
深圳先进院等在数字驱动晶体形貌理性设计和可控合成方面取得进展

作者：writer 来源：中国科学院

本文原地址：<https://www.iikx.com/news/progress/13224.html>

本文仅供学习交流之用，版权归原作者所有，请勿用于商业用途！

中国科学院深圳先进技术研究院材料界面中心副研究员赵海涛课题组在数字驱动晶体形貌理性设计和可控合成方面取得进展，相关研究成果以Machine Learning-Aided Crystal Facet Rational Design with Ionic Liquid Controllable Synthesis为题，发表在Small

上。深圳先进院是论文第一通讯单位，澳大利亚国立大学、上海大学为论文共同通讯单位。论文共同第一作者是深圳先进院博士赖富明和澳洲国立大学博士生孙哲浩，论文通讯作者是深圳先进院赵海涛、澳大利亚国立大学教授殷宗友和上海大学副教授郭海波。

晶体形貌是决定功能材料特性的重要因素之一，晶面与晶棱面（facet junction）携带大量材料特性并赋予晶体多样的功能，然而其合理设计和控制反应条件以获得特定形貌是一个复杂且困难的过程。传统的功能材料研究和发展主要依靠研究者的科学经验和大量反复试验。建立功能材料晶棱面数据库是克服这一瓶颈的重要环节，尤其是基于数据挖掘、高通量计算、机器学习等集成功能于一体的材料自动化平台已成为加速功能材料发现和构建功能材料界面基因组（Materials Interface Genome）的重要技术，也是深圳先进院材料界面中心主攻方向之一。

该研究讨论了材料功能基元的本征特性——形貌对宏观性能的影响规律及其调控机理。通过开发集成晶棱面数据库、机器学习、数学模型和离子液实验合成等技术的新策略，实现了特定晶棱面的合理设计和可控合成。研究人员基于Wulff构造构建了晶棱面数据库，并借助人工神经网络（Artificial Neural Network，即ANN）算法根据数据库中的平衡形貌计算得到了表面能，随后利用Langmuir等温吸附方程建立了表面能与生长条件之间的关系模型，进而实现了晶面可控合成的整体策略。该研究首次将机器学习算法应用于表面能的计算，相比于传统表面能计算方法，基于机器学习的表面能计算方法具有计算时间短、精度高等优点。通过调整离子液体[bmim][BF₄]的浓度合成了具有特定形貌的TiO₂晶体，该策略得到了实验验证。这种创新的框架将数据密集型合理设计和实验可控综合集成在一起，以开发和定制特定晶面与晶棱面。

该研究展示了一种合理设计特定晶体形貌的途径，从而将数据驱动材料发现和实验条件联系起来。基于该集成化的创新策略，利用部分实验可确立形貌与实验条件之间的关系，从而推断出大量未知的实验条件下形貌的变化规律。该工作推动了材料研发由“科学直觉与试错”的传统模式向“数字化和智能化”的新模式转变，为解决材料的设计和制备等关键共性科学问题提供了更好的方案，并为探索新材料提供了更大潜能。

研究工作得到国家自然科学基金、深圳先进院材料界面中心功能材料界面基因组计划、澳大利亚国家研究委员会等的支持。此外，授权该成果相关软件著作权一项：数字驱动合成功能材料及其晶面理性设计。

[论文链接](#)

图1.基于机器学习和离子液体可控合成的晶面合理设计流程

研究团队单位：深圳先进技术研究院

更多 科学进展 请访问 <https://www.iikx.com/news/progress/>

本文版权归原作者所有，请勿用于商业用途，[爱科学iikx.com](http://www.iikx.com)转发