
深圳先进院等搭建机器人辅助胶体纳米晶数字制造平台

作者：writer 来源：中国科学院

本文原地址：<https://www.iikx.com/news/progress/22224.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！

深圳先进院等搭建机器人辅助胶体纳米晶数字制造平台

。近日，中国科学院深圳先进技术研究院先进材料科学与工程研究所喻学锋、赵海涛团队，联合中国科学技术大学、澳大利亚国立大学等，在《自然-合成》（*Nature Synthesis*）上，发表了题为 *A Robotic Platform for Synthesis of Colloidal Nanocrystals* 的研究论文。该工作首次将数据挖掘、数据驱动自动化合成、机器学习、逆向设计集成构建了机器人辅助胶体纳米晶数字制造平台，有望将科研人员从传统试错实验、劳动密集型表征中解放，实现胶体纳米晶数字化制备。

纳米晶在能源、光学、光化学、电化学、光电子学以及生物医药等领域颇具应用潜力。纳米晶物理化学性质与其形貌、尺寸息息相关，而传统的试错实验和密集表征需花费大量时间和精力，制约了纳米晶的研发。为此，研究团队整合数据驱动自动化合成、机器人辅助可控合成、面向形貌逆向设计等技术，构建了机器人辅助胶体纳米晶数字智造平台，以此突破当前纳米晶可控合成研究的局限性。其中，自动化平台由自动化合成模块、自动化表征模块和协作机器人三大模块构成，每个模块包含若干子模块，具有高通量合成、样品存储、原位光学、光谱学表征等功能（图1）。科研团队以两种典型的胶体纳米晶为研究范例，一是目前在生物传感检测领域被广泛研究的金纳米棒，二是在新能源和光学探测领域颇具应用潜力的钙钛矿纳米晶。

为了实现自动化合成，研究人员对文献进行数据挖掘，以提供关键合成参数的初始选择。针对金纳米棒，对1300篇已报道的金纳米棒合成的相关文献进行数据挖掘，并对其关键参数进行分水平排序，从而获取机器人执行参数，并设计正交实验及高通量实验验证，获取了金纳米棒形貌调控的重要参数。针对双钙钛矿，通过对其他钙钛矿相关文献进行数据挖掘，筛选出潜在的可供调节双钙钛矿尺寸形貌的48种溶剂和61种表面活性剂，结合高通量原位合成和表征，快速实现了溶剂和表面活性剂的筛选。

进一步，研究通过设计单因素、双因素以及三因素实验，进行高通量合成、原位光学表征（RGB值获取）、原位光谱学表征以及异位表征（透射电镜、扫描电镜）等获得大样本数据和小样本数据，结合机器学习，获得了合成关键参数（结构导向剂）与吸收光谱之间的关系模型以及吸收光谱和纳米晶尺寸的关系（图2）。通过积累数据样本，模型得到进一步完善。此外，研究根据两种材料大样本颜色信息（RGB），还可构建颜色信息与纳米晶尺寸之间的关系模型。这一模型可作为快速鉴定纳米晶尺寸的另一个指标。得益于这些模型的构建，输入目标产物尺寸信息即可反

馈合成关键参数（结构导向剂），从而实现纳米晶高效逆向设计及合成（图3）。因此，该工作在数据驱动机器人合成纳米晶领域颇具前景。

深圳先进院是第一通讯单位。研究工作得到国家自然科学基金、广东省自然科学基金、深圳市自然科学基金、深港澳科技计划等的支持。

[论文链接](#)

图1.机器人辅助胶体纳米晶数字制造自动化平台

图2.可控合成原位表征机器学习模型与异位表征验证

图3.实验数据库、机器学习模型与纳米晶逆向合成

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](https://www.iikx.com)转发