
四川大学赵焱教授团队——从解释机理到筛选材料：理论计算与AI如何帮助固态电解质研发 MDPI Nanomaterials

作者：writer 来源：科学网

本文原地址：<https://www.iikx.com/news/progress/41840.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！

四川大学赵焱教授团队——从解释机理到筛选材料：理论计算与AI如何帮助固态电解质研发 MDPI Nanomaterials。论文标题：Recent Applications of Theoretical Calculations and Artificial Intelligence in Solid-State Electrolyte Research: A Review

论文链接：<https://www.mdpi.com/2079-4991/15/3/225>

期刊名：Nanomaterials

期刊主页：<https://www.mdpi.com/journal/nanomaterials>

导语

全固态电池以固态电解质替代易燃有机电解液，有望兼顾安全性与高能量密度。然而，固态电解质必须同时满足高离子电导率、低电子电导率和界面稳定性，材料设计涉及复杂的组成与结构空间。

四川大学与武汉理工大学研究团队发表于 Nanomaterials 的综述，系统总结了理论计算和人工智能在该领域的应用：DFT与MD用于解析结构和离子传输机制，机器学习用于快速预测，高通量筛选则将二者组织为机器学习初筛—DFT复核—实验验证的研发流程。

研究过程与结果

1. 理论计算揭示固态电解质离子输运机制

实验能够测量离子电导率，却难以直接观察锂离子的微观迁移。DFT可计算晶体结构、电子性质和迁移能垒，MD则通过原子运动轨迹判断锂离子能否形成长程扩散，二者共同建立结构与离子迁移性能之间的联系。

以氧掺杂硫化物电解质为例，DFT计算表明，Li₇P₃S₁₁中锂离子的迁移能垒为0.31 eV；部分硫被氧取代后，Li₇P₃S_{10.25}O_{0.75}的能垒降至0.20 eV。MD进一步显示，氧掺杂后锂离子

由局部振动转为长程扩散，说明掺杂通过降低迁移阻力改善了离子迁移性能。

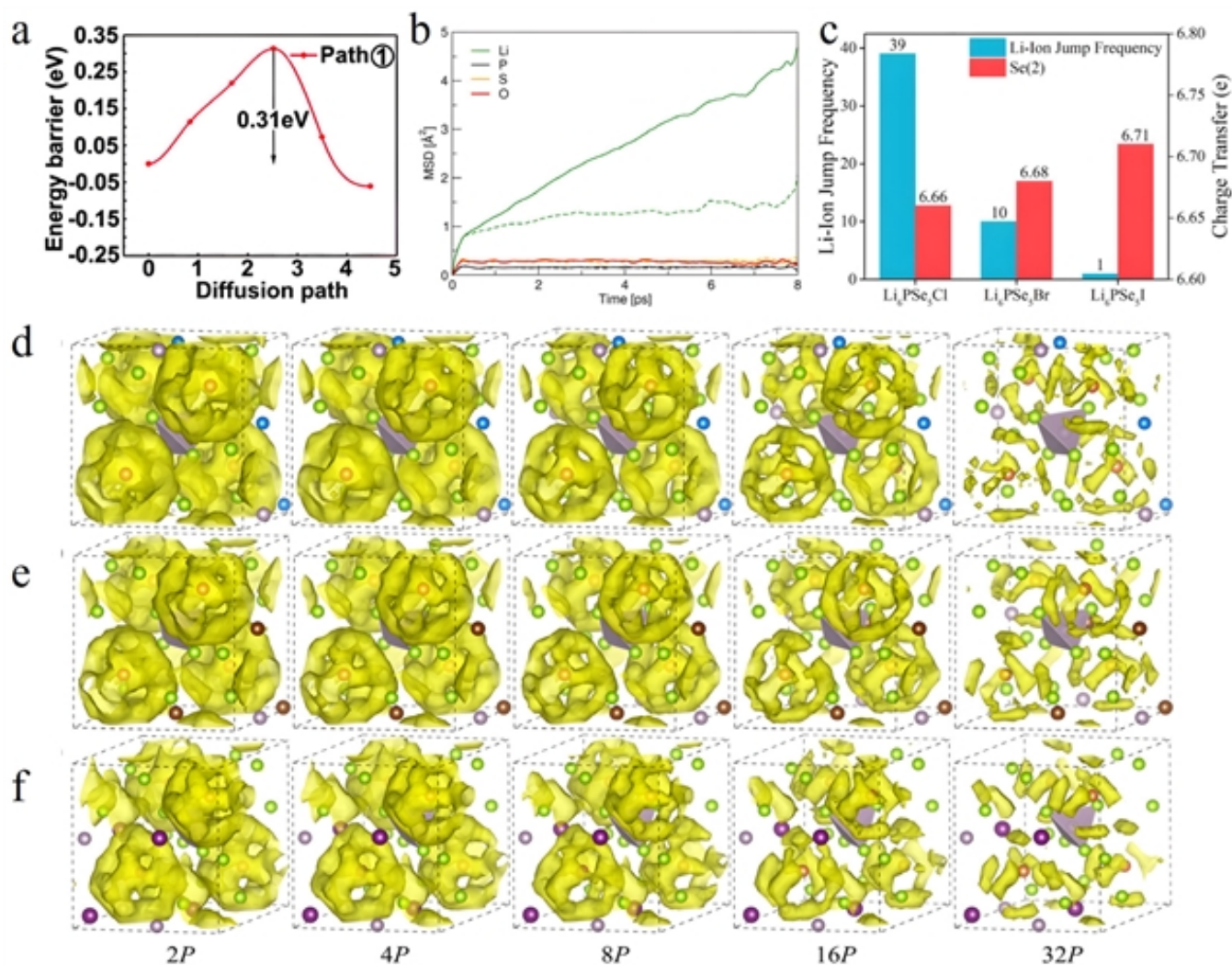


图1. 理论计算表征锂离子输运。(a) Li₇P₃S₁₁的迁移能垒；(b) 均方位移曲线；(c) 不同Li₆PSe₅X的笼间跳跃；(d-f) 锂离子扩散区域。对应原文Figure 3。

2. 人工智能辅助固态电解质性能预测与候选筛选

面对数万种候选材料，逐一开展高精度计算仍然耗时。机器学习可从已有材料的组成、结构和离子电导率数据中学习规律，预测未测试材料的性能，从而提前排除低潜力候选。

一项研究利用4826个离子电导率数据点和109项材料特征训练随机森林模型，并从约3万种化合物中筛出67种高离子电导率Li-S候选。针对掺杂LLZO的模型还识别出相对密度和掺杂元素电负性等关键因素，为实验参数选择提供依据。

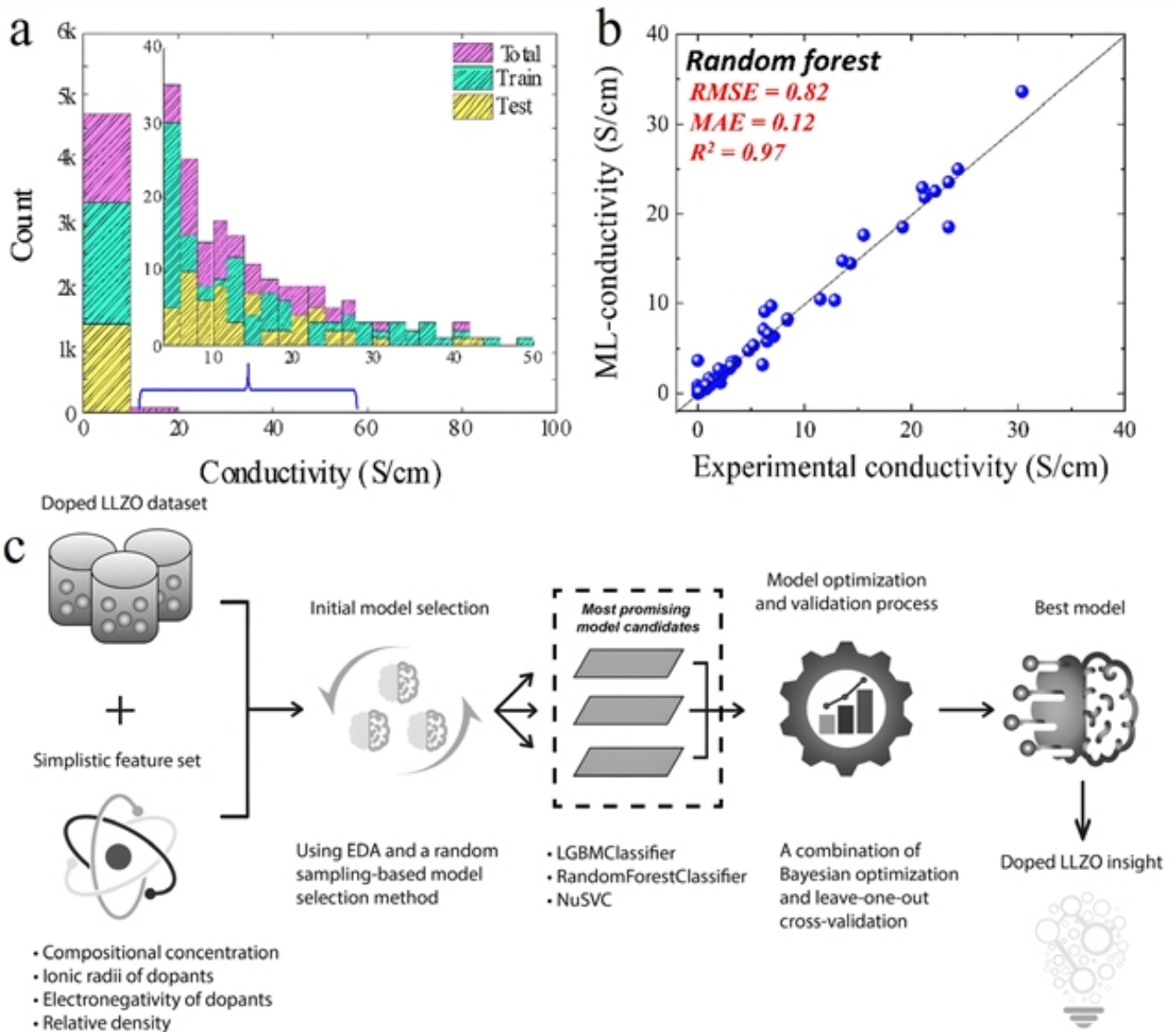


图2. 机器学习筛选流程。(a) 数据集划分；(b) 预测值与实验值对比；(c) 掺杂LLZO的模型训练与验证。对应原文Figure 4。

3. 基于DFT和机器学习的高通量筛选

高通量筛选并非独立方法，而是DFT与机器学习的分层组合：机器学习低成本预测相稳定性、带隙和离子扩散能力，快速缩小范围；DFT再复核能量稳定性等关键指标，以兼顾筛选效率与结果精度。

Chen团队从32,598,079个候选结构出发，经机器学习稳定性预测获得589,609种材料；加入组成和电子性质条件后降至771种，DFT复核后保留583种，再经离子扩散和应用条件筛选，最终得到18种新的固态电解质候选。

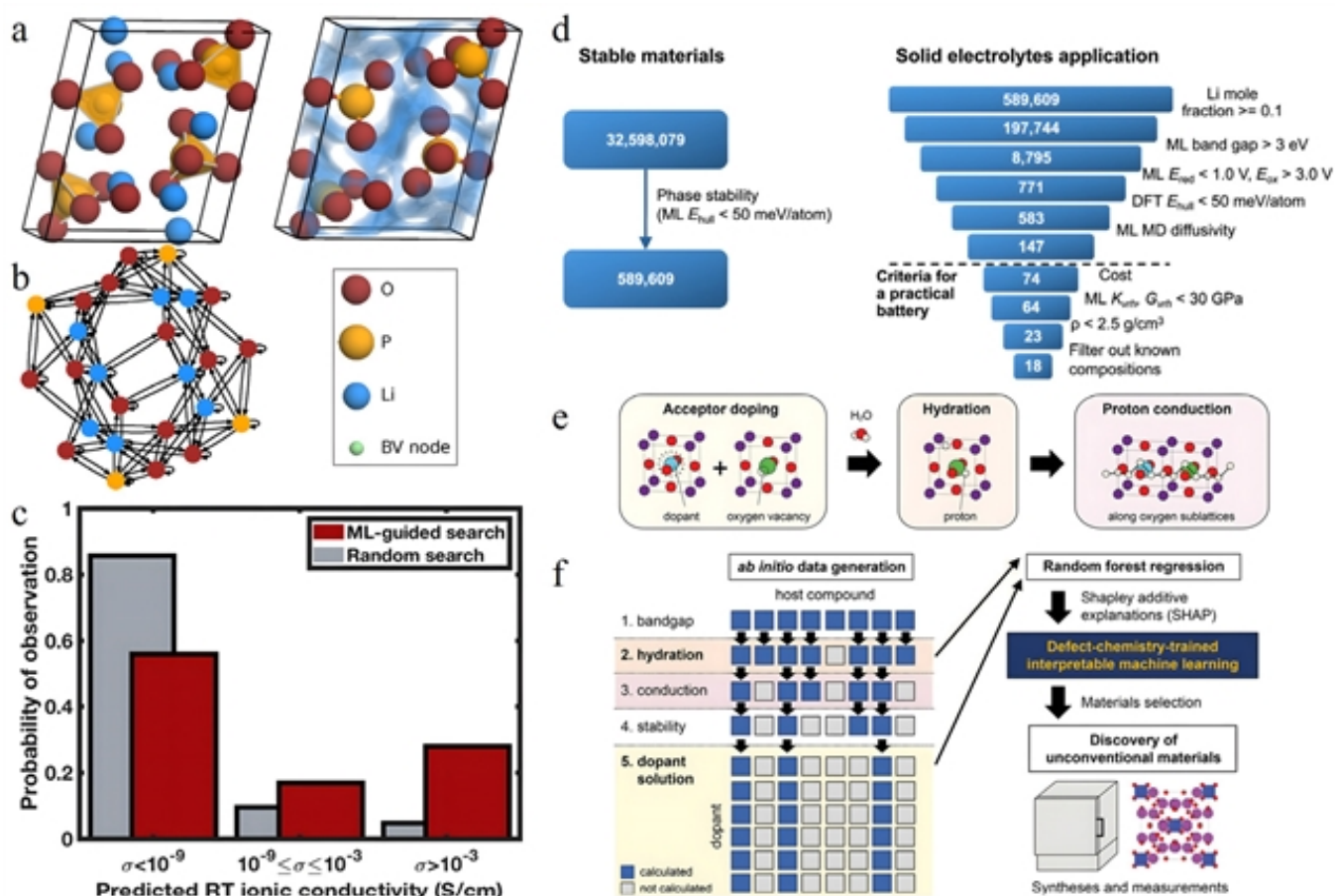


图3. DFT与机器学习协同筛选。(a, b) $\text{Li}_4\text{P}_2\text{O}_7$ 的图结构；(c) 机器学习引导搜索；(d) 分层筛选流程；(e, f) 缺陷化学辅助的质子导体筛选。对应原文Figure 7。

研究总结

综述形成了由机理分析到材料发现的完整路线：DFT和MD解释离子运输，机器学习缩小候选范围，高通量流程再分层调用两类方法。DFT与机器学习是核心工具，高通量筛选是二者的组织方式。

计算与AI仍依赖标准化数据和实验验证。它们更适合确定研究优先级，而非替代材料制备与电池测试。随着预测和实验反馈持续互补，固态电解质研发有望进一步提速。

作者简介

第一作者

姓名：吴明威

机构：四川大学材料科学与工程学院

研究方向：固态电解质、全固态电池、离子运输机制及理论计算与人工智能辅助材料设计。

共同作者

姓名：魏征

机构：武汉理工大学材料科学与工程国际化示范学院

研究方向：计算材料学及数据驱动的材料研究。

通讯作者

姓名：赵焱

机构：四川大学材料科学与工程学院

研究方向：储能材料、固态电解质及电池材料的理论与计算研究。

简介：赵焱，四川大学海纳特聘教授，二级教授，博导，国家千人计划特聘专家，四川省天府峨眉计划专家，湖北省百人计划专家，长期从事理论计算化学和计算材料学等领域的研究工作，在高精确度理论化学数据库的发展、新一代密度泛函的开发和应用(其发展的M06密度泛函方法被10位诺贝尔奖获得者使用，有200多篇Nature和Science及其子刊论文采用该方法)、新能源材料、纳米材料的模拟、计算催化、AI材料设计、计算化学软件开发以及3D打印等领域做出了突出贡献。赵焱教授发表SCI论文300余篇，总引用超过7万次，其中M06论文单篇引用达3万次，H指数为92。2014至2017年连续4年入选全球高被引科学家名单，2025年再次入选科睿唯安全球高被引科学家；2022至2025年连续4年入选爱思唯尔中国高被引学者名单。赵焱教授是美国惠普公司MJF-3D打印技术的主创人员之一，授权国际专利25项，在3D打印与材料智造领域贡献突出。担任Energy Environmental Materials 副主编，Interdisciplinary Materials 学术主编，Nanomaterials 编委，《武汉大学学报(工学版)》编委。

通讯作者

姓名：何秋

机构：四川大学材料科学与工程学院

研究方向：电池材料理论计算，以及人工智能辅助材料研究。

Nanomaterials 期刊介绍

主编：Eugenia Valsami-Jones, University of Birmingham, UK

期刊聚焦纳米材料科学领域的研究，旨在发表纳米材料制备、表征和应用各个方面的研究。目前期刊已被Scopus、SCIE (Web of Science)、PubMed、PMC、Embase、CAPlus / SciFinder、Inspec等数据库收录。

2025 Impact Factor: 4.8

2025 CiteScore: 10.3

Time to First Decision: 12.5 Days

Acceptance to Publication: 2.7 Days

来源：Nanomaterials

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