

湖南师范大学研究生院

院通〔2026〕23号

关于开设湖南师范大学 2026 年微型课程 《人工智能驱动化学研究》的通知

各相关学院：

为深化研究生课程建设改革，拓宽研究生知识面，优化研究生知识结构，提高研究生培养质量，经学院申请、研究生院审核，拟开设微型课程《人工智能驱动化学研究》，现将相关工作通知如下：

一、课程介绍

通过该课程的学习，使学生全面了解人工智能在化学化工领域的研究前沿，使学生能够进行相关理论模拟的计算，实实在在为提升自己的科研水平扩展更多的研究和分析手段。为同学们完善知识结构、培养创新思维以及从事相关领域研究打下重要基础。

二、开课时间及开课地点

开课时间：2026年4月20日-5月20日

开课地点：化学化工学院达嘉维康报告厅

三、授课对象

化学化工及相关专业研究生，化学浩青班本科生

四、课程考核与学分

课程考核按普通课程要求进行，考核合格，可计1学分，

可兑换培养计划内任意选修课学分。每位学生计入培养计划的微型课程总学分数原则上不超过 2 学分。

五、报名要求及流程

1. 报名要求及起止时间

微型课程网上报名学生需满足以下要求：

- (1) 本校研究生；
- (2) 学生本学期已完成学期注册并通过院系审核；
- (3) 学生必须已提交培养计划并通过导师审核；
- (4) 报名起止时间为 2026 年 4 月 16 日-4 月 26 日。

2. 操作流程详见附件 4

六、其它

1. “研究生微型课程”是我校研究生课程教学改革的重要举措，开课学院应高度重视该项工作，将课程开课情况及时通知研究生，并积极组织研究生选修微型课程。

2. 开课学院应指派专人负责微型课程的管理，做好接受报名、课程安排、教学管理和成绩录入等工作。微型课程结束后需提交课程总结一份，具体内容参考附件 5。

3. 研究生选修微型课程后，应服从开设课程学院管理人员和任课教师的管理，全程认真参与课程授课，自觉遵守教学纪律和考核纪律。

附件：1.主讲教师简介

2.课程实施方案

3.课程教学大纲

4.网上选课操作流程

5.课程总结材料清单



附件 1

主讲教师简介

刘智攀，中国化学会会士，复旦大学化学系特聘教授、博士生导师。主要从事理论计算方法发展及理论计算在材料、催化等领域的应用。2008 年获得国家杰出青年科学基金资助；2012 年入选中组部首届国家高层次人才特殊支持计划青年拔尖人才；2013 年入选教育部长江学者奖励计划；2018 年入选科技部 2017 年度中青年科技创新领军人才。担任美国化学会物理化学期刊《J. Phys. Chem. A/B/C》高级主编；《科学通报》《中国科学化学》期刊编委；中国化学会理论化学专业委员会委员；物质计算科学教育部重点实验室副主任。

江俊，中国科学技术大学化学与材料科学学院教授、博士生导师，主要致力于理论化学与人工智能交叉领域研究，是数据智能驱动的“机器化学家”平台的核心发明人。2013 年获科技部青年 973 项目负责人（2018 年获结题优秀），2015 年获唐敖庆青年理论化学家奖，2017 年获安徽省青年科技奖，2020 年获国家杰出青年科学基金资助，同年获日本化学会亚洲杰出讲座奖（人工智能在理论化学中的应用），2025 年获中国科学院科苑名匠称号。在《自然·能源》《美国化学会志》等期刊发表论文 150 余篇，获发明专利 10 余项，主持开发 6 个计算软件包应用于国内外研究机构。2014 年提出“机器化学家”概念，2022 年成功研制数据智能驱动

的“全流程机器化学家”平台，实现材料研发效率提升。担任《中国科学-化学》等期刊青年编委。

刘畅：北京中关村学院首席研究员，此前曾任职于 Microsoft Research。2014 年获清华大学物理系学士学位，2017 年至 2018 年赴杜克大学 Lawrence Carin 教授课题组做访问学者，2019 年于清华大学计算机科学与技术系获得博士学位。刘博士研究方向集中于机器学习领域，包括采样方法、生成模型以及面向分子科学问题的人工智能方法，担任过 ICML、NeurIPS、ICLR 人工智能会议的区域主席，并在 ICML、NeurIPS、ICLR、Nature 子刊等顶级国际学术期刊上发表了近 50 篇学术论文，单篇成果多次被机器学习领域权威综述引用。授课中将回顾那些促进 AI 技术设计并提高其准确性和泛化性的科学概念，以及那些通过学习计算模型来实现科学概念识别、发现和构建的 AI 技术，包括因果表征、符号回归和物理机制发现。

附件 2

课程实施方案

课程目的：通过该课程的学习，使学生全面了解人工智能在化学化工领域的研究前沿，使学生能够进行相关理论模拟的计算，实实在在为提升自己的科研水平扩展更多的研究和分析手段。为同学们完善知识结构、培养创新思维以及从事相关领域研究打下重要基础。

课程内容：本课程围绕四大核心模块系统展开。第一讲聚焦人工智能在理论建模中的应用，重点讲解催化、动力学、反应机理等模型构建方法，提升学生建模能力。第二讲详解 LASP 程序的实际应用，围绕有机高分子光电功能材料设计、凝聚态结构与性能关联、光电器件应用展开实操教学。第三讲介绍机器学习核心原理，并结合化学领域真实案例，展示其在科研分析中的实用价值，夯实学科交叉基础。第四讲理实交融的机器化学家，梳理人工智能与理论计算化学的融合发展脉络，讲解理论计算化学现状、实验应用及二者协同关系。

课程以结构化学、有机化学、物理化学为预修基础，注重理论前沿与实践应用结合，帮助学生掌握 AI 驱动的化学计算模拟方法，拓展科研分析手段，为后续开展化学化工领域研究筑牢根基。

教学计划：

| 序号 | 课程内容 | 课堂讲课 | 实践 | 课堂讨论 | 课外自学 |
|----|-------------------|------|----|------|------|
| | | 学时 | 学时 | 学时 | 学时 |
| 1 | 第一讲 机器学习在理论建模上的应用 | 4 | | 1 | |
| 2 | 第二讲 LASP 程序的强大应用 | 4 | | 1 | |
| 3 | 第三讲 机器学习模型的逻辑与应用 | 4 | | 1 | |
| 4 | 第四讲 理实交融的机器化学家 | 4 | | 1 | |
| 合计 | | 16 | | 4 | |

课程考核：撰写课程论文

成绩评定方案：平时成绩占总成绩比例 50%，课程论文成绩占总成绩比例 50%

学员选拔方法：化学化工相关领域研究生和浩青班本科生

附件 3

《人工智能驱动化学研究》教学大纲 Teaching (Course) Outline of Chemistry Frontiers

第一部分 大纲说明

1. 课程代码: W00000041
2. 课程类型: 微型课程
3. 开课时间: 春季学期
4. 课程目标: 通过该课程的学习, 使学生全面了解人工智能在化学化工领域的研究前沿, 使学生能够进行相关理论模拟的计算, 实实在在为提升自己的科研水平扩展更多的研究和分析手段。为同学们完善知识结构、培养创新思维以及从事相关领域研究打下重要基础。
5. 面向学科: 化学化工及相关学科
6. 考核方式: 撰写课程论文。
7. 预修课程: 结构化学、有机化学、物理化学
8. 教学方式: 教师课堂讲授、研究生专题研讨、课后资料查阅及综述等方式相结合。
9. 学时学分
学时: 20 学时。学分: 1 学分。

| 序号 | 课程内容 | 课堂讲课 | 实践 | 课堂讨论 | 课外自学 |
|----|-------------------|------|----|------|------|
| | | 学时 | 学时 | 学时 | 学时 |
| 1 | 第一讲 人工智能在理论建模上的应用 | 4 | 0 | 1 | 0 |
| 2 | 第二讲 LASP 程序的强大应用 | 4 | 0 | 1 | 0 |
| 3 | 第三讲 机器学习模型的逻辑与应用 | 4 | 0 | 1 | 0 |
| 4 | 第四讲 理实交融的机器化学家 | 4 | 0 | 1 | 0 |
| 合计 | | 16 | 0 | 4 | 0 |

10. 教材及教学参考资料:

- [1]Zheng S, He J, Liu C, Shi Y, Lu Z, Feng W, Ju F, Wang J, Zhu J, Min Y, Zhang H, Tang S, Hao H, Jin P, Chen C, Noé F, Liu H, Liu T-Y 《Predicting equilibrium distributions for molecular systems with deep learning》. 2024b. *Nature Machine Intelligence* 6,(5) :558 ~ 567. <https://doi.org/10.1038/s42256-024-00837-3>.-
- [2] Kang P-L, Shang C, Liu Z-P 《Recent implementations in LASP 3.0: Global neural network potential with multiple elements and better long-range description》. 2021a. *Chinese Journal of Chemical Physics* 34,(5) :583 ~ 590. <https://doi.org/10.1063/1674-0068/cjcp2108145>.
- [3]Song T, Luo M, Zhang X, Chen L, Huang Y, Cao J, Zhu Q, Liu D, Zhang B, Zou G, Zhang G, Zhang F, Shang W, Fu Y, Jiang J, Luo Y 《A Multiagent-Driven Robotic AI Chemist Enabling Autonomous Chemical Research On Demand》. 2025f. *Journal of the American Chemical Society* 147,(15) :12534 ~ 12545. <https://doi.org/10.1021/jacs.4c17738>.
- [4]www.gaussian.com
- [5]www.laspai.com

第二部分 教学内容和教学要求

通过该课程的学习，使学生全面了解人工智能在化学化工领域的研究前沿，使学生能够进行相关理论模拟的计算，实实在在为提升自己的科研水平扩展更多的研究和分析手段。为同学们完善知识结构、培养创新思维以及从事相关领域研究打下重要基础。

第一讲 人工智能在理论建模上的应用

1. 本章主要内容：

- (1) 了解人工智能在理论建模上应用的发展现状；
- (2) 利用人工智能合理建立催化模型，动力学模型；
- (3) 利用人工智能合理建立反应机理模型。

2. 本章的重点与难点、需掌握的主要知识：

- (1) 理论计算化学在实验化学中的应用；
- (2) 人工智能驱动理论计算化学的发展与应用

3. 预备知识要求

- (1) 结构化学，机器学习相关概念

4. 主要参考资料

- [1]Zheng S, He J, Liu C, Shi Y, Lu Z, Feng W, Ju F, Wang J, Zhu J, Min Y, Zhang H, Tang S, Hao H, Jin P, Chen C, Noé F, Liu H, Liu T-Y 《Predicting equilibrium distributions for molecular systems with deep learning》. 2024b. *Nature Machine Intelligence* 6,(5) :558 ~ 567. <https://doi.org/10.1038/s42256-024-00837-3>.-
- [2] Kang P-L, Shang C, Liu Z-P 《Recent implementations in LASP 3.0: Global neural network potential with multiple elements and better long-range description》. 2021a. *Chinese Journal of Chemical Physics* 34,(5) :583 ~ 590. <https://doi.org/10.1063/1674-0068/cjcp2108145>.
- [3]Song T, Luo M, Zhang X, Chen L, Huang Y, Cao J, Zhu Q, Liu D, Zhang B, Zou G, Zhang G, Zhang F, Shang W, Fu Y, Jiang J, Luo Y 《A Multiagent-Driven Robotic AI Chemist Enabling Autonomous Chemical Research On Demand》. 2025f. *Journal of the American Chemical Society* 147,(15) :12534 ~ 12545. <https://doi.org/10.1021/jacs.4c17738>.

第二讲 LASP 程序的强大应用

1. 本章主要内容:

- (1) 表面催化反应的建模与计算
- (2) 有机分子反应机理的建模与计算;
- (3) 功能材料性质的建模与计算。

2. 本章的重点与难点、需掌握的主要知识:

- (1) 合理建模的重要性;
- (2) 合理建模的关键要素

3. 预备知识要求

- (1) 结构化学, 分子动力学, 催化化学, 材料表面化学等

4. 主要参考资料

[1]Kang P-L, Shang C, Liu Z-P 《Recent implementations in LASP 3.0: Global neural network potential with multiple elements and better long-range description》. 2021a. *Chinese Journal of Chemical Physics* **34**,(5) :583 ~ 590. <https://doi.org/10.1063/1674-0068/cjcp2108145>.

[2]Xie X-T, Yang Z-X, Chen D, Shi Y-F, Kang P-L, Ma S, Li Y-F, Shang C, Liu Z-P 《LASP to the Future of Atomic Simulation: Intelligence and Automation》 . 2024c. *Precision Chemistry* **2**,(12) :612 ~ 627. <https://doi.org/10.1021/prechem.4c00060>.

[3] www.laspai.com

第三讲 机器学习模型的逻辑与应用

1. 本章主要内容:

- (1) 机器学习的几种原理;
- (2) 机器学习在化学中应用的实际案例。

2. 本章的重点与难点、需掌握的主要知识:

- (1) 机器学习原理中的基本概念;
- (2) 机器学习在化学中的应用;

3. 预备知识要求

- (1) 了解机器学习基本原理;

4. 主要参考资料

[1]Zheng S, He J, Liu C, Shi Y, Lu Z, Feng W, Ju F, Wang J, Zhu J, Min Y, Zhang H, Tang S, Hao H, Jin P, Chen C, Noé F, Liu H, Liu T-Y 《Predicting equilibrium distributions for molecular systems with deep learning》. 2024b. *Nature Machine Intelligence* 6,(5) :558 ~ 567.

<https://doi.org/10.1038/s42256-024-00837-3>.

[2]Zhang H, Liu S, You J, Liu C, Zheng S, Lu Z, Wang T, Zheng N, Shao B 《Overcoming the barrier of orbital-free density functional theory for molecular systems using deep learning 》 . 2024d. *Nature Computational Science* 4,(3) :210 ~ 223.

<https://doi.org/10.1038/s43588-024-00605-8>.

第四讲 理实交融的机器化学家

1. 本章主要内容:

- (1) 人工智能在化学领域的全方位应用;
- (2) 机器化学家目前的开发与进展。

2. 本章的重点与难点、需掌握的主要知识:

- (1) 人工智能在化学领域多方面的协同引用
- (2) 了解机器化学家的开发、进展与难点;

3. 预备知识要求

- (1) 了解机器化学家的概念;
- (2) 了解人工智能全方位实际应用的难点

4. 主要参考资料

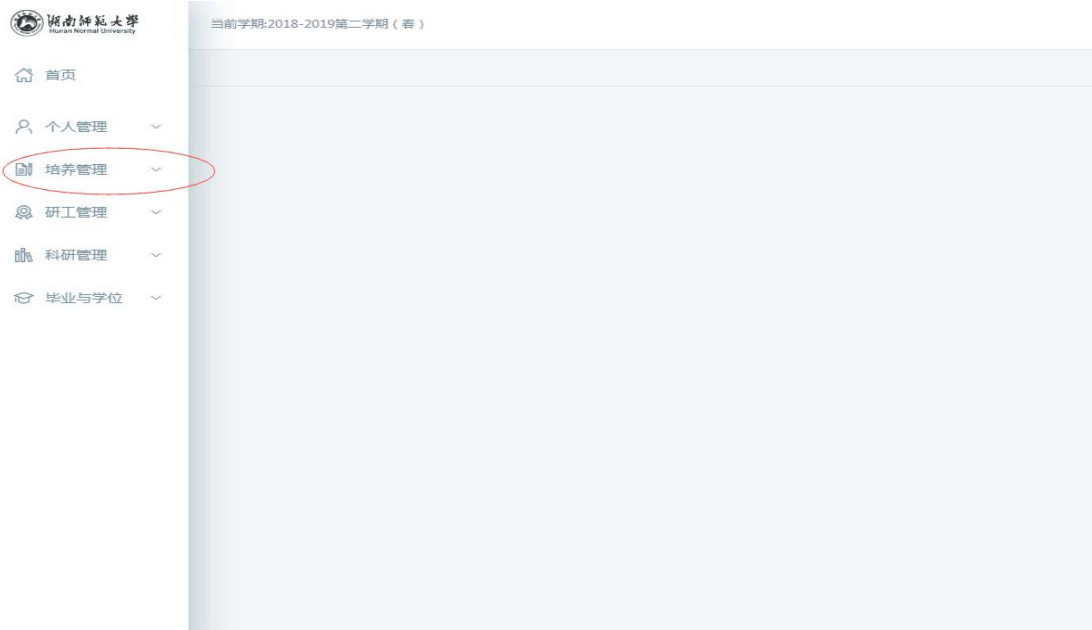
[1]Yang L, Li X, Zhang G, Cui P, Wang X, Jiang X, Zhao J, Luo Y, Jiang J 《Combining photocatalytic hydrogen generation and capsule storage in graphene based sandwich structures 》 . 2017e. Nature Communications 8,(1) :16049. <https://doi.org/10.1038/ncomms16049>.

[2]Song T, Luo M, Zhang X, Chen L, Huang Y, Cao J, Zhu Q, Liu D, Zhang B, Zou G, Zhang G, Zhang F, Shang W, Fu Y, Jiang J, Luo Y 《A Multiagent-Driven Robotic AI Chemist Enabling Autonomous Chemical Research On Demand》 . 2025f. Journal of the American Chemical Society 147,(15) :12534 ~ 12545. <https://doi.org/10.1021/jacs.4c17738>.

附件 4

微型课程网上选课操作流程

一、登录学生界面。



二、依次点击“培养管理”->“学生网上选课”。



三、找到课程，点击“选课”，进行选课。

我的位置: 培养管理 > 公共课网上选课

| 开课院系 | 课程编号 | 课程名称 | 班级名称 | 教室 | 任课教师 | 时间 | 学分 | 容纳人数 | 选课人数 | 开始时间 | 截止时间 | 操作 |
|------|-----------|-------------|--------------|------------|------|-------------|----|------|------|------------|------------|----|
| 研究生院 | W00000019 | 艺术中的美学与审美 | 艺术中的美学与审美1班 | 美术学院艺术地质楼 | | | 1 | 80 | 0 | 2019-10-14 | 2019-10-14 | 选课 |
| 研究生院 | 000010002 | 马克思主义与社会科学方 | 文科(专硕)2班 | 景德楼204 | 陈云凡 | 星期一 下午7:下午8 | 1 | 200 | 10 | 2019-09-05 | 2019-09-22 | |
| 研究生院 | 100010001 | 中国马克思主义与当代 | 博士政治 | 景德楼204 | 胡耀月 | 星期日 上午1:上午4 | 2 | 270 | 9 | 2019-09-05 | 2019-09-22 | |
| 研究生院 | 400010003 | 课程与教学论 | 课程与教学论1班(教育) | 理学院大楼西头409 | 鞠新生 | 星期三 上午1:上午4 | 2 | 120 | 14 | 2019-09-05 | 2019-09-22 | |
| 研究生院 | 300010001 | 硕士学位英语课程 | 英语A组10班(学硕) | 至善楼211 | 梁斌 | 星期二 上午3:上午4 | 3 | 100 | 5 | 2019-09-05 | 2019-09-22 | |
| 研究生院 | 400010001 | 硕士学位英语课程 | (专硕)英语6班 | 文学教学大楼408 | 黄谷会 | 星期二 上午1:上午2 | | | | 2019-09-05 | 2019-09-22 | |
| 研究生院 | 000010002 | 马克思主义与社会科学方 | 文科政治5班(学硕) | 至善楼407 | 陈文珍 | 星期三 下午5:下午8 | 1 | 200 | 4 | 2019-09-05 | 2019-09-22 | |
| 研究生院 | 000010003 | 自然辩证法概论 | 理科政治3班(学硕) | 景德楼204 | 张会 | 星期五 上午1:上午4 | 1 | 200 | 2 | 2019-09-05 | 2019-09-22 | |
| 研究生院 | 000010002 | 马克思主义与社会科学方 | 文科(专硕)3班 | 景德楼304 | 郑会强 | 星期一 下午5:下午6 | 1 | 200 | 39 | 2019-09-05 | 2019-09-22 | |
| 研究生院 | 400010004 | 教育研究方法 | 教育研究方法3班(教育) | 文学院410 | 钟文华 | 星期五 下午5:下午8 | 2 | 100 | 42 | 2019-09-05 | 2019-09-22 | |
| 研究生院 | 000010002 | 马克思主义与社会科学方 | 文科政治2班(学硕) | 文学教学大楼416 | 肖根牛 | 星期一 下午7:下午8 | | | | 2019-09-05 | 2019-09-22 | 选课 |
| 研究生院 | 000010002 | 马克思主义与社会科学方 | 文科政治2班(学硕) | 文学教学大楼316 | 肖根牛 | 星期二 下午7:下午8 | 1 | 200 | 5 | 2019-09-05 | 2019-09-22 | |
| 研究生院 | 400010001 | 硕士学位英语课程 | 学科教学(音乐)非艺术 | 南院校区和乐楼402 | 胡静玲 | 星期二 上午1:上午2 | | | | 2019-09-05 | 2019-09-22 | |
| 研究生院 | 400010001 | 硕士学位英语课程 | 学科教学(音乐)非艺术 | 南院校区和乐楼206 | 胡静玲 | 星期四 上午1:上午2 | 3 | 100 | 3 | 2019-09-05 | 2019-09-22 | |
| 研究生院 | 000010002 | 马克思主义与社会科学方 | 文科政治3班(学硕) | 立善楼317 | 平译 | 星期一 下午7:下午8 | 1 | 200 | 14 | 2019-09-05 | 2019-09-22 | |

四、选课成功后，等待研究生院审核，审核通过后，学生可在“选课结果查询”中查到该门课程。

我的位置: 培养管理 > 选课结果查询

学期: 2019-2020第一学期 (市) [查询] [导出数据]

| 课程编号 | 课程名称 | 班级名称 | 学分 | 阶段 | 任课教师 | 起讫周 | 时间 | 上课地点 | 选课人数 |
|------|-----------|----------------|----|----|------|-------|-----------------|------------|------|
| 1 | 000010001 | 中国特色社会主义理论与实践研 | 2 | 1 | 黄艳 | 3-11 | 连续周 星期一 下午7:下午8 | 文学教学大楼416 | 151 |
| 2 | 000010001 | 中国特色社会主义理论与实践研 | 2 | 2 | 黄艳 | 3-11 | 连续周 星期二 下午7:下午8 | 文学教学大楼316 | 151 |
| 3 | 000010002 | 马克思主义与社会科学方 | 1 | 1 | 肖根牛 | 12-15 | 连续周 星期一 下午7:下午8 | 文学教学大楼416 | 150 |
| 4 | 000010002 | 马克思主义与社会科学方 | 1 | 2 | 肖根牛 | 12-15 | 连续周 星期二 下午7:下午8 | 文学教学大楼316 | 150 |
| 5 | W00000019 | 艺术中的美学与审美 | 1 | 1 | | 8-9 | 连续周 | 美术学院艺术地质楼1 | |

附件 5

微型课程总结材料清单

| 序号 | 内容 | 电子版或纸质版 | 签字 |
|----|-------|---------|----|
| 1 | 开课通知 | | |
| 2 | 课程课表 | | |
| 3 | 选修名单 | | |
| 4 | 课程作业 | | |
| 5 | 课程成绩单 | | |
| 6 | 课程小结 | | |
| 7 | 学生心得 | | |
| 8 | 课程照片 | | |
| 9 | 意见建议 | | |