یکشنبه 10 دی 1402 - 07:07

هوش مصنوعی برای دانشمندان «نانوساختار دوبعدی» طراحی کرد

محققان با استفاده از هوش مصنوعی موفق به ارائه چهار ساختار دوبعدی جدید شدند که از نظر ترمودینامیکی پایدار است.

محققان با استفاده از هوش مصنوعی موفق به ارائه چهار ساختار دوبعدی جدید شدند که از نظر ترمودینامیکی پایدار است.

به گزارش خبرگزاری مهر، مواد دو بعدی مانند گرافن به دلیل خاصیت الکترونیکی، نوری و مکانیکی قابل توجه، علاقه زیادی را به خود جلب کرده است. با وجود مطالعه های زیادی که انجام شده، کمتر از ۱۰۰ ماده دوبعدی با موفقیت در آزمایشگاه ها سنتز شده است. این امر به شدت استفاده عملی آن ها در ترانزیستورها، سنسورها، باتری ها و سایر محصولات را محدود می کند.

به تازگی، محققان یک سیستم محاسبات مصنوعی ایجاد کرده اند که کشف و اعتبار سنجی مواد دوبعدی شیمیایی پایدار را خودکار می کند. این روش در حال حاضر چند گزینه جدید دوبعدی امیدوارکننده را که در تحقیقات پیشین از چشم محققان پنهان مانده بود، را پیدا کرد.

نتایج این تحقیق در قالب مقاله ای با عنوان “Discovery of ۲D Materials using Transformer Network-Based Generative Design” در نشریه Advanced Intelligent Systems به چاپ رسیده است.

از نظر تاریخی، مواد جدید از طریق آزمایش های آزمون و خطا توسط دانشمندان به دست می آید. اما فضای جستجوی گسترده، یافتن ترکیبات پایدار احتمالی را غیرممکن می کند. جیانجون هو از محققان این پروژه می گوید: مواد جدید بالقوه بسیار زیادی برای سنتز در آزمایشگاه ها وجود دارد. ما به ابزارهای محاسباتی نیاز داریم تا هوشمندانه این مواد را کشف کند. یادگیری ماشین انسان ها را از حلقه کشف خارج می کند و به الگوریتم ها اجازه می دهد تا با جستجوی داده ها، خود را آموزش دهند.

این روش جدید، به عنوان ژنراتور ترانسفورمر مواد (MTG)، چندین مؤلفه هوش مصنوعی را ادغام می کند. این فناوری هوش مصنوعی از توانمندی خود برای ایجاد ترکیبات شیمیایی مختلف استفاده کرده و بعد با کمک الگوریتم های خود، این ترکیب شیمیایی را از نظر بلوری و ساختاری با هندسه مواد دوبعدی موجود مقایسه کرده و تلاش می کند تا با تعویض اتم ها و عناصر، ساختار جدیدی را پیشنهاد دهد. در ادامه هوش مصنوعی با استفاده از محاسبات تئوری عملکردی چگال اقدام به بررسی میزان پایداری ترمودینامیکی این ساختار جدید می کند.

این هوش مصنوعی موفق شد تا چهار ترکیب دو بعدی جدید با فرمولاسیون NiCl۴, IrSBr, CuBr۳, CoBrC را شناسایی کند که از نظر ترمودینامیکی پایدار هستند.

این فناوری می تواند به طور گسترده طراحی مواد دوبعدی به منظور استفاده در دستگاه های نسل بعدی را انجام دهد. اما قبل از پذیرش عملی در مقیاس گسترده، محققان باید سنتز برخی از ترکیبات پیشنهادی را در آزمایشگاه انجام دهند.