



功能材料的生成式设计：MatterGen 的突破与展望

/ 327页

传统材料发现方法，如实验试错和高通量筛选，受限于数据库的规模，难以高效探索广阔的化学空间。生成式人工智能（AI）正在材料科学领域引发深刻变革，为功能材料的逆向设计提供全新范式。本文聚焦于近期发表于*Nature*的里程碑工作—MatterGen生成模型，系统介绍其如何通过扩散模型实现无机晶体材料的原子类型、坐标和晶格参数的稳定、可控联合生成，通过解析MatterGen的技术原理、性能优势及实验验证，阐述生成式模型如何推动材料设计从“筛选”走向“创造”，并展望该技术面临的挑战与未来发展趋势。

(马凤凯, 张裕祥, 李真, 张晨波, 陈振强, 徐军, 苏良碧)

人工
晶体
学报

人工晶体学报

JOURNAL OF SYNTHETIC CRYSTALS

2026年3月 第55卷 第3期 Vol.55 No.3

欢迎赐稿 欢迎订阅

《人工晶体学报》创刊于1972年，月刊，是我国人工合成晶体领域唯一的专业性学术期刊。《人工晶体学报》特设综合评述、研究快报、研究论文、简讯等栏目，专业报道我国在人工合成晶体材料、低维晶态材料、人工微结构材料、生物医药结晶等领域在基础理论、合成与生长、结构与性能表征、器件组装、原料合成及装备制造等方面的研究进展与应用开发成果，同时介绍国内外相关方向的发展动态和学术交流活动等。《人工晶体学报》是中文核心期刊、中国科技核心期刊，国内被《中国学术期刊(光盘版)》、万方、维普、超星等数据库收录，国外被美国《化学文摘》(CA)、荷兰SCOPUS、美国EBSCO、日本科学技术振兴机构(JST)等数据库收录。热忱欢迎人工晶体领域的各位专家学者踊跃投稿，投稿网址：<http://rgjtxb.jtxb.cn>。

《人工晶体学报》为月刊，大十六开，每册单价80元，全年定价960元。国内外公开发售，竭诚欢迎广大读者及单位订阅，国内邮发代号80-824，国外邮发代号BM7928。也可向编辑部直接征订，电话：010-65493320（杨老师），E-mail：jtxbbjb@126.com，微信号：jtxb418。

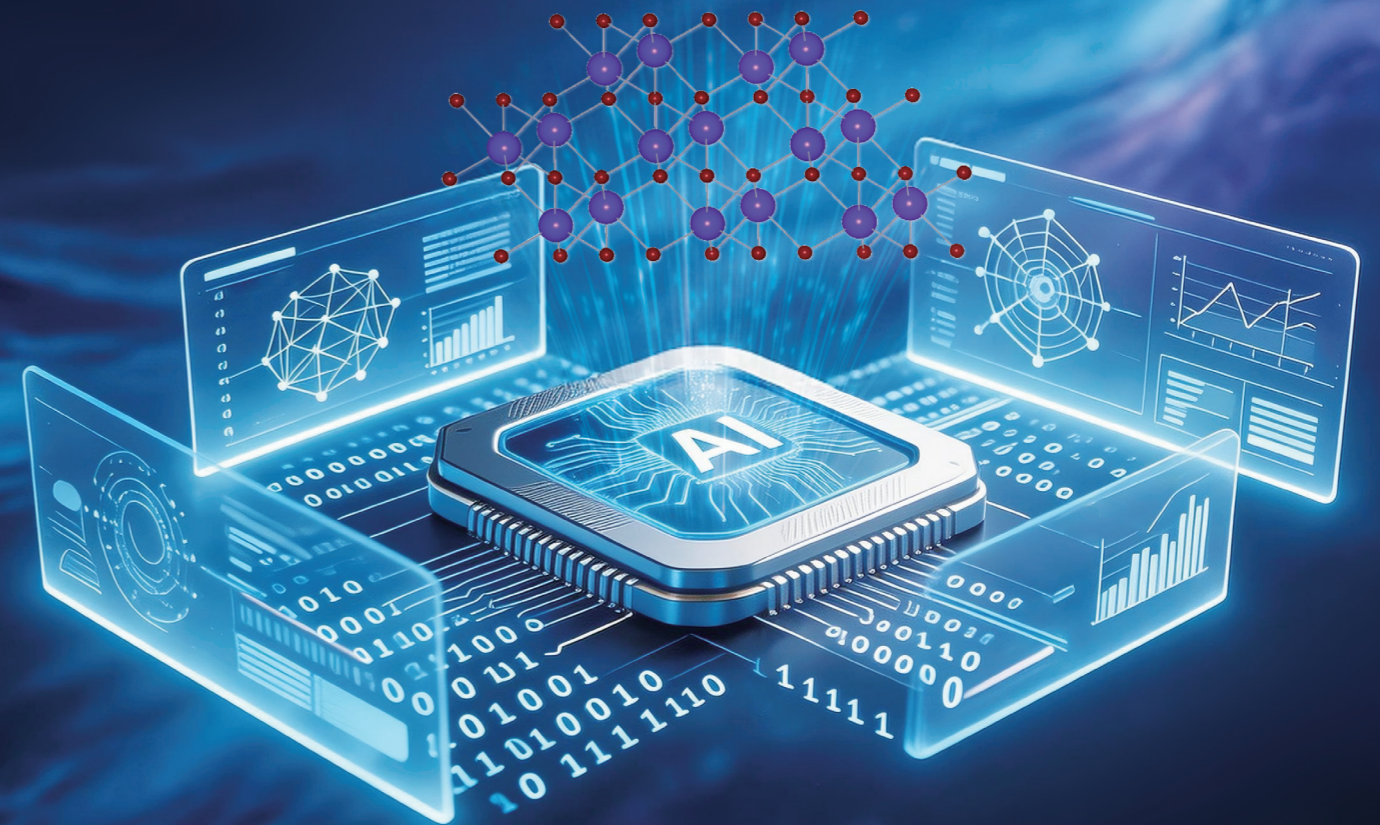
声明：《人工晶体学报》已加入“中国知网”优先数字出版，部分已经录用的论文将于期刊印刷出版前在“中国知网”(www.cnki.net)在线优先发布。如果作者不同意优先出版，可在投稿时向编辑部提供的“版权转让协议”后补充说明。

第五十五卷

第三期

二〇二六年三月

专论——功能材料的生成式设计：MatterGen 的突破与展望



《人工晶体学报》讲好中国晶体的故事

卤化亚汞晶体及其在红外偏光/声光
与核辐射探测器件中的应用

金刚石n型掺杂研究进展与展望

低温生长高质量MAPbI₃钙钛矿单晶
及其光电探测性能

主办：中材人工晶体研究院有限公司