

先进光源表征牵引的材料数字化研究平台规划与设计

Sunday, 30 June 2024 14:30 (15 minutes)

摘要：伴随着新材料的成分、结构、维度等复杂性指数级的增加，传统的材料研发方法面临着巨大挑战，复杂材料体系的研究更是依赖于多平台、多方法的实验与理论协同探索与分析。而随着加速器、探测器以及实验方法学的发展，我国正处于先进光源的高速发展期，其中由上海科技大学负责或参与建设的软 X 射线自由电子激光用户装置和活细胞成像项目已进入运行阶段，硬 X 射线自由电子激光装置正在体系化加快推进，将为材料科学研究提供前所未有的原子级别高时空分辨能力和原位动态观测能力。同时，近年来人工智能在前沿交叉科学领域已取得许多颠覆性成果。随着 ChatGPT 类模型工具的纷纷涌现和生成式人工智能技术的快速发展，以 AI 为基础的新生产和研究模式已登上历史舞台。在材料研究过程中，人工智能在电子层面、原子/分子层面、微介观层面以及宏观层面都有望带来传统科研模式的变革和加速能力提升，具有前所未有的巨大潜力。但同时对于科学数据的多样性、质量和规模，以及不同领域人才的交叉协作均提出了更高的要求。

鉴于以上背景，为将光子大科学装置的尖端探测能力和 AI 技术充分融合到材料科学研究中，本文提出了一种 Data+AI 材料数字化融合创新平台，汇聚光子大科学装置实验数据、基于高精度 DFT、MD、MC 等多尺度模拟方法的理论大数据以及电镜中心、分析测试中心、微纳加工、红外芯片工艺加工等高价值数据资源，建立具有跨领域多源融合、安全共享、可信多方协作的全生命周期数据管理和共享协作系统，实现各类高质量科学大数据、学科领域方法学软件与 AI 算法融合能力平台的构建，满足多源材料大数据的分析挖掘需求，从而构建理论计算-AI 预测-实验验证的体系，形成复杂材料体系科学研究的新模式。

关键词：材料数字化；光子大科学装置；Data+AI 融合创新平台

Summary

Primary authors: 雷, 蕾 (上海科技大学); SHI, Wujun (ShanghaiTech University); ZHANG, Xiaofeng (ShanghaiTech University)

Co-author: 怀, 平 (Shanghaitech University)

Presenter: 雷, 蕾 (上海科技大学)

Session Classification: 先进光源数据与软件