本周读了几篇论文：

《机器学习原子间相互作用建模》

《The Open Catalyst 2022 (OC22) Dataset and Challenges for Oxide Electrocatalysts》

《FORCES ARE NOT ENOUGH: BENCHMARK AND CRITICAL EVALUATION FOR MACHINE LEARNING FORCE FIELDS WITH MOLECULAR SIMULATIONS》

《Generalized Neural-Network Representation of High-Dimensional Potential-Energy Surfaces》

读完后对于机器学习力场有了比较清晰的认识，大概明白了如何设计机器学习力场以及必须要注意的点。

尝试了一下使用ocp-model做吸附能的计算。

明确了在COFs应用上的问题点，使用机器学习力场可以完成两件事，结构优化以及吸附能的计算。这个对于光催化产氢应用具有非常重要的作用。具体的切入点还需要读几篇COFs的文章来了解一下。