

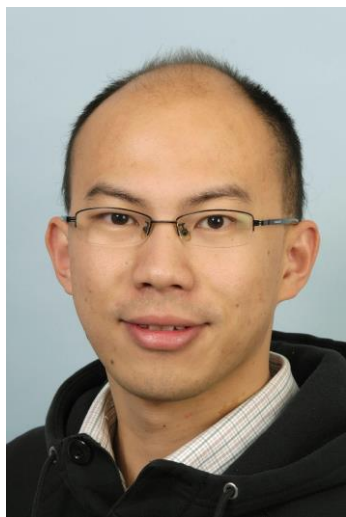


### Weekly Seminar

## CrystalFormer

王磊

中科院物理所



**Time: 3:00 pm, May. 8, 2024 (Wednesday)**

**时间: 2024年5月8日 (周三) 下午3:00**

**Venue: Room w563, Physics building, Peking University**

**地点: 北京大学物理楼, 西563会议室**

**直播链接: <https://www.koushare.com/live/details/34124>**

#### Abstract

大自然偏爱对称的晶体结构。晶体空间群量化了自然的这种归纳偏置，从而显著简化了晶体材料的可能空间。CrystalFormer是一种融合了空间群对称性和自回归Transformer的晶体生成模型。它压缩内化已知的晶体材料数据库，以神经网络参数表达固体化学知识；以神经网络激活反映材料空间的联想能力；以概率模型似然函数描述化学直觉。和用于文本、图片和视频生成的人工智能模型一样，CrystalFormer可以直接生成“以假乱真”的晶体材料。但不同的是，晶体材料真的有可能被合成出来，并且对人类文明有用。

考虑到空间群对称性，晶体有一种“意料之外，情理之中”的序列化离散表示。这源于自然界中的两张表格：量子力学所确定的元素周期表和群论所确定的230个空间群的Wyckoff位置表。为了构建某种晶体，我们只需要从元素周期表中挑选原子，并把它们依次放入Wyckoff位置中。CrystalFormer利用自回归Transformer学习这种晶体语言，从而探索自然界中可以存在，但还没被发现的晶体材料。

#### About the speaker

王磊2006年本科毕业于南京大学，2011年在中国科学院物理研究所获得博士学位，此后在苏黎世联邦理工学院从事计算量子物理的博士后研究，2016年加入中科院物理所工作。主要研究方向是机器学习与量子多体计算的交叉领域。



扫码观看蔻享直播

Host: 宋志达 <[songzd@pku.edu.cn](mailto:songzd@pku.edu.cn)>