



下一篇 ▶

2021年12月23日 星期四

放大 ⊕ 缩小 ⊖ 默认 ○

满足材料业需求 准确率达95%

机器学习预测复杂新材料合成

科技日报北京12月22日电 (记者张梦然) 据22日发表在《科学进展》杂志上的一项研究, 美国西北大学和丰田研究所研究人员已成功应用机器学习来指导新纳米材料的合成, 消除与材料发现相关的障碍。这种训练有素的算法, 可通过定义数据集来准确预测可用于清洁能源、化学和汽车行业燃料的重要催化剂。

论文通讯作者、美国西北大学纳米技术专家查得·米尔金此次发明的数据生成工具“巨库”极大地扩展了研究人员的视野。每个“巨库”都包含数百万甚至数十亿个纳米结构, 每个纳米结构的形状、结构和成分都略有不同, 所有这些都在2×2平方厘米的芯片上进行了位置编码。迄今为止, 每个芯片包含的新无机材料比科学家收集和分类的还要多。

研究团队通过使用聚合物笔光刻技术开发了“巨库”, 这是一种大规模并行纳米光刻工具, 能够每秒对数十万个特征进行特定位置的沉积。

在绘制人类基因组图谱时, 科学家的任务是识别四种碱基的组合。但“材料基因组”包括元素周期表中任何可用元素的纳米粒子组合, 以及形状、大小、相形态、晶体结构等参数。以“巨库”的形式构建更小的纳米粒子子集, 将使研究人员更接近完成材料基因组的完整图谱。

米尔金说, 即使是类似于材料基因组的東西, 确定如何使用或标记它们, 也需要不同的工具。机器学习应用程序非常适合解决定义和挖掘材料基因组的复杂性, 但却受限于创建数据集以在空间中训练算法的能力。“巨库”与机器学习的结合可能最终会解决这个问题, 从而了解哪些参数驱动某些材料特性。

在该项研究中, 米尔金团队编译了先前生成的由具有复杂成分、结构、尺寸和形态的纳米粒子组成的“巨库”结构数据。他们使用这些数据来训练模型, 并要求它预测会产生某种结构特征的四个、五个和六个元素的组成。在19次预测中, 机器学习模型正确预测了18次新材料, 准确率约为95%。

该模型在西北大学建立的大型数据集上, 以寻找具有围绕相位、尺寸和其他结构特征设置参数的多金属纳米粒子, 而这些参数会改变纳米粒子的特性和功能。

研究人员表示, 该技术或能推动对未来至关重要的许多领域中的发现, 包括塑料升级回收、太阳能电池、超导体和量子比特。该团队现在正在使用这种方法寻找对清洁能源、汽车和化工行业的燃料过程至关重要的催化剂。确定新的绿色催化剂将使废物和大量原料转化为有用物质促进氢气产生、二氧化碳利用和燃料电池的开发。

下一篇 ▶

第04版: 国际

上一版 ◀ ▶ 下一版

- ▶ 机器学习预测复杂新材料合成
- ▶ 世界上最长柔性纤维电池问世
- ▶ 2021年突破极限的6大科学纪录
- ▶ 巴西圣保罗推出“碳中和”监测管理平台
- ▶ 新技术让3D打印生物组织更方便存储
- ▶ 接种疫苗加强针可预防奥密克戎
- ▶ 能改变硬度材料可3D打印全固体电池
- ▶ 一把古代串珠揭示五万年前非洲社会网络