

## 1. SDE 與材料的原子擴散關係

Applications of Diffusion Models in Material Properties Prediction

[https://journals.scholarpublishing.org/index.php/AIVP/article/view/18468?utm\\_source=chatgpt.com](https://journals.scholarpublishing.org/index.php/AIVP/article/view/18468?utm_source=chatgpt.com)

Generative diffusion model for surface structure discovery

[https://arxiv.org/html/2402.17404v1?utm\\_source=chatgpt.com](https://arxiv.org/html/2402.17404v1?utm_source=chatgpt.com)

## 2. SDE 是材料成核過程的 math tool ?

3. 將材料結構 (原子座標  $x_t$ ) 視為 SDE 的解，訓練 NN 反向學習 SDE，從  $N(0,1)$  生成物理穩定結構？

提問方向在「機器學習 + SDE 生成材料原子結構」這一塊，是已經有研究，但可能還未完全以原子座標  $x_t$  作為 SDE 解、且訓練 NN 反向學習這種流程。

Equivariant Energy-Guided SDE for Inverse Molecular Design

[https://openreview.net/forum?id=r0otLtOwYW&utm\\_source=chatgpt.com](https://openreview.net/forum?id=r0otLtOwYW&utm_source=chatgpt.com)

## 4. 如何應用 SDE / PF-ODE 模型來描述材料微結構演化？

Digital polycrystalline microstructure generation using diffusion probabilistic models

<https://www.sciencedirect.com/science/article/abs/pii/S2589152923003034>