与结构反演中的应用探究

胡伟

齐鲁工业大学

利用分子光谱反演结构通常采用光谱数据库检索和理论模拟试错的方法,然而却面临着数据库建设成本昂贵、覆盖率低,理论模拟周期长的巨大挑战。基于此现状,报告人开发了分子光谱的人工智能算法,并发展了直接将光谱“翻译”为简化分子线性输入规范(SMILES)的机器学习算法。首先,通过网络爬虫和高通量的量子化学计算搭建包含分子的标量、矢量、张量性质,以及红外、拉曼、紫外-可见、核磁共振光谱的大数据库:QMe14S。其次,结合自注意力机制、E(3)等变图神经网络、球谐函数、贝塞尔函数、卷积神经网络等,发展了深度等变张量注意力网络(DetaNet),并在国际上首次实现了分子高阶张量性质的人工智能预测。再次,基于 DetaNet,开发了多种机器学习模型,用以模拟分子的红外、拉曼、紫外可见吸收、核磁共振光谱。最后,报告人基于 Transformer,通过提取光谱特征矩阵、SMILES 与光谱特征的对抗学习等,发展了直接将分子光谱“翻译”为 SMILES 的机器学习算法 TranSpec。所发展的新模型、新算法,将为表征微观结构、理解微观作用机制、揭示复杂构效关系提供知识基础和软件工具。

交流类型：邀请报告

E12-I-082

机器学习势函数开发和动力学模拟

李磊

南方科技大学

材料的动态演化在材料基础研究中扮演着重要的角色,对于揭示材料的作用机制和优化设计至关重要。这种动态演化包括结构演化、组分重组、界面化学反应等过程,通常发生在秒、分钟甚至小时的时间尺度上。然而,现有的动力学模拟方法在保持高精度的同时难以涵盖如此广泛的时间尺度。为应对这一挑战,我们开发了基于神经网络架构的机器学习势能面构建软件包 PyAMFF。同时,针对机器学习方法中长程静电作用缺失的问题,我们发展了一种自洽的电荷优化方法,在无需提供电荷参考值的前提下,实现了电荷与势能面的同步预测。另外,进一步结合分子动力学和动力学蒙特卡洛方法实现了长时间的动力学模拟。

交流类型：邀请报告

E12-I-083

局域畸变调控材料光电性质微观机理研究

吴天敏

福建师范大学

晶格局域畸变与材料光电性质之间存在着密切的联系,通过调控局域畸变系数可以对材料的光电性质产生显著影响。深刻揭示局域畸变与材料光电性质之间的紧密构-效关系,有助于推动材料高效设计与筛选。基于密度泛函理论,我们从理论层面剖析 $\text{Na}^+/\text{Bi}^{3+}$ 掺杂不会打破 $\text{Cs}_2\text{AgInCl}_6$ 等受宇称跃迁禁阻,但进一步引入稀土 Nd^{3+} 掺杂则会诱导局域对称性调节(局域八面体畸变)、宇称禁戒跃迁破坏和电-声耦合降低,首次实现上转换自陷激子态(Self-trapped exciton)发射和 Nd^{3+} 近红外发射协同增强等荧光发射光谱调控。此外,我们采用了一种融合物理知识的数据驱动建模方法,识别出晶格几何特征指纹有效映射材料电

子带隙，如八面体畸变指数（DI）和有效配位数（ECoN），并建立了稳健的结构-性能关系模型，再通过对 MAPbI₃ 多相结构的晶格压缩模拟进一步验证了 DI 和 ECoN 与电子带隙之间存在强相关性，证明了所选八面体几何指纹的可靠性，且通过晶体结构局域八面体畸变系数成功调制体系的跃迁偶极矩及光吸收系数等光电性质。通过第一性原理计算我们还模拟了畸变调控 ZnO 纳米片电子结构、光电特性和光催化性能的联合效应，发现气不仅有效缩小带隙和移动 p-/d-带中心以增强了在可见光和近紫外区光吸收，还促进了自极化以有利于光生电子和空穴的分离。同时，畸变还促进了缺陷形成，从而为光催化反应创造了丰富的活性位点。

交流类型：邀请报告

E12-I-084

光电催化材料电荷分离态超快动力学追踪和效率探索

许子豪

中国科学院化学研究所

电荷分离态的产生效率从根本上决定了半导体光电催化的效率上限，因此以高时间分辨率追踪光电催化半导体电荷分离态的产生、输运、反应等动力学过程是解析器件效率瓶颈的强力手段。然而观测半导体-溶液界面处的电荷分离态信号困难重重，例如在无机半导体中飞秒激光的超大瞬时功率带来的超高载流子浓度破坏了半导体-溶液界面的内建电场，导致半导体内部电荷分离效率下降；有机半导体激子结合能大，电荷分离困难。因此在有机和无机半导体与溶液界面的电荷分离态信号较小，对反应动力学的观测提出了挑战。本工作主要以瞬态光谱技术为核心，通过构筑无机半导体 p-n 结与有机半导体对称性破缺诱导电荷分离的模型体系，探索了无机块材半导体和有机半导体纳米颗粒在半导体-溶液界面近工况条件下的电荷分离态反应动力学。本工作成功观测了无机和有机半导体-溶液界面的电荷分离态，并通过测量电荷分离的速率与效率提出了光电催化器件的效率模型，建立了电荷分离、输运直至发生催化反应的观测方法，取得了原位观测载流子动力学方面的进展。

交流类型：邀请报告

E12-I-085

基于配位场理论的高比能正极材料特征解析与定向筛选

王达

上海大学

高比能正极材料的高工作电压、高比容量及结构稳定性源于过渡金属在其中扮演“电子开关”和“结构支柱”的角色。通过配位场理论分析过渡金属 d 轨道在配体环境中的能级分裂、键和性质、多电子效应等量子力学参量，进而建立微观电子结构到宏观电化学性能的物理映射框架，并将局域配位场特征转化为专家知识驱动的人工智能描述符(例如，识别局域配位场构建晶体分子轨道能级程序 MOELD-LFF 可以得到电极材料费米能级位置/状态描述符，基于配位场和空间电荷层的界面电阻计算程序 IR-LFSCCL 程序可以得到正极/固态电解质界面电阻描述符)。依托领域知识嵌入的数据质量治理框架，从数据品质与数据数量双维度实现高精度配位场正极晶体学信息数据的规范化。结合物理规则嵌入的数据特征工程优化，借助机器学习构建功能基元与目标性能的显式数学模型。本报告聚焦高比能正极材料高与结构稳定性协同调控的核心矛盾，开发基于配位场理论的协同演化定量预测方法，利用数据-知识双驱动的机器学习算法解析结构特征变化与循环容量衰减的构效关系，筛选兼具高比能与结构稳定性的理想正极体系。

交流类型：邀请报告

E12-I-086

面向有机光电材料的快速灵活分子 3D 结构设计框架

赵子丰

北京科学智能研究院

有机光伏（OPVs）、有机发光二极管（OLEDs）和有机场效应晶体管（OFETs）等有机光电器件在太阳能转换、高端显示、柔性电子和电子皮肤等领域具有重要应用价值。这类器件的性能核心在于具有共轭多环结构的有机光电分子（OOMs）。然而，传统的新 OOMs 发现方法严重依赖专家经验、偶然发现和低效的试错策略，极大限制了化学空间的探索效率。尽管深度生成模型为计算机辅助理性设计提供了可能，但受限于共轭多环体系的复杂性，现有模型仍难以有效加速 OOMs 的发现进程。

本研究提出 O2-GEN——一种面向复杂共轭分子设计的创新生成框架，其突破性体现在：

1. 首个基于 3D 结构的 OOMs 预训练模型：通过专门构建的高分子量 OOMs 数据库 AOMAD（本文同步开源）实现大规模预训练，全面覆盖典型 OOMs 结构；
2. 虚拟粒子（VPs）生成算法：采用 VPs 构建分子生成器，在保证生成效率与收敛性的同时，结合 3D 结构预训练信息显著提升分子有效性与新颖性；
3. 精细化区域采样策略：基于 VPs 方法开发局部生成模式，支持特定分子结构的定向优化设计；
4. DFT 精度的多目标性质筛选器：集成基于预训练 3D 骨架的筛选模块，通过密度泛函理论（DFT）数据微调，实现高效精准的性能预测与多任务场景适配。

该研究为高性能 OOMs 的发现提供了“生成-筛选”一体化解决方案，显著提升了计算设计与实验开发的协同效率。

交流类型：邀请报告

E12-I-087

基于 MD 模拟的固体电解质材料离子扩散机理研究

许真铭

南京航空航天大学

固态电池具有高能量密度和高安全性等优点，受到人们广泛的关注。开发具有高离子电导的固体电解质材料是发展高性能固态电池的关键，然而目前人们对固体中的离子扩散机理还不够深刻。近年来我们通过第一性原理计算、分子动力学模拟等理论方法，针对若干锂离子固体电解质材料系统地研究了其锂-阴离子相互作用对锂离子扩散性能的影响，包括锂-阴离子库伦静电作用、锂-阴离子振动模式耦合作用、以及锂-阴离子基团“paddle-wheel”作用。首先，具有 hcp 型阴离子亚晶格的 β - Li_3PS_4 、 Li_4SnS_4 和 Li_4GeS_4 硫化物中观测到晶格膨胀增加锂离子迁移活化能垒的反常现象，并揭示了其潜在机制。理解晶格体积对固体中锂离子迁移的影响不仅要考虑瓶颈尺寸和自由体积的因素，还要结合锂离子占位类型、锂离子迁移路径和阴离子亚晶格类型等方面。其次，硫化物中的低频锂离子振动模和高频阴离子基团伸缩（屈服）模之间的非谐耦合效应更能促进锂离子的高效传输，而低频阴离子旋转模与中高频锂离子之间的非谐耦合并不会提升锂离子的扩散能力。最后，室温下晶体 $\text{Li}_7\text{P}_3\text{S}_{11}$ 中不仅没有“paddle-wheel”效应，而且 $[\text{PS}_4]^{3-}$ 聚阴离子基团的旋转对锂离子的整体扩散能力也有一些微弱的消极影响。上述对锂-阴离子相互作用的深刻理解为进一步优化已有固体电解质体系和开发新型固态电解质提供了强大的理论指导。

交流类型：邀请报告

E12-I-088

基于无监督学习策略构建晶体结构原型数据库

罗树林

中国科学院山西煤炭化学研究所

材料结构及物性数据库、高通量计算、机器学习三者的联合发展为材料科学家提供了数据驱动材料设计新范式。新范式下，候选新材料通常基于已有材料空间结构框架进行元素替换，或基于已有化学组分进行结构演变的方式创建。材料空间结构框架和化学组分一起构成材料结构原型。获知材料结构原型对构建并筛选出高质量新材料至关重要。因此，我们基于无监督学习策略，通过对所有已知无机晶体材料局域原子环境进行聚类分析，构建了一个高质量大型无机晶体结构原型数据库 ICSPD。同时发展了一套晶体结构原型生成方法与软件包 SPGI。我们使用 ICSPD 和 SPGI 构建了一系列 MgCl_2 体系，并计算其聚合能、带隙值等物性，以验证 ICSPD 和 SPGI 的实用性和有效性。参考文献：
<https://pubs.acs.org/doi/10.1021/acs.jpca.2c03416>

交流类型：邀请报告

E12-I-089

DeePMD-kit v3: 机器学习势能模型的多后端框架

曾晋哲

中国科学技术大学

近年来，机器学习势能（MLP）模型在物理、化学和材料科学领域已成为不可或缺的工具，推动了相关分子动力学模拟软件包的快速发展。这些软件包通常依赖于某一特定人工智能框架（如 TensorFlow、PyTorch 或 JAX）进行实现，但当更高级的应用需要跨框架协同时，往往面临集成难题。以往基于 TensorFlow 的 DeePMD-kit 版本便充分暴露了此类局限性。针对这一问题，我们介绍了 DeePMD-kit v3 版本，该版本引入了一个支持 TensorFlow、PyTorch、JAX 以及 PaddlePaddle 后端的多后端框架。我们还展示了如何将其他 MLP 软件包与 DMFF 无缝集成，以验证该架构的高度灵活性。借助这一设计，用户和开发者只需进行极少量的修改，便可在不同后端之间实现平滑切换，从而轻松将 DeePMD-kit 融入使用其他机器学习框架的工具链。该创新不仅为构建更复杂、互操作性更强的 workflows 提供了坚实基础，也为 MLP 在科学研究中的更广泛应用开辟了新路径。

交流类型：邀请报告

E12-I-090

单原子催化剂的理论设计与高通量优选

刘研

安徽师范大学

利用电催化 CO_2RR , ORR 等小分子转化反应，将电能转化为高附加值的化学品，是利用可再生电能的有效方式。核心问题为高效电催化材料的研发，其本质在于催化活性位点的设计和反应分子机理的研究。基于此，近年报告人通过机器学习辅助高通量筛选高效电催化材料，揭示并提出了双原子催化剂的“几何-电子”耦合设计原则、中间体构相翻转的双原子位点“内串联”、单原子外配体动态转变等新型反应机理，指导实验催化材料合成，拓宽了催化体系设计，为合成具有应用前景的单原子材料提供思路。

交流类型：邀请报告

E12-I-091

面向笼状含能材料结构设计与合成优化的机器学习研究

姚闯

长江师范学院

笼状含能材料具有额外的应变能和超静定结构稳定性，有望满足现代装备对高爆能、低感度新型先进含能材料的迫切要求，具有重要研究价值。本研究融合了高通量量子力学计算、定制化机器学习模型和实验合成验证，开发了具有图形交互界面的专用软件 App，设计了一系列高稳定、高能量密度的新型含能化合物，并以新型六氮杂异伍兹烷笼状化合物为例探索了优化合成方法，揭示了分子能级结构和电子分布对笼状含能材料结构稳定性、化学反应活性的重要调控作用，为新型含能材料的理论设计和实验合成研究提供了参考。

交流类型：邀请报告

E12-I-092

二维材料超快输运过程的高通量表征

袁龙

中国科学技术大学

二维半导体材料因其在纳米尺度下具有独特的光学性质和电子结构，日益引起广泛的研究兴趣。研究二维半导体材料中的电荷和能量迁移对于深入理解其能量转化机理和发展新型高效纳米光电器件具有重要意义。为此我们发展了基于泵浦-探测和频闪光学成像的新型超快光学成像技术并用于高通量表征不同种类二维半导体材料中电荷输运过程。我们的研究为构建二维材料输运性质数据库奠定良好基础。

交流类型：邀请报告

E12-I-093

AI Design for Energy Catalysis

刘晓静

山东大学

New theoretical modulation strategies are required for the precise design of high efficient energy catalysts. We first proposed the concept that the surface orbital orientation have effect on the chemical reaction dynamics performance, providing a new theoretical research approach for high-efficient material design. We also elucidated the significant effect of non-metal p-band center in transition metal complexes on the catalysis, developing the strategy of surface orbital energy effect on the reaction performance. Based on the above structure modulation, we further innovated a coordinate-independent material parameterization method FOGN, trained an explainable artificial intelligence (XAI) model, and revealed the key descriptors based on the synergistic effects of orbital orientation and energy on the surface, enabling the accurate prediction of catalytic performance and large-scale screening of materials.

交流类型：邀请报告

E12-I-094

光电转换动力学机制和调控

田文明

中国科学院大连化学物理研究所

光电转换材料是将光能转变为电能或化学能的一类能量转换功能材料。深入理解材料中光生载流子分离、迁移、复合和界面转移等过程和调控机制是决定能否建立高效光电转化体系的核心因素之一。在二维钙钛矿单晶材料中揭示了激子解离，电荷分离和迁移动力学过程和机制。进一步提出外场调控载流子迁移调控策略，实现光电材料长距离快速电荷输运。通过温度调控，研究发现 $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$ 单晶相变过程中存在大量缺陷，在缺陷的辅助下，实现载流子在单晶中的快速迁移，迁移速率是室温条件下的 14 倍。另一方面，通过压力调控，成功抑制二维钙钛矿单晶中自由激子向自陷激子转变，并实现了高达 $93.6 \text{ cm}^2 \text{ V}^{-1} \text{ s}^{-1}$ 的激子迁移率。这一超快激子输运特性显著提高了二维钙钛矿(API) PbBr_4 单晶的紫外光响应，突显了其在高效光电器件中的应用前景。进一步将光电材料中载流子动力学调控应用到实际器件中，实现光电器件中调控应用，获得了高效光电转换器件。

交流类型：邀请报告

E12-I-095

可高精度计算自由基发光材料的 SDSPT2 方法

雷依波

西北大学

近年来，有机自由基发光材料因其独特的开壳层电子结构和激子利用机制在有机发光二极管（OLEDs）领域展现出重大应用前景。然而，该类体系的强电子相关性和多参考态特性导致传统密度泛函理论（DFT）方法常出现显著误差。为突破这一计算瓶颈，本研究采用了我们发展的“先静态-再动态-又静态”二阶微扰理论方法（SDSPT2）对这类发光材料的光物理机制进行了系统的电子结构计算研究。需要特别强调的是，最新发展的 SDSPT2 水平的跃迁偶极矩计算方法，为正确描述相关材料的吸收与发射光谱提供了可能。如在确定氮杂环卡宾自由基的特征吸收所对应电子激发态时，SDSPT2 给出了确定的单一激发态，而不是仅包含静态相关的 CASSCF 指认的两个简并激发态。另外，SDSPT2 计算提供了合理的有机自由基发光材料研究所需的辐射与非辐射速率常数，为高效与可靠预测与筛选此类发光材料提供了理论依据。

交流类型：邀请报告

E12-I-096

人工智能设计锂电池电解液

陈翔

清华大学

电解液是锂电池的核心组成之一，主要发挥传输锂离子的功能，显著影响电池实际性能，被形象地誉为“电池血液”。然而，先进电解液设计开发面临着溶液化学规律复杂、电解液分子数目庞大、电解液组分间强关联优化难等挑战。本报告将围绕理解电解液溶剂化学原理和机器学习设计先进电解液研究展开。具体而言，结合第一性原理计算和分子动力学模拟等多尺度模拟方法探究电解液溶剂化学规律，发现离子-溶剂结构的形成是影响电解液界面稳定性的关键因素，从而建立离子-溶剂化学模型；发展介电常数、黏度等多种电解液物性预测方法；集成多种物性计算方法和高通量计算，搭建电解液大数据库，包括 25 万种分子结构和 20 余种电解液性质；基于所构建的电解液大数据库，发展机器学习学习模型，定量关联电解液分子结构与理化性质，从而实现电解液分子的高通量筛选与反向设计，得到了十余种新分子体系，进一步开展实验验证。以上研究内容构建了电解液大数据库，发展了人工智能设计先进锂电池电解液的新方法，在上亿分子空间实现了电解液分子的快速、精准设计，推动了下一代高比能电池的实际应用，为实现我国“双碳”目标提供关键技术支撑。

交流类型：邀请报告

E12-I-097

多性质化工材料逆向设计的深度学习方法

陈厚样

中国科学院重庆绿色智能研究院

交流类型：邀请报告

E12-I-098

基于机器学习揭示无序合金电催化剂的构效关系

陈征

复旦大学

合金材料可通过调控电子结构和活性位分布，有效提升电催化性能。深入理解其结构-性能关系对催化剂设计具有重要意义。然而，表面元素分布受温度和气氛等合成条件影响较大，预测其偏析行为仍具挑战，同时对复杂构型下催化活性的高效评估也亟待解决。本文以无序 PdxAu_y 合金用于氧还原反应为例，构建结合粗粒度位点模型与晶体图卷积神经网络的机器学习方法，高效预测合金形成能与吸附能，结果与 DFT 一致。结合动力学蒙特卡罗模拟，准确再现不同条件下的表面偏析行为，并与实验吻合。进一步分析不同 Pd/Au 比例下 Pd_1 、 Pd_2 、 Pd_3 位点的分布及其活性，确定最优组分与实验一致。结果表明，位点集效应主导催化活性，配体效应在“火山”型曲线顶部附近具有显著调控作用。本研究为合金电催化剂的理性设计提供了新方法 with 机制认识。

交流类型：邀请报告

E12-I-099

钙钛矿太阳能电池及空穴传输层材料的机器学习研究发现

萨百晟

福州大学

本研究中，提出了一种小分子空穴传输层材料（SM-HTMs）的设计流程与研究范式，旨在加速高性能 SM-HTMs 的发现与应用。开发了一种定制化的分子拼接算法（MSA），生成了包含 20 万种中间分子的样本空间，并最终构建了一个包含超过 7000 种潜在 SM-HTM 候选分子的综合数据库。结合 MSA、密度泛函理论计算和高通量筛选，最终筛选出 6 种具有应用前景的空穴传输层候选材料。此外，引入了随机森林（RF）、梯度提升决策树（GBDT）和极端梯度提升（XGBoost）等三种机器学习算法，构建材料关键属性的预测模型，包括空穴重组能量、溶剂化自由能、最大吸收波长和疏水性。其中，基于 XGBoost 的机器学习模型表现出最佳的整体性能。本研究所介绍的 MSA 方法结合了全面的 SM-HTM 数据库和性能预测模型，为下一代 SM-HTMs 的设计与优化提供了一个强大且通用的工具包，支撑钙钛矿太阳能电池的后续发展。

交流类型：邀请报告

E12-I-100

半经验方法 aTB 及其应用

张英峰

深圳理工大学

基于原子密度的紧束缚方法（atomic density based tight-binding, aTB）是目前流行的

DFTB、GFN-xTB 之外的另一种紧束缚模型。该方法利用由密度拟合形式表示的电子密度构建零级哈密顿量，因此也被称作 aTB。aTB 支持从氢（H）到镭（Ra）一共 88 种元素，其基态的计算支持到二阶解析导数，激发态的计算支持一阶解析导数。其可用于计算包含主族元素和过渡金属的分子的结构、振动频率、分子间相互作用以及激发态。可以计算超过 10000 个原子的体系，相比于 DFT，aTB 则要快 3 个数量级。而相比于 DFTB 和 GFN-xTB，aTB 方法有着以下的优势：

1. aTB 的参数覆盖了更广泛的元素范围，其基态和激发态参数均支持到镭（Ra），而 GFN-xTB 支持到氡（Rn），专门用于激发态计算的 sTDA-xTB 支持到砹（At）。使用 DFTB 需要复杂的参数文件，且其参数覆盖范围远不如 aTB 广泛。

2. aTB 支持解析二阶导数，而 GFN-xTB 不支持，这使得 aTB 能够更精准、更快速地计算二阶导数，用于热力学计算以及过渡态搜索。

3. 激发态方面，aTB 支持解析一阶导数，能够快速完成大体系的激发态几何结构优化工作，而 sTDA-xTB 不支持。

4. aTB 方法在 Ames 软件中实现，支持过渡态搜索、背景电荷（点电荷与高斯电荷）和匀强电场，以及它们的一阶和二阶导数，这些功能都是 xtb 软件所不具备的。

除了可以直接计算分子的能量和性质，为机器学习模型生成结构，aTB 也可以直接结合机器学习模型，在大幅提高精度的同时，保留较好的可迁移性，并且可以支持添加外场的计算。

交流类型：邀请报告

E12-I-101

等变势函数 - 从球谐函数到笛卡尔张量

文明健

电子科技大学

机器学习势函数通过平衡计算精度与效率，显著推动了材料科学与化学等领域的原子尺度模拟研究与发展。目前主流的势函数主要基于球谐张量描述原子局域环境，而笛卡尔张量在简洁性和计算效率上展现出独特优势。本报告将介绍笛卡尔原子矩势函数（Cartesian Atomic Moment Potential, CAMP），一种完全在笛卡尔坐标系下构建等变势函数的新方法。CAMP 通过邻近原子构建原子矩张量，并利用张量积运算引入高阶多体相互作用，从而实现原子局域环境的完整描述。通过与图神经网络结合，该方法可实现系统性提升。测试表明，CAMP 在多种体系（包括周期结构、有机小分子、二维材料等）中均表现出优异的性能，其分子动力学模拟的精度、效率及稳定性达到或超越当前主流模型。

交流类型：邀请报告

E12-I-102

人工智能赋能嵌段共聚物相图的自动构建

董庆树

复旦大学

嵌段共聚物自组装是获取各种周期性有序纳米结构的一种有效途径。通过自洽场理论（SCFT）计算嵌段共聚物相图，可以精准预测嵌段共聚物的自组装行为，为制备各种新颖结构提供指导。但是通过自洽场理论计算相图非常依赖研究人员的经验，特别是依赖研究人员设定备选结构。这是因为自洽场理论通过迭代的方式寻找自由能极小值，非常依赖初始条件。以往研究中，备选结构主要来源于实验结果、无机晶体结构、研究人员的经验推测等。由于嵌段共聚物体系的复杂性，很难保证备选结构的选取是否全面，导致相图计算结果的可

靠性受到影响。为了解决这个问题，我们发展了一种结构的初始化方法，并将其和 SCFT、贝叶斯优化算法结合，实现了自组装结构的自动搜索，摆脱了研究人员的经验限制。进一步地，我们采用深度学习方法，对自组装结构进行分类识别，从而实现了相图的自动构建。

交流类型：邀请报告

E12-I-103

二维材料缺陷的图神经网络模型及其在单光子发射源筛选中的应用

邹小龙

清华大学深圳国际研究生院

缺陷工程是实现二维材料多功能应用的关键。然而，庞大的构型空间和复杂的结构-性能关系为目标导向的应用设计带来了巨大挑战。近年来，机器学习为预测二维材料缺陷的热力学和电子性质提供了新思路，从而推动实现对材料功能化应用的有目的性的设计。本研究中，我们充分融合了缺陷形成能定义中的全局项和局域项，提出并开发了一种基于图神经网络的新模型 D@DPP，该模型能够在无需结构弛豫的前提下，实现对二维材料缺陷形成能的高精度预测。且在面对未包含于训练集中的材料体系时，依然展现出优异的泛化性与迁移能力。作为该模型的实际应用，我们将 D@DPP 与主动学习相结合，高效筛选出缺陷形成能较低的复合缺陷结构。从 8911 个复合缺陷候选结构中，基于热力学稳定性与电子性质等标准，我们遴选出 28 种易于形成的且具有单光子发射性能的缺陷构型，不仅验证了在预测复杂缺陷体系形成能方面的出色性能，也凸显了其在缺陷工程中的潜在应用。D@DPP 有望加速新型二维材料缺陷构型的发现与设计，满足多样化的功能需求。

交流类型：邀请报告

E12-I-104

面向金属芳香功能材料的机理探索与智能设计

陈浙宁

中国科学院福建物质结构研究所

过渡金属芳香化合物作为芳香化学领域的新分支，显著丰富了芳香化学的内涵，并为新型芳香功能材料的研发开辟了新的路径。金属苯、金属稠环以及金属杂环等过渡金属类苯杂环化合物，作为这一家族的核心成员，因其独特的结构与化学性质而引起了广泛的关注。值得注意的是，此类化合物往往展现出非平面型几何构型，违反了传统芳香体系常常呈现出平面结构的普遍认知。我们前期的研究揭示，金属苯化合物偏离平面结构的驱动力主要来源于 σ 空间轨道的反键排斥，而非通常认为的 π 空间轨道的相互作用。有趣的是，我们发现金属苯化合物的结构弯曲不仅不会使体系芳香性消失，反而增强了其芳香性。我们基于此“ σ 控制机理”为基础建立了一套简单且有效的规则用于理性设计“弯曲的”且“更具芳香性的”金属苯。在此基础上，我们的研究进一步延伸至金属稠环及金属杂环化合物，拓宽了“ σ 控制机理”的适用性并印证了其普适性。此外，我们的研究工作还表明，“ σ 控制机理”不仅可用于理解金属苯的结构特征，还可用于解析其独特的芳香性趋势。目前，我们针对金属芳香化学领域小数据集特征，基于“ σ 控制机理”构建适用于小样本场景的机器学习模型，以实现金属芳香化合物结构特征的高效预测。与此同时，我们致力于构建高质量的金属芳香化合物结构特征数据库。初步研究结果表明，机器学习方法与双杂化泛函框架的有机结合能够显著提升对金属芳香化合物结构特征的预测精度。我们的研究工作以期能拓宽金属芳香化学的研究边界，进而推动新型金属芳香功能材料的开发。

交流类型：邀请报告

E12-I-105

从机器学习到材料相变模拟

朱升财

中山大学

基于量子力学 (QM) 计算的原子模拟在过去几十年已成为材料科学家的重要工具，帮助人们理解从结构到性能的广泛问题。然而，由于 QM 计算固有的计算量剧增和高昂成本，在进行大尺度原子模拟时，研究者不得不在精度和时间之间做出取舍。近年来，人工智能在材料研究领域得到广泛应用，其中基于机器学习 (ML) 的大尺度原子模拟展现出巨大潜力。这类模拟不再直接求解薛定谔方程，而是通过大量精确势能面 (PESs) 数据集和复杂数值模型来预测总能量，兼具大体系计算的高速性和高精度。本报告将详细介绍课题组近年来在利用机器学习势函数领域的若干应用案例，主要聚焦于材料的势能面搜索以及大体系分子动力学模拟：（1）通过拟合高精度的神经网络势函数，实现大体系的势能面快速搜索，从而揭示晶体到非晶态间的相变过程中，保留了结构中的拓扑有序性，而该有序性是非晶记忆效应背的本质。（2）通过拟合碳神经网络势函数，实现了大体系的分子动力学模拟，揭示了冲击条件下石墨向六方金刚石的相变关键，从而提出了六方金刚石静高压的合成路径——单轴压保持石墨的 AB 堆垛以及中等温度抑制石墨的层间互滑移，为六方金刚石的成功制备提供了理论指导。（3）通过拟合 Si-O-H 体系的神经网络势函数，通过势能面搜索发现了含水的斯石英在高压下呈现一维水通道的超结构，并得到了单晶实验验证。在此基础上，创新性地发现了高温高压下含水斯石英超结构内的氢离子形成独特的一维超离子态。

交流类型：邀请报告

E12-I-106

机器学习驱动第一性原理探索陶瓷的晶格热导行为

孙维威

东南大学

热导率作为材料的基本热学性质，是热功能和热管理材料应用的重要指标。通过对宽组成空间内的层状 MAX 相陶瓷 M_2AX ($X=B, C$ 或 N) 和 M_2AB_2 相进行高通量密度泛函理论计算，发现大量稳定存在的新材料。而且，该类层状金属陶瓷的电子与声子的热导贡献随组分结合机器学习，我们又进一步揭示了接近优异晶格热导率的根本原因，捕捉了强相关的描述符，并通过反向比较验证其自洽性。对于声子热导率，我们基于等边神经网络，同时引入键长和键角描述符，并结合多头注意力机制，构建了 CrysGraphFormer 模型，该模型对陶瓷材料的晶格热导率的预测精度和决定系数均超过了现有 MEGNET, GATGNN, ALIGNN, DEEPERGATAGNN 等模型。

交流类型：邀请报告

E12-I-107

光诱导超快动力学过程的理论模拟和光谱表征

陈立朋

之江实验室

现代超快光谱和衍射技术可以达到飞秒甚至阿秒时间分辨率和超高的空间分辨率，提供了探测各种分子体系中化学反应过程的理想工具。不断增加的揭示分子和化学反应机理的实验数据需要我们发展准确的理论方法从而可以解释分子体系光谱信号及其对应的结构变化背后的核和电子动力学过程。本人一直致力于发展各种变分波函数、随机薛定谔方程、量子

主方程、混合量子经典方法用于激发态动力学和非线性光谱的模拟。我们的整体目标是建立理论与实验的直接联系，揭示各种光化学过程的反应机理，实现光化学反应的“分子快照”。

交流类型：邀请报告

E12-I-108

机器学习驱动的表面结构动力学研究

曹端云

北京理工大学

表面作为物质交互的核心区域，其原子级结构演变与动力学行为（如吸附、扩散、反应）深刻影响催化、能源存储、电子器件等关键领域的性能。传统基于密度泛函理论的计算或实验表征，难以兼顾复杂体系的计算效率与动态精度。机器学习通过构建数据驱动的准确、高效的力场，推动了表面结构和动力学的原子尺度研究。

交流类型：邀请报告

E12-I-109

基于深度学习的合金微观结构强化机制识别及高保真度逆向设计

袁睿豪

西北工业大学

先进金属结构材料如高温合金在航空航天等领域有重要应用，微观结构作为连结成分、工艺与性能的桥梁，其有效/高效表征对物理现象如强化机制的理解以及性能的优化至关重要。目前，金属材料的微观结构表征主要依赖于专家经验，不可避免的引入主观性，同时效率较低，无法应对日益增长的数据规模。深度学习因其优异的图像处理能力，近年来被用于微观结构表征。但是，金属材料的微观结构表征困难，可用数据规模小，直接训练深度学习模型容易过拟合；预训练模型或者迁移学习有望解决这一问题，但源数据与目标数据通常属于不同领域（如基于 ImageNet 的预训练模型）导致迁移效果不佳。更重要的是，微观结构蕴含的大量物理规律或约束通常被深度学习忽视，导致算法驱动设计的微观结构不符合物理事实。

针对以上问题，以 Inconel625 高温合金为研究对象，从 25 组微观结构图像-屈服强度数据出发，开发了基于少量微观结构图像准确预测力学性能以及高保真逆向设计微观结构的方法。（1）首先在不考虑性能标签的情况下，利用图像增强算法对 25 组图像进行大规模扩充，进而基于变分自编码器对无标签数据学习，获得了无性能倾向、更具鲁棒性和泛化能力的微观结构潜空间表示；将预训练模型应用于有性能标签数据，提升了微观结构表征能力，发现了潜变量与屈服强度遵循 Hall-Petch 公式，大幅提升了屈服强度的预测精度。作为对比，发现卷积神经网络无法学习到有规律的微观结构表征，出现了严重过拟合。（2）在此基础上，尝试利用训练的 VAE 模型实现微观结构的逆向设计，但仅基于 VAE 生成的图像质量较差，晶界等物理信息严重失真或者缺失；通过引入 U-Net 和扩散概率模型（DDPM）以及设计损失函数，有效提升了微观结构图像的生成质量；对比实验图像和生成图像，发现晶粒面积和晶粒取向等物理特征均呈现较好的一致性；进一步发展了多目标性能导向的微观结构主动学习设计框架，能够根据需求逆向设计高保真微观结构。

交流类型：邀请报告

E12-I-110

基于数据增强的机器学习评分函数及其应用

李文金

深圳大学

机器学习正迅速推动药物发现进程，显著提升了研发速度与效率。计算机辅助药物设计的创新主要源于基于结构和配体的方法。当针对某一靶点的已知抑制剂数量有限时，数据增强策略通常更具优势。近期，我们开发了基于结构的药物发现预测模型，通过结合传统机器学习和最新深度学习算法，并利用靶点与配体的动态感知数据集进行训练。通过将其应用于多个治疗重要性靶点（包括 m6A 修饰蛋白 YTHDF1 和 Mettl3、胞质 DNA 传感器 cGAS 以及结核分枝杆菌胸苷酸激酶），本研究验证了该方法的潜力。该方法为活性分子稀缺的靶点提供了可行的药物发现研究路径。

交流类型：邀请报告

E12-I-111

跨化学领域预测中密度泛函方法的基准研究与应用展望

刘艺炜

上海应用技术大学

密度泛函理论（DFT）的泛函选择在计算化学中仍面临重大挑战，尤其在电子关联效应主导的过渡金属体系和键解离过程中。本研究系统评估了 16 种代表性 DFT 泛函在六个化学多样性基准集上的性能，包括原子电离势（AIP10）、金属-配体键解离焓（M-LBDE）、Diels-Alder 过渡态能垒（D-A_TS_BH）、过渡金属反应能垒（MOBH35）、氟硼烷中 B-F 键解离（B-F）以及 3d 过渡金属电催化配合物（3dTMV）。通过对比高精度计算（如 CCSD(T)/CBS）和实验数据，我们发现泛函性能呈现显著的领域依赖性。含适度精确交换的杂化泛函（如 CF22D）在主族热化学（平均绝对误差 MAE < 1.20 kcal/mol）和过渡金属键解离（MAE < 4.50 kcal/mol）中均表现平衡。MN15 泛函在主族体系中表现优异（MAE = 1.57 kcal/mol），优于传统泛函如 ω B97X-D（MAE = 3.87 kcal/mol），挑战了其仅适用于过渡金属的传统认知。半局域泛函（如 B3LYP）在强关联体系（如弱场配体解离）中显示出系统性偏差（>12 kcal/mol），而 MN15-L 泛函在 3d 过渡金属电催化配合物的计算中表现出稳健精度（MAE = 4.2 kcal/mol）。研究结果为催化与材料设计中的泛函选择提供了依据。CF22D 以其跨领域平衡性能（总 MAE = 3.70 kcal/mol）成为通用优选，而 MN15-L 和 B3LYP-D3(BJ)则分别适用于过渡金属和需色散校正的体系。本工作强调了系统化基准分析在推动 DFT 发展中的关键作用，并为多尺度化学及材料体系模拟提供了实践指导。

交流类型：邀请报告

E12-I-112

Interpretable Machine Learning Framework for Designing High Ionic Conductivity in Low-Temperature Lithium-Ion Battery Electrolytes

刘柱

浙江大学杭州国际科创中心

Ionic conductivity is a critical determinant of electrolyte performance in lithium-ion batteries, governing critical functionalities such as rate capability and low-temperature operability. Conventional optimization approaches, whether empirical or simulation-based, face significant limitations in either resource efficiency or predictive accuracy. To address these challenges, we develop an interpretable machine learning framework that combines LASSO regression with Shapley Additive Explanations (SHAP) analysis to elucidate the structure-property relationships in multicomponent electrolyte systems. The framework proposes a novel descriptor, the Model-input-weighted Sum of LASSO Features (MSLF), which quantitatively captures the

collective influence of molecular characteristics on ionic conductivity. Our approach achieves state-of-the-art predictive accuracy (RMSE = 1.33 mS cm⁻¹, R² = 0.88) while identifying two dominant molecular features: PEOE_VSA1, representing surface charge distribution, and NumAtomStereoCenters, reflecting stereochemical complexity. Application of this methodology led to the design of an optimized ternary electrolyte system (1 mol L⁻¹ LiTFSI in MA:THF:DMF, 5:3:2 volume ratio) demonstrating unprecedented conductivity values: 15.74 mS cm⁻¹ at 25 °C and 2.69 mS cm⁻¹ at -70 °C. These results validate our framework's ability to guide the development of high-performance electrolytes for extreme low-temperature applications. This study establishes a robust machine learning-driven framework for accelerated electrolyte discovery, providing fundamental insights into the molecular determinants of ionic conductivity, with potential extensions to diverse energy storage systems.

交流类型：邀请报告

E12-I-113

机制结合数据驱动的新型光电子材料计算设计

孙远慧

苏州实验室

材料研究范式的变革不断提升新材料的研发效率,从最初的经验科学逐渐转向未来的纯数据驱动方向发展。相比于具备巨量数据的文字或图像领域,天生是小数据集的材料体系而言,实现完全意义的数据驱动还比较遥远,实现机制结合数据驱动的研究范式,是当前行之有效的解决思路。基于该思路,我们针对氢化物超导材料、八面体光电材料、二维材料领域开展深入研究。在氢化物超导材料方面,相比于领域内十余年发现的百余种二元金属氢化物,我们一次性实现了总数目 25% 的增长,在具有高超导转变温度潜力的网络状氢晶格超导材料方面,实现了 65% 左右的增长。在八面体光电材料方面,通过构建八面体嵌入的结构生成模型框架,将八面体晶体生成的能力从 42% 提升至 65%,并指导实验人员制备一种具有优异光电性质的八面体材料。在二维材料方面,通过搭建一套主动学习流程,实现二维材料数据集数量级程度的增长至 20 余万条,同时将机器学习势对稳定材料的筛选精度提升至 92%。

交流类型：邀请报告

E12-I-114

电子化合物合成氮催化材料的智能设计

王俊杰

西北工业大学

电子化合物 (Electrides) 是一类具有独特电子结构的功能材料,其显著特征是部分价电子不再参与常规的原子键合,而是局域于晶体结构中的空隙或通道中,充当类似阴离子的角色。这些“自由电子”通常未被原子核束缚,因而在能带结构中靠近费米能级 (Fermi Level) 分布,呈现出一系列异于常规材料的物理和化学性质。例如,电子化合物普遍具有极低的功函数、优异的电子供体能力、各向异性的导电性,以及潜在的拓扑特性。这些特性使其在多个能源与环境相关的催化反应中展现出重要的应用潜力,尤其是在氨合成与分解、CO₂加氢、析氢反应 (HER) 和析氧反应 (OER) 等关键反应路径中表现出优异的催化活性与选择性。然而,电子化合物的组成复杂、结构多样,往往涉及多组元金属-非金属体系,其结构稳定性和电子局域化行为高度依赖于精确的化学成分、原子排列与晶体对称性。这种高度复杂性极大地增加了新型电子化合物的设计与开发难度。传统依赖试错实验的材料开发方法不仅效

率低下，而且成本高昂，远远无法满足高性能电催化材料日益增长的应用需求。因此，亟需引入更高效、系统化和智能化的设计方法，推动电子化合物的快速筛选与性能优化。

近年来，材料基因工程（Materials Genome Engineering）理念的提出为电子化合物的智能设计提供了新思路。通过集成高通量计算筛选（High-throughput Screening）、晶体结构预测（Crystal Structure Prediction）与机器学习（Machine Learning）等先进方法，研究人员可以在更短时间内、高维空间中探索材料组成与性能之间的复杂关系。高通量计算技术可在大规模材料数据库中迅速识别出具有潜力的电子化合物候选体，并预测其稳定性、电子结构及催化性能；结构预测方法则有助于揭示复杂晶体中的电子局域位点与拓扑通道，从而构建更合理的电子局域模型；机器学习则能够基于已有计算和实验数据建立高效的性能预测模型，挖掘出影响电子局域行为的关键结构特征与化学因素，进一步指导化学成分的智能优化。

本报告将系统总结近年来基于材料基因工程方法，在电子化合物设计与催化性能调控方面取得的重要研究进展。重点介绍高通量与机器学习方法如何协同加速电子化合物的发现与筛选，以及如何通过结构预测深入理解其电子局域化机制与催化反应路径。通过这些前沿技术的有机融合，不仅显著提升了新型电子化合物的研发效率，也为面向氨合成等清洁能源转化过程的高性能催化剂开发提供了理论指导与实践路径，进一步拓展了电子化合物在能源、环境与信息材料等领域的应用边界。

交流类型：邀请报告

E12-I-115

高分子材料的微观机制解析和性能的机器学习优化

王大鹏

中国科学院长春应用化学研究所

高分子复合材料具有诸多优良性能，已成为人类生产生活中的重要组成部分。合理且快速地优化配方成分是精准制备满足实际需求高分子复合材料的关键步骤之一。然而，高分子复合材料的性能与其加工过程密切相关，其底层机制是高分子在不同的加工过程中处于不同的非平衡状态，导致采用不同加工过程制备的高分子复合材料性质存在各异。这种差异性使得不同来源的结果难以对齐，从而难以构建一个数据详实、性能完整的橡胶材料数据库。在传统的橡胶材料配方设计过程中，实验试错法被广泛采用，通过大量实验数据的积累来优化配方。然而，这种做法存在时间长、资源消耗大的明显缺陷。为解决这一问题，我们创新性地运用和发展机器学习与实验耦合技术，深入揭示橡胶性能与配方组分之间的关联机制，从而准确预测橡胶材料的各项性能。通过有目的地、定向性地优化配方组分，我们能够实现单目标性能的极限优化和多目标性能优化，有效解决了高分子复合材料性能配方优化过程中效率低、难以找到全局最优解的问题。

交流类型：邀请报告

E12-I-116

钙钛矿光电材料功能添加剂的智能设计

刘哲

西北工业大学

机器学习在筛选高效有机分子添加剂以提升钙钛矿太阳能电池性能方面展现出巨大潜力。然而，面对由数百万种结构多样的分子构成的庞大化学空间，传统机器学习方法由于数据量有限和依赖人工设计特征，在新材料预测中存在显著偏差，使得高效添加剂的筛选面临重大挑战。针对这一难题，我们开发了钙钛矿添加剂智能筛选系统（Co-PAS）。该系统创新性地整合了以下关键技术：1）基于分子骨架分类器的预筛选模块；2）采用树形变分自编

码器 (JT-VAE) 的分子结构编码技术; 3) 供体数、偶极矩和氢键受体数量等关键分子特性参数的机器学习预测模型。团队从 PubChem 数据库中随机选取 25 万种分子作为筛选库, 通过 Co-PAS 系统综合考虑, 评估了光电转换效率预测值、关键分子特性参数、可合成性等因素, 成功筛选出多个高性能候选分子。经实验验证, 发现了用于钙钛矿器件的新型添加剂分子, 并表现出优异的器件性能提升效果。

交流类型: 邀请报告

E12-I-117

高可信高通量实验平台加速新型光伏与微型光谱仪技术开发

赵怡程

电子科技大学

光电材料与器件的高效研发涉及到多变量耦合与多目标兼顾的需求, 通常要求材料组分与加工工艺的全局优化, 因此亟需建立以高通量实验数据与 AI 模型为核心的研发模式。团队开发了面向电子薄膜材料与器件的高可信高安全性高通量人工智能实验研发平台。该平台通过集成本地云服务器、高通量实验装置、智能调度算法、自主决策算法, 构建了覆盖“参数设计-制备执行-数据分析-AI 模型建立”的全链条研发体系。该平台单日配方研制通量可达 10^4 , 薄膜与光电器件加工通量可达 10^3 , 数据分析通量可达 10^4 以上。基于该平台, 我们成功实现了高质量且稳定的单结钙钛矿光伏薄膜组分优化、钙钛矿光伏电池性能高精度预测, 以及微型光谱仪的高精度重构。相关工作论证了高可信高通量实验驱动的研发模式优越性, 尤其是加速新型器件研发方面产生的质变作用。

交流类型: 邀请报告

E12-I-118

通过知识增强表征学习实现虚拟表征: 从有机共轭分子到器件

程正

北京科学智能研究院

有机功能器件的理性设计依赖于对结构-性能-器件表现关系的深入理解, 这通常需要跨尺度的表征。然而, 传统的实验或模拟表征方法成本高昂, 且依赖多学科的专业知识。本文提出了一种融合领域知识的表示学习框架——OCNet, 首次实现了从分子到器件尺度的统一虚拟表征。OCNet 在一千万以上自生成的共轭分子及其二聚体上进行预训练, 学习到了具有良好泛化能力的微观表征, 其效果可与专家精心构建的特征相媲美。在多个关键计算和实验光电性质的预测任务中, OCNet 相较当前最先进模型的性能提升超过 20%。进一步地, OCNet 首次实现了可迁移的薄膜态电荷转移积分预测模型, 为基于多尺度模拟的介观尺度载流子迁移率估算提供了可能。通过引入紧束缚级别的电子结构描述符, OCNet 还可实现器件光电转换效率的实时精准预测。综上, OCNet 构建了一个统一且具扩展性的跨尺度虚拟表征基础, 适用于有机光伏、显示与传感等多种应用场景。

交流类型: 邀请报告

E12-I-119

Thermodynamic and kinetic stability study of novel chemical molecules

丁益宏

温州大学

The endeavor to find novel chemical species with good thermodynamic stability or good kinetic stability properties has never been ceased. Unfortunately, experimental studies have always

faced great challenges to find suitable synthetic precursors, synthetic routes and synthetic conditions, which have significantly blocked study of these species purely from the experimental viewpoint. Alternatively, with the developments from the quantum computational theory and computer science, one can independently study chemical species at a reliable level free of experimental information. In this way, one can predict useful information of these exotic chemical species, which accordingly would provide useful guidelines for future laboratory study. We summarize our recent research studies on the nitrogen-rich and boron-rich molecular species with exotic structures. The thorough isomeric and transition state structural search have been carried out in order to describe their thermodynamic or kinetic stabilities. A class of the lowest-energy or ground-state structures were found that act as “thermodynamically stable” species. Besides, we also found species that are thermodynamically unstable (with high-energy) but kinetically stable (reluctant to isomerize or decompose).

交流类型：邀请报告

E12-I-120

Cu/CeO₂ 界面长程氧溢流理论研究

苏亚琼

西安交通大学

氧化铈负载的铜催化体系(Cu/CeO₂)因其特殊的催化能力而在一氧化碳氧化、和水煤气转化反应等多个催化领域有重要应用。然而,在团簇催化剂的制备以及反应过程中,界面结构通常会发生显著重构,原位生成新的活性反应物种以调控其催化效率和选择性。在这一背景下,我们借助于热力学原理、界面能量及尺寸效应等关键理论依据构建了评估反应环境下Cu 纳米团簇在 CeO₂ 载体上稳定性的理论框架。此方法可以定性分析催化剂制备阶段的结构演化,为深入理解催化剂制备及理性设计提供了新的理论认识。

通过该方法,我们通过第一性原理分子动力学(AIMD)和深度势分子动力学(DPMD)模拟了不同 CeO₂ 晶面负载 Cu 纳米团簇动态重构过程。发现在实验典型煅烧温度(500°C)下,由于 Cu 团簇与 CeO₂ 载体的强相互作用,CeO₂ 表面晶格氧可以自发迁移到 Cu 团簇表面,形成载体→金属的氧溢流现象。其中,CeO₂ 载体表面被部分还原,而 Cu 纳米颗粒则被部分氧化为 Cu_xO。通过更大尺度的 DPMD 模拟,我们发现 Cu/CeO₂ 界面存在氧溢流的长程效应,即更远处及亚表层和体相内的晶格氧可以溢流到 Cu 团簇上,同时形成一定数量的氧空位。该研究揭示了 Cu/CeO₂ 界面处氧物种的动态演化过程,为深入研究氧化物负载金属催化剂制备过程结构复杂性提供了一些参考。

交流类型：邀请报告

E12-I-121

镧钍分离过程中 f 电子性质的理论研究

胡淑贤

北京科技大学

随着核能的快速发展,乏燃料后处理尤其是高放废液的安全处理与处置对于核能的可持续发展具有重要意义。高放废液是 PUREX (Plutonium and Uranium Extraction) 流程排出的废液,其中仍有少量的铀和钚、次锕系元素及其长寿命裂变元素,如不妥善处理可对环境构成长期危害。“分离-嬗变”是目前国际上处理高放废液的有效途径之一。因为高放废液中还含有大量的具有较大中子俘获面积的锕系元素而降低了嬗变效率,所以需要将锕系元素从次锕系元素中分离出来。由于锕系与镧系元素具有非常相似的物理化学性质,因此镧钍分离成

为高放废液处理中最具挑战的研究课题之一。另外，次锕系元素具有强放射毒性，开展实验研究有较大困难和挑战，因此从理论上研究次锕系元素对镅分离是非常必要的。

报告人近年来开展了一系列对 f 电子化合物结构和成键规律的理论研究。先后研究了 $AnxCy$ 和 $AnxBy$ ($An = Th, U, Np, Pu, Am, Cm, x=1$ 和 $2, y=8$ 和 12) 的成键规律，并与对应的镧系化合物和过渡金属的化合物做了比较。计算结果表明从 Th 到 Cm 的化合物，5f 轨道的能量逐渐降低，而 6d 轨道的能量逐渐升高。但由于 6d 轨道的径向分布较 5f 更加延展，使得 6d 轨道在 An 与 C8/B8 成键过程中起到更重要的作用。锕系化合物与类似的镧系化合物的计算结果显示它们之间有细微的区别，即相比于镧系金属参与成键的 4f 和 6s 轨道，锕系金属的 5f 和 7s 轨道更加有效，而且镧系金属的“半芯”5p 轨道相比于锕系的 6p 轨道，其反键作用更大。本次报告将针对这些结果进行汇报。

交流类型：邀请报告

E12-I-122

锕系元素 5f-in-core 模守恒势的理论研究

鲁俊波

中国科学院赣江创新研究院

以镧系和锕系元素为代表的 f 区元素，由于其超重原子核、多重角动量价轨道并存及众多电子的特性，其理论研究一直是电子结构领域中的难点和痛点问题。其中，相对论势的发展对 f 区元素体系的理论模拟至关重要。自上世纪 70 年代以来，镧系锕系元素的能量一致势和形状一致势在分子量子化学社区被相继开发出来。然而，上述势由于其计算标度问题，难以被应用于镧系锕系凝聚相体系的模拟。Goedecker-Teter-Hutter (GTH) 势是可分离的高斯型模守恒势，在凝聚相体系的模拟中被广泛应用。令人遗憾的是，镧系锕系元素的 GTH 势参数自上个世纪 90 年代一直未能得到有效解决，因而阻碍了镧系锕系凝聚相体系的理论模拟。我们在过去八年时间中，开发出了镧系锕系元素 f-in-valence 的 GTH 势和基组。1-2 结合第一性原理从头算分子动力学(AIMD)模拟，该系列势被应用于镅分离以及镅分离过程的模拟研究，揭示了宏观实验过程的微观机制。3-4 考虑到 f 轨道的收缩特性，我们于近期开发出了 f 区元素的 f-in-core 的 GTH 势和基组。5-6 由于 f 电子被包含在势中，f-in-core 的 GTH 势将会极大地加快镧系锕系凝聚相体系的模拟。本报告主要介绍锕系元素的 5f-in-core 势的开发及相关应用。

交流类型：邀请报告

E12-I-123

高效催化结构筛选及催化促进机理探究

刘一蒲

海南大学

设计具有高本征活性的催化结构对相关能源转换技术发展至关重要。然而由于实验合成及结构表征的局限性，一些相对复杂的催化结构在实验层面上很难构建系统对比，同时相应的催化促进机理也不够明确，极大的限制了催化结构优化策略的进一步构建。考虑到量子力学及计算机技术的蓬勃发展，基于密度泛函理论(DFT)的理论化学能够为催化材料的电子结构分析及相应催化机理推测提供有效帮助，目前也已经发展出了较为成熟的催化活性预测方法。与此同时，DFT 计算能够保持不同结构计算条件的基本一致，让我们能够实现对复杂结构中不同亚单元的贡献进行探究。但是理论计算与实验结果之间仍然存在巨大的鸿沟，如何从实验到理论合理化理论分析，以及如何从理论到实验合理化理论预测均存在大量问题需要解决。我们将以近期涉及的催化结构为例，包括 OH 修饰 $MoSe_2$ 纳米壳层、

Ru/FeOOH/Ni(OH)₂ 三相异质结、边缘单原子结构及 Au 单原子阵列结构, 给出我们对相关问题的思考。

交流类型: 邀请报告

E12-I-124

水溶液中的自电离行为及质子振动光谱解析的理论研究

刘玲

北京大学

人们对水分子电离机制的探索由来已久。然而, 自然条件下纯水自电离的概率极低, 不仅阻碍了实验的直接观测, 也对理论上精确刻画自由能面及阐明反应机制提出了巨大挑战。本研究基于 DFT 精度的原子神经网络势函数, 在经典核处理下开展了纳秒级增强采样动力学模拟, 获得了收敛的反应自由能面, 并精确复现了电离平衡常数 ($pK_w=14.14$) 与速率常数 ($1.369 \times 10^{-3} \text{ s}^{-1}$)。我们不仅清晰揭示了关键中间态与过渡态, 还首次提出了三质子异步转移的反应路径。此外, 研究将溶剂驱动效应归因于“双预溶剂化”机理, 即通过周围配位水分子数量的变化产生局域电场涨落, 进而触发水分子的电离过程。

在酸性水溶液中, 质子通常被认为以 Zundel 和 Eigen 两种典型构型存在。然而, 对于盐酸溶液中红外光谱的解释仍存在显著争议, 尤其是在 1750 cm^{-1} 附近振动峰的归属问题上尚无定论。本研究基于傅里叶变换及其逆变换, 设计了一种新的振动谱解析方法。通过构建 DFT 精度的原子神经网络力场, 我们对盐酸溶液中水合质子的振动行为进行了系统表征。结果表明, 1750 cm^{-1} 附近的振动峰来源于一种“中间态”构型中质子的伸缩振动。该中间态在体系中占比高达 44%, 平均寿命为 51 fs, 均显著高于传统的 Zundel 和 Eigen 构型。

交流类型: 邀请报告

E12-I-125

仿生人胃柔性反应器内传递与转化特性的数值模拟研究

李昌勇

华侨大学

反应器作为工业生产的核心设备, 传统设计以刚性且不可伸缩的壁面为主, 依赖机械搅拌以促进内部物料混合。但传统机械搅拌混合法无法有效混合高黏性或剪切敏感性的物料。本项目利用仿生方法学的原理, 模仿人胃的生理结构与功能, 构建一种新型的仿生人胃反应器, 该反应器通过模拟胃壁的蠕动作用实现物料流动和混合。本项目采用计算流体力学(CFD)技术, 开发耦合流体本构方程、动网格技术及化学反应动力学的数学模型和 OpenFOAM 计算程序。通过实验与数值模拟相结合的方法, 揭示蠕动作用下反应器内流体的流动特性与混合机制; 研究反应器结构参数、运行条件及物料黏度对流动与混合效果的影响规律; 揭示蠕动位置、频率与振幅等因素对高黏蛋白溶液酶解速率及转化程度的影响机制, 并与传统搅拌釜式反应器内蛋白水解效果进行对比分析, 阐明反应器内高黏介质流动混合与反应转化之间的相互作用关系, 旨在为仿生反应器技术的应用提供初步的理论支持和实证基础。

交流类型: 邀请报告

E12-I-126

短程有序对高熵合金力学行为和强韧化机制影响的计算机模拟研究

宋海洋

西安石油大学

高熵合金作为颠覆传统合金设计理念的新型材料, 其强塑性倒置共性难题仍未突破, 其

中一个关键因素可能在于现有研究范式常将化学短程有序（CSRO）与界面的强化行为割裂开单独研究，未能阐明二者在变形过程中的动态交互作用。本项目以 CSRO 与界面的协同作用为主线，针对 AlFeCoCrNi、CoCrFeMnNi 等高熵合金体系，采用分子动力学、分子动力学/蒙特卡洛混合模拟方法，研究高熵合金 CSRO/界面动态互调控及强韧化协同机制。

交流类型：邀请报告

E12-I-127

基于量子化学与几何结构增强图神经网络的新型分子表征算法

王亮亮

防化研究院

人工智能（AI）技术正以多尺度、多领域以及多学科交叉融合的方式变革化学与材料科学研究范式。在分子设计领域，性质预测作为加速分子设计的关键环节，其可靠性很大程度上取决于分子结构表征的完整性。本研究聚焦更全面表征分子的结构特征，巧妙设计量子数和几何两种尺度的自监督预训练学习任务，创新开发了融合分子“电子-原子-键长-键角-二面角”特征的分子表征算法 Q-GEM，显著提升了对分子绝对构型和构象细微差异的区分能力，在 MoleculeNet 基准数据集上展现出优异的预测性能。此外，基于 Q-GEM 提出了融合量子、几何、语义特征的新型多任务性质预测框架 QGeoSEP，通过共享不同性质终点之间的关联知识，有效缓解了下游性质预测任务中数据样本严重稀疏的现实问题，进一步提升了预测结果的准确性。本研究可为新分子和新材料稀疏小样本关键性质的高效准确预测提供一种可靠解决方案。

交流类型：邀请报告

E12-I-128

钴单晶表面的小分子活化机制与催化剂精准设计

黄传奇、杨文绍

浙江师范大学

基于高分辨 STM 技术和 DFT 计算的表面反应可视化研究对深入理解催化反应具有至关重要的意义，其在诸多重要的反应机制方面提供了独一无二的直观科学依据，使得人们能够从原子层面认识和理解表界面催化反应的基元反应过程，过渡态和中间产物等关键信息。基于此，我们深入探究了 CH₃OH、H₂、CO、H₂O、O₂、CO₂ 等重要小分子在钴基催化剂单晶表面的吸附、迁移、解离活化以及相互作用等基元过程。

交流类型：邀请报告

E12-I-129

恒电势分子动力学模拟研究 N₂ 活化和转化

赵训华

东南大学

带电液-固界面的结构与动态是理解电化学过程的核心问题之一，是电化学里最有趣也最有挑战性的课题之一。近年来我们基于第一性原理“恒电势-杂化溶剂-动态模型”（CP-HS-DM）方法模拟了多个电化学界面在真实溶剂和电势下的动态和反应。N₂ 的活化转化长期是电催化中的一个重要但很难的问题。在本次报告中，我们将专门讲述我们最近在 N₂ 活化转化中的探索，特别是单原子合金中动力学 vs 热力学数据的缩放关系，以及机器学习回归分析如何获得统一的定量关系并因此加快单原子合金催化剂在反应能垒层次的搜索，此外我们还将讨论碳材料催化 N₂ 活化和转化为多种高价值产物的可能路径。

交流类型：邀请报告

E12-I-130

高通量计算与机器学习设计一维磁性原子链材料

王聪

中国人民大学

一维磁性材料因其在自旋电子学与量子计算中的独特量子效应备受关注,但其合成的实验挑战性高,亟需理论指导来加速发现进程。本研究通过高通量计算、热力学分析与机器学习,系统探究了 6832 种过渡金属/非金属元素构成的 1D 链结构稳定性、电子结构与磁性。研究筛选获得一系列在特定化学势区间热力学稳定的一维磁性链(如富 Cl 条件下的 FeCl_2),其中部分一维磁性原子链展现出有趣的磁性或者电子结构特性: MnTe 的 Luttinger 补偿反铁磁、 CrF_3 的交变磁性。我们采用随机森林机器学习模型,发现低化学配比、组成元素的电子亲和能是决定一维链稳定性的关键因素,为实验合成与低维磁性材料设计提供了理论指导。

交流类型：邀请报告

E12-I-131

机器学习助力的二氧化钌基析氧材料设计

田子奇

中国科学院宁波材料技术与工程研究所

质子交换膜电解水制氢是实现氢能应用的关键技术环节,其阳极材料依赖钌基、铱基氧化物,且存在活性与稳定性不足的问题。通过机器学习技术,基于理论计算与实验结果,设计并实现多元金属掺杂的低钌阳极材料,显著降低电化学反应过电位并实现工业电流密度下的良好稳定性。

交流类型：邀请报告

E12-I-132

基于多专家图神经网络的发光材料高通量精准筛选与在线预测平台

胡连瑞

华东师范大学

在分子光电功能材料的研究中,准确预测复杂体系中的激发态电子结构与能量分布对于材料设计具有关键意义。然而,传统密度泛函理论(DFT)与 Post-HF 方法在大规模体系与强关联电子结构模拟方面面临极高的计算成本,难以满足高通量筛选与结构空间快速探索的需求。为应对这一挑战,我们构建了 SFMMoE,即多专家门控机制图神经网络模型,结合局部图拓扑信息与分子全局描述符融合学习机制,实现了对五个关键激发态性质的同步精准预测。相比传统 ML 模型和现有 GNN 框架(如 D-MPNN),SFMMoE 在泛化能力与预测精度方面均实现显著提升。此外,我们还将该模型部署为线上可视化预测平台,用户仅需输入 SMILES 或分子结构图,即可自动完成分子优化、描述符提取与性质预测,极大降低了筛选门槛,推动了单重态裂分材料的智能设计。本研究展示了将多任务图学习与专家模块结构融合在复杂激发态体系中的应用潜力,为高通量、低成本筛选有机光伏材料提供了切实可行的新范式,并为解决能源材料领域中的“精度-效率”难题提供了新的解决路径。

交流类型：邀请报告

E12-I-133

平衡态分子理论计算与胶体马达自驱动机制及应用研究

杨玲
国科温州研究院

交流类型：邀请报告

E12-I-134

机器学习辅助钠离子电池电极材料储钠机制的理论研究

王晓

中国科学院深圳先进技术研究院

钠离子电池因其原材料丰富、成本低和安全性能好,成为一类重要的二次离子电池体系。然而,人们对钠离子电池微观动力学储钠机制的认识不足,严重制约了对钠离子电池电极的性能提升。本工作将以基于机器学习力场的动力学模拟为主要方法,探究钴酸钠正极和硬碳负极的储钠行为。在钴酸钠正极的研究中,我们训练了精度较高的机器学习力场,绘制了不同钠组分下的 O3 和 P2 相的相图,揭示了钠离子占位有序性对结构稳定性以及钠离子扩散机制的内在关联,并模拟了正极的半电池曲线,与实验结果较为吻合;在硬碳负极的研究中,我们训练了适合研究钠-硬碳体系的机器学习力场,构建了合理的硬碳模型,并且通过几何特征和随机森林算法实现了吸附-插层-填充的位点识别,提取了对插入位点关联度较高的关键环境特征。最后通过电压曲线的模拟,证明了该模型的储钠过程符合“吸附-插层-填充”机制,这与报道的实验结论一致。上述研究验证了机器学习力场用于探究钠离子电池体系乃至其他电池体系储能微观机制的可行性,也为钠离子电池体系的改性提供了重要的理论指导。

交流类型：邀请报告

E12-I-135

材料基因工程方法在银稀土基电接触材料研究中的应用

陈松

云南贵金属实验室有限公司

银基电接触材料由于优越的电接触性能广泛应用于低压电器中。而对于电接触过程中出现的特有的熔桥、电弧现象的特征参量的测量十分关键和重要,而这些参数与材料的组成和结构有密切关系,如何发现这些关系或者主要影响因素对于电接触材料的优化和设计具有重要学术和使用价值。本研究采用自主研发的高通量熔炼、制备、分析和测试方法,对 16 种稀土系银稀土合金的显微组织、中间相、枝晶等与电弧的作用的关系,电弧对于阳极、阴极的侵蚀特征和作用机理;并在不同电流-电压条件下的熔桥几何尺寸、电弧寿命、电弧形态等关键电接触性进行的定量测量;基于这些测量数据采用机器学习中的 k 聚类方法进行分析,发现了决定熔桥尺寸、电弧寿命的元素关键影响因素为稀土原子系数、周期表位置、杨氏模量、电离能、电负性、电弧能量等参数。最后,通过实验结果和数据分析可以部分预测银稀土系合金电接触材料中熔桥、电弧的主要作用特征和作用机理,为新型银基电接触的设计提供的思路和支持。

交流类型：邀请报告

E12-I-136

机器学习驱动的高通量碳/氮基二维层状材料催化/吸附性能研究

张千帆

北京航空航天大学

二维层状材料被广泛应用于催化/储能等新能源材料体系。二维层状材料与原子、分子、团簇间的相互作用对于研究其催化、吸附等性能有重要意义。高通量计算及机器学习模拟可

以实现对成分空间巨大的二维材料及其相关吸附体系的高效研究，同时对阐述催化/吸附机制有重要意义。应用发展的机器学习驱动的高通量模拟方法，系统研究了 MXene/MA2Z4 等二维碳/氮基层状材料家族对分子、金属原子的催化、吸附作用，从理论上阐述了相关二维层状材料催化性能、亲金属性等形成机制，筛选得到了具有优良催化/吸附性能的二维碳/氮基层状材料。

交流类型：邀请报告

E12-I-137

金属-有机骨架材料用于天然气脱硫净化的高通量筛选

李智

中国石油大学（北京）克拉玛依校区

金属-有机骨架材料（MOF）因其卓越的气体吸附和分离性能，被视为天然气吸附净化领域极具潜力的候选材料。然而，由于部分 MOF 材料的骨架结构对酸性条件敏感，其在天然气脱硫领域的应用研究尚处于起步阶段。本研究旨在利用分子模拟技术，系统评估 MOF 材料在变压吸附（PSA）和真空变压吸附（VSA）工况下的性能，并从中筛选出高性能材料。研究采用巨正则系综蒙特卡洛模拟（GCMC）技术，对 CoRE-MOF 2019 数据库中的近 3000 个 MOF 材料进行了全面评估。通过预筛选、分子模拟计算、结构-性能关系分析以及高通量筛选程序，研究系统评估了 MOF 材料的分离性能。最终，成功筛选出前十种兼具高效脱硫性能和优异耐酸性气体性能的 MOF 材料，例如 GUYMAP-Zn、FERHAN-Zn 和 FEFDAX-Zn 等。其中，GUYMAP-Zn 展现出最佳性能，其综合吸附性能值高达 24.381×10^6 mol/kg。研究发现，这些高性能 MOF 材料的孔径分布范围为 $3.7 \text{ \AA} \leq \text{PLD} \leq 6.9 \text{ \AA}$, $4.4 \text{ \AA} \leq \text{LCD} \leq 8.0 \text{ \AA}$ 。进一步的分析表明，当硬酸配体与高价金属离子结合，或软酸配体与低价金属离子结合时，MOF 材料能够展现出良好的结构稳定性。特别值得关注的是，Zn 基 MOF 材料在高浓度 H_2S 条件下表现出较强的耐酸性。此外，研究还发现小孔径（ $3.7\text{-}5.8 \text{ \AA}$ ）的 MOF 材料对 $\text{H}_2\text{S}/\text{CH}_4$ 混合气体具有更大的吸附选择性。本研究不仅成功筛选出适用于天然气脱硫净化的高性能 MOF 材料，而且建立了材料结构特性与 $\text{H}_2\text{S}/\text{CH}_4$ 混合气体吸附性能之间的明确关系。研究结果表明，Zn 基 MOF 材料在高浓度 H_2S 条件下兼具优异的耐酸性和吸附性能，有望成为同时具备高吸附性能、大工作容量以及强稳定性的理想 MOF 材料。本研究不仅为天然气脱硫净化领域提供了高性能的 MOF 材料候选，而且为 MOF 材料的设计和优化提供了重要的理论指导，对于推动 MOF 材料在该领域的实际应用具有重要意义。

交流类型：邀请报告

E12-I-138

Cluster analysis as a tool for quantifying structure–transport properties in simulations of superconcentrated electrolyte

毕晟

厦门大学

Using molecular dynamics simulations and graph-theory-based cluster analysis, we investigate the structure–transport properties of typical water-in-salt electrolytes. We demonstrate that ions exhibit distinct dynamics across different ionic clusters—namely, solvent-separated ion pairs (SSIPs), contact ion pairs (CIPs), and aggregates (AGGs). We assess the average proportions of various ionic species and their lifetimes. Our method reveals a dynamic decoupling of ion kinetics, with each species independently contributing to the overall molecular motion. This is evidenced by the fact that the total velocity autocorrelation function (VACF) and power spectrum

can be expressed as a weighted sum of independent functions for each species. The experimental data on the ionic conductivity of the studied LiTFSI electrolytes align well with our theoretical predictions at various concentrations, based on the proportions and diffusion coefficients of free ions derived from our analysis. The insights gained into the solvation structures and dynamics of different ionic species enable us to elucidate the physical mechanisms driving ion transport in such superconcentrated electrolytes, providing a comprehensive framework for the future design and optimization of electrolytes.

交流类型：邀请报告

E12-I-139

Ru Clusters Regulate Single-Atom Catalysts for Oxygen Evolution Reaction on Ni-Layered Double Hydroxides through the Electronic Dam Effect

刘尧

福州大学

Single-atom (SA) electrocatalysts supported on layered double hydroxides (LDHs) exhibit outstanding activity for the oxygen evolution reaction (OER), yet the reaction mechanism remains inadequately understood—particularly regarding pathway modulation under complex aqueous conditions. Although cluster structures are proposed to enhance OER performance, their potential role in regulating the electronic structure of Ru single atoms has not been systematically explored. In this study, Ru single atoms anchored on Ni-LDH are used as a model system. Under alkaline conditions, spontaneous OH coordination is observed at the catalyst surface, leading to significantly improved OER activity. Mulliken charge analysis reveals a cluster-size-dependent regulation mechanism, in which the highest occupied molecular orbital (HOMO) level of the Ru cluster exhibits an inverse linear correlation with electron transfer to the single atom. This indicates an “electronic dam” effect that stabilizes and finely tunes the Ru electronic state, thereby enhancing OER catalytic performance. Ab initio molecular dynamics (AIMD) simulations further demonstrate that Ru clusters strengthen electrostatic attraction of K⁺ ions toward the catalyst surface and induce reorientation of interfacial water dipoles, forming a hydrogen-bonding network conducive to OER. This microenvironment lowers the proton transfer barrier and accelerates the reaction kinetics. These findings establish a new paradigm of cluster–single atom synergistic modulation, providing theoretical guidance for the rational design of efficient OER catalysts and advancing the development of renewable energy conversion systems.

交流类型：邀请报告

E12-I-140

二维铁弹催化材料的理论设计

焦亚龙

河北师范大学

This study represents the first demonstration that two-dimensional (2D) ferroelastic (FE) materials can enhance photocatalytic applications. By comprehensive first-principles calculations, we identified the LuSX (X=Cl, Br, I) monolayers as novel FE photocatalysts for water splitting. These monolayers exhibit direct band gaps ranging from 3.67 eV to 4.09 eV, with favorable band edge alignments for photocatalytic water splitting across a range of pH values. The ferroelastic nature of LuSX enables tunable electronic properties through strain engineering, facilitating

charge separation and enhancing photocatalytic efficiency. Our computations revealed their low FE switching barriers (as low as 0.12 eV per atom for LuSI) and high reversible FE strain, surpassing many known 2D materials. Furthermore, these LuSX monolayers exhibit strong UV-driven photocatalytic activity across all pH values without needing external strain. Under compressive strains, their ability to harvest a broader range of the solar spectrum is enhanced, significantly boosting their photocatalytic efficiency. These findings open up new avenues for using 2D ferroelastic materials in energy conversion applications, positioning LuSX monolayers as promising candidates for efficient, flexible photocatalysts.

交流类型：邀请报告

E12-I-141

无机固态电解质离子输运行为的晶格动力学诠释及声子信息数据库

林雨潇

江苏师范大学

全固态电池是电化学储能的热点发展方向之一，然而，无机固态电解质离子电导率的影响因素种类繁多且相互制约，如何系统全面地揭示其影响机制并借此改善离子电导率是一项极具挑战性的课题。本研究从晶格动力学的角度对离子输运行为进行了诠释，将相关因素划分为晶格静态因素和动态因素，夯实了利用晶格静态因素构建离子输运势能面进而设计无机固态电解质的理论基础，证实了利用声子频率和振幅等晶格动态因素分析离子输运激活能和筛选迁移离子类型的可行性，提出利用特定声子模式的优化以及晶格静态和动态因素的耦合来设计固态电解质的新路径。在此基础上，进一步构建了近万种化合物的声子信息数据库，补充了声子振幅差值与迁移离子类型的量化关系，提出了声子模式数目这一离子迁移激活能的新型描述符，以期阐释出声子信息与离子输运行为的相互作用规律。此外，本报告还将简要介绍锂硫电池硫碳复合正极材料孔隙设计的相关工作。

交流类型：邀请报告

E12-I-142

语言驱动的材料智能研发

于曦

天津大学

交流类型：邀请报告

E12-I-143

三维相变存储芯片材料的 AI 研究范式

徐明、汤思琦

华中科技大学

相变存储器（Phase Change Memory, PCM）利用硫系化合物在晶态（低阻态）与非晶态（高阻态）之间的可逆相变实现数据存储。它的工作原理是通过电脉冲加热材料：短而强的脉冲使材料熔融后快速淬火形成非晶态，中等强度的脉冲缓慢冷却形成晶态。这种电阻差异可通过测量实现数据读取。PCM 具有非易失性、高速度、长寿命等优势，有望替代传统 DRAM 和闪存，解决计算机存储体系中的功耗、速度与数据持久性矛盾。相变材料的性能直接决定 PCM 的可靠性与应用潜力。理想的材料需满足快速相变（纳秒级）、高稳定性（数据保持超 10 年）、低功耗（操作能耗降低 90%）等要求。例如，传统 Ge-Sb-Te（GST）材料虽广泛应用，但存在晶化速度慢、功耗高等问题。然而，传统方法研究非晶相变材料仍然存在一

定的局限性。本工作发展了 AI 驱动的材料研发新范式：（1）非晶材料的大尺度建模：通过分子动力学和第一性原理计算，结合深度学习势能模型，可模拟非晶态原子排列与相变动力学。此外，利用软硬件协同设计的方式可极大提高势函数训练的能效。（2）非晶材料数据库建立：AI 依赖高质量数据训练，通过高通量计算生成材料成分-结构-性能关系数据库，此外，通过材料大预言模型从海量文献中提取有用数据。（3）相变材料的 AI 筛选：基于以上数据库，机器学习可加速材料筛选。（4）AI 揭示相变存储机理：神经网络深度学习方法可以发现缺陷态的位置，从而实现对相变材料机制的探索。该范式已成功指导开发出 In、As、C 掺杂的相变和选通材料，为下一代低功耗、高可靠性 PCM 器件提供了全新研发路径。

交流类型：邀请报告

E12-I-144

金属硫化物的结构缺陷及碱金属离子存储特性的计算模拟研究

田瑞雪

内蒙古科技大学

交流类型：邀请报告

E12-I-145

数据驱动设计具有弱织构和良好室温成形性的镁合金

李卫东

北京科技大学

镁合金作为低密度、高比强度的结构材料，是应对当前全球气候危机、控制碳排放的主要候选材料之一。然而，镁合金在室温下加工难度大、成本高，这极大程度上限制了其广泛应用。镁合金的难加工特性主要源于其六方晶体结构在加工过程中引起的强基面织构。因此，解决镁合金难加工的问题可以通过降低其在加工过程中产生的基面织构强度来实现。我们结合机器学习、热力学计算，逆向设计和正向筛选设计了具有弱织构、良好室温成形性及塑性的含稀土元素的新型镁合金成分及配套关键工艺。所设计的合金成分、配套关键工艺及对应的织构及力学性能得到了较好的实验验证。

交流类型：邀请报告

E12-I-146

First Principles Studies of Pt-doped MXenes as ORR/OER catalysts

马宁贵

华侨大学

The sluggish kinetics of the oxygen reduction reaction (ORR) and oxygen evolution reactions (OER) have been severely limited the development of clean energy technologies. MXenes, are a typical two-dimensional layered material. Owing to their excellent electrical conductivity, good mechanical stability, and tunable physicochemical properties, MXenes have significant application prospects in the fields of energy storage and energy conversion. On the other hand, due to the diversity of MXenes, studies on their structures and electronic properties are still unclear, and highly active MXene-based catalysts still need to be explored.

In our research, we systematically investigated Pt-doped MXenes as single-atom catalysts (SACs) for the ORR/OER, leveraging density functional theory to establish a detailed structure-activity relationship. Initially, we examined the impact of biaxial strain on the catalytic activity of Pt-VF-Ti₂CF₂ and Pt-VO-Ti₂CO₂ SACs, finding that strain can significantly enhance

catalytic performance by altering the electronic properties of the catalyst and thereby adjusting the adsorption strength of catalytic intermediates. Building on this, we further explored the applicability of the d-band center model in Janus-MXenes (functionalized by two elements (Pt-VN(L)-Ti₂CN(L))). The results showd that functionalized atoms can modulate the electronic properties of catalysts to enhance their activity; however, the d-band center, electron transfer, and work-function are not the sole determinants of catalytic performance.

Given the high computational cost of DFT calculations and the complexity of factors influencing the catalytic activity of MXene-based SACs, machine learning (ML) was employed to accelerate the screening of efficient catalysts and to identify the intrinsic factors affecting catalytic performance. We developed an ML database for Pt-doped MXenes, which was used to establish ML models that explore the physical and chemical properties influencing catalytic overpotential. Factors such as The , , d-band center of the Pt atom, the and , among others, were identified as key contributors to the catalytic performance of SACs.

In conclusion, we systematically discussed the various influencing factors of Pt-doped MXene-based SACs on the ORR/OER and proposed some suggestions for improving the catalytic activity. Our research is expected to be instructive for the design and development of high-efficiency catalysts.

交流类型：邀请报告

E12-I-147

机器学习驱动的硅负极相变及微观结构演变研究

傅方佳

江西师范大学

硅基材料因其极高的理论比容量,被视为下一代高能量密度锂离子电池的理想选择之一。然而,硅负极的实际应用因脱/嵌锂过程中显著的体积膨胀/收缩问题而受到极大限制。为了开发出适用于高容量电池的硅负极,深入理解脱/嵌锂过程中的反应路径和结构演变至关重要。但由于硅负极在脱/嵌锂过程中涉及晶态和非晶态的反复转变,传统分子动力学模拟和第一性原理方法在准确性和效率方面存在瓶颈,使得这一问题的解决面临挑战。为此,本研究运用机器学习构建了硅基负极的通用力场,旨在探究锂硅体相和界面结构的电化学特性、相变结构以及扩散行为。通过从原子层面剖析脱嵌锂过程中锂硅的热力学和动力学演变机制,期望本项研究能够为实验上设计高性能硅基负极提供理论指导和结构优化策略。

交流类型：邀请报告

E12-I-148

电子温度依赖的机器学习势函数下的钴酸锂正极材料耐辐照性能研究

刘鹏飞

郑州大学

锂离子电池(LIBs)因其高能量密度和长循环寿命,成为深空探测等极端环境中应用的理想电源。但在高辐射环境下,LIBs的LiCoO₂正极材料易遭受结构退化和离子迁移等问题。这些退化过程在高辐射条件下加剧,严重影响材料的动力学性能。因此,研究LiCoO₂正极材料在辐射下的动态结构退化机制,不仅对其在极端环境中的应用具有重要价值,还可为其在自然条件下的结构演变提供新的视角。目前,实验技术难以直接观察辐射下层状氧化物正极材料的结构演变。传统的密度泛函理论(DFT)计算虽能提供基本模拟,但因计算系统规模小、观察时间短,难以捕捉辐射下的动态结构演变。因此,亟需一种新方法以在高能辐射

下直接观察层状氧化物正极材料的动态结构演变。利用电子温度依赖深度势能模型（ETD-DP），该研究能够在保持计算精度的同时扩大模拟系统规模和时间尺度，为 LIB 正极材料辐射耐受性改善提供重要参考。同时，这项研究还提供了基于高能粒子束的精细结构表征技术在先进电池应用中的新视角。

为了研究 LiCoO_2 在辐射下的动态结构退化机制，本文使用电子温度依赖的深势模型（ETD-DP）。此模型相对于传统的深势模型（C-DP），通过引入电子温度参数 T_e ，它能够更准确地表征辐射对势能面的调制效应。ETD-DP 模型首先通过初始数据集进行训练，随后在非平衡条件下迭代学习直到达到期望精度。实验引入多种能量水平的辐射，包括 30 eV、120 eV 和 3 keV 等。对于每组参数，采用 NVE 系综模拟辐射前后 LiCoO_2 系统的动态演变。实验结果显示， LiCoO_2 对辐照的响应可分为三个阶段：离子迁移，局部结构强调整，结构弛豫。在辐射条件下，钴离子迁移至锂层，最终形成与邻近钴离子结合的哑铃结构。通过高能电子束实验验证发现，模拟结果与实验观测一致，显示出强烈结构调整的趋势。这显示 LiCoO_2 具有一定的辐射耐受性，但高能辐射仍可引发离子迁移，对材料的动力学性质造成负面影响。未来可通过引入缺陷工艺或重金属离子掺杂进一步提高辐射耐受性。同时，需探索辐射对材料各向异性耐受性及大规模辐射对结构完整性的影响，推动材料在极端环境中的应用研究。

交流类型：邀请报告

E12-I-149

基于预训练模型的全维反应势能面构建与动力学研究

付艳林

中国科学院大连化学物理研究所

分子反应动力学是从原子与分子尺度研究化学反应机理的学科，是现代化学研究的前沿领域。其中高精度分子反应势能面的构建是分子反应动力学理论研究的核心基础，其精确性直接决定了反应路径解析与速率预测的可靠性，因此在分子反应动力学中占据关键地位。如何在构建势能面的过程中高效利用数据集、提高势能面的可扩展性，并实现高精度复杂多原子体系势能面的快速构建，是当前制约理论研究发展的关键瓶颈。

单原子自由基与简单烷烃（C1-C4）反应在基础研究及工业催化等领域具有重要价值，但是由于十原子以上的高精度全维反应势能面构建的困难，关于 C2-C4 体系的动力学研究显著少于 C1 体系。针对这一现状，我们将基于可扩展的原子表示方法（如 DPA-3 等），构建单原子自由基与简单烷烃反应的专有势能预训练模型。利用少量高精度从头算数据进行模型微调，将模型拓展至 C3-C4 烷烃体系，构建全维全域的高精度反应势能面。根据我们的测试，构造化学精度（1 kcal/mol）势能面所需数据量可缩减到基准的十分之一甚至百分之一，有效地降低了高精度量子化学计算的开销。并以此为基础，进行了动力学测试，对氢抽取以及氢取代反应的动态过程开展研究。在不同初始条件下计算各产物的速率常数、产物分支比以及散射角等动力学信息，揭示单原子自由基与烷烃的反应机理。重点突破传统大体系势能面构建对大量计算资源的依赖，实现小体系向大体系的精准拓展，深入理解多原子反应的动力学本质，为激光化学、燃烧化学研究提供理论支撑。

交流类型：邀请报告

E12-I-150

Accelerated Discovery of Optical Phase-Change Materials for Integrated Photonics through Data-Driven Approaches

朱卓轩

南方科技大学

Optical Phase-Change Materials (OPCMs) are increasingly recognized as key enablers for next-generation integrated photonic devices, particularly in reconfigurable nonvolatile photonics, owing to their ability to reversibly switch between amorphous and crystalline states with distinct optical properties. These materials offer significant refractive index contrast (Δn) and tunable optical characteristics, making them ideal for applications such as optical memory, tunable metasurfaces, and photonic neural networks. However, conventional OPCMs, such as $\text{Ge}_2\text{Sb}_2\text{Te}_5$ (GST), often exhibit high optical losses, characterized by elevated extinction coefficients (k_c), which limit their efficiency in large-scale photonic integration. Additionally, the traditional trial-and-error approach to discovering new OPCMs is both time-intensive and costly, involving iterative synthesis and characterization of numerous compositions. These challenges have impeded the development of low-loss, scalable OPCMs tailored for advanced photonic systems, necessitating innovative strategies to accelerate material discovery and optimization.

In this study, we established a high-throughput experimental database comprising 2,308 material compositions containing S, Sc, Ge, Se, In, Sb, Te, and Bi, along with corresponding optical parameters— Δn and k_c at 1550 nm. Using features derived from elemental properties and stoichiometry, we trained machine learning models to predict Δn and k_c , achieving high accuracy with R^2 values exceeding 0.96. Furthermore, SHAP-based interpretability analysis revealed distinct physical and compositional factors governing Δn and k_c . Thermodynamic and electronic properties were identified as key contributors for both Δn and k_c . Additionally, S, Se, and Sc exhibited contrasting regulatory effects on Δn and k_c , offering valuable insights for the rational design of low-loss PCMs tailored for photonic integration. These findings establish a predictive and interpretable foundation for rapidly identifying new PCMs with desirable optical characteristics, paving the way for scalable, tunable, and energy-efficient photonic systems.

交流类型：邀请报告

E12-I-151

通用机器学习势用于复杂化学反应网络的自动搜索

李国奥

南京大学

为复杂反应体系开发通用的机器学习势存在重大挑战，这源于训练数据集中对关键过渡态和非平衡结构采样不足。本工作引入了一个集成了分子动力学/坐标驱动（MD/CD）方法与主动学习策略（AL）的 MD/CD-AL 框架，用以生成了 MDCD20 数据集，该数据集涵盖了包含多达 20 个重原子的多样化反应构型。利用此数据集，本工作开发了一个具有量子力学（QM）精度的通用反应性机器学习势 MDCD-NN，适用于含碳/氢/氧/氮的气相反应，在 100 个教科书有机反应中得到验证。MDCD-NN 与参考 QM 方法相比达到了四个数量级的加速比，能够加速 MD/CD 方法实现复杂反应网络的自动化高效构建，在三个具有复杂区域/立体选择性的实际反应体系中得到了应用。在每种情况下，本方法成功识别了数千个中间体和过渡态，构建了多步反应网络，不仅合理解释了实验观测结果，还拓展了已有的反应机理的认知。此外，MDCD-NN 能够进行纳秒尺度的增强采样动力学模拟，用于计算反应自由能面，在量子力学精度与长时间动力学模拟之间架起了桥梁。

交流类型：口头报告

E12-O-01

基于 PBE0 水平机器学习势的 MD 模拟研究 CO₂-I/III 相图及相转变机制

洪本坤

南京大学

描述好分子晶体中的弱相互作用对理论模拟是一个挑战,如果晶体存在于极端(如高温、高压等)条件下,通过实验进行观测也非常困难。我们提出了 PBC-GEBF-AL workflow,将普适的基于能量的分块(generalized energy-based fragmentation, PBC-GEBF)方法^{1,2}深度势能分子动力学(deep potential molecular dynamics, DPMD)方法³、多温多压多伞形势系综下的即时概率增强采样(multiTPU-OPES, on-the-fly probability-enhanced sampling in multithermal-multibaric-multiumbrella ensemble)增强采样方法^{4,5}相结合,从而训练了 PBC-PBE0-D3(BJ)/aug-cc-pVDZ 水平的机器学习势函数(machine-learning potential, MLP)。基于一条约 170 ns 的 multiTPU-OPES DPMD 轨迹,我们在宽广的温压范围(250-700 K, 10.5-14.0 GPa)(甲)得到了 CO₂-I/III 的 T - p 相图,预测的弯曲的相边界(phase boundary)斜率 dT/dp 先正后负、在 525 K 处达到最大值约 12.3 GPa,且与实验测得的 I/III 和 I/VII 相转变压强(transition pressure, p_{TS})(300 K 下 12 GPa, 640 K 下 12.3 GPa)非常接近;(乙)定量地描述了 CO₂-I $\rightarrow$ -III 相转变机理,包括分子旋转、晶胞各向异性变化,以及体积先膨胀后收缩的过程;(丙)发现了一个可能是 CO₂-III 的 $Cmca$ 结构,这个结构与 CO₂-III 粉末 XRD 结构不同的是分子并不平行于 ac 平面且晶胞参数 $a > b$,与 CO₂-VII 晶体 XRD 结构更相似,我们将模拟的振动态密度(vibrational density of states, VDOSs)与实验 Raman 光谱比对,认为 III 与 VII 可能是同一个相,他们的差异主要来自热力学效应。这个工作开拓了 CO₂ 分子晶体相行为(phase behavior)的新视野,并建立了一套策略通过构建高水平 MLP 来研究周期性体系中有能垒的过程。

交流类型: 口头报告

E12-O-02

Unraveling the synergy of nanotube curvature and axial coordination in MN₄-CNTs for enhanced bifunctional oxygen electrocatalysis: A DFT + ML perspective

贾少波

西北大学

The development of metal-air batteries relies heavily on the design and advancement of efficient catalysts for the oxygen reduction reaction (ORR) and oxygen evolution reaction (OER). In this study, to explore the effects of support curvature on catalysis, we synthesized CoN₄ sites on planar graphene and curved carbon nanotubes (CNTs), observing enhanced ORR/OER performance on curved supports, but the underlying electronic and structural mechanisms remain unclear. Therefore, we employed density functional theory (DFT) to investigate the ORR/OER activity of Fe/Co single-atom catalysts (SACs) anchored on diameter-tuned single-walled CNTs, (m, m) Fe/CoN₄-CNTs (m = 5-10). Notably, the highly curved (5, 5) CoN₄-CNTs exhibit the best bifunctional performance, with low overpotentials of 0.26 V for ORR and 0.15 V for OER. Axial coordinating ligands (ACLs) were further introduced to construct L-(5, 5) MN₄-CNTs (L = F, Cl, Br, I; M = 3d transition metals), enabling modulation of the metal center's electronic density and intermediate adsorption, thereby significantly influencing catalytic activity. To accelerate the rational design of high-performance catalysts, we integrated DFT results with machine learning (ML) models trained on seven atomic descriptors. The RFR and GBR models achieved excellent predictive accuracy ($R^2 > 0.89$), and their predictions aligned well with DFT. This DFT-ML approach offers valuable insights for the rational design of electrocatalysts.

交流类型：口头报告

E12-O-03

缺陷演化调控 COFs 单晶的生长动力学

于向坤

吉林大学

共价有机框架（COFs）是一类由有机构筑单元通过共价键连接而成的结晶多孔材料，因其优异的结构可调性与热/化学稳定性，在气体分离、催化等领域展现出广阔的应用前景。然而，受限于聚合过程的复杂性和单晶形成条件的苛刻性，大尺寸单晶的快速合成仍是当前合成技术面临的重大挑战。深入理解晶体生长过程中缺陷的动态演化机制，尤其是缺陷的形成与修复行为，对于突破现有合成瓶颈具有重要意义。本研究采用 GPU 加速的分子动力学模拟软件 PYGAMD，并结合以反应能垒（ E_{bar} ）和结合能（ E_{bind} ）为特征参数的动态键模型，原位追踪了表面生长过程中晶体缺陷的演化过程。模拟结果揭示，由于单体吸附与取向的随机性，晶粒边界处易形成结构缺陷，这些缺陷成为阻碍晶体有序扩展的关键瓶颈。在后续生长过程中，缺陷通过多路径的动力学重组与自发修复机制不断演化，其效率直接决定了晶体的完整性与尺寸。进一步的系统分析表明，反应活化能与结合能的协同作用调控缺陷修复效率，进而影响晶体的生长速率和最终产物的形貌。特别地，当二者均处于“刀刃”形状的最优参数窗口内时，可显著提高正逆反应速率，从而加速缺陷修复并促进单晶的形成。本工作采用独创的理论模型与分析策略，为理解二维 COFs 生长过程中的缺陷动力学提供了深入的微观图解，同时为单晶合成条件的精准调控提供了理论依据和设计指导。

交流类型：口头报告

E12-O-04

基于机器学习与第一性原理计算的白钨矿结构氧化物压电性能研究

胡业全

桂林理工大学

ABO₄型白钨矿结构氧化物的 A, B 位置分别是 8 配位和 4 配位原子。由于其晶体结构不是中心对称的，具有压电研究的潜力。第一性原理计算结果表明，在其 Z 轴方向施加电场可以引起逆压电效应。在研究白钨矿结构氧化物的压电性能时，在 Z 轴方向施加 -0.06 eV/Å 至 0.06 eV/Å 范围内的电场，训练机器学习模型筛选具有优异压电性能且能保持力学稳定性的工况。筛选结果中如 YbPO₄ 在 -0.04 eV/Å 的电场下能保持稳定，且压电应变常数 d_{33} 达到了 -8.65 pm/V。对其 A 位置和 B 位置分别进行掺杂研究，在 A 位置的掺杂研究中，通过机器学习模型筛选出 80 种掺杂后稳定的材料。掺杂后材料的压电性能发生了显著变化，如 In₁Eu₃As₄O₁₆ 的 d_{31} 达到 -273.45 pC/N。在 B 位置掺杂，通过机器学习模型筛选出 Pr₄V₁Nb₃O₁₆ 等掺杂材料。较高的压电应变常数表明，掺杂后的材料展现出在能量收集领域中良好的应用前景。

交流类型：口头报告

E12-O-05

HlightReaxMD：基于机器学习的多尺度辐射化学动力学分析与损伤预测框架

李唯一

火箭军工程大学

分子动力学模拟目前被广泛用于研究大规模碰撞级联并生成海量模拟轨迹。然而，当辐照过程涉及复杂的化学反应时，有效分析和提取这些数据中的特征就成为了一项挑战。在这里，我们介绍 HlightReaxMD，这是一个跨平台工具包，旨在对分子动力学模拟轨迹进行并

行分析，特别关注辐照损伤过程和化学反应信息。HlightReaxMD 中的分析工具包括化学反应分析和反应动力学参数计算、碰撞级联过程分析以及很多的物理化学性质计算。HlightReaxMD 通过读取力场参数支持对反应性力场中使用的所有元素进行分析，并提供了一种自动化解决方案，用于跟踪原子级碰撞事件和通过构建级联树和反应网络路径分析化学反应机制。进一步地，HlightReaxMD 还能通过分析结果进行机器学习驱动模型训练并实现材料辐照损伤的预测，而不是仅仅依靠 Norgett-Robinson-Torrens 原子位移（NRT-dpa）模型。它使研究人员能够自动从太字节规模的轨迹数据中获得有意义的原子到微观尺度缺陷的动力学过程和反应信息。我们相信 HlightReaxMD 能够推动材料科学中辐照效应的系统性研究。

交流类型：口头报告

E12-O-06

面向可持续循环的 PMMA 聚合-解聚加速动力学建模与贝叶斯优化设计

方悦

香港科技大学

聚甲基丙烯酸甲酯 (PMMA) 是一种典型的商用塑料，其聚合历史决定了其使用性能和报废时的可回收性。我们提出了一个缩放加速动力学蒙特卡罗 (KMC) 模拟框架，将自由基聚合和热解聚统一在一个统一的随机模型中。该模拟器通过重现热重分析中观察到的多步质量损失特征，并在 70 K 温度范围内匹配文献动力学参数，进行了严格的验证。在此基础上，我们进行了进一步的实验条件参数对缺陷的影响，通过改变引发剂浓度、温度和链转移化学反应，绘制了合成条件如何引发结构缺陷——头对头连接、链端不饱和键等。统计分析揭示了缺陷群体，这些缺陷可将解拉链前沿加速一个数量级，从而为聚合物制造选择和循环潜力之间的定量联系提供了桥梁。最后，我们将 KMC 模拟与贝叶斯优化相结合，将模拟解聚产率作为目标，将工艺变量作为可控输入。该算法在 40 次迭代内收敛到一个实验可行配方，该配方在保持可接受聚合速率的同时最大限度地提高单体回收率，凸显了在复杂动力学设计空间中进行数据高效、人工智能驱动的探索的价值。这些进展共同为合理的、生命周期感知的聚合物设计提供了可迁移的工具链：用于机理解析动力学的快速 KMC、对缺陷敏感的降解途径洞察以及对工艺窗口的机器学习优化。通过定量地将“制造方式”与“回收方式”联系起来，我们的研究为真正实现 PMMA 循环利用，乃至其他可解聚塑料的循环利用，绘制了一条切实可行的路线。

交流类型：口头报告

E12-O-07

同手性仲铵盐的复杂相变和不对称铁电性

别洁

南京大学

手性是自然界中固有的不对称性，由于其在材料组装和性能方面起着关键作用，一直是广泛研究的主题。具体而言，引入同手性分子可以提高形成具有极性点群晶体的可能性，从而实现潜在的铁电性。在本研究中，我们参照轻质、环保、具有铁电性的卤化铵盐，对现有的晶体数据库进行了全面的数据挖掘，并识别出三种具有不对称铁电性的“旋转-定子”型仲铵盐。值得注意的是，这些仲铵盐都含有同手性有机阳离子。随后，我们通过合理的化学修饰，新设计了五种具有不对称铁电性的仲铵盐。第一性原理计算表明，这些新设计的仲铵盐会经历由仲铵离子旋转引发的铁电-顺电-铁电相变，并伴随着扶手椅型 $\text{NH}\cdots\text{Cl}$ 氢键的断裂和形成以及氯离子的位移。这些新型卤化铵盐的特定组成成分、仲铵离子以及晶体的结构组

装为其相变创造了不对称的化学环境，最终导致其不对称铁电性。这项研究提供了一种设计具有不对称铁电性的同手性分子晶体的策略，并确定了一类可用于下一代智能电子器件的潜在铁电材料。

交流类型：口头报告

E12-O-08

基于文本信息增强的钛合金塑性知识萃取

彭泳潜

国防科技大学

在合金领域，钛合金因其优异的综合力学性能广泛用于航空航天、生物医疗等各个领域。由于钛合金化元素种类和比例对性能影响显著，使得合金成分组成空间巨大。机器学习可以基于大量数据对候选合金进行性能评估从而实现高效筛选，然而这些机器学习模型的准确性常常受到特征选择的限制。合金的性能尤其是延伸率，受到工艺方法、微观组织结构等信息极大的影响，然而将这些信息进行人为提取并归纳为数值参数无疑会导致信息的丢失。除此之外，材料文献文本中包含了作者对实验工作的总结以及材料科学知识的凝练，蕴含了大量的材料科学知识，长期以来文献中蕴含着丰富的潜在知识和专家经验难以被机器直接理解。近年来，直接从原始文本中学习的预训练方法彻底改变了自然语言处理领域，这种自动的信息提取方法将非结构化的文本数据处理成高维向量进行端到端的表示学习，可以从原始数据中自动提取最相关的特征或特征表示、适应不同的任务和数据分布。在本工作中，我们依据微调策略，在公开发表的 MatSciBERT 的基础上，提出了一种信息融合模型，通过将合金的物理参数、工艺方法、成分变化与微观结构等文本信息输入到 MatSciBERT 中，提取出文本特征，然后将这些特征进行融合，大幅提高了钛合金性能预测的准确性，超过现有的语言模型模型。此外，基于实验前成分变化与微观结构的未知性，我们还提出了一种对比学习模型，通过对比学习的方式，实现了合金的物理参数、工艺方法和成分变化与微观结构之间关系的建立，从而实现在没有成分与微观组织结构的文本的情况下实现合金性能的准确预测。我们的研究表明，信息融合模型和对比学习模型可以有效地提高合金性能预测的准确性，为合金设计提供了新的思路。

交流类型：口头报告

E12-O-09

Autonomous Atomic-Scale Reaction Control by Scanning Probe Microscopy via Deep Learning

朱志文

上海大学

Precise control of chemical reactions at the single-molecule level has long been regarded as a central objective in chemistry and molecular nanotechnology. Such control holds the potential to enable bottom-up fabrication of functional molecular architectures, programmable reaction cascades, and quantum materials with designed properties. Scanning tunnelling microscopy (STM) has been a powerful tool to manipulate single atoms and molecules with sub-nanometer precision. However, despite advances in tip-induced chemistry, achieving deterministic, highly-efficient and programmable reactions within a single molecule remains an open challenge. The inherent stochasticity of molecular reactivity, coupled with the complexity of bond environments and the need for adaptive parameter tuning, makes such transformations highly uncertain and difficult to scale.

In this work, we develop a fully autonomous framework for atomically precise single-molecule chemistry. Here, we integrate scanning tunnelling microscopy (STM) with a deep reinforcement learning (DRL) framework to achieve atomically precise, autonomous dissociation of the C–Br bonds in 5,10,15,20-tetrakis(4-bromophenyl)porphyrin (TPP-Br₄). Our AI-driven system dynamically optimizes tip positioning and pulse parameters to selectively remove individual bromine atoms in user-defined orders. The entire framework is governed by computer vision and a learned DRL policy, exemplifying full AI-driven autonomy in atomic-scale surface chemistry. This synergy between STM manipulation and machine learning provides a general strategy for programmable on-surface synthesis, and heralds the autonomous construction of complex nanoscale architectures with single-bond precision.

交流类型：口头报告

E12-O-10

DFT-Enhanced Machine Learning for Accurate PLQY Predictions and Inverse Design of Novel MR-TADF Materials

师浩然

北京交通大学

Predicting the photoluminescence quantum yield (PLQY) of multi-resonance thermally activated delayed fluorescence (MR-TADF) molecules is essential for advancing high-efficiency organic light-emitting diodes (OLEDs). Traditionally, density functional theory (DFT) calculations have been applied mainly for material characterization at the final stages of research, limiting their practical impact. Here, we introduce an approach that incorporates diverse DFT-derived parameters into machine learning (ML) models for early-stage PLQY prediction. Our model captures a range of molecular properties, including electronic structures and transition dynamics, offering deeper insights into key determinants of PLQY. Building on these insights, we identified critical factors affecting PLQY and developed a rapid prediction model for the most critical factor, emission transition dipole moment (TDM), for inverse molecular design and screening. Through a generative model based on a modified variational autoencoder with TDM as the objective function, combined with expert knowledge, we generated an extensive molecular space and achieved precise molecular inverse design. This study illustrates the transformative potential of integrating DFT with ML, shifting DFT from a characterization tool to a predictive modeling component, accelerating the development of high-performance MR-TADF materials for OLED applications.

交流类型：口头报告

E12-O-11

Sn-I 矿化剂在黑磷生长中的作用机制

杜雨庭

华东师范大学

黑磷（BP）凭借其独特的材料特性，例如高载流子迁移率，层数可调带隙、各向异性 and 良好的机械性能，在光电探测器、超级电容、生物检测器件、场效应晶体管等领域展现出巨大的研究和应用潜力。而在众多的合成方法中，利用 Sn-I 矿化剂辅助的化学气相输运法，可以在较为温和的反应环境中制备纯度高达 99% 以上的高品质的 BP 材料。然而，目前对反应机理认知的不足严重阻碍了对 BP 可控合成的研究。为此，我们使用第一性原理计算系统研究了真空与矿化剂环境中 BP、红磷（RP）和蓝磷（BLP）团簇稳定性差异，并详细讨论

了矿化剂在 BP 生长中起到的关键作用。计算结果表明，一维结构的 RP 因边界不饱和原子数量和表面能均低于二维结构的 BP 和 BLP，在无外界干预时优先生长。然而，BP 更高的不饱和原子比例和更为适配的边界构型，使 Sn-I 矿化剂产生的 SnI_2 对其边界的饱和作用显著强于 BLP 和 RP。另一方面， SnI_2 基底对于二维结构（BP 和 BLP）表面饱和作用更显著，同时团簇周围的 SnI_2 分子与基底之间的“钉扎”效应进一步提升了 BP 团簇稳定性，这些机制共同促进了磷前驱体从 RP 到 BP 结构的转变，最终实现 BP 的定向生长。

交流类型：口头报告

E12-O-12

融合物理特征的 Graph Transformer 模型用于预测投影电子态密度

吴家豪

中国科学院理化技术研究所

材料领域预测投影电子态密度(PDOS)的传统方法一直依赖于基于 Graph Convolution(GCN)或 Graph Attention(GAT)的深度学习模型。在本研究中，利用三万多份 PDOS 样本，我们证明了 Graph Transformer(GT)——它在每个节点及其局部邻域上采用多头点积注意力机制——在相同的能级校正条件下，其预测精度优于传统 GAT 和 GCN 模型。此外，通过将整个结构中 s、p、d 和 f 轨道的价电子数作为额外特征融入基于 GT 的模型，我们进一步提高了模型的预测性能。这种新颖的框架和基于物理信息的特征增强为改进 PDOS 的预测以及可能的其他电子性质预测提供了有价值的见解。

交流类型：口头报告

E12-O-13

Agent-based automated extraction of multimodal data from materials science literature

杨文金

北京科技大学

The paradigm of materials research is rapidly shifting towards a data-driven model, which focuses on uncovering relationships among material composition, processing, and properties through machine learning. However, efficiently extracting structured experimental data (e.g., material components, fabrication parameters, mechanical/electrochemical properties) from massive, multi-source, and heterogeneous scientific literature remains a critical bottleneck for this paradigm shift. Existing methods face challenges in cross-modal alignment, long-distance entity relationship modeling, and inefficient PDF document parsing. To address these issues, we propose an agent-based multimodal data co-extraction framework (Agent-based Multimodal Data Extraction, AMDE). This method employs a large language model (LLM) as its core engine to construct a "thinking-acting-observing-reflecting-verifying" cognitive loop. By innovatively integrating the MCP protocol to expand model capabilities and designing a multimodal attention mechanism, the framework achieves end-to-end automated extraction and structured integration of critical information—including textual descriptions, structured tables, and curve chart images—from input literature. It realizes a one-stop conversion from raw PDF documents to AI-ready structured datasets. AMDE provides researchers with a powerful tool for simple, rapid, and large-scale acquisition of high-quality composition-process-property correlation data from the literature ocean, significantly accelerating data-driven material design and optimization. This approach establishes key data infrastructure to overcome traditional trial-and-error limitations and expedite new material discovery.

交流类型：口头报告

E12-O-14

取代基响应的碳硼烷结构发现及结构规则确立的研究新范式

王世胜

温州大学

由于独特化学结构赋予的优异反应活性,碳硼烷在无机化学、有机金属等领域备受关注。基于硼的缺电子特性,化学家通过实验与计算归纳出诸多规则,其中 Wade-Mingos (W-M) 规则作为最经典的结构规则,可通过骨架电子对数目预测缺电子团簇的稳定结构。然而,现代化学为赋予碳硼烷更优异性能,常通过非氢取代基调控其衍生物,而取代基与碳硼烷骨架的相互作用程度,会对体系热力学与动力学稳定性产生不同影响,当前关于取代基对碳硼烷骨架演化影响的系统研究仍属空白。基于此,我们发展了“Seed and Mortise-Tenon” (SMT) 模型,该模型可预测六顶点二碳硼烷中 74613 个体系的 2.4 亿个结构能量,涵盖 SiH₃、H、PH₂ 等 17 个常规取代基,其基态预测精度达到高精度复合方法 CBS-QB3 水平。通过海量数据分析,揭示了 endo (传统正八面体封闭结构) 与 exo (开放结构) 的显著模式翻转: 与 W-M 规则相关的准八面体封闭结构 A 仅占 9.02%,成为局部“模式主导者”;而此前被忽视的三角双锥结构 B 竟占据 89.08%,成为新的全局“模式主导者”,同时还发现 4 类全新基态结构。针对 74613 个体系采用“分区”策略,推导出简单公式 $P=nM+1.1nH$,当 $P=0$ (所有取代基连接原子电负性较低) 时,该公式与 W-M 规则等价。SMT 模型不仅为新型 C₂B₄R₆ 结构的发现与合成开辟新路径,还将作为有效的基态结构搜索范式,用于确立取代基下骨架 - 配体型团簇的结构规则。

交流类型：口头报告

E12-O-15

基于深度学习的(K, Na)NbO₃ 铁电材料相变和纳米畴拓扑结构的分子动力学研究

张旭

武汉理工大学

通过多态结构和畴动力学调控,无铅 $K_xNa_{1-x}NbO_3$ (KNN) 可拥有优异的铁电和压电性能,并因此获得持续关注。尽管通过组分、相和畴结构等测量可以优化 KNN 的铁电性能,然而,该体系铁电性能的原子尺度机理仍是一个亟待解决的问题。我们通过训练具有从头算精度的深度学习势 (Deep potential, 简称 DP), 对不同 K/Na 比例 ($x = 0.25 \sim 1.0$) 的 KNN 展开了分子动力学模拟研究。DP 模型在描述不同相结构下的 $KNbO_3$ 和 $K_{0.5}Na_{0.5}NbO_3$ 的状态方程、弹性常数和声子色散关系等特性上表现出极高的量子级准确性,证实了 DP 模型的适用性和可扩展性。随后,我们对 KNN 复杂的温度依赖的相变和畴形成进行了广泛和定量的分子动力学模拟。模拟的结果表明, KNN ($x = 0.25 \sim 1.0$) 的顺电-铁电相变主要受到有序-无序效应的驱动;而位移效应在随后的铁电相变中占主导地位。特别地,在相变过程中观察到了以 90° 畴壁排列的通量闭合或鱼骨状纳米畴拓扑结构,这与实验观察结果相一致。此外,随着 Na 含量的增加, A 位阳离子半径差异会引起明显的氧八面体畸变,导致 90° 畴壁形成更加困难。可以预见的是,基于 DP 的原子模拟有助于为储能和换能材料的复杂结构、热力学和铁电特性的探索提供一个准确和高效的计算模拟解决方案。

交流类型：口头报告

E12-O-16

基于机器学习的多层吸波蜂窝结构智能设计方法

高锦程

电子科技大学

本研究提出了一种融合深度学习（DL）与强化学习（RL）的多层吸波蜂窝结构智能设计框架，以解决频谱响应逆向设计与多性能协同优化中的关键科学难题。首先基于深度学习算法构建了多层蜂窝结构的正向与逆向“结构-性能”预测网络，在测试集上分别实现了 95% 的正向预测精度与 90% 的逆向设计精度。随后将双向预测模型嵌入强化学习框架，通过智能体与环境的动态交互实现结构参数自主优化，使材料吸波性能显著提升。实验验证表明，在蜂窝高度低于 40 mm 的前提下，该智能优化系统在 1-18 GHz 频段内可稳定实现反射损耗低于 -20 dB，同时 -10 dB 带宽超过 16.5 GHz，并保持高达 95% 的优化成功率。值得注意的是，强化学习智能体对具有相似介电特性的浆料体系也展现出强大的泛化优化能力，证实了该方法具有广泛的适用性。

交流类型：口头报告

E12-O-17

基于偶极工程的 MXene/PVDF 纳米复合材料界面介电增强机制研究

刘波

武汉理工大学

以二维 MXene 为纳米填料的聚偏氟乙烯（PVDF）基介电复合材料近年来展现出显著增强的介电性能和能量密度，在柔性电子器件和静电储能领域具有重要应用潜力。然而，MXene/PVDF 纳米复合材料介电增强的微观机制仍缺乏基于量子力学的深入理解。本研究通过第一性原理密度泛函理论（DFT）计算，揭示了 $\text{Ti}_3\text{C}_2\text{T}_x$ -MXene/PVDF 复合材料的界面介电增强机制，重点关注氢键诱导的偶极调控对复合材料结构、电子及介电性能的关键作用。实验观测到的介电增强主要归因于 OH 终端 MXene 引发的界面偶极工程效应，包括 β -PVDF 链偶极取向转变（如从 $\text{Ti}_3\text{C}_2\text{O}_2$ 表面的平行取向（ $\rightarrow$ ）转变为 $\text{Ti}_3\text{C}_2(\text{OH})_2$ 表面的垂直取向（ $\uparrow$ ））、界面电荷转移、本征偶极矩增大以及带隙拓宽。界面氢键作用增强了界面耦合强度与相容性，实现了介电与电子特性的协同调控，使 $\text{Ti}_3\text{C}_2(\text{OH})_2$ /PVDF 复合材料在提升介电常数和击穿场强的同时，降低了介电损耗和漏电流。本研究填补了纳米尺度机理认知的空白，为基于氢键诱导偶极工程策略的界面介电增强机制提供了理论依据。

交流类型：口头报告

E12-O-18

Intelligent design and simulation of high-entropy alloys via machine learning and multi-objective optimization algorithms

曹键

温州大学

High-entropy alloys (HEAs) are innovative metallic materials with unique properties and wide potential applications. However, the compositional complexity of HEAs poses a great challenge to investigate the physical mechanisms controlling their performance. Herein, we propose a novel framework comprised of high-entropy alloys design and simulations (HEADS) that combines machine learning (ML), molecular dynamics (MD), and multi-objective optimization algorithm (MOOA). When considering the disordered characteristics of high-entropy alloys, this framework initially predicts the phase structure of high-entropy alloys with different compositions using ML and subsequently performs theoretical modeling. Tensile simulations were conducted via MD to generate the mechanical property data, which served as the foundation for further optimization. Within this framework, deep neural network (DNN) models conduct

multi-task regression to fit the data obtained from the MD simulations, thereby developing an accurate performance prediction model. This model was employed as the fitness function in the multi-objective optimization algorithm to optimize the elastic modulus (EM) and ultimate tensile strength (UTS) of HEAs. The framework is validated using FeNiCrCoCuAlMg alloy and supports flexible weight assignments for EM and UTS, allowing tailored optimization based on specific application requirements. HEADS framework can provide a robust strategy to accelerate the development of high-performance HEAs and offer new insights for engineering applications requiring advanced materials with optimized properties.

交流类型：墙报

E12-P-01

Intelligent carbonene fiber preparation and characterization platform: AI for Fiber

李梦蝶

北京大学

Fibers with ultra-high mechanical properties are crucial in the aerospace and military fields. Incorporating graphene or carbon nanotubes into heterocyclic aramid fibers can significantly enhance their mechanical properties. However, the complex preparation process and numerous variables of carbonene/heterocyclic aramid fibers complicate the precise control of their mechanical properties. Herein, we construct an AI-enabled automated fiber preparation and characterization platform—AI for Fiber (AI4F), which facilitates automated preparation and mechanical testing of carbonene/heterocyclic aramid fibers. Based on the AI4F database, we will train machine learning models to explore the intricate relationships among the composition, preparation parameters, structure, and mechanical properties of carbonene/heterocyclic aramid fibers. This analysis will enable us to decouple the factors influencing the mechanical properties of these fibers, ultimately guiding the preparation of carbonene/heterocyclic aramid fibers with ultra-high mechanical properties.

交流类型：墙报

E12-P-02

Uniform Single-Domain Liquid Crystalline Hexagonal Rods by Synchronized Polymerization and Self-Assembly Using Disc-Shaped Monomers

麻元馨

中国科学院化学研究所

The fabrication of nanostructures from polycyclic aromatic hydrocarbons (PAHs) is highly attractive owing to their unique optical, electrical, and magnetic properties. However, the creation of uniform and well-defined PAH nanostructures by self-assembly still remains a significant challenge. Herein, we report that highly uniform hexagonal rods can be obtained from triphenylene (TP)-derived monomers by synchronized polymerization and self-assembly (SPSA). These rods have a single-domain columnar liquid crystalline structure in which columns formed from stacked TPs are along the long axis of the rods. The length/diameter ratios of the rods can be tuned over a wide range. Key factors to achieve SPSA of PAHs were analyzed, and the formation mechanism was clarified. In particular, it is observed that successful SPSA occurs below an upper critical temperature, which could be attributed to insufficient microphase separation between the side chains and the main chains and should be a general principle for SPSA. Furthermore, we

demonstrate that the columnar stacking of TP units significantly promotes the intersystem crossing of the singlet excited state to the triplet excited state, resulting in simultaneous fluorescence and phosphorescence emission at room temperature. This work may be extended to a wide range of PAHs to regulate their self-assembly and light emission properties.

交流类型：墙报

E12-P-03

基于 CuGaS₂量子点光谱调控的理论研究

杨文新

福建师范大学

环境友好型无毒量子点I-III-VI族硫化物因其宽光谱可调性、高稳定性及低毒性成为研究热点。然而，实验合成的未包覆壳层的 CuGaS₂量子点通常表现出极低的荧光量子产率（PLQY），甚至无可见发光。其原因可能是 CuGaS₂量子点三元结构引入的高陷阱密度，而表面缺陷/陷阱可以充当非辐射复合中心，导致量子点的光致发光量子产率（PLQY）降低和光/化学稳定性差。异质结构量子点（如核/壳量子点）的合理设计和合成有利于钝化表面缺陷/陷阱并调整其光学特性。利用 ZnS 进行表面钝化是目前常用的减少表面缺陷的方法。我们在实验中通过控制量子点合成温度与合成中 Cu/Ga 的摩尔比对 CuGaS₂@ZnS 量子点的波长进行调控，并成功合成出发射波长为 462nm 的蓝色量子点与拥有 510nm 和 605nm 两个发射峰且半峰全宽为 257nm 的黄色量子点。观察半峰全宽为 257nm 的 CuGaS₂@ZnS 量子点的激发光谱，发现其最佳激发在 420nm 附近，如果使用 420nm 波长的紫光激发，可在激发量子点的同时弥补该量子点在蓝光区域的缺陷，调节合适比例可制成宽带发射白色荧光转换层。针对以上问题与实验现象，本研究结合密度泛函理论（DFT）计算与瞬态荧光光谱（TRPL），揭示 CGS 核的缺陷态分布及 ZnS 壳层对非辐射复合通道的抑制机制，辅以 XRD 分析壳层外延生长引起的晶格应变效应。通过调控前驱体化学计量比（Cu/Ga=1/4, 1/8, 1/12）与合成温度（220~280 ℃），阐释展宽变化与波长移动的原因。利用 X 射线光电子能谱（XPS）与电子能量损失谱（EELS）表征掺杂位点，结合能带计算揭示晶格收缩与导带偏移对发光蓝移的贡献。

交流类型：墙报

E12-P-04

生成对抗网络增强主动学习加速超高温陶瓷抗氧化性能优化

王凌宇

国防科技大学

针对超高温陶瓷抗高温氧化性能优化效率低、小样本数据制约机器学习模型预测能力的难题，提出了一种生成对抗网络（GAN）与主动学习协同驱动的智能优化框架。以 HfB₂-SiC-X（X=C、MoSi₂、ZrC、TaSi₂）体系为研究对象，基于 83 条实验数据，利用 Wasserstein GAN 生成 1000 条高保真增强数据，有效缓解数据稀疏性，显著提升模型预测精度。结合主动学习置信上界（UCB）算法，以氧化层厚度最小化为目标，通过两轮迭代推荐 8 个候选配方并进行实验验证。结果表明：优化配方氧化层厚度最低为 3.73 μm，低于原始数据最小值（5.49 μm）。表征分析证实，优化配方在 1600℃氧化后形成了致密的 HfO₂-SiO₂复合氧化层，通过产生高粘度液相氧化物，有效抑制氧扩散。SHAP 模型进一步揭示，硅化物 MoSi₂、TaSi₂ 与 SiC 的协同作用可增强氧化层自愈合能力，而 C 与 ZrC 则因气态产物和氧化层剥落导致性能劣化。本研究将数据增强与主动学习相结合，实现了小样本驱动下超高温陶瓷抗氧化性能的高效优化与机理阐释，展示了一种使用小数据快速发现材料的高效和通用方法。

交流类型：墙报

E12-P-05

水凝胶电解质性能及锌离子输运动力学研究

黄坤龙

福建师范大学

水系锌离子电池由于其环保、成本较低和高安全性，在下一代储能设备中显示出巨大的应用前景。但是活性水分子分解导致的析氢反应、锌阳极腐蚀和锌枝晶无序生长等问题严重限制了水系锌离子电池的实际应用。水凝胶电解质是解决上述问题的有效方法之一，我们团队通过在传统的聚丙烯酰胺水凝胶电解质中引入八乙基八硅倍半氧烷 (POSS) 和二乙烯苯 (DVB) 合成了一种兼具高离子电导率和高机械性能的新型水凝胶电解质。密度泛函理论 (DFT) 计算阐明了 POSS-DVB 水凝胶电解质对 Zn^{2+} 电镀/剥离过程的反应动力学的优势，POSS-DVB 分子链中氧原子的电子云密度高于 PAM 分子中氧原子的电子云密度，表明其与 Zn^{2+} 具有较强的配位能力，再加上 POSS-DVB 分子的静电梯度扩散，有利于 Zn^{2+} 沿着带负电荷基团的定向迁移。此外，POSS-DVB 对 Zn^{2+} 的吸附更强，结合能为 -1.01 eV ，比 Zn^{2+} -AM (-0.74 eV) 和 Zn^{2+} - H_2O (-0.32 eV) 的结合能更负，这有助于减少 Zn^{2+} 和凝胶中活性水分子相互作用产生的副反应，进一步表明 POSS-DVB 在调控 Zn^{2+} 方向上的优势。与理论计算结果相对应，线性扫描伏安法显示 POSS-DVB 水凝胶在反应过程中产生的析氢和析氧反应均远低于普通水凝胶和液态电解液，而且由 POSS-DVB 水凝胶组装的凝胶对称电池在电流密度 1 mA cm^{-2} 容量 1 mAh cm^{-2} 下可稳定进行 Zn^{2+} 电镀/剥离循环超 3000 h，证明了 POSS-DVB 水凝胶在抑制副反应和延长电池寿命方面的优势。由五氧化二钒正极，锌负极和 POSS-DVB 电解质组成的水凝胶电池在 3 A g^{-1} 的电流密度下可连续充放电超 1000 次，且容量保持率为原来的 80 %，这证明了 POSS-DVB 水凝胶后期在实际应用中的可能性。

交流类型：墙报

E12-P-06

机器学习探索六方氮化硼莫尔超晶格的拓扑极化图案

姚成实

华东师范大学

由扭曲和应变引起的莫尔超晶格可以近似为滑动双层膜的组合，构成各种拓扑上非三维的极化模式，这引起了人们的关注。然而，由于莫尔超晶格的尺寸过大，大多数研究都基于有效模型，缺乏第一性原理计算的结果。最近，机器学习为模拟大尺度结构的局部极化分布提供了一种方案。在这项工作中，我们通过机器学习获得了六方氮化硼 (h-BN) 扭曲和应变双层结构中极化图案的拓扑结构。此外，我们还验证了垂直电场和晶格失配可以有效地调节拓扑图案。最后，在反平行堆叠的 h-BN 扭曲和应变双层膜中也存在局部极化现象。我们的工作详细研究了莫尔超晶格中的极化模式，相信这将有助于莫尔铁电、拓扑物理及相关领域的更多研究。

交流类型：墙报

E12-P-07

基于生成模型的吸附结构精确生成加速催化剂设计

霍松泽

上海交通大学

Accurate and efficient prediction of adsorption geometries is a critical step in elucidating catalytic mechanisms and guiding the discovery of new catalysts. In this work, we introduce

DiffCata, a generative model that couples a periodic Brownian-bridge framework with an equivariant graph neural network to learn relaxation pathways directly from pairs of unrelaxed and DFT-relaxed structures without requiring explicit energy or force annotations. Once trained, DiffCata produces high-fidelity adsorption geometries in under 1 second, achieving an interatomic distance mean absolute error (DMAE) of 0.035 Å on the CatHub dataset, nearly threefold improvement over the leading machine learning potential OC20-EquivormerV2 model and matching DFT accuracy in 85% of cases within 0.1 eV. Furthermore, we enhance accuracy by detecting and refining anomalous predictions via a hybrid chemical-heuristic and classifier-based outlier detection. Finally, We showcase the application of DiffCata in accelerating high-throughput computational screening for efficient alloy catalysts in the oxygen reduction reaction (ORR), underscoring the potential of DiffCata as a powerful tool for catalyst design and optimization.

交流类型：墙报

E12-P-08

基于傅里叶变换的振动光谱解析新方法及其在盐酸溶液中的应用

杨璇烨

南京大学

水溶液中水合质子的结构是理解酸碱化学及生物化学过程的核心问题。Zundel 阳离子与 Eigen 阳离子作为两种经典结构，其相互转换被认为是质子扩散的主要驱动力。然而，由于缺乏直接指认溶液振动谱的有效方法，红外光谱中约 1750 cm^{-1} 处的振动模式归属问题成为实验与理论之间争论的焦点，导致何种结构占主导地位仍存在广泛争议。原则上，精确表征光谱特征需要实时捕捉溶液中质子的动态结构。遗憾的是，理论上无法将特定结构与基于动态轨迹的光谱中的特定振动模式一一对应。

针对上述问题，本研究提出了一种新的振动光谱解析方案，并将其应用于盐酸溶液体系中水合质子的振动特性研究。主要研究内容及成果包括：

1. 振动光谱解析方法的发展：针对凝聚相体系，设计了一种基于傅里叶变换及其逆变换的振动光谱解析方案。该方法能够同时生成振动态密度及特定频率处的振动矢量，从而实现对溶液中质子本性的精确识别。

2. 机器学习力场的构建：基于机器学习技术，构建了具有第一性原理精度 (RPBE+D3) 的盐酸溶液体系原子神经网络力场，并对浓度范围为 0.9 M 至 0.01 M 的盐酸溶液进行了纳秒时间尺度的平衡分子动力学模拟。

3. 中间态结构的发现与振动指认：结合机器学习原子神经网络力场与振动谱的逆傅里叶变换，揭示了一种有别于传统 Zundel 和 Eigen 结构的“中间态”结构。这种结构的质子伸缩模式特征频率为 1770 cm^{-1} ，构型占比达 44%，显著高于 Zundel (28%) 和 Eigen (28%) 结构。该中间态结构的寿命为 51 飞秒，长于 Zundel (25 飞秒) 和 Eigen (36 飞秒) 结构，这一特性得益于周围氢键网络所贡献的局域电场。

本研究不仅重塑了对溶液中质子转移的基本理解，同时发展了一种普适性方法，为水溶液中瞬态物种的表征开辟了新的途径。

交流类型：墙报

E12-P-09

新型 OTS 选通管非晶 GaS 的设计与机理研究

袁少杰

华中科技大学

三维堆叠交叉阵列结构的相变存储器（PCM）技术有望满足在数据爆炸增长时代对高密度存储和高速信息处理的迫切需求。其中，器件性能在很大程度上依赖于奥氏阈值选通管器件（OTS）的特性，后者负责控制存储单元的导通与关断状态。非晶态 GaS 因其较宽的迁移率带隙和较高的结晶温度，被认为是性能优异的 OTS 材料，但其导通机理仍缺乏深入理解。在本研究中，我们基于第一性原理计算系统研究了非晶态 Ga-X（X = S、Se、Te）的结构与电子性质。结果表明，Ga 原子倾向于形成类四面体结构，而 S/Se/Te 原子则主要呈现畸变三角锥构型。这种结构特征可归因于阴离子孤对电子与 Ga 原子周围空的 sp 轨道之间形成的大量配位键。三种材料均表现出较大的迁移率带隙和明显的中间态，确保在外加电场作用下可以实现高效导通，同时，在无偏压状态下有效抑制漏电流。这些缺陷态源于由短而强的 Ga-Ga 键构成的扭曲链状局域结构。我们的研究揭示了非晶 Ga-X 作为 OTS 材料的导通机制，丰富了 III-VI 族硫属化物在电开关材料中的应用体系，为高密度集成存储系统的优化与发展提供了新的机遇。

交流类型：墙报

E12-P-10

单原子金属合金表面上 H₂ 的吸附解离与溢流动力学

乔冬冬

中国科学院福建物质结构研究所

气相分子在单原子金属合金表面的吸附与解离机制是理解金属多相催化中基元反应过程的关键问题。H₂ 分子不仅作为典型模型体系具有代表性，其本身也在众多催化反应中占据重要地位。本研究针对一系列 Pt₁-Pt_x/Ag(111) 单原子合金表面，采用从头算分子动力学（AIMD）方法系统研究了 H₂ 分子的吸附、解离及产物 H 原子的溢流行为。通过统计大量动力学轨迹，构建了包含多种典型构型的高质量结构-能量/梯度数据集。基于该数据集，进一步利用嵌入式原子神经网络（EANN）方法或 DeepMD 方法训练得到了统一适用于多种表面构型的势函数（PES）。在此 PES 基础上，采用准经典轨迹（QCT）方法，系统计算了不同初始碰撞能条件下 H₂ 的吸附与解离概率，并分析了产物 H 原子的溢流路径与机制。研究结果揭示了不同单原子表面构型对 H₂ 反应动力学的调控作用，为深入理解和设计高效单原子催化剂提供了理论依据。

交流类型：墙报

E12-P-11

气相团簇活化甲烷的机器学习研究

徐颖

中国科学院化学研究所

甲烷作为天然气的主要成分，其高效、高选择性转化为高附加值化学品是化学研究的“圣杯”之一。相较于传统实验和理论计算方法，基于机器学习（ML）的研究手段可显著降低人力、物力和时间成本。在气相离子与甲烷反应的研究中，研究人员已经揭示了两种重要的甲烷活化转化的机理：金属中心参与氧化加成机理和金属氧化物团簇的氧自由基机理。然而，现有气相团簇反应活性研究多聚焦于孤立的“团簇个例”，难以揭示团簇间相对活性的定量规律。迄今缺乏建立能定量关联实验反应性与团簇活性调控因素的模型。

本研究基于这两种活化机理开展了相关工作：（1）氧化加成机制：我们以体现气相团簇物种活化甲烷能力的离子-分子反应速率常数为目标值，构建了涵盖 134 个团簇-甲烷反应速率常数及 20 个由密度泛函理论（DFT）计算得到的初始特征构建的数据集。通过特征选择和超参数优化，我们训练了四种回归模型：反向传播人工神经网络（BPANN）、随机森

林 (RF)、梯度提升 (GBRT) 和极端梯度提升 (XGBoost)，并以皮尔逊相关系数和均方根误差为指标进行对比评估。结果表明，BPANN 速率预测模型性能最优。分析揭示，垂直电子脱离能 (VDE)、甲烷 HOMO 与金属物种 LUMO 能级差 ($|\Delta E_{H-L}|$)、金属原子最大自然电荷 ($Q_{\max}$) 以及金属原子价层 s 轨道最大电子占据数 ($n_{s,\max}$) 是影响反应活性的关键特征。(2) 氧自由基机理：针对金属氧化物团簇通过氧自由基机理活化甲烷，我们结合实验数据和 DFT 计算，开发了定量描述其反应活性的 ML 模型。研究表明，未配对自旋密度 (UPSD) 和局部电荷 (Q_L) 是影响含氧中心自由基 ($O^\cdot$) 活化甲烷的关键因素。进一步分析发现，VDE 或垂直电子亲和能 (VEA) 可作为 Q_L 的有效替代描述符，而 UPSD 则是不可替代的核心特征。本研究成功构建了可预测气相物种 (氧化加成机制) 和金属氧化物团簇 (氧自由基机理) 活化甲烷反应活性的 ML 模型，并揭示了各自的关键电子结构特征。这为甲烷转化催化剂的设计提供了新的理论依据和研究范式。

交流类型：墙报

E12-P-12

AI 原子模拟加速钙钛矿太阳能电池材料设计

雷霞

南方科技大学

钙钛矿太阳能电池在光伏产业中展现出巨大潜力，然而当前研发受限于传统“试错法”和有限的理论指导，在组分掺杂、界面修饰、高光电转换效率与长期稳定性方面具有挑战。近年来，机器学习及人工智能的迅速发展，为提升材料理论计算的计算效率和可靠性，优化钙钛矿太阳能电池关键材料的设计思路提供了新工具。本工作报道了基于人工智能的原子级别模拟方法，显示了 AI 原子模拟在设计和预测钙钛矿太阳能电池自组装分子层分子性质方面的优势。在此基础上，发展了基于 AI 智能体构建自动化材料筛选流程的框架。同时，本工作展示了基于云计算和本地化部署的 AI 原子模拟平台，Aitomistic Hub 和 Aitomistic Lab，为实现由 AI 驱动的高效可靠钙钛矿太阳能电池材料设计提供实践基础。

交流类型：墙报

E12-P-13

Metal-organic frameworks for natural gas desulfurization and purification based on molecular simulation

裴家玲

中国石油大学 (北京) 克拉玛依校区

交流类型：墙报

E12-P-14

数据驱动型策略设计高效析氢双轴应变单原子阵列催化结构

叶齐通

海南大学

近年来，二维层状过渡金属二硫属化物 (2D transition metal dichalcogenides, 2D TMDs) 得益于其多样的元素构成、可调节的晶体构型、独特的电子结构性质，已被证明是潜在的优异 HER 催化材料。然而，传统 TMDs 的催化活性主要依赖边缘位点，其基面对 HER 反应常表现出惰性。为了进一步提高 TMDs 的催化活性，研究人员通常借助掺杂、创建空位、相变工程策略来调控活性。与以上对 TMDs 的改性方法相比，应变调节通过施加外部影响而无需改变催化剂自身的组成而呈现出显著优势。应变效应源于原子键长的变化或晶格结

构的失配,具有应变效应的催化剂不仅表现出不同的电子结构特性(包括态密度、能带以及d带中心),还可由配位环境变化表现出动态性能。另一方面,引入单原子并优化活性位点的局域环境也可以激活TMDs的惰性基面。与常见的石墨烯基底相比,TMDs中的硫族元素(如S、Se)具有孤对电子和路易斯碱性质,能够与单原子(SAs)发生强相互作用,从而有效抑制单原子团聚,正成为锚定和功能化单原子序列的强大平台。

基于我们前期的研究,在本研究中,我们将单催化剂原子阵列与双轴应变支撑结合,能有效实现均匀配位环境和原子结构稳定性的双重目标。为了制备双轴应变TMD,可以使用表面超光滑的金(Au)纳米球,既作为模板也作为单原子的来源。然而,考虑到双轴应变水平和TMD衬底组合的巨大多样性,通过试错法识别最佳SAA既繁琐又难以实现。因此,我们开发了一种数据驱动的方法,结合高通量密度泛函理论(HT-DFT)计算和机器学习(ML),从1248个锚定在双轴应变过渡金属二硫化物上的单原子阵列位点库中筛选出候选催化剂。研究发现,锚定在双轴应变二硒化钼(MoSe₂)表面的金(Au)原子阵列(通过Au-Se₃键连接)具有优异的氢吸附性能。机器学习分析揭示了四个关键结构特征,并指出吸附位点的平均带中心可作为氢吸附能的预测因子。后续实验验证表明,该单原子Au阵列锚定的双轴应变MoSe₂在酸性氢进化反应(HER)中展现出高达800mA/cm²、持续1000小时的稳定性,且活性位点包含Au原子阵列及其邻近的Se原子,显著提升了催化活性。

交流类型: 墙报

E12-P-15

基于螺旋生长模型和定制力场的LLM-105晶体形貌预测

李永杰

中国工程物理研究院

2,6-二氨基-3,5-二硝基吡嗪-1-氧化物(LLM-105)是一种具有广泛应用潜力的低感高能化合物,形貌控制是保证其应用的关键。然而,由于通用力场的精度有限,且一般模型未考虑动力学因素,因此准确的形貌预测仍然是一个挑战。本研究针对LLM-105改进了OPLS-AA力场,并将其应用于DMSO、NMP和DMF三种溶剂条件下的螺旋生长模型形貌预测。通过比较预测结果和实验结果的长径比和晶面占比,证实了我们的方法比其他模型和力场的优势。分子间相互作用分析表明, π - π 相互作用占主导地位,其次是氢键。由于(011)晶体表面[100]边缘存在以 π - π 相互作用为主的强分子键链,因此在三种溶剂条件下LLM-105晶体均呈棒状生长。本工作为LLM-105的形貌控制奠定了基础,也可为其他有机分子晶体提供参考。

交流类型: 墙报

E12-P-16

AI智能筛选液态金属催化材料

田洪瑞

四川大学

交流类型: 墙报

E12-P-17

CHARMM36力场与先进水模型联用的可行性研究

孙茜雯

南开大学