
华东师大团队开发ECNU ? Zeoformer模型实现分子筛材料智能化制备的新突破

作者：writer 来源：科学网

本文原地址：<https://www.iikx.com/news/progress/38738.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！

华东师大团队开发
ECNU ? Zeoformer模型实现分子筛材
料智能化制备的新突破

。分子筛具有有序晶体和规则孔道结构，在石油化工、精细化学品合成以及吸附分离等领域具有重要应用价值。长期以来，新型分子筛的开发高度依赖传统试错法，不仅耗时耗力，也严重制约新材料的开发效率。尽管通过计算模拟有机结构导向剂分子结构与分子筛骨架和孔道的匹配性有助于筛选适配的有机结构导向剂，助力精准开发新型结构分子筛材料。但是，传统力学模拟对计算资源消耗巨大，难以开展大规模、高通量的有机结构导向剂筛选。近年来，人工智能驱动的材料设计合成在材料科学领域蓬勃发展，为破解上述瓶颈问题提供了全新思路与技术路径。

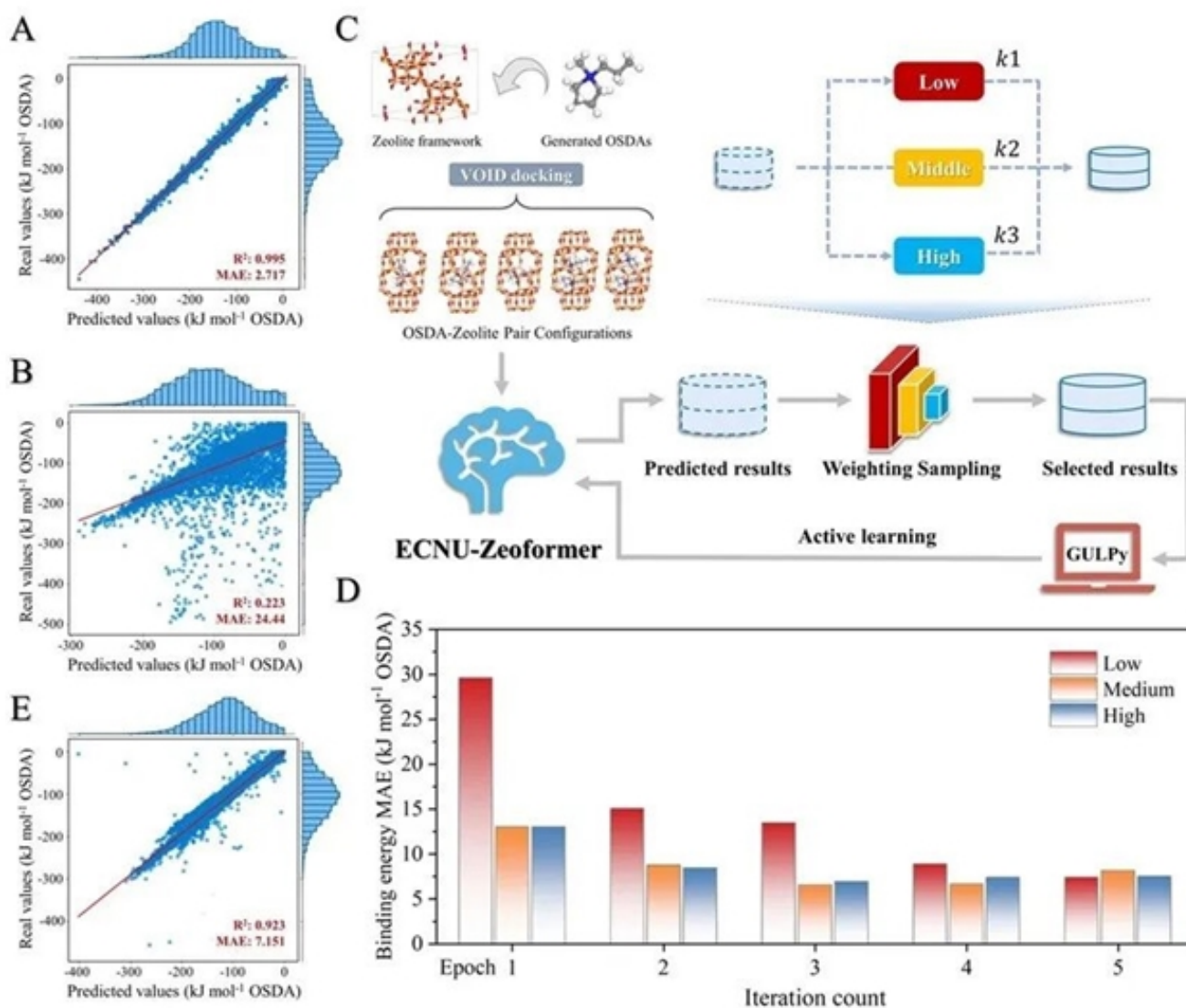


图1. ECNU-Zeoformer模型开发与强化训练。

针对传统分子筛合成依赖经验试错、计算成本高等关键问题，华东师范大学吴鹏教授、徐浩教授和何晓教授的研究团队自主开发了以华东师范大学（East China Normal University, ECNU）命名的人工智能模型ECNU-Zeoformer，可精准、高效预测有机结构导向剂与分子筛骨架之间的结合能，显著提升筛选适合设计特定分子筛结构的有机结构导向剂的速度与准确性。ECNU-Zeoformer模型依托百万级训练数据集与主动学习策略进行强化学习，能够精准识别分子间的相互作用，有效解决传统机器学习模型依赖人工描述符、泛化能力不足、难以预测全新结构等固有限制（图1）。研究团队进一步将ECNU-Zeoformer模型与中石化上海石油化工研究院杨为民院士团队的自动化高通量机器人合成系统相结合，首次通过水热合成法直接制备出ECNU-30、ECNU-34、ECNU-40三种新型层间扩孔型大孔径分子筛，与上海科技大学马延航教授团队合作解析，确认其结构与硅烷化后处理获得的一致，突破了上述扩孔结构此前仅能通过硅烷化后处理获得的瓶颈（图2）。

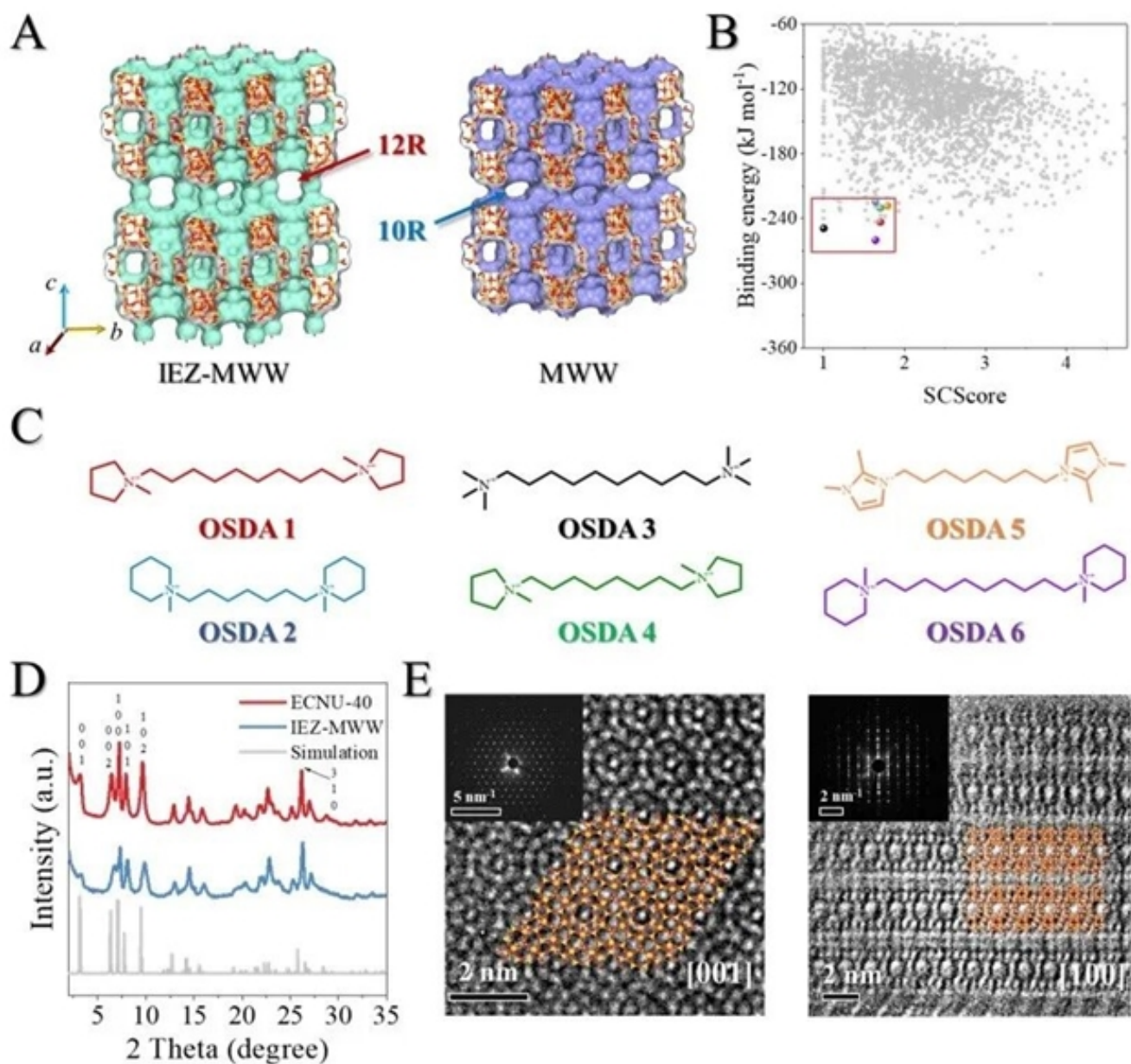


图2. ECNU-40 有机结构导向剂的人工智能筛选与晶体结构解析。

此项研究构建了兼具高精度与高效率的人工智能预测模型，首次实现机器学习与高通量合成的深度耦合，构建了分子筛按需设计—机器学习模型指导—高通量自动化合成的全链条分子筛研发模式。该研究是人工智能与分子筛材料交叉融合的重要标志性成果，不仅推动了分子筛合成从经验摸索向理性设计的跨越式转变，也为多孔材料、催化材料、能源化工材料的智能化开发提供了可复制、可推广的新范式。研究成果对于提升我国在先进催化材料与人工智能材料领域的国际竞争力具有重要科学价值与应用前景。

这一成果近期发表在国际主流化学期刊J. Am. Chem. Soc上，文章的第一作者是华东师范大学王继隆专任副研究员、万政博士后以及上海科技大学范亚奇博士。

原文（扫描二维码，识别后直达原文页面）：



Artificial Intelligence Predicted OSDAs Enable Direct Synthesis of Interlayer-Expanded Zeolites

Jilong Wang, Yaqi Fan, Zheng Wan, Xiangxiang Shen, Xinyue Zhao, Ziwen Niu, Xintong Li, Xianchen Gong, Jingang Jiang, Zhendong Wang, Yi Luo, Yejun Guan, Xian Wei, Hao Xu*, Yanhang Ma*, Xiao He*, Weimin Yang, Peng Wu*

J. Am. Chem. Soc., 2026, DOI: 10.1021/jacs.5c22724

研究团队介绍



吴鹏，华东师范大学教授，博士生导师。主要从事分子筛多相催化材料及其绿色催化化学反应过程的研究，研究兴趣包括烃类选择氧化催化剂的设计合成和环境友好过程的研发。曾获国家自然科学基金委杰出青年项目资助，入选教育部长江学者、新世纪百千万人才工程国家级人选、教育部新世纪优秀人才、上海市东方学者、浦江人才、优秀学科带头人、上海市领军人才等专项计划。2001至2004年先后获得日本新化学发展协会、日本石油学会以及日本触媒学会青年人奖3项个人奖励；2007年获上海市市科学技术奖；2015年获中国石油与化工联合会发明一等奖，2024年度上海市技术发明一等奖。

<https://www.x-mol.com/university/faculty/10540>



徐浩，华东师范大学教授，博士生导师。研究方向为新型分子筛催化材料的设计合成及其催化应用研究。以第一作者/通讯作者身份在相关国际主流化学、催化和材料期刊发表SCI论文70余篇，包括Nat. Catal., Nat. Synth., J. Am. Chem. Soc., Angew. Chem. Int. Ed., ACS Catal., Catal. Rev., Natl. Sci. Rev.等，获得专利授权7项；参与编写5部专著专章。2019年获得中国分子筛新秀奖，2022年获得国家自然科学基金优秀青年项目资助。

<https://www.x-mol.com/university/faculty/385111>



何晓，华东师范大学教授，博士生导师。研究领域为理论与计算化学，研究方向包括量子分块方法和密度泛函方法的发展，以及深度学习在化学领域中的应用。发展的方法主要应用于复杂大分子和凝聚态体系的高精度模拟，分子理性设计等。在Nat. Comput. Sci.、PNAS、Sci. Adv.、Nat. Commun.、J. Am. Chem. Soc.、Angew. Chem. Int. Ed.等重要学术期刊发表SCI论文160余篇。获得教育部长江学者特聘教授（2023）、国家优秀青年科学基金项目（2019）、中国化学会唐敖庆理论化学青年奖。

<https://www.x-mol.com/university/faculty/172473>



马延航，上海科技大学研究员，博士生导师。2011年获上海交通大学应用化学学士学位，2016年获斯德哥尔摩大学材料与环境化学博士学位，同年入职上海科技大学。主要从事晶态多孔材料（沸石、MOF、COF、HOF等）和手性纳米材料等研究，利用三维电子衍射和原子级高分辨电镜成像等解析物质晶体结构，深入理解材料生长机理和作用机制。主要研究内容包括：开发电子显微学新方法，包括新概念和理论的提出和实践，以及与人工智能的结合；基于电子晶体学方法对材料的晶体结构（包括手性结构）等进行解析；功能化分子筛的合成、表征与应用，结合先进表征手段和原位电镜来解释分子筛的生长和催化机理。已在Science、Nature、Nat. Mater.等期刊发表论文80余篇，主持国家优青/面上项目等。

特别声明：本文转载仅仅是出于传播信息的需要，并不意味着代表本网站观点或证实其内容的真实性；如其他媒体、网站或个人从本网站转载使用，须保留本网站注明的“来源”，并自负版权等法律责任；作者如果不希望被转载或者联系转载稿费事宜，请与我们联系。

来源：J. Am. Chem. Soc

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](http://www.iikx.com)转发