

Homework-02

Ch01. Chemistry, Materials and Nanoscience

會選擇這一章節做閱讀的原因是因為大學時的背景就是材料系。當初為了考取材料研究所，更是在專業科目上花費了不少心力，舉凡材料熱力學、材料科學、甚至是物理冶金。而這些專業科目的理論幾乎都是建立在實驗的結果上，很難讓我聯想到 AI 竟然也可以跟材料有所相關。所以當看到目錄上出現了 Materials 的關鍵字時，不由自主地就想要去了解，到底 AI 是如何應用在材料上的。

這一章節主要分了幾個部分來說明 Machine learning (ML)和 Artificial intelligence (AI)在化學和材料上的應用、主要挑戰、未來十年的進展以及所期望的結果。文章的開頭其實就闡明了，設計、改進材料和化合物的能力一直是現今社會技術 (society's technology)和設施快速發展的關鍵。這些複雜技術在開發和優化具有所需性能的材料和化合物時，需要廣泛的需求，例如機械、電子、光學和磁的性能等。再加上在沒有明確的理論或合成方向的情況下，探索那些尚未被發現的化合物、材料，光靠實驗去驗證是需要花上大量的時間以及成本，所以 AI 佔了非常重要的一環。文中舉了一個非常具有說服力的例子來說明 AI 的重要性：從發現用於電池中的 LiMn_2O_4 到鎳錳鈷 (NMC)材料的時間表，是利用 ML 加上已知數據、將適合做成的電池新穎材料類別的發現從 14 年加速到不到 5 年。

而看似光鮮亮麗的外表下，其實也面臨著不少問題與挑戰。例如預測各種屬性或結構，通常是透過簡單的電子結構計算所得到，但現實世界卻是相對複雜許多。所以需要在可靠和精確的計算技術方面取得進步，才能準確且快速的解決當今技術應用日益複雜的功能。其中還有一個讓我印象比較深刻的挑戰是：設計持續不平衡的亞穩態相 (metastable phase)的材料，而這種特性已經超出了熱力學所提出的，任何物質都傾向以平衡的狀態存在的限制。但實際上卻可以利用材料的光學驅動過程控制化學過程、產生亞穩態相的材料。而困難的地方則在於以高效且可重複的方式做到這項挑戰；這是需要非常高速和大量數據流的分析。

我相信在未來的幾年內，AI 必成為科學家發現和設計材料中不可或缺的一部分。科學家可以利用 AI 以合理的方式生成科學數據、制定新的物理模型和理論，進而推動材料和化學品合理的設計途徑，探索目前無法想像的原子設計。就像文末所提及的，以 1000 倍的速度發現未知的可合成材料和複雜的化學物質，並同時具有所需的特性，進而提高人們的生活品質以及便利性。