



دانشمندان مواد فوق سخت جدیدی را پیش‌بینی کردند

گروهی از دانشمندان موسسه علوم و فناوری "اسکولتک" (Skoltech) واقع در روسیه از روش‌های یادگیری ماشین برای پیش‌بینی مواد فوق سخت جدید براساس ساختار بلوری آنها استفاده کردند.

گروهی از دانشمندان موسسه علوم و فناوری "اسکولتک" (Skoltech) واقع در روسیه از روش‌های یادگیری ماشین برای پیش‌بینی مواد فوق سخت جدید براساس ساختار بلوری آنها استفاده کردند.

به گزارش ایسنا و به نقل از فیز، مواد فوق سخت (Superhard) اخیراً به دلیل پیامدها و کاربردهای بالقوه آن در صنایع مختلف از تولید روغن گرفته تا تولیدات پیشرفته، مورد توجه محققان قرار گرفته است. یک ماده فوق سخت دارای دو ویژگی اساسی است که سختی و مقاومت در برابر شکستگی هستند که به ترتیب، مقاومت آن در برابر تغییر شکل و گسترش شکاف و ترک را سبب می‌شوند.

با محاسبه خصوصیات مطلوب برای مواد فوق سخت می‌توان با استفاده از روش‌های پیشرفته علوم محاسباتی با استفاده از یک مدل نظری خوب، محاسباتی با خواص متناسب با نیازهای خاص هر صنعت را پیدا کرد.

"افیم ماژنیک" دانشجوی دکترا در مرکز علوم و فناوری انرژی Skoltech در آزمایشگاه کشف مواد محاسباتی تحت هدایت پروفسور "آرتم آر. اوگانوف" استاد این موسسه با استفاده از "شبکه‌های عصبی پیچشی" موسوم به "CNN" موفق به ساخت چنین مدلی بر روی نمودارها شد که در واقع یک روش یادگیری ماشین است که پیش‌بینی خصوصیات یک ماده را از ساختار بلوری آن امکانپذیر می‌کند.

بدین ترتیب با استفاده از مجموعه‌ای از مواد با خصوصیات شناخته شده می‌توان به "شبکه‌های عصبی پیچشی" آموخت تا این خصوصیات را برای ساختارهای ناشناخته محاسبه کند.

"ماژنیک" می‌گوید: ما در مواجهه با کمبود داده‌های تجربی در مورد سختی و مقاومت در برابر شکستگی برای آموزش صحیح مدلها، به داده‌های فراوان بیشتری در مورد مازول‌های الاستیک روی آوردیم و مقادیر آنها را برای بدست آوردن خصوصیات مورد نظر با استفاده از مدل فیزیکی که قبلاً ایجاد کرده بودیم، پیش‌بینی کردیم.

"اوگانوف" نیز گفت: ما در این مطالعه از روش‌های یادگیری ماشین برای محاسبه سختی و مقاومت در برابر شکستگی برای بیش از ۱۲۰ هزار ساختار بلوری شناخته شده و فرضی استفاده کردیم که بیشتر آنها از نظر این ویژگی‌ها هرگز کاوش نشده بودند. در حالی که مدل ما تایید می‌کند که الماس سخت‌ترین ماده شناخته شده است، وجود ده‌ها ماده بالقوه بسیار سخت یا فوق سخت دیگر را نیز پیش‌بینی می‌کند.

این تحقیق در مجله Applied Physics منتشر شده است.