近年來，人工智慧一直是在各個領域中最熱門的話題之一。 在各種棋類比賽中，圍棋一直是被稱作複雜度最高且難以被完全了解的棋盤遊戲之一，而在近期發生了著名的ALPHA GO事件，結合蒙地卡羅搜尋樹與深度學習網路的ALPHA GO以四勝一敗的成績擊敗了頂尖的韓國職業棋士李世乭又接著擊敗了當時世界第一的棋士柯潔，自此AI的熱潮就一直沒有退去。小時候第一次接觸到人工智慧就是從魔鬼終結者電影中所塑造的形象，覺得人工智慧在未來終將取代一切，如今AI也正在慢慢地充斥在我們的生活之中，從生活隨處可見的語音助理到工作上的無人化環境，我們逐漸用機器的計算來取代人腦的猜想。

由於半導體的蓬勃發展，電腦的性能也跟著飛躍般的倍率成長，AI受惠於計算能力與儲存空間的突飛猛進，也因此被關注了起來。科學家過往探索新材料以及化學反應的靠的不僅是專業的累積也需要有一定的領域直覺，藉此設計實驗、模型再從中發展出理論，但在複雜度越來越高的數據之中，能探索的維度也漸漸變成了天文數字，要在海量般的訊息找出相關的線索簡直像是大海撈針。因此，利用機器學習來幫助科學家探索複雜的數據集，加速新技術或材料的開發已成為目前的當紅工具。如電池的發展，在原子成份與化學反應幾乎是有無限的挑戰空間，而其中涉及的理論基礎也同為廣泛，利用AI來閱讀以及理解至今為止的知識，並幫助我們找出更佳設計的電池將會是科學發展的一大助力。

在一般材料發展，穩態的製程設計為較容易探索的領域，但如能利用亞穩態來設計新的製程，或是原本以層堆疊設計的材料，能夠改以低維度異質性材料的設計，相信在材料的性質發展上能夠有更大的突破。在材料的生成上通常利用保留原子在介面上的堆疊來避免缺陷的產生，如在半導體中的磊晶製程，但在原子的尺度上仍然有許多問題難以解決，而這些問題目前也仰賴結合物理與機器學習來探討。此外，從我們平常使用的能源到藥品，化學分離對於我們日常生活的幾乎每個方面都至關重要，這一領域在改善和優化實驗方法方面可以看到AI的變革性進步。AI的使用也將有助於應對巨大的挑戰，例如了解複雜的層次相關性，從分子尺度的相互作用到傳輸現象。量子領域的發展也使得我們所需處理的資訊量倍增如電子的結構與材料內部的電化學位能，這複雜的數據集如果能利用AI來進行控制與分析將能協助我們獲得更大的進展。因為這些能夠控制的變因以舊有的操作模式來說實在太為廣泛，AI以儼然成為彌補這一段差距的關鍵解法，目前來說教導AI的方式與決策仍為一大挑戰，但以解決大量的數據與精確控制的實驗中，AI依然是我們可尋求的最佳解決途徑之一。

AI除了在高維且複雜的大數據能有優異的表現，在微小尺度的觀測上也能有其優勢，如一些稀有發生或是時間尺度小極小的反應，在這些以低於人類所難以觀測的尺度的事件也有可能有重大的影響，如材料失效，氣相的化學副反應，AI能夠幫助我們發現這些事件，也能夠幫助我們標記這些少量且稀疏的資訊，或是儀器的準心發生偏移時，利用這些功能也能夠讓儀器自動重新校準。

簡單來說AI雖然只是一個能夠在高維度的系統擬和的工具，但善用這個工具不僅能幫助我們在大尺度的系統也能夠幫助我們在維小尺度的反應中觀測到有利於分析的事件，而為了針對這些龐大的訊息量做分析，硬體的發展也會是極大的挑戰之一。