科学通报 2025 年 第 70 卷 第 24 期: 4012 ~ 4014
人工智能驱动的材料科学研究专题 编者按
《中国科学》杂志社 SCIENCE CHINA PRESS

人工智能驱动下的材料科学范式变革: 方法、平台与应用前沿

尹万健[1*], 刘淼[2,3*], 龚新高[4*]

1. 苏州大学能源学院, 苏州 215006
2. 中国科学院物理研究所, 北京凝聚态物理国家实验室, 北京 100190
3. 松山湖材料实验室, 东莞 523808
4. 复旦大学计算物质科学教育部重点实验室, 计算物质科学研究所, 上海 200433
* 联系人, E-mail: wjyin@suda.edu.cn; mliu@iphy.ac.cn; xggong@fudan.edu.cn

Paradigm shift in materials science driven by artificial intelligence: methods, platforms, and frontiers of applications

Wan-Jian Yin[1*], Miao Liu[2,3*] & Xin-Gao Gong[4*]

[1] *College of Energy, Soochow University, Suzhou 215006, China*
[2] *Beijing National Laboratory for Condensed Matter Physics, Institute of Physics, Chinese Academy of Sciences, Beijing 100190, China*
[3] *Songshan Lake Materials Laboratory, Dongguan 523808, China*
[4] *Key Laboratory for Computational Physical Sciences (MOE), Institute of Computational Physics, Fudan University, Shanghai 200433, China*
* Corresponding authors, E-mail: wjyin@suda.edu.cn; mliu@iphy.ac.cn; xggong@fudan.edu.cn

doi: 10.1360/CSB-2025-5311

尹万健

苏州大学教授, 教育部国家重大人才工程特聘教授. 研究方向为AI物理、计算物理与计算材料学. 长期致力于光电转换基础理论与材料设计算法的研究, 在半导体缺陷、光伏材料和基于人工智能的材料逆向设计等方向做出了创新性的科学贡献.

近年来, 随着人工智能、大数据与高性能计算技术的高速发展, 材料科学研究正处于新一轮范式转型的前沿浪潮之中, 从实验-理论-计算为核心的三大传统范式, 正迈向以数据驱动、模型预测、自主优化为特征的“第四范式”. 《科学通报》组织出版“人工智能驱动的材料科学研究专题”[1~7], 聚焦“人工智能+材料科学”的交叉融合前沿, 涵盖理论计算、模型构建、实验平台、数据库开发、性能优化、应用拓展等多个关键环节, 旨在系统展示当前该领域的研究进展与实践探索, 诠释材料科学迈向智能化、自主化发展态势.

在高精度理论模拟领域, 神经网络量子态(neural network quantum states, NNQS)方法为解决强关联体系提供了新思路. 中国科学技术大学杨金龙、商红慧团队[1]提出基于Transformer架构的神经网络方法QiankunNet系列, 结合周期性边界条件处理、自回归采样与密度矩阵嵌入理论, 构建了面向固体材料的QiankunNet-Solid与QiankunNet-DMET框架, 在石墨烯、硅等材料中实现了接近全组态相互作用(full CI)精度的计算能力, 同时显著降低了计算资源需求. 该综述展示了生成式AI模型在处理固体材料长程相互作用和复杂电子结构问题上的巨大潜力, 预示着AI在模拟高温超导体、拓扑材料等前沿材料中的广阔前景. 北京大学陈默涵课题组[2]介绍的ABACUS软件是我国科研团队自主研发的密度泛函理论

引用格式: 尹万健, 刘淼, 龚新高. 人工智能驱动下的材料科学范式变革: 方法、平台与应用前沿. 科学通报, 2025, 70: 4012–4014
Yin W-J, Liu M, Gong X-G. Paradigm shift in materials science driven by artificial intelligence: methods, platforms, and frontiers of applications (in Chinese). Chin Sci Bull, 2025, 70: 4012–4014, doi: 10.1360/CSB-2025-5311

© 2025《中国科学》杂志社

刘淼

中国科学院物理研究所/松山湖材料实验室研究员、博士生导师. 长期致力于发展“材料大数据+人工智能”方向的研究，运用高通量第一性原理计算为领域构建数据库，将海量科学数据带到科研人员手中. 主持创建了Atomly.net材料科学数据库、MatChat AI材料科学智能体等多项材料科学数据工具.

龚新高

计算凝聚态物理学家，复旦大学教授，中国科学院院士，科技部重大科学研究计划首席科学家，美国物理学会会士，复旦大学第八届学术委员会主任. 研究方向为AI物理与计算凝聚态物理，包括新型能源材料的设计和计算、表面和界面的结构和动力学性质、纳米体系物性的理论研究、基于人工智能的物质计算新方法的发展等.

(density functional theory, DFT)软件平台，具备平面波与数值原子轨道双基组支持，适用于不同硬件体系与材料种类的高精度模拟. 该平台为大原子模型(large atomic model, LAM)项目提供了可靠的数据来源，助力构建通用型、预训练、可调优的原子势函数，为“AI for Science”提供了底层算力基础. 这也标志着我国在AI赋能科学计算工具链方面正逐步实现从跟跑到领跑的转变. 中国科学院计算技术研究所贾伟乐课题组[7]针对基于神经网络的分子动力学模拟工具DeePMD-kit，提出了一系列软硬协同优化策略，包括无框架算子重构、瘦高矩阵优化与算法并行化，实现了时间步计算速度的数量级提升. 该工作打通了AI模型从理论开发到工程部署的“最后一公里”，为大尺度、长时间、多分辨率模拟任务提供了实际可行的解决方案.

作为数据驱动研究的基石，材料数据库的构建质量直接决定AI模型训练的上限和材料发现的效率. 吉林大学张立军、王新江团队[3]以材料数据库构建流程为主线，从数据生成、预处理、存储、检索四个层面系统总结了数据库构建规范与技术要点，同时对ICSD、Materials Project、OQMD、MatCloud等代表性数据库进行了横向比较. 该综述明确指出，未来材料数据库的发展将从结构化数据积累向语义可解释、知识图谱化方向演进，推动数据库从信息载体迈向知识平台.

材料实验是材料科学中至关重要的一环. 传统试错式实验方法在面对材料设计的高维度参数空间时面临效率瓶颈. 上海交通大学汪洪团队[4]系统回顾了AI驱动下的“自驱动实验室”(Self-driving Laboratory, SDL)的发展现状，提出以机器人执行为硬件基础、以AI算法为决策内核、以数据标准化为协同桥梁的“等级0至等级5”自主实验室体系架构. 该工作不仅厘清了自主实验室从操作自动化到智能化的演进路径，还对其在催化剂、薄膜、纳米材料等关键领域的应用实例进行了梳理. 该文特别强调“智能数据工厂”的理念，即自主实验室既是数据的高质量生产者，也是高效使用者，是实现智能化材料研发流程闭环的关键节点.

基于算法、数据和实验平台的快速发展，“人工智能+材料科学”的研究范式正在应用到材料科学各领域. 理论催化中多相界面建模和反应路径解析是长期难题. 北京大学蒋鸿课题组[5]综述了机器学习在理论多相催化计算中的应用现状，涵盖小样本统计模型、机器学习势(machine learning potential, MLP)、生成式模型三大技术流派. 尤其是通用机器学习势(如M3GNet、CHGNet)打破了传统MLP对元素类别和局域环境的依赖，结合预训练与微调策略，初步实现了面向多类型催化反应的高精度部署. 此外，大语言模型(large language models, LLMs)等生成式AI工具亦开始在反应路径推理与结构预测中显现潜力，为复杂催化体系建模提供了新解法. AI与多物理场建模的融合也正在重塑物性研究的模式. 北京航空航天大学孙志梅团队[6]以二维范德华磁性材料为研究对象，系统探讨了堆叠角度与层间滑移对磁序调控的影响，揭示了层间耦合在磁电耦合、非共线自旋态、莫尔超晶格等现象中的关键作用. 该工作结合第一性原理、高通量计算与深度学习，展示了AI在调控新奇量子态方面的多维度作用.

综上所述，本专题涵盖了AI+材料科学在基础算法、平台工具、核心数据库、理论计算与实验验证等多环节的交叉进展，系统展示了智能化材料研发链条的雏形构建. 我们相信，随着理论方法持续突破、数据体系不断完善、工具平台逐步成熟，AI将进一步赋能材料科学，驱动其迈向“快、准、广、自主”的智能新时代.

衷心感谢所有作者在撰写过程中展现出的学术严谨与前沿探索精神，感谢审稿专家的辛勤付出与高质量意见，

也感谢编辑部的精心组织与推动. 我们希望本专题的发布, 能够为“人工智能+材料科学”这一交叉方向的学术交流与协作搭建平台, 激发更多原创性、突破性研究成果的诞生.

参考文献

1 Ma H, Fu L, Shang H, et al. QiankunNet-Solid/DMET: a generative neural network quantum state method for solid material simulations (in Chinese). Chin Sci Bull, 2025, 70: 4015–4026 [马欢, 付礼中, 商红慧, 等. QiankunNet-Solid/DMET: 面向固体材料模拟的生成式神经网络量子态方法. 科学通报, 2025, 70: 4015–4026]

2 Peng X, Zhou W, Zheng D, et al. Open-source density functional theory software ABACUS: promoting the development of large atomic-scale machine learning pre-trained models (in Chinese). Chin Sci Bull, 2025, 70: 4027–4043 [彭星亮, 周巍青, 郑大也, 等. 开源密度泛函理论软件ABACUS: 助力大原子模型发展. 科学通报, 2025, 70: 4027–4043]

3 Feng J, Zhou K, Li M, et al. Construction and application of materials database under data-driven research paradigm (in Chinese). Chin Sci Bull, 2025, 70: 4044–4065 [封俊杰, 周琨, 李木琛, 等. 数据驱动研究范式下材料数据库的构建与应用. 科学通报, 2025, 70: 4044–4065]

4 Zhang L, Liu M, Yuan H, et al. AI-driven new materials development and data standardization (in Chinese). Chin Sci Bull, 2025, 70:4066–4080 [张澜庭, 刘明洋, 袁宏建, 等. AI驱动的新材料智能研发与数据标准化. 科学通报, 2025, 70: 4066–4080]

5 Liu Z-Q, Deng Z, Jiang H. Machine learning methods for theoretical heterogeneous catalysis: current status and challenges (in Chinese). Chin Sci Bull, 2025, 70: 4081–4097 [刘照清, 邓哲, 蒋鸿. 理论多相催化计算中的机器学习方法: 现状与挑战. 科学通报, 2025, 70: 4081–4097]

6 Zhao T, Zhou J, Sun Z. Theoretical advances in bilayer van der Waals magnetic materials (in Chinese). Chin Sci Bull, 2025, 70: 4098–4108 [赵曈, 周健, 孙志梅. 双层范德华磁性材料的理论研究进展. 科学通报, 2025, 70: 4098–4108]

7 Li J, Tan G, Jia W. Strong scaling of molecular dynamics simulations with *ab initio* accuracy (in Chinese). Chin Sci Bull, 2025, 70: 4109–4115 [李剑雄, 谭光明, 贾伟乐. 第一性原理精度的分子动力学模拟强可扩展性研究. 科学通报, 2025, 70: 4109–4115]