

武汉大学 2026 年大学生创新创业训练计划项目申报书

填表时间： 2025 年 11 月 28 日

项目名称		基于自注意力机制的二维材料缺陷性质高通量预测平台				
项目简介 特色和创新点		<p>1. 研究目的：针对二维材料缺陷工程中第一性原理计算成本高昂、难以满足大规模筛选需求的瓶颈，本项目旨在构建一个高精度、快响应的性质预测平台，以加速新型功能材料的筛选与理性设计。</p> <p>2. 研究内容：研究首先基于多元数据库，提取并编码高保真的缺陷结构特征。在此基础上，我们将传统图神经网络范式升级为周期性全局感知架构，构建基于自注意力机制的深度学习模型，以突破局部消息传递的限制，精准捕捉缺陷诱导的长程相互作用。最终，开发端到端的开源代码库，实现对二维材料缺陷的高通量预测。</p> <p>3. 创新点：</p> <p>（1）方法突破：利用自注意力机制对传统图神经网络进行优化，突破其局部性限制，有效解决缺陷长程物理效应的建模难题。</p> <p>（2）物理融合：创新引入显式周期性编码与缺陷特异性标志。通过引入原胞的周期性副本，完整反映晶格的无限平移对称性，消除人为截断带来的边界效应，确保模型符合晶体物理规律并提升可解释性。</p> <p>（3）平台落地：打造面向二维材料缺陷的高通量开源预测平台，有效解决传统第一性原理计算中精度与效率难以兼顾的矛盾，填补该领域专用筛选工具的空白。</p>				
项目所属一级学科		理学				
项目类型		创新训练（ <input checked="" type="checkbox"/> ） 创业训练（ <input type="checkbox"/> ） 创业实践（ <input type="checkbox"/> ）				
申请经费		10000		起止时间	2025 年 9 月至 2027 年 3 月	
申请人或申请团队信息	姓 名	学 号	学院、专业		联系电话	E-mail
	华一明	2024302021174	物理科学与技术学院物理学		15551771305	cnhym@foxmail.com
	毕佳琦	2024302021135	物理科学与技术学院物理学		15387075759	2251513767@qq.com
	邬乐颜	2023300003001	物理科学与技术学院物理学		15911035310	2023300003001@whu.edu.cn

	注：项目负责学生的信息填写在本栏目的第一行，创新训练和创业训练成员共计不超过3人，创业实践项目成员共计不超过5人。				
指导教师信息	姓名	单位	职称	联系电话	E-mail
	常胜	武汉大学物理科学与技术学院	教授	15307184629	changsheng@whu.edu.cn

一、立项背景

1. 选题背景和意义

为响应国家“十五五”规划中对新材料领域加强原始创新与关键核心技术攻关的号召，本研究致力于应用潜力巨大的“二维材料”。二维材料是指是在两个维度上具有无限扩展性，而在第三个维度上的尺寸被限制在纳米尺度的材料。二维材料独特的结构特征和物理化学性质使它们成为众多领域，例如：电子学、光电子学和太阳能电池等中最具吸引力的材料之一[1]。然而，在实际的制备和应用过程中，二维材料往往不可避免地存在缺陷[2]，如原子空位、取代和位错等。但是随着研究的深入，人们逐渐认识到，这些缺陷并非总是负面因素。二维材料缺陷工程正是基于这一认知，其核心概念是：通过精确设计、引入、调控或修复材料中的固有缺陷，来系统性地重塑其电子结构、能带排列、进而改善或赋予材料新的功能，例如提高催化活性[3]、调整带隙等等。

二维材料缺陷是二维材料性能调控的核心因素之一。缺陷会破坏二维材料原本的晶格结构，从而使局域结构发生畸变或重构。晶格结构的破坏进一步会导致材料能带结构改变，产生局域态、缺陷态、费米能级移动等。这一系列微观层面的变化会使得材料宏观性能的改变，如材料的电学、光学、催化性能等等[4]。二维材料的缺陷可分为点缺陷、位错和晶界。点缺陷一般包括空位缺陷，不同类型的空位缺陷的形成能一般不同，形成能的大小影响了缺陷的常见程度。位错和晶界，位错被视为再原始结构中插入半无限长的条带，晶界则是由位错核组成的阵列。同时实验表明，上述两种缺陷都对二维材料各个维度性能有显著影响[5]。总而言之，二维材料的缺陷类型多，空间分布复杂，同时对于材料性能的影响是高度非线性形的。

二维材料的缺陷很大程度上影响了材料的性质，进而影响材料的使用。可见，二维材料的缺陷工程在二维材料的研究与应用中是极为重要的。其中，根据缺陷预测性质又是缺陷工程中极为重要的一环。通过缺陷预测性质，我们可以精确地建立从缺陷结构到电子

结构到宏观性能的映射关系，从而深化我们对材料本质的认识，同时预测可以避免传统研发中的漫长的试错环节，在计算层面进行高通量筛选排除无效的实验方向，实现效益最大化。

传统的预测方法主要指的是基于物理模型的计算模拟方法，包括密度泛函理论，即直接从量子力学方程来计算电子性质、缺陷形成能等等[6]。分子动力学模拟，当需要预测材料的力学性能，如拉伸强度时，常使用此种方法[7]。但是上述的传统方法往往有着计算成本高，效率低，难以捕捉长程物理效应等问题。因此，我们需要引入新的方法来建立新的研究范式从而在一定程度上避免诸如此类的问题。

为了寻找可以提高效率降低成本的研究方法，我们首先来归纳总结用缺陷预测材料性质这项任务本身的特质。首先，缺陷的类型、浓度、位置等多重因素排列组合，形成了数量级极大的可能结构，这导致传统方式难以在如此之多的可能性之中进行遍历式搜索。其次，缺陷对材料性能的影响往往是复杂的非线性关系，这就需要我们使用可以更好地捕捉非线性关系的模型来进行预测。最后，为了精确描述一个缺陷，需要使用大量的原子级特征，这就需要我们使用一个可以将多维向量作为输入模型。

根据上述任务的特征，同时随着近几年科学研究范式的转变，我们希望引入人工智能模型来为此任务提供更好的解决方案。针对该任务的特质，我们发现人工智能方法可以很好地解决该问题。首先，人工智能模型如神经网络善于捕捉输入特征与输出性质之间复杂的非线性关系[8]。其次，人工智能模型在预测新结构时相较于 DFT 计算效率提升很大，能够实现高通量筛选以帮助我们快速锁定最有前景的缺陷结构。此外，一些深度学习模型，如图神经网络可以直接以原子特征作为输入，自动学习有效的结构-性能关联特征，减少了人工特征工程的难度。最后，在自然语言处理领域取得革命性成功的自注意力机制为捕捉长程物理效应带来了新的见地[9]。

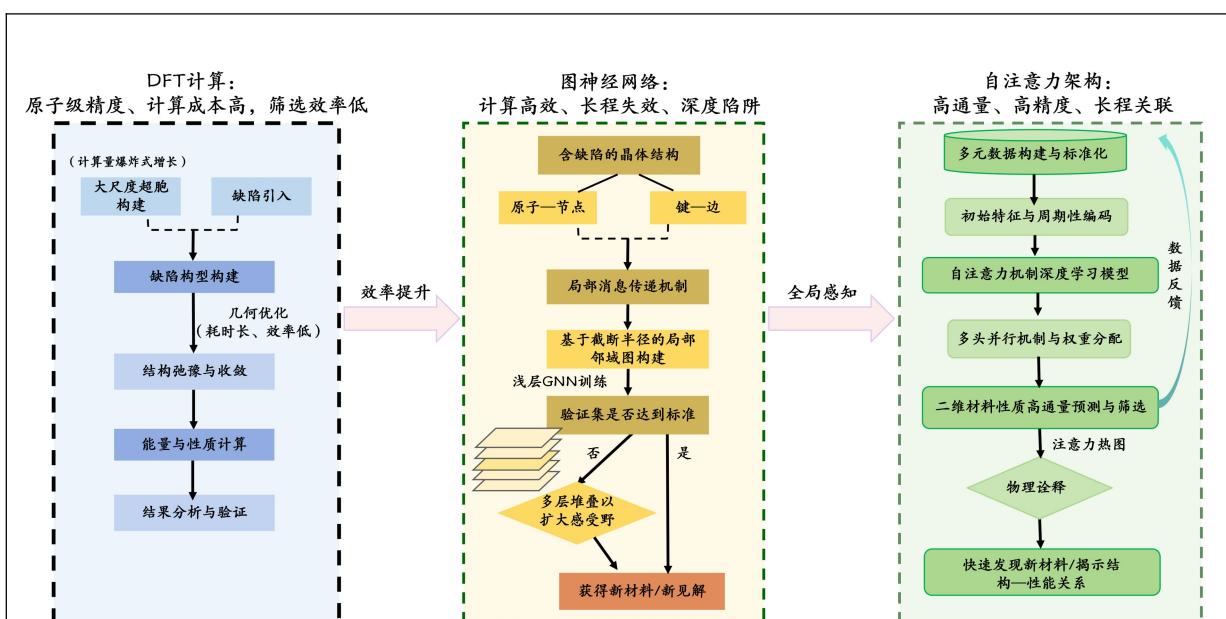


图 1：二维材料缺陷性质预测方法的范式演进

2. 国内外研究现状和发展动态

当前, 利用人工智能方法高通量预测二维材料的缺陷性质, 已成为加速先进材料研发的关键路径。国内外研究团队在利用机器学习和深度学习中的图神经网络对缺陷材料进行性质预测上取得了显著进展。

机器学习作为人工智能在缺陷材料性质预测上的开端, 其虽然有一定缺陷, 但是也取得了一定的进展, 为后续的研究打下了坚实的基础。例如, 美国普渡大学等机构的研究者系统地开发并评估了 SNAP、Allegro 等势函数, 用于预测 MoSe₂等二维材料在拉伸、相变及缺陷演化等非平衡状态下的力学行为。研究表明, Allegro 等势函数在精度与可迁移性上均优于传统经验势 (如 Tersoff 势), 能够可靠地模拟训练集未包含的物理现象, 为高通量、大尺度的缺陷性质预测提供了强有力支持[10]。

在图神经网络方面, 其应用为二维材料缺陷研究提供了全新的高通量筛选范式。一个典型范例是利用 GNN 加速二维材料中晶界结构的搜索。该方法将原子结构映射为图, 通过训练 GNN 模型快速预测不同缺陷构型的能量。该模型作为“代理模型”与进化搜索算法结合, 能够从海量可能结构中高效筛选出能量低、结构稳定的缺陷构型, 其搜索效率较传统第一性原理计算提升数个数量级[11]。

在此基础上, 注意力机制的引入进一步拓展了图神经网络在二维材料缺陷研究中的应用场景。除了作为“代理模型”加速晶界与缺陷构型的搜索外, 基于多头缩放点积注意力的 Graph Transformer 在表征原子局域环境及长程相互作用方面表现出明显优势。如下图所

示，在完全一致的数据集与训练设置下，Graph Transformer 在投影态密度（PDOS）预测任务上，于 MSE、RMSE 与 MAE 等多项指标均显著优于传统的图卷积网络（GCN）和图注意力网络（GAT）。这种性能差异表明，注意力机制能够更灵活地捕捉化学环境的异质性与非局域耦合，从而提高电子结构相关性质的预测精度。这为我们后续的研究提供了启示。

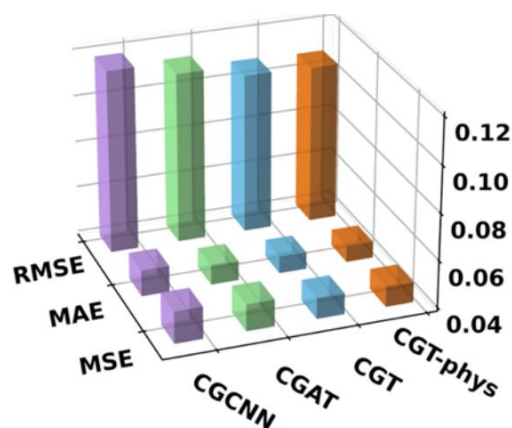


图 2：测试集上不同模型对 PDOS 的预测误差指标

3. 团队情况和前期准备

本项目成员由来自物理科学与技术学院的华一明、毕佳琦、邬乐颜三人组成。我们都有坚持不懈、刻苦钻研的科研精神，有从事科研工作的兴趣与热情。我们是一个团结而优秀的队伍，希望在项目执行过程中发现问题、分析问题，并提出具体可行的解决方案，享受科研过程，提升科研能力。本项目需要将物理学知识与人工智能领域的知识相结合。本项目同学都已经学习过物理学基础课程以及程序设计类课程。物理学知识方面，我们根据项目需求，进一步学习了固体物理，量子力学和计算物理等方面的知识。此外，本项目还需要大量并且深入的人工智能领域相关的知识，为此，我们系统地学习了图神经网络，自注意力机制等相关知识并且由于人工智能领域近年来发展迅速，我们也在同步地跟进人工智能领域最新的进展。这为我们进行此项目打下了良好的基础，支持我们做可靠且深入的研究。

在项目前期，我们阅读了大量的相关文献和相关数据集并学习了相关知识。我们主要阅读了有关于自注意力机制在材料科学领域的应用的文章。首先，由于本项目的深刻基于图神经网络模型，于是我们通过阅读 A Comprehensive Survey on Graph Neural Networks[12]系统地了解了图神经网络这一领域的最新进展和研究方向。接着，我们重点阅读了 Graph Transformer Model Integrating Physical Features for Projected Electronic Density of States Prediction[13]。这篇文献介绍了一种新的图神经网络模型——

Graph Transformer, 简称 GT, 该模型结合了物理特征来预测材料的投影电子态密度。其中, 自注意力机制在其中的应用主要体现在通过并行计算多个注意力头, 捕捉图中远距离节点间的潜在联系, 充分地利用了全局信息, 克服了传统图神经网络方法在处理复杂结构和长程依赖时的不足, 这为我们后续的研究使用自注意力机制提供了基本的架构和思路。

考虑到我们所研究的二维材料的结构具有有周期性的特点, 据此, 我们又学习了将材料中周期性结构考虑进来的文献 Periodic Graph Transformers for Crystal Material Property Prediction[14], 在这篇文献所提出的 Matformer 模型中, 注意力机制通过捕捉周期性结构中的原子间长程依赖和跨周期性单元格的关系, 使得模型能够在不同的周期性结构下仍然保持对晶体材料属性的准确预测。最后, 由于我们的项目是基于二维材料的缺陷来展开的, 所以我们选取了 Computational Materials Respository(CMR)这一资料库来进行学习。这个数据库包含了多个材料学相关的数据集, 例如 Impurities in 2D Materials Database, Uncertainty-aware electronic density-functional distributions, Database of ABSe3 materials 等等。通过基于 Python 的系统化数据分析与挖掘, 本研究不仅致力于高效利用这些科学数据资源, 更旨在推动数据驱动的研究范式在材料科学中的应用, 从而为构建开放共享、高效协同的数据要素应用生态提供前沿探索。

4.参考文献

- [1] C. Chang et al., "Recent progress on two-dimensional materials," Wuli Huaxue Xuebao/Acta Physico-Chimica Sinica, 2021.
- [2] M. Schleberger and J. Kotakoski, "2D material science: Defect engineering by particle irradiation," Materials, vol. 11, no. 10, p. 1885, 2018.
- [3] P. Muhammad et al., "Defect engineering in nanocatalysts: from design and synthesis to applications," Advanced Functional Materials, vol. 34, no. 29, p. 2314686, 2024.
- [4] M. F. Hossen, S. Shendekar, and S. Aravamudhan, "Defects and defect engineering of two-dimensional transition metal dichalcogenide (2D TMDC) materials," Nanomaterials, vol. 14, no. 5, p. 410, 2024.
- [5] Z. Xiong, L. Zhong, H. Wang, and X. Li, "Structural defects, mechanical behaviors, and properties of two-dimensional materials," Materials, vol. 14, no. 5, p. 1192, 2021.
- [6] J. Neugebauer and T. Hickel, "Density functional theory in materials science," Wiley Interdisciplinary Reviews: Computational Molecular Science, vol. 3, no. 5, pp. 438-448, 2013.
- [7] Z. Islam and A. Haque, "Defects and grain boundary effects in MoS₂: A molecular dynamics study," Journal of Physics and Chemistry of Solids, vol. 148, p. 109669, 2021.
- [8] P. Reiser et al., "Graph neural networks for materials science and chemistry," Communications Materials, vol. 3, no. 1, p. 93, 2022.
- [9] A. Vaswani et al., "Attention is all you need," Advances in neural information processing systems, vol. 30, 2017.

- [10] Y. Zhang et al., "Generalizable machine learning potentials for quantum-accurate predictions of non-equilibrium behavior in 2D materials," *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, vol. 448, p. 118502, 2026.
- [11] J. Zhang, A. Koneru, S. K. Sankaranarayanan, and C. M. Lilley, "Graph neural network guided evolutionary search of grain boundaries in 2D materials," *ACS applied materials & interfaces*, vol. 15, no. 16, pp. 20520-20530, 2023.
- [12] Z. Wu, S. Pan, F. Chen, G. Long, C. Zhang, and P. S. Yu, "A comprehensive survey on graph neural networks," *IEEE transactions on neural networks and learning systems*, vol. 32, no. 1, pp. 4-24, 2020.
- [13] J. Wu, W. Lu, J. Wu, B. Zhang, and Y. Guo, "Graph Transformer Model Integrating Physical Features for Projected Electronic Density of States Prediction," *The Journal of Physical Chemistry A*, vol. 129, no. 25, pp. 5700-5708, 2025/06/26 2025.
- [14] K. Yan, Y. Liu, Y. Lin, and S. Ji, "Periodic graph transformers for crystal material property prediction," *Advances in Neural Information Processing Systems*, vol. 35, pp. 15066-15080, 2022.

二、项目方案

三、人员分工

华一明：全面负责项目的规划、协调与管理；主导核心的自注意力模型架构设计与开发；

毕佳琦：负责成果总结、结题报告及学术论文的撰写；

郭乐颜：协助进行模型的超参数调优、训练监控与性能评估。

四、进度安排

第一阶段：(2025.9 - 2026.01)

本阶段主要完成多元数据的解析、图结构的构建以及传统图学习方法的基准测试。首先，解析并清洗多元数据库，提取关键的原子结构和物理性质数据。接着，建立晶体结构到图结构的转换流程，设计能区分原子类型并编码距离与角度信息的周期性图表示。最后，利用此图结构进行传统图学习方法的基准测试，为引入自注意力机制奠定对比基础。

第二阶段：(2026.02 - 2026.07)

本阶段是核心研发期，我们将聚焦于自注意力架构的设计与实现。首先，我们将开发基于全局自注意力机制的核心算法模块，利用其直接交互的特性，有效捕捉缺陷诱导的长程相互作用。同时，我们将通过在注意力计算中引入周期性和几何编码，确保模型满足晶体材料的周期不变性，使其能准确处理超胞边界处的相互作用。

第三阶段：(2026.08 - 2026.10)

本阶段侧重于提升模型精度，并利用自注意力机制的特性挖掘物理规律。我们将对模型进行系统性调优，评估不同几何特征对注意力权重的影响，并量化全局注意力模块相比于传统局部消息传递的性能提升。同时，通过可视化注意力热图，我们将进行物理可解释性研究，验证模型是否将高权重分配给缺陷中心等关键原子，从而确认算法学到了符合物理直觉的规律。

第四阶段：(2026.11 - 2027.01)

本阶段主要进行成果整理、论文撰写及代码开源。我们将总结自注意力机制在二维材料缺陷挖掘中的优势，整理实验数据，梳理项目创新点与技术难点，撰写学术论文。同时，我们将整理代码库，封装数据处理脚本与预测模型，并在代码托管平台发布，形成可供社区使用的高通量筛选工具。

五、预期成果

1. 高性能预测模型：一个经过充分训练和验证的自注意力模型，能够对新的二维材料缺陷构型进行快速、准确的性质预测。
2. 共享平台与开源仓库：一套完整的、包含数据处理、模型实现、训练和评估流程的开源代码，确保研究的透明度和可复现性，方便其他研究者使用和扩展。
3. 高水平学术论文：一篇系统阐述项目方法、结果和意义的学术论文，投稿至同行评议期刊，为科学文献库做出贡献。

六、经费预算

开支科目	预算经费 (元)	备注
交通费	1000	用于项目组成员开展实地调研、用户访谈、前往合作企业或校外实验室进行技术对接，以及参加各类学术交流活动产生的市内及城际交通支出。
图书资料费	2000	用于购置深度学习、算法设计相关的国内外经典专业书籍，订阅付费技术专栏，以及购买或下载项目研究所需的特定数据集、行业报告及付费学术论文。
印刷费	1000	用于打印项目阶段性总结报告、结题报告、技术文档、调研问卷，以及制作项目答辩展示所需的宣传海报、易拉宝和宣传折页等图文资料。
办公用品	1000	用于购买项目组日常所需的文具（笔、笔记本、文件夹等），以及用于存储实验数据和备份项目代码的移动硬盘、U 盘等耗材，保障档案管理规范。
会议费	1000	用于支付项目组成员参加与课题相关的学术会议、行业研讨会、成果交流展会的注册费、会务费及资料费，以帮助团队了解前沿动态并展示项目成果。
实验材料费	2000	用于租用高性能计算集群或云端 GPU 资源
其它	2000	用于订阅国内外各种人工智能工具辅助科研
总计	10000	

导师意见：（系统中附件上传无需导师签字）

签 名：

年 月 日

项目所属单位意见：（系统中附件上传无需项目所属单位签章）

签名盖章：

年 月 日

学校意见：（系统中附件上传无需学校意见）

年 月 日