

华东理工大学预测功能性分子晶体材料研究获新进展

2021年03月22日

作者：陶婷婷


绘制能量-结构-性能图是一种预测多孔分子晶体材料的方法，该方法利用理论计算寻找可能的低能量高性能晶体排列方式来实现新材料的探索 and 发现。近日，华东理工大学费林加诺贝尔奖科学家联合研究中心的安迪·库伯教授团队在数字化导航能量-结构-性能图研究方面取得新进展。该成果以华东理工大学为第一单位，以“数字化导航基于氢键的多孔分子晶体能量-结构-性能图”为题发表于国际权威学术期刊《自然-通讯》。

物理性能优异的分子晶体材料可以应用在如气体储存与分离等诸多领域，然而分子晶体领域的设计多依赖于经验与试错。这是由于其最终结构往往来源于不同分子间弱相互作用达到平衡而非总是某一种主导，同时多晶型这一现象的存在又加剧了分子晶体的不确定性。在前期关于绘制能量-结构-性能图进行晶体结构预测的研究基础上，针对传统晶体预测结果给出数以万计的可能结构致使三者关系难以解读，以及所预测结果无法跨分子进行比较的问题，团队研发人员在本工作中进一步延伸拓展了上述方法。以氢键有机框架结构为例，新方法首先对一系列的能量-结构-性能图进行了更加详尽的剖析，找出最有潜力的分子及类型并分析原因，在此基础上结合机器学习的方法，对ESF图中的高维数据进行了无监督学习型分类与降维可视化。

这种更加通用、便捷的工作流程可以系统性的从高维数据中直接筛选出代表性结构，从而使研究人员可以直接在极其复杂的ESF图上进行导航搜索，发现能量有利或性能优异的分子晶体结构，同时可视化的预测、揭示复杂的结构-性能相关性。本研究同时开发了一种开源的交互式可视化工具，为检索与分析晶体结构提供了有力保障。结合以上探索，团队研发人员在研究中预测了一种超低物理密度的分子晶体。该工作为计算机探索、研发功能性分子晶体材料提供了新方法和新方向，同时为推进该领域未来的全自动化提供了新的思路。

该研究主要由华东理工大学赵成蹊博士在安迪·库伯教授和陈林江研究员及南安普顿大学格雷姆·戴教授的指导下以CSC资助交流博士生身份完成。研究得到了华东理工大学刘洪来教授、卢运祥教授，华理校友、利物浦大学吴晓锋研究员，以及利物浦大学车瑜和庞中孚博士的指导和帮助。该工作获得了Leverhulme研究中心、费林加诺贝尔奖科学家联合研究中心、国家自然科学基金以及国家留学基金委的相关科研资金支持。

证件信息：沪ICP备10219502号 (<https://beian.miit.gov.cn>)

 沪公网安备 31010102006630号 (<http://www.beian.gov.cn/portal/registerSystemInfo?recordcode=31010102006630>)

中国互联网举报中心 (<https://www.12377.cn/>)

Copyright © 2009-2022

上海科技报社版权所有

上海科荧多媒体发展有限公司技术支持



([//bszs.conac.cn/sitename?method=show&id=5480BDAB3ADF3E3BE053012819ACCD59](http://bszs.conac.cn/sitename?method=show&id=5480BDAB3ADF3E3BE053012819ACCD59))