本项目将从申请者较为熟悉的导热高分子领域切入，整合量子、全原子、粗粒化与介观等不同分辨率的工具，并结合数据库与机器学习，搭建高通量的科学软件，模拟多维度过程，探究微观机理，预测宏观性能，为功能高分子设计提供新的蓝图。能源、材料、分子动力学、软件开发、信息学与机器学习，六领域交叉融通、共性导向是本项目特征。

全球终端消耗50%的能源都与热能相关，高效利用可再生的热能，将成为克服全球性能源危机的关键，急需质轻、价廉、可塑的高分子材料作为载体。然而，高热导率纳米纤维制作成本昂贵且适用范围小，复合材料则受限于无定形高分子基底0.1-0.5 W/mK的低热导率，盐碱复合材料、共轭半结晶材料、高分子共混体等基底的实验结果，遇到高碱性、低相容性、机理争议性大等问题，无法高效有说服力地指导该方向的导热高分子材料研发。

高分子具有复杂的化学结构（聚合度、官能团、均聚物、共聚物等）与跨度巨大的原子间作用力（共价键、取向力、诱导力、分散力），通过机械拉伸、熔体浇筑、溶液共混、气相沉积等加工工艺，可制成橡胶、塑料、纤维等形态丰富的工业产品。分子动力学软件的开发，将模块化结构生成器、力场赋值、结构弛豫、动力学过程、性能计算、统计分析等功能，自动化地处理复杂官能团的建模、多变加工工艺的模拟以及多原子的大尺度计算，服务于系统性、低成本的材料设计与筛选。

高通量的计算将产生海量的数据，与信息学成果合并建立数据库，并将结构数字化、指纹化，借助无监督、有监督与强化学习，寻找规律，建立模型，在更为广阔的化学结构与时空尺度进行探索，实现低成本且高速的性能预测，进而根据需求提供备选材料，结合实验合成与表征验证，为工业过程的开发与新材料的市场化做好铺垫，既是共性导向的交叉融通，也是世界科技的热点与前沿。从2014年到2021年，以高分子与机器学习为关键词的论文年发表量增长了10倍， 足见该新兴交叉领域的前沿性与成长性。