

非晶材料在电池材料中的研究进展

近年来，**无定形（非晶）材料**在电池领域的研究备受关注，其**高离子电导率**、**结构稳定性**及优异的界面兼容性等优点，使其在锂离子、钠离子及固态电池等系统中具有潜在应用价值¹。然而，与晶体材料相比，无定形体系具有高度无序和多成分复杂性，这给基于**密度泛函理论（DFT）**的模拟和实验表征带来了挑战¹。为此，采用机器学习（ML）和人工智能（AI）方法对非晶电极/电解质进行设计与性能预测成为新兴方向。研究表明，**机器学习势能函数**等技术可以在保持近乎DFT精度的前提下，高效模拟无定形结构的动力学与热力学行为²。例如，Wang 等提出了一种基于**在运行时学习的机器学习势（MLIP）**的分子动力学框架，用于研究非晶固态电解质Li₃PS₄及其保护层Li₃B。该方法能够计算出材料的非晶化能、非晶-非晶界面能，并分析界面对Li⁺迁移率的影响，为无定形电池材料的设计提供了新思路²。

基于AI的非晶材料结构设计

为逆向设计非晶材料，近年来开发了多种**生成式模型**。从深度学习的角度看，**生成对抗网络（GAN）**、**变分自编码器（VAE）**、以及**扩散模型（Diffusion Model）**等方法被应用于非晶结构的自动生成³。同时，**大型语言模型（LLM）**也开始被尝试用于材料生成。Shang 等（2024）提出了一种生成-预测联合的深度学习架构，将无监督GAN与监督模型结合，引入上千个合金体系的先验知识，有效缓解了数据稀缺问题⁴。利用该模型，他们成功设计出了铜基非晶合金，实现了异常高的硬度或极低的弹性模量，且在实验验证后可迭代优化^{4 5}。

Yang 等（2024）开发了基于**图神经网络的扩散模型**，能够生成多种非晶结构。该模型在数倍至上千倍于常规模拟速度下，生成了具有正确短程和中程有序性的二氧化硅玻璃等结构，并可通过调控冷却率等条件来生成纳米多孔结构或复制金属玻璃的相空间^{6 7}。这种方法为高效探索非晶材料的结构域提供了新途径。

在电解质领域，Yang 等（2024）进一步采用**GPT类预训练模型与扩散模型**对聚合物电解质进行生成式设计。通过对比不同生成模型并进行超参数调优，他们生成了一批新的聚合物结构，并利用全原子分子动力学模拟评估性能。在测试的46个候选物中，有17个表现出高于已有聚合物的离子电导率，有的甚至翻倍提升^{8 9}。此外，这项工作指出，通过预训练-微调策略可加速模型收敛、提高小数据下性能，同时保证生成结构的新颖性、有效性和合成可行性。

多任务学习和虚拟筛选也是实现非晶材料设计的有力手段。例如，Xie 等（2022）利用**多任务图神经网络（GNN）**加速聚合物电解质筛选。该模型从大量未收敛的短时MD模拟数据和少量收敛的长时MD数据中学习，实现对4种收敛物理量（如离子电导率、迁移数等）的准确预测，并对6247种聚合物进行了筛选，远超以往研究规模¹⁰。该策略显著降低了复杂无定形体系（如聚合物电解质）性质模拟的计算成本。

下表列出了几项代表性的基于生成模型的非晶电极/电解质设计研究：

代表性研究	方法	目标材料	应用体系
Shang et al. (2024)	生成对抗网络（GAN）+监督预测模型	铜基金属玻璃	常规电池材料/结构材料
Yang et al. (2024)	图神经网络（GNN）扩散模型	二氧化硅玻璃、金属玻璃	非晶材料设计（通用）

代表性研究	方法	目标材料	应用体系
Yang et al. (2024)	GPT-类+扩散生成模型	新型聚合物电解质	锂离子电池（固态电解质）
Xie et al. (2022)	多任务图神经网络	聚合物电解质材料	锂离子电池（聚合物电解质）

非晶材料性质预测模型

除了结构生成，机器学习在**性质预测**方面也展现出强大能力，常用于预测电导率、扩散率、稳定性等关键指标。在聚合物电解质领域，**Bradford 等（2023）**提出了**化学信息化图神经网络（ChemArr）**模型，将Arrhenius公式形式融入神经网络的读出层，以编码温度依赖关系¹¹。该模型基于数百篇实验数据训练，对聚合物电解质的离子电导率进行了精确预测，相比不含温度编码的模型误差显著降低¹¹。利用该模型，研究者预测了数千种候选高电导聚合物，并筛选出多种有前景的材料¹²。类似地，**Xie 等（2022）**的多任务GNN模型同时预测了聚合物电解质的多个稳定物理量，使得在更大化学空间中进行虚拟筛选成为可能¹⁰。

在无定形**固态电解质和界面**研究中，机器学习势能函数（MLIP）被用于长尺度模拟。**Wang 等（2023）**的工作中，通过“运行时学习”构建了 Li_3PS_4 （非晶硫化物电解质）和 Li_3B （保护层）体系的势能模型，实现了对其非晶化能和非晶-非晶界面能的计算，并研究了界面结构对 Li^+ 扩散的影响²。该方法突破了传统DFT尺度限制，能够在纳米级空间和纳秒级时间尺度上得到近DFT精度的模拟结果。**Seth 等（2024）**则基于**NequIP（Neural Equivariant Interatomic Potential）**架构，训练了包含1.345万个LiPON（非晶LiPON电解质）结构的势能模型。优化后，该势能的能量和力预测误差分别仅为约5.5 meV/原子和13.6 meV/Å¹³。使用该模型进行分子动力学模拟，结果显示LiPON的无定形结构与ab initio模拟一致，同时模拟了 Li^+ 在LiPON界面上 Li^+ 扩散的各向异性，发现界面扩散速率仅略慢于块体相¹⁴。这一研究表明，先进的等变图神经网络势能能够高保真地描述复杂无定形电解质体系的离子迁移行为。

下表总结了几项具有代表性的非晶材料性质预测研究：

代表性研究	模型架构	预测性质
Xie et al. (2022)	多任务图神经网络（GNN）	聚合物电解质的离子电导率等多项物理量 ¹⁰
Bradford et al. (2023)	化学信息化图神经网络（ChemArr）	聚合物电解质的离子电导率 ¹¹
Wang et al. (2023)	机器学习势能MD（MLIP）	Li_3PS_4 非晶化能、界面能及Li迁移率 ²
Seth et al. (2024)	NequIP（GNN势）	非晶LiPON中 Li^+ 扩散率 ^{13 14}

研究趋势、挑战与未来展望

总体来看，结合**AI for Science**的非晶电池材料研究正呈现多样化发展趋势：生成式模型（GAN/VAE/扩散/LLM）被用于探索无定形材料的未知化学空间^{3 8}；物理启发式学习（如化学信息化层、迁移学习等）有效提高了性质预测的准确性¹¹；机器学习势场使得对复杂非晶体系的多尺度模拟成为可能^{2 13}。在电池应用方向，不仅关注锂离子体系，也逐步扩展到钠离子、铝离子及双离子电池等不同化学体系。此外，越来越多研究开始关注**交叉学科**的融合，例如利用大语言模型辅助材料设计，将生成模型与高通量实验相结合，以实现闭环优化设计。

尽管取得了诸多进展，但仍面临显著挑战。一方面，**数据稀缺性**依旧制约着模型训练，尤其是非晶体系的实验和高精度模拟数据相对有限；另一方面，无定形结构的表示和评价标准尚不完善，缺乏统一的评价生成结构“合理性”和“新颖性”的指标体系（当前常用的新颖度、有效性、合成可行性等评价指标¹⁵）。此外，模型泛化能力、可解释性和多尺度耦合（如界面、缺陷效应）也是亟待解决的问题。未来研究方向上，**主动学习**和**增强学习**等策略有望用于加速候选材料的筛选；同时，深化AI与物理规律的耦合（如先验约束、守恒关系等）将进一步提升模型可靠性。跨领域协作、构建更完善的材料数据库，以及更多基于实验验证的闭环研究，将有助于推进非晶材料在新一代电池中的应用。

参考文献： 上述内容基于近期文献报道，包括生成式深度学习、图神经网络、物理引导的神经网络以及机器学习势能在非晶电池材料研究中的应用^{4 6 10 8 11 13 2}。各文献详见正文引用。

^{1 2} (PDF) Nature of the amorphous-amorphous interfaces in solid-state batteries revealed using machine-learned interatomic potentials

https://www.researchgate.net/publication/372423641_Nature_of_the_amorphous-amorphous_interfaces_in_solid-state_batteries_revealed_using_machine-learned_interatomic_potentials

³ Application-oriented design of machine learning paradigms for battery science | npj Computational Materials

https://www.nature.com/articles/s41524-025-01575-9?error=cookies_not_supported&code=21d66760-c56a-456a-ae3e-d749142ecca0

^{4 5} Customized design of amorphous solids by generative deep learning

<https://www.the-innovation.org/article/doi/10.59717/j.xinn-mater.2024.100071>

^{6 7} A Generative Diffusion Model for Amorphous Materials

<https://arxiv.org/html/2507.05024v1>

^{8 9 15} De novo design of polymer electrolytes using GPT-based and diffusion-based generative models | npj Computational Materials

https://www.nature.com/articles/s41524-024-01470-9?error=cookies_not_supported&code=a0268a9a-4dd4-4406-a0d7-1f151700c8a4

¹⁰ Accelerating amorphous polymer electrolyte screening by learning to reduce errors in molecular dynamics simulated properties | Nature Communications

https://www.nature.com/articles/s41467-022-30994-1?error=cookies_not_supported&code=948fc067-3180-47af-a9aa-2b70cf345a7e

^{11 12} Chemistry-Informed Machine Learning for Polymer Electrolyte Discovery - PubMed

<https://pubmed.ncbi.nlm.nih.gov/36844492/>

^{13 14} Seth Et Al 2025 Investigating Ionic Diffusivity in Amorphous Lipon Using Machine Learned Interatomic Potentials | PDF | Density Functional Theory | Amorphous Solid

<https://www.scribd.com/document/840044501/seth-et-al-2025-investigating-ionic-diffusivity-in-amorphous-lipon-using-machine-learned-interatomic-potentials>