
科学家发布材料合成大语言模型MatChat

作者：writer 来源：中国科学院

本文原地址：<https://www.iikx.com/news/progress/24777.html>

本文仅供学习交流之用，版权归原作者所有，请勿用于商业用途！

材料合成路径预测是物质科学领域的重要课题。

近年来，大语言模型的崛起以及预训练-

微调方法的应用，使得通用大语言模型的理解能力在各垂直领域展现出潜力，但在材料领域缺乏相关的应用和研究。

近期，中国科学院计算机网

络信息中心人工智能部和物理研究所SF10组合作，通过使用来自400

多万篇论文中提取的35675个无机材料固相反应合成过程，将数据处理为13878

条高可信度的合成路径描述数据，

并对开源大语言模型LLaMA2-7B进行微调训练，

研发了专注于无机材料合成

路径预测任务的大语言模型——MatChat (<http://chat.aicnic.cn/onchat>

)。目前，该模型已上线运行并开放使用。

该模型基本具备材料合成领域知识的生成和推理能力。经实验验证，该模型在预测合成复杂的无机材料时，具备超过ChatGPT

的性能表现。受限于数据集的数量和质量，该成果仍需要更多的语料以满足不同材料设计的需求，但展现出大模型在材料领域的创新潜力和应用空间，为材料研究和创新带来了新的启发和思路

。

相关研究成果发表在《中国物理B》(Chinese Physics

B)上。研究工作得到中国科学院网信专项应用示范项目的支持。

[论文链接](#)

[平台](#)

[代码](#)



How to make K₂CaMoB₂P₂O₁₃?



K₂CaMoB₂P₂O₁₃ can be made from (NH₄)₂HPO₄, K₂CO₃, CaCO₃, H₃BO₃, and MoO₃ via solid state reaction. The chemical reaction equation is $2 (NH_4)_2HPO_4 + 1 CaCO_3 + 1 H_3BO_3 + 1 K_2CO_3 + 0.5 MoO_3 == 1 K_2CaMoB_2P_2O_{13} + 2 CO_2 + 3 H_2O + 4 NH_3$. The precursors are mixed, ground in agate, heated under 600.0°C for 24.0h, cooled. The detailed recipe can be found in literature [10.1016/s0167-2738(99)00022-1].



How to make Nd₂Zn₆₀B₄₀Si₁₉O₁₆₁?



Nd₂Zn₆₀B₄₀Si₁₉O₁₆₁ can be made from SiO₂, Nd₂O₃, ZnO, and H₃BO₃ via solid state reaction. The chemical reaction equation is $40 H_3BO_3 + 19 SiO_2 + 1 Nd_2O_3 + 60 ZnO == 1 Nd_2Zn_{60}B_{40}Si_{19}O_{161} + 60 H_2O$. The precursors are mixed in agate, heated under 1000.0°C in air for 24.0h, cooled. The detailed recipe can be found in literature [10.1016/j.jssc.2005.06.002].

MatChat模型部署平台对话实例

研究团队单位：计算机网络信息中心

更多 科学进展 请访问 <https://www.iikx.com/news/progress/>

本文版权归原作者所有，请勿用于商业用途，[爱科学iikx.com](https://www.iikx.com)转发