AS 华南师范赵纪军课题组：图神经网络实现单重态裂分有机分子高效筛选

作者：writer 来源：科学网

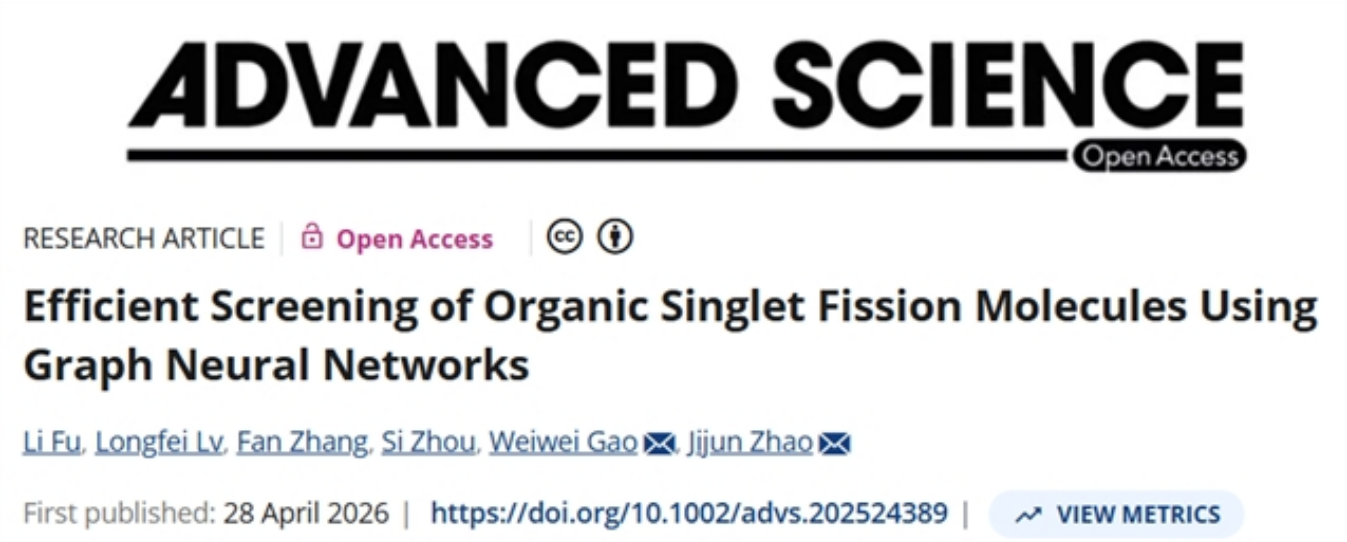
本文原地址：https://www.iikx.com/news/progress/41373.html

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！

AS 华南师范赵纪军课题组：图神经网络实现单重态裂分有机分子高效筛选。

研究背景：

单重态裂分（Singlet Fission, SF）是一种独特的光物理过程：当一个分子吸收光子产生高能单重态后，可裂分为两个低能三重态。这一过程有望突破传统太阳能电池的Shockley-Queisser效率限制，在高效光伏器件中具有重要应用潜力。然而，已知的SF分子数量有限，且面临着稳定性差、合成困难或转换效率低等现实瓶颈。另一方面，传统的理论筛选依赖高精度的量子化学计算（如TD-DFT或GW-BSE方法）来评估ES1、ET1、ET2等关键激发能信息。这些方法虽然结果可靠，但计算耗时，难以遍历庞大的有机分子化学空间。因此，开发兼顾计算速度与准确度的筛选策略，是当前寻找高效SF材料的关键。

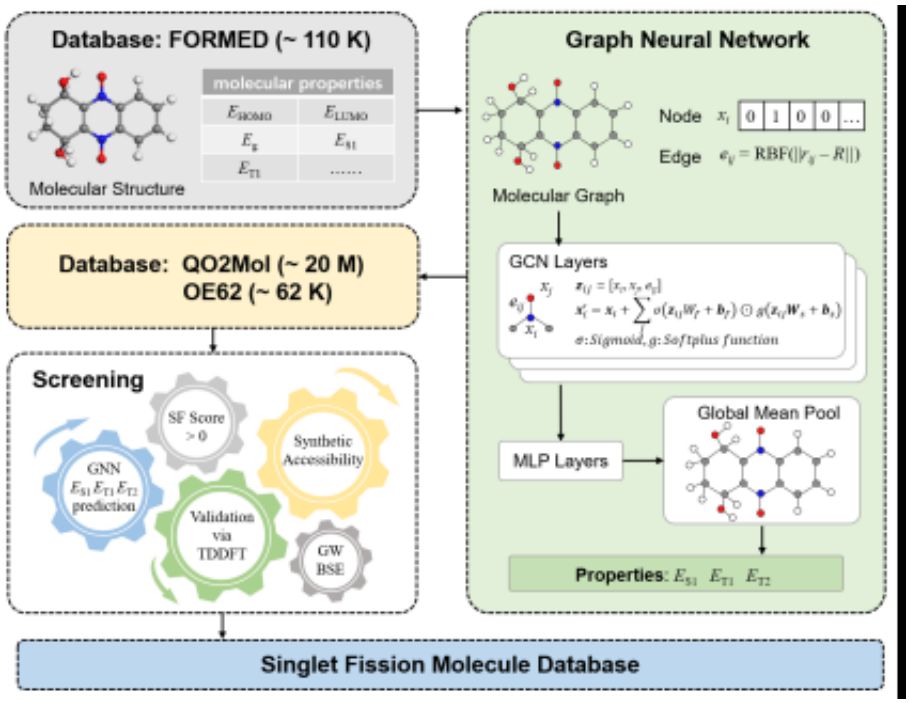


文章概述：

近日，华南师范大学赵纪军教授团队报道了一种结合图神经网络（GNN）和多层级计算验证的

有机单重态裂分分子高通量筛选框架。研究团队首先训练GNN模型，实现对EHL（HOMO-LUMO能隙）以及ES1、ET1、ET2激发能的快速预测。随后，该模型被用于OE62和QO2Mol数据库中超过2000万个有机分子的筛选。通过能级匹配筛选，研究团队在TD-DFT水平下识别出180个潜在SF分子。进一步，利用DeepSA模型评估分子的可合成性后，筛选得到79个较易合成的候选分子，并最终通过GW-BSE方法进行了更高精度的验证。该研究不仅提供了一批值得实验探索验证的有机SF分子候选结构，也展示了机器学习方法以激发能能级为目标的功能材料设计中应用潜力。相关结果发表在 Advanced Science 上。

图文导读：



该研究提出了一种面向有机单重态裂分分子的机器学习辅助高通量筛选策略。通过GNN模型快速预测激发态能级，并结合TD-DFT、GW-BSE和可合成性预测等多层级验证，研究团队从千万级有机分子中筛选出一系列潜在SF分子。该工作显著降低了传统激发态计算的筛选成本，为单重态裂分材料的发现提供了新的候选分子库和研究范式，也为荧光、磷光、三重态湮灭和热激活延迟荧光等其他功能材料的智能筛选提供了参考。

该项目研究获得国家自然科学基金（12534012、12474221、12474168）资助，谨此感谢。

论文信息：

Efficient Screening of Organic Singlet Fission Molecules Using Graph Neural Networks

Li Fu, Longfei Lv, Fan Zhang, Si Zhou, Weiwei Gao*, Jijun Zhao*

Advanced Science

DOI:10.1002/advs.202524389

原文链接：

https://doi.org/10.1002/advs.202524389

期刊介绍：



Advanced Science 是 Wiley旗舰期刊 Advanced 系列中的一种完全开放获取的跨学科科学期刊，发表材料科学、物理、化学、医学、生命科学、环境科学、工程和社会科学等领域的前沿基础和应用研究。我们的使命是通过开放获取出版，使前沿创新的科学研究具有更广泛的可访问性。Wiley 的 Advanced 系列是全球公认的高影响力期刊系列，传播来自资深和青年研究人员的科学成果，帮助他们实现使命并扩大科学发现的影响力。

Advanced Science 2025年影响因子为14.1，五年平均影响因子为15.6，期刊引文指标1.74，CiteScore 为 18.1。在 2025年中国科学院院文献情报中心期刊分区表中，Advanced Science

入选综合类期刊一区TOP。



来源：Advanced Science

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转发