固态储氢智能设计新图景：趋势、挑战与机器学习突破

作者：writer 来源：科学网

本文原地址：https://www.iikx.com/news/progress/41543.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！

固态储氢智能设计新图景：趋势、挑战与机器学习突破。固态储氢因安全、高容量、可逆等优势，被公认为氢能规模化利用的重要方向，但其发展仍受热力学、动力学与结构等复杂的约束限制。华北电力大学杨维结团队在Eng. Chem.
Eng.发表综述指出，大数据与机器学习正重塑固态储氢研究范式。首先，基于Digital Hydrogen?S平台的数据分析，明确了材料发展趋势与核心瓶颈，发现现有材料在储氢容量、工作温区、压力等关键指标上普遍未达到美国能源部（DOE）目标。其次，数据驱动方法可显著加速性能预测、高通量筛选与逆向设计，与高通量计算、实验验证结合正形成智能闭环研发体系。最后，神经网络势函数（neural network potentials, NNPs）能以接近第一性原理的精度描述氢的吸附、解离与扩散，但仍面临长程相互作用与模型泛化性挑战。展望未来，构建开放多模态数据库（数值、文本、谱图、图像）、研发多模态大模型、推进逆向设计、建立可描述完整吸放氢循环的通用神经网络势函数，是实现固态储氢材料智能化、实用化开发的关键路径。

综述亮点

聚焦固态储氢智能设计的三大关键方向

Digital Hydrogen-S平台揭示材料发展趋势与DOE目标差距

该平台整合1000余篇文献、3000余种材料、超25.4万条记录，覆盖Mg基氢化物、AB5合金、高熵合金、硼氢化物、MOFs等十大类储氢材料。经K-means聚类分析，现有材料与美国能源部（DOE）车载储氢目标（储氢量5.5~6.5wt%、输送温度－40~85°C、输送压力5~12bar）存在系统性差距：V-Ti-Cr合金储氢容量不足，Mg-RE-Ni合金工作温度过高，Ti-Fe/Ti-Mn合金工作压力超标，同时数据分布不均衡引发分布外（OOD）问题，导致机器学习模型在数据稀疏区域的预测可靠性大幅下降。

机器学习推动从性能预测到逆向设计的突破

将SVM、RF、GBDT、GNN等算法应用于储氢容量预测，部分研究中决定系数R2可达0.98，计算速度较第一性原理计算提升3~4个数量级。逆向设计成为核心突破点：FIND平台采用变分自编码器实现 性能→成分 的反向映射，发掘出27种Mg-Ni-La-Ce候选合金；生成对抗网络（GAN）成功设计了二维MgH2新材料，结构验证率达96.8%。此外，高熵合金的帕累托前沿优化、MOFs材料高通量筛选与实验验证（V基MOF储氢量达9.0wt%），标志着机器学习正从 性能预测向材料创造

延伸。进一步，Cat-Advisor平台将大语言模型、文献数据自动提取、机器学习预测和遗传算法逆向设计相结合，面向 MgH2脱氢催化剂实现了从文献挖掘、性能预测到候选催化剂推荐的智能化流程。该类LLM-to-Agent框架表明，固态储氢材料研究正在从单一模型预测走向数据驱动和多智能体协同的智能设计平台。

神经网络势（NNPs）深入解析储氢微观机制

NNP以密度泛函理论（DFT）数据训练，兼具近第一性原理精度与低计算成本的优势。E(3)等变神经网络可精准预测H2在Cu多晶面的解离吸附过程；Behler-Parrinello型NNP完整揭示了MgH2(110) 表面脱氢序列，即亚表面分子氢形成、滞留、迁移至最终脱附的完整过程。

结论与展望

当前领域已构建 高通量计算-机器学习预测-实验验证-数据反馈 的研发闭环，LLM-to-Agent 框架将文献挖掘效率提升40倍，但仍面临数据库规模不足、模型可解释性差、逆向设计能力薄弱、NNP迁移性受限等核心挑战。未来研究需聚焦四大方向：搭建开放共享的多模态数据库，研发融合实验、计算与数据驱动的多模态基础模型，深化材料逆向设计研究，构建可覆盖完整吸放氢循环的通用神经网络势，推动固态储氢材料从实验室研究加速走向工程化应用。（来源：EngineeringJournals微信公众号）

相关论文信息：https://journal.hep.com.cn/fcse/EN/10.1007/s11705-026-2649-3

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等事宜，请与我们接洽。
作者：杨维结等 来源：《工程 · 化学工程》

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