



“材料与能源前沿科学：人工智能+材料”

培训班

2025年11月23日~11月25日

四川成都

主办单位：北京计算科学研究中心

协办单位：表面物理与化学重点实验室

目录

CONTENT

培训班简介 P01

Introduction

培训须知 P02

Instruction

培训日程 P03

Schedule

课程内容 P05

Courses





北京计算科学研究中心（以下简称中心）是隶属于中国工程物理研究院的独立法人单位，是以计算科学为牵引的多学科基础研究机构。中心成立于2009年8月。中心的定位是开展计算科学研究，促进科技发展，打造一个国际一流的开展计算科学及相关学科交叉研究的综合平台。

中心积极引进高层次人才，努力开展计算科学相关学科的交叉和创新研究，共有七个研究部：物理系统模拟研究部、量子物理与量子信息研究部、材料与能源研究部、复杂系统研究部、应用与计算数学研究部、力学研究部、计算方法研究部。研究领域涵盖了数学、力学、物理学、化学、材料科学、计算机科学等多个基础、前沿领域。中心积极与国内外知名科研机构以合办会议、合带博士后、人员互访等丰富形式开展合作，努力推动学科交叉、加强学术交流。作为一个基础性、跨学科、开放式的综合研究平台，中心将成为中物院在各个研究领域开展创新研究的重要支撑，开展对外科学技术交流合作的桥梁和纽带，高层次人才引进与培养的摇篮，同时填补我国计算科学相关学科交叉研究领域的空白。

“材料与能源前沿科学”培训班是北京计算科学研究中心材料与能源研究部主办的系列培训班，每年选取领域内最新或最热的主题举办一次。2025年的主题为“人工智能+材料”，定于2025年11月23日~25日在四川成都召开。本次培训班由北京计算科学研究中心材料与能源研究部主办、表面物理与化学重点实验室协办。主题聚焦于材料设计领域的新型人工智能算法、新型材料的计算机辅助设计、材料大模型相关理论和技术研究等，旨在帮助青年研究人员了解人工智能驱动的材料科学研究进展和发展趋势，抓住人工智能驱动材料科学的关键难题与突破方向。同时借此机会加强与中物院内外研究单位和人员的合作交流。

我们诚挚地欢迎各位学员参加本期培训班！

INSTRUCTION

培训须知

为方便各位老师和学员的科研工作/学习和生活，现将有关事项提示如下：

一、培训与住宿地点：

四川省成都市银河·云瑞酒店（四川省成都市双流区银河路596号）

二、现场报到：

11月22日（星期六）15:00~18:00（银河·云瑞酒店二楼大厅）

11月23日（星期日）07:30~08:30（银河·云瑞酒店一楼银河厅外）

三、正式培训：

11月23日 全天（银河·云瑞酒店一楼银河厅）

11月24日~11月25日 全天（银河·云瑞酒店一楼云瑞厅）

四、用餐时间与地点：

早中晚三餐均在酒店二楼西餐厅自助；

早餐刷卡用餐，午晚餐凭餐券用餐。

五、Wi-Fi：

Luckycloud Hotel

其他注意事项：

一、培训期间应严格遵守培训纪律，注意人身和财产安全，有事及时与会务组联系（卡牌挂绳为黄色的人员为会务组工作人员）。

二、自觉遵守培训纪律，不迟到、不早退，因故不能参加培训或需提前离会，须告知会务组。（培训期间，中物院院内单位学员需每天签到一次作为考勤记录，全勤则具备证书颁发资格）

三、进入培训会会场前，请自觉关闭手机或调至静音状态，以免影响他人。

四、禁止在公共场所谈论涉密信息。

会务组联系方式：

北京计算科学研究中心 冯 怡 18600984303 fengyi@csrc.ac.cn

SCHEDULE
培训日程

2025年11月23日 星期日		一楼银河厅
07:30~08:30	现场注册、签到	
主持人：黄兵		
08:30~08:35	开班仪式	
08:35~10:05	王童（清华大学） 人工智能驱动的生物大分子动力学模拟	
10:05~10:35	问答讨论、合影（二楼正门外）、茶歇	
10:35~12:05	孙兆茹（上海科技大学） Ai助力溶液与极地冻存材料研究	
12:05~14:00	问答讨论、午餐（二楼西餐厅）	
主持人：李颂		
14:00~15:30	王清（大连理工大学） 特征参数嵌入的机器学习先进合金材料设计与研发	
15:30~16:00	问答讨论、茶歇	
16:00~17:30	王琦（中国工程物理研究院材料研究所） 人工智能驱动的无序合金性能预测与逆向设计	
17:30~19:00	问答讨论、晚餐（二楼西餐厅）	
2025年11月24日 星期一		一楼云端厅
08:15~08:30	签到	
主持人：高世武		
08:30~10:00	戴佳钰（国防科技大学） Ai赋能的极端条件物质科学研究	
10:00~10:30	问答讨论、茶歇	
10:30~12:00	邓辉球（湖南大学） MD和KMC模拟方法在核材料辐照损伤研究中的新进展	

2025年11月24日 星期一		一楼云瑞厅
12:00~14:00	问答讨论、午餐（二楼西餐厅）	
主持人：邱睿智		
14:00~15:30	袁睿豪（西北工业大学） 基于人工智能的材料多模态构效关系挖掘与高性能设计	
15:30~16:00	问答讨论、茶歇	
16:00~17:30	刘淼（中国科学院物理研究所） AI+材料科学应用案例若干	
17:30~19:00	问答讨论、晚餐（二楼西餐厅）	
2025年11月25日 星期二		一楼云瑞厅
08:15~08:30	签到	
主持人：姜泽禹		
08:30~10:00	刘仕（西湖大学） 机器学习分子动力学在铁电材料中的应用	
10:00~10:30	问答讨论、茶歇	
10:30~12:00	蒋鸿（北京大学） 针对构型无序材料的机器学习方法研究	
12:00~14:00	问答讨论、午餐（二楼西餐厅）	
主持人：康俊		
14:00~15:30	管鹏飞（中国科学院宁波材料技术与工程研究所） AI+无序合金计算模拟研究的机遇与挑战	
15:30~16:00	问答讨论、颁发证书（中物院院内人员）、茶歇	
16:00~17:30	朱博南（北京理工大学） 人工智能加速晶体结构预测：方法、应用与展望	
17:30~19:00	问答讨论、总结闭幕、晚餐（二楼西餐厅）	

COURSES

课程内容



题目：人工智能驱动的生物大分子动力学模拟

授课老师：王童 ▶▶

王童博士，清华大学生命科学学院助理教授、博士生导师、课题组长，清华大学-北京大学生命科学联合中心（CLS）研究员，北京生物结构前沿研究中心研究员，中国生物信息学会结构预测与模拟专委会委员，曾在哈佛大学访学和微软研究院工作。其主要研究方向是AI驱动的生物大分子动力学模拟、机器学习力场开发、分子结构表征学习和计算机辅助药物发现。作为项目第一负责人和完成人，提出了AI²BMD动力学模拟程序，将蛋白质等大分子的动力学带到了量子级精度，获得“2024年度中国生物信息学十大进展”；并带领团队获首届全球AI药物研发大赛冠军。近五年来，以第一作者和通讯作者在《Nature》、《Nature Machine Intelligence》、《Nature Communications》、《Cell Research》等杂志上发表了30余篇论文，并拥有十多项中美专利。

授课内容简介：

2024年诺贝尔化学奖授予了AI驱动的蛋白质结构预测和设计，然而如何利用AI准确描述蛋白质的动态运动，是另一个需要解决的难题。生物分子的动力学模拟是生命科学和药物发现研究的基础技术，其有效性取决于其准确性和效率。经典模拟速度快但精度较低；量子模拟精度高，但代价高昂难以用于生物分子。我们提出了基于AI的生物分子动力学系统AI²BMD，实现了量子级别精度的蛋白质动力学模拟。AI²BMD包含了通用的蛋白质分割方法、ViSNet机器学习力场和自主设计的高效的动力学模拟程序。AI²BMD以量子级（从头计算）的精度高效地模拟了超过一万个原子的多种全原子蛋白质，比量子力学方法快百万倍以上，对蛋白质折叠过程、构象空间探索、自由能等热力学性质的计算带来更为准确的描述和分析，与ViSNet网络联合建模在首届全球AI药物设计大赛中获得冠军，为蛋白质动态机理探索、药物研发和蛋白质设计等领域带来全新的视角。



题目：AI助力溶液与极地冻存材料研究

授课老师：孙兆茹 ▶▶

孙兆茹，上海科技大学物质科学与技术学院助理教授，2009年、2014年分别在山东大学物理系、北京大学物理学院获得学士、博士学位。2018年-2018年在美国天普大学物理系从事博士后研究，2018年入职上海科技大学物质科学与技术学院。主要研究方向是复杂无序体系的理论计算研究。近年来在机器学习辅助设计冷冻保存材料、溶液体系的机器学习势函数开发等前沿领域积累了丰富的研究经验。先后承担或参与完成国家自然科学基金委重大研究计划、国家自然科学基金、上海市启明星计划等项目，获得上海市青年东方学者、拔尖人才等荣誉称号。

授课内容简介：

在复杂无序体系的物性模拟中，由于此类体系普遍具有结构无序、多尺度耦合以及非平衡动力学等特征，通常需要借助分子动力学模拟并结合统计物理的方法加以研究。分子模拟的核心在于准确刻画原子—分子间的相互作用，因此构建精确且高效的势函数至关重要。然而，在传统框架下，势函数的“精度-效率”长期存在不可避免的trade-off，使得许多复杂体系的模拟难以真实反映其微观环境与物理本质。近年来，机器学习势的快速发展为解决这一瓶颈提供了新的可能，使得“接近第一性原理精度、同时具备经典力场效率”的势函数成为现实。在本次讲座中，我将介绍分子动力学方法、势函数构建策略，并展示其在溶液等体系中的应用。此外，我将讨论如何基于物理机制驱动的机器学习框架实现极地冷冻保存功能材料的设计，为复杂系统研究与材料探索提供新的思路。



题目：特征参数嵌入的机器学习先进合金材料设计与研发
授课老师：王清 ▶▶

王清，大连理工大学教授、博士生导师。长期从事AI赋能材料设计与先进材料研发方面的工作，包括高温合金、特种高温不锈钢、高熵合金/陶瓷等，并将多尺度模拟计算方法与自主研创的团簇式设计方法相结合，更加高效地发展高性能特种材料。在Adv. Mater.、Acta Mater.等学术期刊上发表了SCI论文百余篇，授权专利30多项；主持多项国家级科研项目；担任中国金属学会材料科学分会等多个委员会委员；获辽宁省优秀博士学位论文指导教师等多个称号。

授课内容简介：

近年来，机器学习在先进材料研发领域日渐重要。对于任一材料体系而言，数据库大多都为小样本空间，会影响机器学习的预测精度，需要领域知识指导机器学习，即在机器学习过程中需要选取和确定特征参数。目前，选取的特征参数多与组织结构密切相关。然而，在机器学习模型逆向设计中，以性能为目标导向预测复杂合金成分时，由于处理单变量对多变量关系，采用全局寻优算法会输出过量的成分，造成后续实验验证的难度，并降低了模型的预测精度。本工作采用团簇成分式方法对多元复杂成分进行降维处理，由于团簇式方法对组元进行了强约束，大大提升了模型预测合金成分的精度和实验验证的效率。



题目：人工智能驱动无序合金性能预测与逆向设计
授课老师：王琦 ▶▶

王琦，中国工程物理研究院材料研究所研究员。博士毕业于清华大学，先后在美国劳伦斯伯克利国家实验室、约翰霍普金斯大学从事博士后研究。主要从事人工智能、计算模拟与实验协同的合金性能预测与设计研究。以第一(含共同)或通讯作者在Nature, Nature Communications, Science Advances和npj Computational Materials等发表论文20余篇，引用3000余次。入选国家级青年人才计划，获邓稼先青年科技奖、中国材料学会非晶与高熵合金杰出青年科学家奖、杭州青山湖材料基因工程青年科学家奖和中物院十大青年锐杰等。

授课内容简介：

近年来，“AI for Science”作为一种新兴的科研范式迅速崛起，旨在以数据驱动的方式识别决定材料性能的关键要素，从而加速材料性能预测与新材料设计。在本讲座中，我们将以无序合金体系为对象，重点讨论人工智能在结构无序的非晶态合金与成分/拓扑无序的高熵合金中的应用进展。具体内容包括：利用面向无序体系的新型结构表征与深度图神经网络，实现对原子尺度响应的高精度预测，并追踪弛豫过程中协同运动的产生与演化；在此基础上，将深度学习模型与交换蒙特卡洛等统计方法相结合，构建以目标性能为牵引的无序结构逆向设计路径。总体而言，人工智能与材料学理论的深度结合，为揭示复杂合金的结构-性能关联、构建可泛化的设计框架提供了新的思路与工具。



题目：AI赋能的极端条件物质科学研究

授课老师：戴佳钰 ▶▶

戴佳钰，国防科技大学教授，国家高层次人才计划领军人才，获国家自然科学基金优秀青年基金资助，是教育部青年长江学者，军队学科拔尖人才，湖南省科技创新领军人才，获邓稼先青年科技奖，湖南省自然科学一、二等奖各1项。湖南省“物态模拟与调控”基础学科研究中心主任，全国高压物理专业委员会委员，全国光学青年论坛副主席，中国核学会铀系物理与化学学会理事，担任MRE, Physica Scripta, 《高压物理学报》等杂志编委/客座编辑，Chinese Physics Letters等四刊青年编委等。

授课内容简介：

人工智能正逐步深入科学研究的各个环节，从理论建模、数据分析到实验设计与知识发现，其角色已由辅助工具演变为科研体系中的核心驱动力。本报告聚焦AI赋能复杂体系的物质科学研究，重点介绍面向宽温压域、强激光与辐照等极端条件的通用多尺度物理方法，以及其在国防材料、半导体器件服役性能与毁伤效应评估等关键领域的应用实践。同时，报告还将探讨AI在跨尺度建模、材料性质预测与逆向设计等方向的发展前景，以及物理规律与非平衡统计物理思想如何深度融合于机器学习框架，以推动AI向更强可解释性与泛化能力演进的核心挑战。



题目：MD和KMC模拟方法在核材料辐照损伤

研究中的新进展

授课老师：邓辉球 ▶▶

邓辉球，湖南大学物理与微电子科学学院教授。2001年在湖南大学获材料物理与化学专业博士学位并留校任教至今，长期为本科生和研究生讲授《计算物理学》和《原子模拟理论》等课程。2006~2007年和2010~2011年分别在德国马普学会Fritz-Haber研究所和美国西北太平洋国家实验室作访问学者。主要从事高能粒子辐照、腐蚀和高压等极端条件下核材料与燃料结构演化的多尺度模拟计算研究，发展了多种长时间动力学演化模拟方法，开发了数十种核材料和燃料的原子间相互作用势函数并被国内外广泛采用。在Nature正刊、Nature/Science子刊、Acta Materialia等重要学术期刊上发表研究论文300多篇，主持完成了国家自然科学基金项目、国家重点研发计划课题、三大核电集团及九院横向课题等科研任务30余项。

授课内容简介：

在中子和离子等载能粒子的辐照下，核材料中产生大量的缺陷，导致材料服役性能急剧恶化，因此理解辐照缺陷在核材料中的热力学和动力学行为，揭示相应的辐照损伤机制，对于先进抗辐照核材料的研发和应用至关重要。近年来多尺度模拟计算结合机器学习方法在核材料研究中的作用越来越重要。本课程将结合国内外研究进展和本课题组研究成果，详细介绍核材料辐照缺陷演化的多尺度模拟计算方法，主要包括辐照损伤用经验势函数与机器学习势函数开发、辐照级联碰撞分子动力学模拟与初级损伤结构数据库建设、加速分子动力学与机器学习KMC长时间动力学演化新方法发展等内容。



题目：基于人工智能的材料多模态构效关系挖掘与高性能设计

授课老师：袁睿豪 ▶▶

袁睿豪，西北工业大学材料学院副教授，博士生导师。目前主要从事研究领域为“人工智能+金属材料”，聚焦于金属材料多模态构效关系挖掘和高性能设计。以第一/通讯作者在Advanced Materials、Materials Today、Acta Materialia等期刊发表论文30余篇，授权软著/专利10余项，主持国家级项目5项。参与编写“人工智能+材料”相关教材和专著各1本。担任期刊《MGE Advances》和《Journal of Materials Informatics》的青年编委。先后获得陕西省优秀博士论文，材料基因工程青年科学家奖，教育部自然科学一等奖。

授课内容简介：

近年来，机器学习被越来越多的应用于材料构效关系挖掘和高性能设计。在该讲座中，我们将结合具体研究案例，介绍主动学习、符号回归、自监督学习、多模态数据融合在材料研发中的应用，特别是在一些案例中将通过实践演示如何针对目标问题进行代码实现。



题目：AI+材料科学应用案例若干

授课老师：刘淼 ▶▶

刘淼，现就职于中国科学院物理研究所，任研究员、博士生导师；兼任松山湖材料实验室研究员，材料计算团队负责人。他曾是Materials Project的核心开发人员之一。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业界顶级数据库，将海量科学数据和人工智能工具带到科研人员手中。他创建的Atomly.net材料科学数据库是世界范围内数据质量和数量最好的数据库之一；matchat材料科学智能体融入了28万篇专业论文知识；GPTFF无机材料通用力场模型具备很好的预测精度和泛化本领。

授课内容简介：

物理学家费曼提出，原子论是承载最人类丰富科学知识的一句话。原子论就像一根主线，把物理、化学、材料和生物学串到了一起，让基础科学形成一个整体；AI 则像一座桥梁，连接起信息技术、物联网，让这些前沿技术相互配合、协同发力，两者分别在基础和应用层面，实现了不同领域的融合。在当下的科学技术框架下，人类驾驭科学的能力实现了质的飞跃。借助不断迭代的技术工具与系统知识，个体得以突破自身生理与认知的局限。本次课程中，主讲人将聚焦 AI + 材料领域的国际前沿动态。以数据为核心脉络，分享描述原子间相互作用的通用力场发展与应用，讲解如何通过模型预测材料性能，以及机器人实验室建设的实践思考。结合具体案例，主讲人还将重点拆解该领域的科研方法论，与学员共同开展未来方向的头脑风暴。



题目：机器学习分子动力学在铁电材料中的应用

授课老师：刘仕 ▶▶

刘仕，2009年本科毕业于中国科学技术大学，2015年博士毕业于美国宾夕法尼亚大学，博士后工作于华盛顿卡内基研究所和美国陆军研究所，现为西湖大学理学院物理系长聘副教授、特聘研究员、博士生导师。先后入选浙江省和国家海外高层次人才引进计划青年项目。2025年入选浙江省自然科学基金杰青项目。长期聚焦于计算物理、材料物理、人工智能及其交叉前沿，针对功能材料和量子材料中普遍存在的跨尺度关联问题，发展面向复杂体系的多尺度计算框架，揭示多层次结构跨尺度耦合对材料宏观涌现性质的调控规律。自2013年以来，共参与发表文章130余篇。近五年，以通讯作者身份，在Phys. Rev. X、Phys. Rev. Lett.、Nat. Commun.等期刊发表论文55篇。目前主持国家科技部重点研发计划青年科学家项目、国家自然科学基金委面上项目、重大研究计划培育项目等多个项目。

授课内容简介：

铁电材料的功能性能通常源于其极化与外加场之间的相互作用，这些相互作用与电畴和畴壁的动态响应密切相关。分子动力学（MD）是一种研究大尺度空间和时间动力学过程的理想计算工具，同时能以飞秒级时间分辨率提供原子尺度细节。MD模拟的核心在于力场，它需要精确描述目标材料中的原子间相互作用。然而，由于精确描述原子间相互作用的多体势能极具复杂性，针对新材料的分子动力学模拟应用常因此受到制约。机器学习力场（MLFF）的出现使这一局面得到显著改善，它结合了密度泛函理论（DFT）等第一性原理方法的精度和经典MD的效率，为精度与效率的权衡提供了理想解决方案。本教程将通过与传统解析力场的对比，介绍面向固态材料的MLFF基本概念。我们将重点探讨基于深度神经网络的深度势能（DP）方法，该方法已成功应用于多种铁电材料体系，包括HfO₂等二元氧化物、PbTiO₃等钙钛矿及其固溶体，以及In₂Se₃、CuInP₂S₆等二维材料。通过在线平台，参与者将亲手实践MLFF开发与测试的工作流程，并运用MD模拟来研究电场作用下铁电畴与畴壁的动力学行为。最后我们将探讨MLFF的优势与局限，并介绍结合多种机器学习方法的铁电材料多尺度模拟与设计。



题目：针对构型无序材料的机器学习方法研究

授课老师：蒋鸿 ▶▶

蒋鸿，北京大学化学与分子工程学院研究员。2003年获北京大学物理化学专业理学博士学位。先后在美国杜克大学(2003-2004)、德国法兰克福大学(2004-2006)和德国柏林弗里兹-哈勃研究所(2006-2009)开展博士后研究。主要研究兴趣是材料体系电子结构理论方法发展与应用，在Phys. Rev. Lett.、J. Am. Chem. Soc.、J. Phys. Chem. Lett.、Phys. Rev. B、J. Chem. Phys.等刊物发表学术论文140余篇。现担任IOP-Electronic Structure、Computer Physics Commun.、Communications in Computational Chemistry、《大学化学》等刊物编委。

授课内容简介：

具有确定晶体结构但晶格位点存在占据随机性的多组分构型无序材料广泛应用于半导体光电子学、多相催化、超导材料等领域。对这类材料的理论模拟必须考虑所关注物性对占据构型的依赖性及其统计平均。本报告将基于课题组近期工作[1-6]，重点介绍团簇展开模型的基本原理、构建策略及其与机器学习方法的结合以实现构型无序材料统计热力学性质的高效理论模拟。

- [1] X. Xu, H. Jiang, J. Chem. Phys. 150, 034102 (2019).
- [2] D. Luan, H. Jiang, J. Chem. Phys. 154, 074702 (2021).
- [3] J.-Z. Xie, X.-Y. Zhou, H. Jiang, J. Chem. Theo. Comput. 18, 3795 (2022).
- [4] J.-Z. Xie, X.-Y. Zhou, H. Jiang, J. Chem. Phys. 157, 200901 (2022).
- [5] J.-Z. Xie, H. Jiang, J. Phys. Chem. C, 127, 13228 (2023).
- [6] J.-Z. Xie, X.-Y. Zhou, B. Jin, H. Jiang, J. Chem. Theo. Comput. 20, 6207 (2024).



题目：AI+无序合金计算模拟研究的机遇与挑战

授课老师：管鹏飞 ▶▶

中国科学院宁波材料技术与工程研究所研究员，国家级领军人才，海洋关键材料全国重点实验室副主任，前沿交叉科学研究中心主任。长期致力于材料多尺度计算方法的发展以及物性模拟与设计研究。主持工信部新材料重大专项、国家自然科学基金杰出青年科学基金、国防基础科研核科学挑战专题等科研项目；相关研究成果在SCI期刊发表论文180余篇；现任中国材料研究学会计算材料分会委员、材料基因分会委员、中国物理学会凝聚态理论与统计物理分会委员、中国金属学会非晶合金及应用分会委员，担任《AI for Science》《National Science Open》《Materials Future》等期刊主编/副主编/编委。

授课内容简介：

无序合金体系研究的根本挑战在于其本征无序性（化学/拓扑）及构效关系的复杂性，人工智能技术为解析无序合金的结构特征与性能关联提供了新机遇。当前AI赋能非晶合金研究主要聚焦三大方向：一是构建结构-性能关联模型，如通过“软度参数”等指标量化非晶局部动力学行为；二是开发机器学习势函数（MLPs）解决全原子模拟的精度-效率矛盾，实现多元非晶体系大尺度模拟并探索成分-物性关联；三是基于数据驱动模型预测非晶形成能力、力学及软磁性能，逆向设计抗塑性变形构型与多元合金。无序合金研究也面临小数据困境，亟需融合多源数据与领域知识，推动范式从“结构-性能”向“动力学-性能”转变，深入探索动力学序-功能关联。同时，针对非晶合金的研究有望形成双向赋能：AI深化无序体系认知，而玻璃物理（如自旋玻璃理论）启发神经网络解析，非晶软磁材料支撑AI硬件发展。AI+无序合金计算模拟研究有望突破数据与尺度限制，为无序合金新材料智能创制提供有力工具。



题目：人工智能加速晶体结构预测:方法、应用与展望

授课老师：朱博南 ▶▶

朱博南，北京理工大学空天科学与技术学院教授，2016年、2020年于英国剑桥大学获得本科、博士学位，随后加入伦敦大学学院开展博士后研究。于2023年回国，受到国家级青年人才计划支持，主持国家自然科学基金青年项目、国家外专项目，承担国家重大科技专项研究任务。长期从事材料物化性质计算、理论设计、结构预测等研究。在氧化外延薄膜界面调控，新型锂电池材料发现，高通量计算平台开发等方面取得了多项成果。在ACS Nano、Advanced Functional Materials、Nature Communications 等学术期刊发表论文29篇，任 Journal of Open Source Software 编辑、Materials Genome Engineering Advances 青年编委，担任npj Computational Materials, Journal of American Chemical Society 等期刊审稿人。

授课内容简介：

基于结构数据库的高通量计算材料筛选技术已被广泛用于新材料发现，但对于已有数据的依赖限制了其在未知化学空间中的预测能力。晶体结构预测方法通过对材料势能面进行直接采样，而非依赖于先验知识，与其形成了良好的互补。本报告将讲授晶体结构预测在新材料发现方面的应用。内容包括晶体结构预测的基本概念、预测方法种类及其发展历程等。报告将着重介绍第一性原理随机结构搜索方法的原理及其在固态电解质材料界面、锂离子正极、氮化物钙钛矿等新材料设计方面的应用。报告将在近年来涌现一系列人工智能新方法的背景下，如机器学习势函数、通用力场、晶体结构生成式模型等，探讨这些新方法与晶体结构预测的内在联系与交叉，展望如何实现新材料的加速研发。

