



首页 | 概况简介 | 科技布局 | 人才队伍 | 科技动态 | 成果发布 | 规章制度 | 人才招聘 | 新闻动态 | 联系我们

## 研究人员提出电偶极矩描述符结合人工智能预测催化剂-分子吸附作用的新方法

时间：2021年02月02日 13:16 栏目：科技动态 浏览次数：50

中国科大江俊教授团队结合量子化学理论计算和先进的深度机器学习方法，定量揭示了催化剂表面和分子之间偶极相互作用与吸附作用的深层次关联性，首次提出并论证了电偶极矩作为精确、可测量、易计算的描述符用于定量预测催化剂表面-分子相互作用的可行性。

发掘构效关系描述符是描述复杂的催化剂表面-分子吸附作用并预测催化性能的关键。为了深入挖掘吸附作用的内在规律，该研究选取了大量的金属催化剂表面的分子吸附结构，采用量子化学计算获得了吸附结构的多种几何和电子信息数据，如吸附能和电偶极矩等，并应用人工智能的机器学习技术，通过关联性和降维分析筛选描述符，找到有效的构效关系描述符即电偶极矩及其夹角，成功地预测了催化剂-分子吸附能和界面电荷转移量（如图1），定量揭示了电偶极矩与吸附作用的深层次关联性。进一步验证了神经网络训练模型从某种材料推广到多种材料的卓越泛化能力。

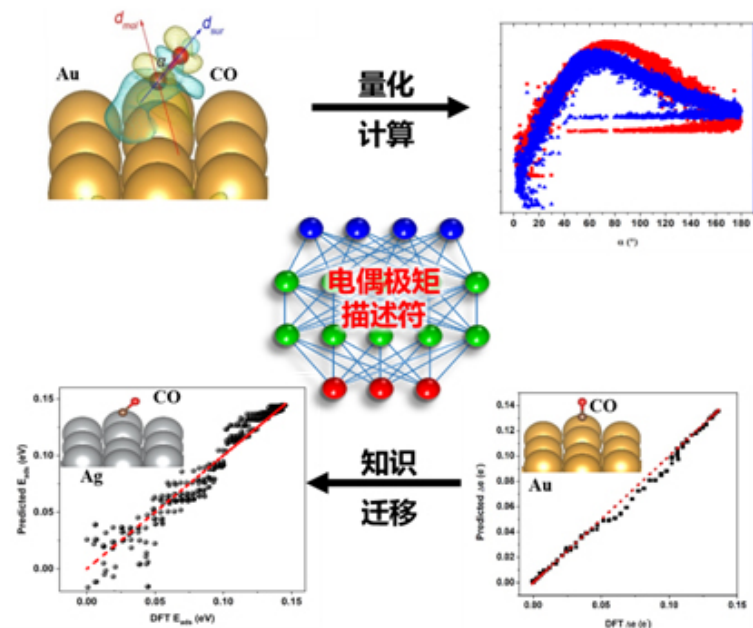


图1 针对高通量的量化计算数据，应用机器学习和电偶极矩相关描述符准确预测催化剂-分子吸附作用

本研究成果提出了原创的、可迁移应用的电偶极矩相关描述符，既能被实验测量，也便于高通量计算，还能准确反映从微观结构（表面几何信息、原子结构、电荷分布、波函数）到性能参数（电荷转移量、吸附能）之间的数学映射关系。为理性设计高性能催化剂提供了理论指导。研究成果发表在国际期刊JACS上。该研究工作得到国家重点研发计划、国家自然科学基金、中国科学院洁净能源创新研究院合作基金等经费来源的支持。（文/图 中国科大）



依托单位：

共建单位：



