

分会场十：AI4M分会

国产开源软件ABACUS的DFT+AI材料计算探索

郑大也*

北京科学智能研究院

ABACUS是一款国产开源密度泛函理论（DFT）软件，专注于材料科学的高精度模拟计算，兼具学术研究与工程应用价值。其核心优势在于平面波基组与数值原子轨道基组的协同支持。数值原子轨道基组在保持接近平面波精度的同时，显著减少基组规模，提升计算效率，尤其适用于大体系或复杂材料的模拟。ABACUS在性能上支持高效并行计算及CPU+GPU异构计算，针对国产CPU+DCU硬件平台展现了优异的性价比。材料多尺度模拟长期面临精度与计算效率难以协同优化的挑战。基于DFT高精度数据的AI方法为解决这一难题提供了新思路。ABACUS支持了多项AI驱动的创新方法，构建了覆盖材料模拟关键环节的技术体系：在AI势函数构建方向，支持DeePMD（高效分子动力学模拟）与DeepSpin（磁性体系势函数拓展），实现复杂体系的高精度动态模拟；在电子结构高效求解方向，支持紧束缚电子哈密顿量模型方法DeePTB，显著提升电子结构计算效率；在泛函设计新范式方向，支持DeePKS框架通过神经网络修正泛函精度，推动高精度计算与低计算成本的平衡。

关键词密度泛函软件；DFT+AI；电子结构计算

二维Mg₁M₂X₄(M=Ga,In;X=Se,Te)半导体:用于高性能光伏光电探测器

张笛*

北京航空航天大学

寻找具有卓越电子和光学特性的二维(2D)半导体是先进光电子学中一个持续的热门话题。通过第一性原理计算与非平衡格林函数方法相结合，我们发现了四个2DMg₁M₂X₄(M=Ga, In;X=Se, Te)半导体。预期这些2D晶体可以被剥离，并表现出强大的热力学、动力学和热稳定性。重要的是，它们的优秀带隙(0.82 - 1.67eV)、显著的光吸收系数($\sim 2 \times 10^5 \text{cm}^{-1}$)、适当的激子结合能(0.37 - 0.64eV)和良好的电子迁移率(98.7 - 245.3cm²/Vs)突出了2DMg₁M₂X₄半导体在光伏应用中的潜力。此外，由于激子-声子相互作用，吸收光谱在300K时发生显著的重整化。对载流子散射机制的综合分析表明，极性光学声子散射是限制300K或更高温度下迁移率的主要机制。鉴于其出色的电子和光学特性，我们进一步探索了构建的p-n结的光伏性能。这些器件具有II型(交错)能带对齐结构，基于Mg₁M₂X₄的光伏光电探测器的最大响应度(R_{max})分别为76、111、57和85mA/W。这些值与在单层MoS₂p-n结中观察到的最大响应度(R_{max}=65mA/W)相当或更高。因此，2DMg₁M₂X₄半导体为下一代纳米级光伏器件的应用提供了广阔的前景。

关键词p-n结；迁移率；光伏光电探测器；量子输运模拟

深度学习紧束缚模型的发展与应用

邹暨捷^{2,3}、顾强强^{*1,2}

1. 中国科学技术大学

2. 北京科学智能研究院

3. 北京大学

近年来，基于机器学习方法构建高精度电子结构模型成为推动多尺度材料模拟的重要方向。我们开发的DeePTB系列方法，旨在以第一性原理精度高效生成体系的电子结构模型，并应用于量子输运、声子辅助光吸收谱等具体应用场景中，很好地符合实验结果。DeePTB方法包含两种构造体系电子结构模型的方法：**DeePTB-SK**和**DeePTB-E3**，从不同角度实现从原子结构到电子结构的映射。DeePTB-SK方法以Slater-Koster紧束缚框架为基础，通过深度神经网络学习不同轨道间相互作用的参数，具备明确的物理可解释性和良好的可迁移性，适合在传统紧束缚理论基础上进行扩展。DeePTB-E3方法则基于E(3)等变神经网络，直接在对称性保持的前提下构建Kohn-Sham哈密顿量、电子密度矩阵等算符矩阵，表现出更强的表达能力与适应性。在此基础上，我们进一步开发了面向量子输运计算的**DeePTB-NEGF**框架，将DeePTB哈密顿量与非平衡格林函数方法相结合，可高效模拟电流-电压特性、透射谱等输运性质，在场效应晶体管、金属断裂结拉伸、分子结等复杂体系中得到验证。该方法既保留了第一性原理计算的精度，又大幅提高了模拟的效率，适用于复杂材料和器件的大规模输运计算。面向半导体光电材料，我们提出结合**深度势能方法（DeePMD）**与DeePTB的计算框架，通过分子动力学模拟采样和高效的电子结构预测，实现了声子辅助光吸收谱的快速计算。以硅和砷化镓为例，我们模拟了不同温度下光学吸收谱与带隙重整化，成功捕捉间接吸收、直接跃迁及Urbach尾等关键特征，为复杂材料中电声耦合现象研究提供高效工具。

关键词深度学习；紧束缚方法；E(3)等变；量子输运；声子辅助光吸收谱

机器学习赋能的材料原子尺度显微结构解析

王珊珊*

国防科技大学

材料的原子级结构（如空位、晶界、相态、层错等）显著影响其电学、光学、力学、催化等性能，也是理解材料微观结构向宏观性质传递规律的关键环节。透射电子显微术是表征材料原子尺度结构信息的重要手段。然而，人工分析显微图像存在耗时长、精度低、门槛高、对图片质量敏感、难以获得统计学结论等局限。因此，亟需开发高精度、高效率、高鲁棒、自动化的显微图像识别与分析方法。本报告将介绍（1）利用等变图神经网络，对结构多样、且存在随机大尺度晶格畸变缺陷的精准识别；（2）利用解耦表征学习的生成式模型，构建显微图像高质量数据库，进而实现对二维范德华界面复杂层错（包括滑移堆垛和扭角堆垛花样）原子级结构的解析；（3）将机器学习驱动的缺陷智能发掘与材料制备、性质预测和性能验证相结合，形成人机协作的新型催化剂研发闭环。

参考文献：

[1] Wenqiang Huang, Lin Yao*, Fangping Ouyang*, Jin Zhang*, Shanshan Wang*, et al. Auto-resolving the atomic structure at vander Waals interfaces using a generative model [J]. Nat. Commun., 2025, 16, 2927.

[2] Junjie Jiang, Fangping Ouyang*, Feng Ding*, Zhu jun Wang*, Shanshan Wang*, Chirality-transferred epitaxy of circular polarization-sensitive ReS₂ monolayers on single crystals. Nat. Commun [J]., 2025, accepted in principle, NCOMMS-25-13413A.

[3] Zheng Luo, Kele Xu*, Jin Zhang*, Shanshan Wang*, et al. Exploring structural diversity in atomic resolution microscopy with graph [J]. Adv. Mater. 2025, 37, 2417478.

[4] Shen' ao Xie, Zheng Luo*, Fangping Ouyang*, Shanshan Wang*, et al. Machine learning-assisted active center exploration in atomically thin MoS₂-x electrocatalysts for efficient hydrogen evolution [J]. Adv. Mater. 2025, Accepted, 10.1002/adma.202503474.

[5] Yun Chen, Feng Liu*, Shanshan Wang*, Jin Zhang*, et al. Constructing slip stacking diversity in vander Waalshomobilayers. Adv. Mater. 2024, 36, 240473.

关键词机器学习、缺陷、原子尺度、透射电镜

基于通用机器学习原子势和多尺度模拟的多元材料研究

祝令刚*、杨宁、邹显耀、周健、孙志梅

北京航空航天大学

通过合金化、掺杂、熵增等策略获取的多元材料体系，一方面给材料研发提供了巨大的设计空间，另一方面在性能上往往提升明显。然而多元材料的庞大设计空间给材料研究带来严峻挑战，计算模拟通过计算机“做实验”可有效减少资源消耗，然而即便是对计算模拟，多元材料的原子尺度计算模拟需要探索庞大的成分、原子构型、晶体结构空间，成本也较高。当前机器学习和计算模拟的融合成为研究多元材料体系的重要策略，本报告将介绍我们利用通用机器学习原子势和多尺度模拟研究多元合金体系的相关进展。

针对TiZr系高熵合金体系，首先利用第一原理计算和蒙特卡洛模拟的集成，探究了体系中的化学短程序现象，以及这种短程序对模量、层错能等力学性质的影响，并对其中的电子尺度机制进行了分析。同时研究了高熵金属基体中加入少量氧后对材料原子结构和力学性质的影响及机理，结合高通量计算和统计分析，获取了氧-短程序相互作用形成的稳定局部原子构型，展示了多元材料内部的原子尺度图像。同时通过集成通用机器学习原子势Mattersim与蒙特卡洛模拟，进一步加速了多元材料原子结构模拟。

关键词多元材料；多尺度模拟；通用原子势；化学短程序

新型轻元素MAX相的理论设计与性能预测

冯幸¹、张程程¹、乔竹辉^{*1}、孙志梅²

1. 烟台先进材料与绿色制造山东省实验室

2. 北京航空航天大学

MAX相是一类兼具金属与陶瓷优异性能的新型层状化合物，在航空航天、核能及电子等极端环境领域展现出巨大应用潜力，同时也是制备二维MXene的前驱体。当前研究聚焦于通过元素替代与结构调控设计新型功能化MAX相材料。其中，X位元素的选择对调控MAX相的“陶瓷”特性尤为关键。本研究揭示：除传统X位元素（如C、N）外，引入轻质元素（B、H、O、Li、Be等）至X位点，不仅能有效维持其层状结构稳定性，更能诱导出诸如固溶软化和负泊松比等独特性能。这些反常力学响应预示着该类新型轻元素MAX相在吸能材料、传感器等特殊应用领域具有突破性潜力，同时也为合成具有新颖物化特性的功能性MXene提供了新的可能。未来研究将融合高通量计算与机器学习方法，加速新型MAX相材料的理论设计、性能预测与筛选，为其在极端服役环境下的广泛应用及衍生高性能MXene的开发奠定坚实基础。

关键词 MAX相；轻元素；固溶软化；负泊松比；第一性原理

堆叠调控反铁磁MXene的反常谷霍尔效应

赵瞳*

北京航空航天大学

谷指数是新兴电子自由度，但关于谷极化的研究主要集中于铁磁序。本研究提出了在二维反铁磁中实现堆叠构型调控反常谷霍尔效应的范式，通过引入衬底和调控堆垛构型，打破时空联合对称性 (PTsymmetry)，实现堆叠相关的谷自旋分裂。基于第一性原理计算，发现了反铁磁Cr₂CH₂MXene的自发谷极化，以及Cr₂CH₂/Sc₂CO₂异质结中堆垛相关的谷自旋分裂。另外，切换Sc₂CO₂的铁电极化方向诱导了Cr₂CH₂/Sc₂CO₂的半导体-金属转变，伴随着谷特征消失。本研究为发展基于反铁磁单层的可控谷电子学器件提供了理论指导。

关键词堆叠；反铁磁；反常谷霍尔效应；铁电调控

预训练分子大模型：Uni-Mol在材料中的应用

汪鸿帅*

深势科技

早期的分子表征方法是通过特征工程为分子创建“指纹”，利用化学和物理参数表征分子，以区分不同分子并预测其化学性质。三维分子表征能够精确地描述分子中原子的空间排列，保留了分子所有必要的信息，没有丢失任何关于分子结构的细节。对分子进行三维表征的工作量巨大，因为它涉及到大量的数据处理和复杂的计算。这不仅需要高性能的计算硬件来处理原子间相互作用的量子力学计算，还需要先进的机器学习算法来从这些数据中提取有用的信息和模式。近年来AIforScience新范式快速发展，各种底层要素快速涌现，使得3D分子表征成为可能。Uni-Mol即是全球首个发表的3D分子表征大模型。Uni-Mol是由深势科技于2022年5月发布的一款基于分子三维结构的通用大模型，论文被机器学习顶会ICLR2023接收[1]。Uni-Mol是分子世界的基座大模型，基于Uni-Mol可实现分子生成、性质预测等业界关注的多种通用能力，覆盖众多行业。Uni-Mol性能优越、模型泛化能力强，获得了大量学界和业界研究人员的广泛关注。我们在蛋白-药物构象生成[2]、单步逆合成设计[3]、MOF碳捕捉材料性质预测[4]、OLED发光性质预测[5]、药物毒理性预测[6]等众多场景，以Uni-Mol作为基座大模型进行了成功的应用，展现了强大的通用性，在不同场景中均能通过迁移和微调达到该场景的领域最优。Uni-Mol大模型展现出的通用性构成了其在AIforScience领域中的巨大潜力。深势科技正在将Uni-Mol与产品功能深度融合，以用户触手可及的交互形式，赋能药物开发、化学工程、材料设计等相关领域。我们预期Uni-Mol将被更多团队使用，作为通用大模型，对分子的世界进行探索

关键词分子大模型；表征学习；AIforScience

双过渡金属MBenes:锂/镁/铝离子电池的负极材料

胡京京、周健*

北京航空航天大学

二维过渡金属硼化物 (MBenes) 因其显著的结构多样性和良好的导电性, 在储能领域引起了广泛关注。基于双过渡金属前驱体MAB相的成功合成, 双过渡金属MBenes的研究得到了迅速发展。本研究系统地探究了28种 $M'M''B_2$ 单层结构 (M'/M'' 为Sc、Ti、V、Cr、Y、Zr、Nb、Mo, 代表8种不同金属元素的组合)。通过特殊准随机结构 (SQS) 模拟确定了这些结构的最低能量构型。借助全面的第一性原理计算发现, 这些材料具有优异的力学性能、突出的电极性能和热稳定性。研究结果表明, 这些双过渡金属MBenes作为锂/镁/铝离子电池的负极材料展现出卓越的电极性能: 分别具有高比容量 (509.37–936.75/1018.74–1873.49/1528.10–2810.24mAh/g)、适宜的开路电压 (0.33–0.79/0.51–1.11/0.39–1.51V) 和低迁移势垒 (7.53–40.13/20.14–61.63/14.07–216.60meV)。此外, 这些材料在充放电循环过程中的结构变形极小, 形状变化小于7%。

关键词 MBenes; 双过渡金属; 负极; 第一性原理计算

碲化锗中的赝姜泰勒效应驱动位移型铁电相变机制

王昌锐、孙志梅*

北京航空航天大学

本工作结合第一性原理计算与基于神经演化势（NEP）的大规模分子动力学模拟，研究了碲化锗（GeTe）晶体中的相变机制与动态无序涨落。我们发现GeTe的铁电相变在三临界点附近，属于位移型机制。值得注意的是，模拟观察到由赝姜泰勒效应（PJTE）引发的局域动态无序，该现象不同于热激活跃迁所致的静态无序。通过将振动-电子耦合PJTE铁电理论拓展至强非谐体系，本研究构建了理论化调控及优化IV-VI族化合物热学与光电性能的新范式。

关键词 碲化锗；铁电相变；赝姜泰勒效应；动态无序

全流程自动化制备型薄层色谱平台：加速化学纯化

蔡文迪、赵博轩、莫凡洋*

北京大学

制备型薄层色谱法 (pTLC) 是一项至关重要的纯化技术，但其手动操作仍然是化学发现中缓慢、不可重复且危险的瓶颈。我们推出了Auto-pTLC，这是一个全自动机器人平台，它通过工程化解决方案系统地解决每个瓶颈问题，并通过其模块化硬件架构和数字集成的视觉引导控制软件实现真正的端到端自动化。该平台已在各种具有挑战性的化学场景中得到验证，能够提供具有出色重现性的高纯度产品。它引入了一种并行化的批量纯化模式，可提高样品通量，同时减少主动劳动并消除危险暴露。Auto-pTLC弥补了实验室自动化的一个关键空白，将手工工艺转化为强大的工程流程，从而加速科学发现。

关键词 制备型薄层色谱，纯化，自动化

MBenes负载单原子催化剂用于氧还原反应和析氧反应及机器学习

王二鹏²、周健¹、孙志梅^{*1}

1. 北京航空航天大学

2. 烟台大学

氧还原反应（ORR）和析氧反应反应（OER）是各种可再生能源转化和储能技术中的关键催化过程。在此，系统地研究了由第四以及第五周期过渡金属原子（TM）负载到MBenes衬底组成的单原子催化剂（SACs）的ORR和OER催化活性（记为：TM-M₂B₂O₂，M=Ti、Mo和W）。结果表明，相比较MBenes衬底，单原子对催化活性起决定影响因素。其中负载Rh、Pd、Au和Ir的SACs具有优良的ORR或OER催化活性。特别地，Rh-Mo₂B₂O₂和Rh-W₂B₂O₂具备超低ORR/OER过电位，催化活性甚至优于Pt/RuO₂（0.45/0.42V），是一种有前途的双功能催化剂。随后，基于特征提取以及特征降维，构建了机器学习数据库。通过机器学习，开发了两种输入仅包含10个SACs元素特征的模型以及两种基于元素特征的符号表达式，以实现快速和准确地识别催化活性优异的ORR和OER电催化剂。本工作系统研究了单原子以及双原子负载的MBenes基材料的催化活性，从原子尺度揭示了材料的结构-性能间的构效关系，促进了二维过渡金属硼化物在能源转化领域的应用，为后续研究提供新的设计思路和解决办法。

关键词第一性原理；氧还原反应；析氧反应；MBene二维材料；机器学习

电镜表征自动化进展

张泽中*

北京科学智能研究院

人工智能（AI）正深度融入电子显微学，推动材料科学向自动化和智能化迈进。传统电镜如扫描电子显微镜（SEM）、聚焦离子束（FIB）和扫描透射电子显微镜（STEM）虽功能强大，但依赖人工操作，存在通量低、重复性差等瓶颈。同时，国产高端科学仪器进入加速发展期，亟需突破软硬件国产化，发展自动化流程与智能决策解析，构建高分辨-高精度-高效率的下一代表征平台。在这个时代背景下，AI+仪器成为国产高端仪器突围的关键机遇。

本报告聚焦AI驱动的电镜自动化技术进展：我们研发并验证了一套先进系统，融合大语言模型、AI图像识别与智能体技术，实现了SEM大视场高分辨图像的无人值守采集、晶粒分割定量与报告自动生成，大幅提升微观结构统计分析效率。针对半导体FIB复杂流程，通过智能体与工作流的深度结合，实现了目标区域自动化、高精度、高效率的切割制样。此外，通过构建的模拟沙盒系统提升了STEM三维断层扫描研发效率，利用智能追踪与自适应调整，完成了纳米结构的自动化数据采集。

关键词电镜自动化；人工智能；高通量

基于知识驱动非监督学习方法识别金属材料的声发射变形机制

丁向东^{1,*}, 勾柏元¹, 陈研¹, 徐颂华^{2,*}, 孙军¹, Turab Lookman^{1,3}, Ekhard K. H. Salje^{1,4}

¹金属材料强度国家重点实验室, 西安交通大学, 中国西安, 710049

²数学与统计学院, 西安交通大学, 中国西安, 710049

³AiMaterials Research LLC, 美国新墨西哥州, 87501

⁴地球科学系, 剑桥大学, 英国剑桥, CB2 3EQ

*Email: dingxd@mail.xjtu.edu.cn

摘要正文： 实时识别金属结构材料的变形机制对实现潜在损伤和断裂的早期预警具有重要意义。声发射（AE）技术因其非破坏性优势被广泛用于此类监测。然而，传统的方法在区分多种变形机制共存的时候面临着挑战。针对这一问题，我们提出一种知识驱动的非监督学习方法。该方法利用一系列梯度驱动的监督学习基学习器并集成了领域知识注入的聚合损失函数，从而构建了一个无需标签的非监督学习框架。与现有的方法相比，该方法在识别AE信号中共存的多种变形机制方面表现出更高的准确性。在多孔316L不锈钢拉伸过程中，所识别的位错和裂纹相关声发射信号的雪崩统计特性与经典统计方法和断裂理论相吻合。通过结合雪崩理论，所提出的方法实现连续实时地检测材料变形机制，并具备动态早期失效预警能力。此外，该框架在非监督学习机制的支持下，表现出良好的迁移性，适用于新材料中多种共存变形机制的识别任务。

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

Xiangdong Ding^{1,*}, Boyuan Gou¹, Yan Chen¹, Songhua Xu^{2,*}, Jun Sun¹, Turab Lookman^{1,3}, Ekhard K.H. Salje^{1,4}

¹ State Key Laboratory for Mechanical Behavior of Materials, Xi'an Jiaotong University, Xi'an 710049, China

² School of Mathematics and Statistics, Xi'an Jiaotong University, Xi'an, 710049, China

³ AiMaterials Research LLC, Santa Fe, New Mexico, 87501, USA

⁴ Department of Earth Sciences, University of Cambridge, Cambridge CB2 3EQ, England

*Email: dingxd@mail.xjtu.edu.cn

Abstract 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.

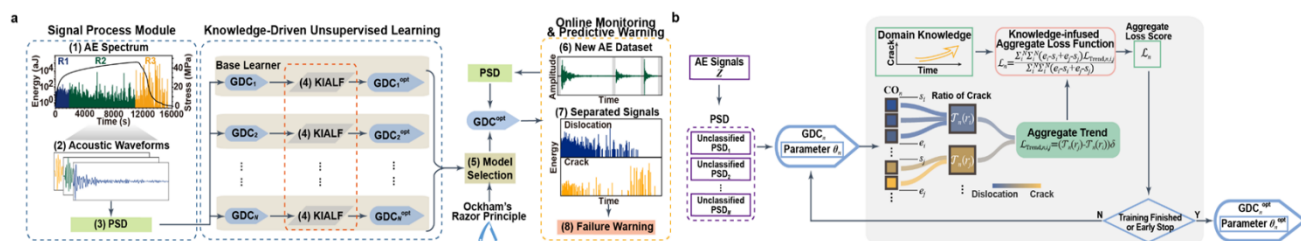


Fig. 1 The Framework of Knowledge-Driven Unsupervised Learning Strategy.

关键词：声发射；知识驱动非监督学习；知识注入聚合损失函数；共存变形机制识别

参考文献

- [1] B. Y. Gou, Y. Chen, S. H. Xu*, J. Sun, T. Lookman, E. K. H. Salje, **X. D. Ding***, Detecting Deformation Mechanisms of Metals from Acoustic Emission Signals through Knowledge-Driven Unsupervised Learning, *Nat. Commun.*, In press.
- [2] H. Li, H. X. Zong, S. Z. Li, S. B. Jin, Y. Chen, M. J. Cabral, B. Chen, Q. W. Huang, Y. Chen, Y. Ren, K. Y. Yu, S. Han*, **X. D. Ding***, G. Sha*, J. S. Lian, X. Z. Liao, E. Ma*, J. Sun, Uniting tensile ductility with ultrahigh strength via composition undulation, *Nature*. **2022**, **604**, 273-279.
- [3] X. Li, Q. L. Liang*, T. J. Dong, C. X. Liang*, D. Wang, Y. Z. Wang, **X. D. Ding***, Fatigue-resistant elastocaloric effect in hypoeutectic TiNi58 alloy with heterogeneous microstructure, *Acta Mater.* **2024**, **262**, 119464.
- [4] W. Tan, B. Y. Gou, **X. D. Ding***, J. Sun, E. K. H. Salje*, Avalanches during micro-galvanic corrosion of Mg-Cu-Al alloys in NaCl solution, *Phys. Rev. Mater.* **2025**, **9**, 025801.
- [5] Y. Chen, B. Y. Gou, D. D. He, **X. D. Ding***, J. Sun, E. K. H. Salje*, Avalanche dynamics of dislocations and cracks under tension in additively manufactured copper, *Appl. Phys. Lett.* **2024**, **124**, 042902.
- [6] Y. Chen, B. Y. Gou, X. Xu, **X. D. Ding***, J. Sun, E. K. H. Salje*, Multibranches of acoustic emission as identifier for deformation mechanisms in additively manufactured 316L stainless steel, *Addit. Manuf.* **2023**, **78**, 103819.
- [7] Y. Chen, B. Y. Gou, **X. D. Ding***, J. Sun, E. K. H. Salje*, Real-time monitoring dislocations, martensitic transformations and detwinning in stainless steel: Statistical analysis and machine learning, *J. Mater. Sci. Technol.* **2021**, **92**, 31-39.
- [8] W. Tan, B. Y. Gou, **X. D. Ding***, J. Sun, E. K. H. Salje*, Wild avalanches and mild fluctuations during filiform corrosion of Mg in NaCl solution, *Phys. Rev. Res.* **2023**, **5**, 033219.
- [9] Y. Chen, Q. B. Wang, **X. D. Ding***, J. Sun, E. K. H. Salje*, Avalanches and mixing behavior of porous 316L stainless steel under tension, *Appl. Phys. Lett.* **2020**, **116**, 111901.
- [10] Y. Chen, B. Y. Gou, W. Fu, C. Chen, **X. D. Ding***, J. Sun, E. K. H. Salje*, Fine structures of acoustic emission spectra: How to separate dislocation movements and entanglements in 316L stainless steel, *Appl. Phys. Lett.* **2020**, **117**, 262901.
- [11] E. K. H. Salje, D. Z. Xue, **X. D. Ding***, K. A. Dahmen, and J. F. Scott. Ferroelectric switching and scale invariant avalanches in BaTiO₃. *Phys. Rev. Mater.* **2019**, **3**, 014415.

报告人/墙报展示人简介:

丁向东，西安交通大学材料科学与工程学院教授。1999年获得吉林大学博士学位，曾在日本国立材料研究所（NIMS）、美国洛斯阿拉莫斯国家实验室（Los Alamos National Laboratory）、麻省理工学院（MIT）和剑桥大学（University of Cambridge）等机构担任研究职务。2015年入选长江学者特聘教授，担任剑桥大学 Yip Visiting Fellow。致力于金属材料变形和相变的多尺度模拟和实验研究。主持两项国家自然科学基金委国际合作项目和一项重点项目，以及多项国家研发项目。在高影响力国际期刊上发表论文200余篇，包括《Nature》、《Science》、《Nature Materials》、《Advance Materials》等，荣获国家自然科学奖。担任《Journal of Materials Informatics》的副主编，《Crystalline Materials》顾问委员会成员。



面向极端服役条件的金属材料机器学习势构建和宽区物性研究

宋海峰^{1,*}, 王丽芳¹, 陈欣¹, 高兴誉¹, 戚家伟¹

¹北京应用物理与计算数学研究所, 北京, 100088

*Email: song_haifeng@iapcm.ac.cn

摘要正文: 基础科学（高压物理、地球物理、材料科学等）和国家工程（战略武器、聚变物理等）研究中，材料常面临高温、高压、高应变率以及辐照等极端条件加载，因此材料宽区多相物性是评估其服役性能的关键。数值模拟是研究材料物性的重要途径之一，同时机器学习势函数的发展为兼顾提升模拟精度和效率提供了可行性。面向极端场景，我们在极端材料集成计算平台ProME中，给出了高精度宽区多相机器学习势函数的系统构建方案，包括训练数据集构建、势函数建模、机器学习模型参数训练和拟合、以及势函数验证等，研发了机器学习势函数建模软件TensorAlloy和训练数据集构建软件TensorDB，实现了机器学习势函数的高效构建。基于该技术方案和软件，我们分别建立了典型金属材料铜和关键核材料铀的高精度机器学习势函数，实现宽温压区多相物性模拟研究。针对铜材料，基于宽区多相机器学习势函数，我们模拟研究了孔隙结构对材料冲击动力学行为的影响效应，揭示了异质微结构和非平衡效应在改变弹塑性波传播、冲击相变机制和相变路径等性质的关键作用，为面向防撞减震、冲击防护等场景应用的疏松材料设计提供理论依据。针对铀材料，基于机器学习的平衡态分子动力学模拟准确给出了宽区温度-压力相图，成功再现铀的 α 、 γ 、液相等多相热力学物性；同时，采用非平衡分子动力学模拟，我们首次实现了基于高精度机器学习势函数的铀材料冲击响应过程模拟，发现并揭示了铀材料在冲击加载下的 $\alpha \rightarrow \gamma$ 相变动力学路径和相变机理，为其在爆轰冲击等高应变率极端服役条件下的力学性质和形变行为评估奠定基础。

关键词: 机器学习；分子动力学模拟；金属材料；冲击动力学；相图和相变

参考文献

- [1] X. Chen, L.F. Wang, X.Y. Gao, Y.F. Zhao, D.Y. Lin, W.D. Chu, H.F. Song, Machine learning enhanced empirical potentials for metals and alloys, *Comput. Phys. Commun.* **2021**, **269**, 108132.
- [2] X. Chen, X.-Y. Gao, Y.-F. Zhao, D.-Y. Lin, W.-D. Chu, H.-F. Song, TensorAlloy: An automatic atomistic neural network program for alloys, *Comput. Phys. Commun.* **2020**, **250**, 107057.
- [3] X. Gao, W.Y. Wang, X. Chen, X. Chong, J. Xian, F. Tian, L. Wang, H. Chen, Y. Liu, H. Huang, others, ProME: An Integrated Computational Platform for Material Properties at Extremes and Its Application in Multicomponent Alloy Design, *ArXiv Prepr. ArXiv2505.06194* (2025).

报告人/墙报展示人简介:

宋海峰，北京应用物理与计算数学研究所副所长、研究员，博士生导师。入选国家高层次人才计划、国家“百千万人才工程”和科技部中青年科技领军人才，获国家科技进步一等奖1项、省部级科技进步二等奖5项和于敏数理科学奖等，享受国务院特殊津贴。中国核学会铀系物理与化学专业委员会常务理事，中国材料研究学会计算材料专业委员会副秘书长、材料基因组专业委员会委员。长期致力于理论方法发展、物理效应建模、模拟算法及软件研制等工作，发表论文百余篇，被引用2000余次，取得发明专利授权十余项、软件著作权十余项。



非晶纳米材料的科学与应用

Mo Li^{1,*}

¹ School of Materials Science and Engineering, Georgia Institute of Technology
Atlanta, Georgia 30332, USA

*Emails: jzhou@buaa.edu.cn, zmsun@buaa.edu.cn

摘要正文: Different from crystalline materials, nanoscale disordered materials, including metallic glassy alloys and oxide glasses, possess unique and often advantageous properties, such as structural isotropy, high catalytic properties, soft magnetic properties, high strength, and wear and corrosion resistance. Ideally, they should rival the crystalline counterparts in many applications, especially in nanoscales. In this talk, I will go over some of these unique properties to show their potential applications in various settings, and the challenges in synthesizing the desired nanoscale materials. One example I will show is the formation of a one-dimensional order in nanoparticles due to surface tension and internal stress **【1】**. This unique structural order in a disordered material demonstrates the metastability and its manifestation that are rarely seen in crystalline nanoparticles. The second example is a newly developed synthesis method using Joule heating to produce nanoparticles of well-controlled size, composition and shape **【2】**. Finally, if time permits, I will go over some challenges in characterizing and understanding disordered glassy nanomaterials in modeling and experiments.

关键词: 非晶纳米材料; 纳米制备; 原子结构; 纳米材料性能

参考文献

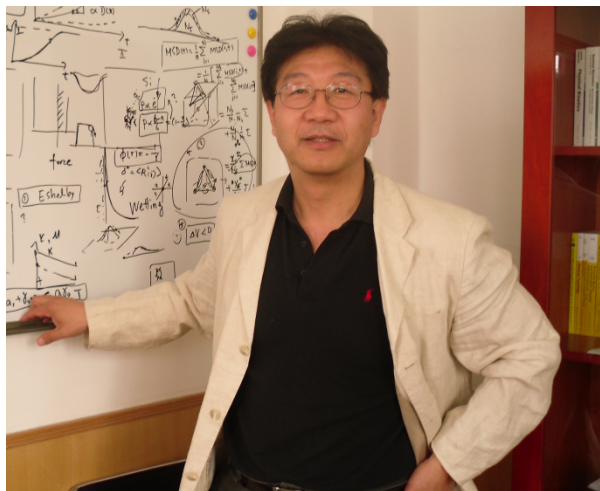
- [1] Development of one-dimensional periodic packing in metallic glass spheres. *Scripta Materialia* **2020**, **177**, 132-136.
- [2] Metallic Glass Nanoparticles Synthesized via Flash Joule Heating. *ACS Nano* **2025**, **19** (21), 19806.

报告人/墙报展示人简介:

Professor Mo Li received his Ph.D. in applied physics in 1994 from California Institute of Technology. After a brief staying as a postdoctoral fellow at Caltech and the Argonne National Laboratory, he joined Morgan Stanley & Co. in New York. He came back from the investment bank to academia in 1998.

From 1998 to 2001, he was an assistant professor at the Johns Hopkins University. Currently, he is a professor at the Georgia Institute of Technology. Professor Li's research focuses on understanding fundamental properties and processes of materials, and predicting material behaviors. The approaches used in his research are a blend of those from statistical physics, solid-state physics, materials science, metallurgy, mechanics and large scale, high performance computing. His research focuses on algorithm development, simulation, and theoretical analysis.

He is the recipient of the National Thousands Talent Program Award of China (2009) and the Alexander von Humboldt Prize (2023).



机器学习赋能的碳纳米管水平阵列控制制备

李越¹, 钱柳¹, 张锦^{1,*}

¹北京大学

*Email: jinzhang@pku.edu.cn (通讯作者电子邮件地址)

摘要正文: 硅基半导体技术已接近瓶颈, 急需新的材料或结构突破延续摩尔定律。基于碳纳米管水平阵列的碳基半导体已在实验室级别展现出远超硅基的性能, 然而, 碳纳米管水平阵列的制备技术仍面临诸多挑战。本研究将视角聚焦到催化剂体系的革新上, 利用离子束技术实现了 Fe、Co、Ni、Cu、Ti、Pt、Ru 等多种金属及其排列组合的催化剂加载, 并结合机器学习和自动化技术进行高通量筛选。通过对大量实验数据的高维分析与自主优化, 最终发现了一种高效的 Ti-Pt 双金属催化剂, 显著提升了碳纳米管的生长效率及均匀性。此外, 研究还首次成功实现了生长密度的精确控制。该研究不仅为碳纳米管的大规模制备提供了新的技术路径, 也为催化剂的开发和筛选提供了创新性的解决方案。这一结合离子束技术与人工智能筛选的策略, 有望在能源、电子器件等领域的材料开发中发挥重要作用。

关键词: 碳纳米管; 机器学习; 控制制备

参考文献

- [1] Yue Li, Shurui Wang, Zhou Lv, Zhaoji Wang, Yunbiao Zhao, Ying Xie, Yang Xu, Liu Qian*, Yaodong Yang*, Ziqiang Zhao*, Jin Zhang*. Transforming the Synthesis of Carbon Nanotubes with Machine Learning Models and Automation. *Matter*, 2025, 8, 101913.
- [2] Ying Xie†, Yue Li†, Zhisheng Peng†, Chengyu Wang, Zanlin Qiu, Xinyi Cai, Tinglu Song, Jia Si, Xiaoxu Zhao, Liu Qian*, Ziqiang Zhao*, Jin Zhang*. Nano-seeding Catalysts for High-density Horizontally Aligned Carbon Nanotube Arrays with Wafer-scale Uniformity. *Nature Communications*, 2025, 16, 149

