机器人辅助胶体纳米晶数字制造平台

作者：writer 来源：科学网

本文原地址：https://www.iikx.com/news/progress/22228.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！

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。

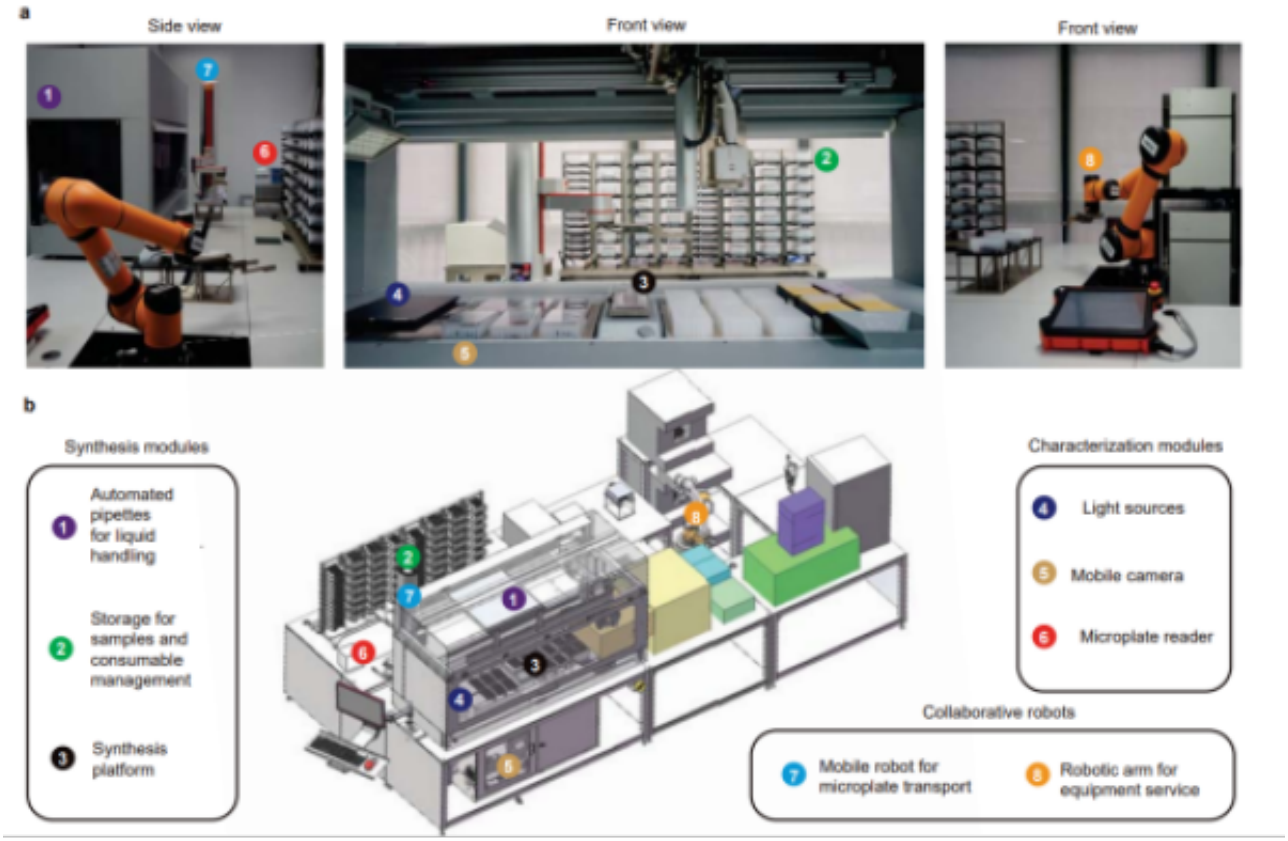


图1.机器人辅助胶体纳米晶数字制造自动化平台

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。

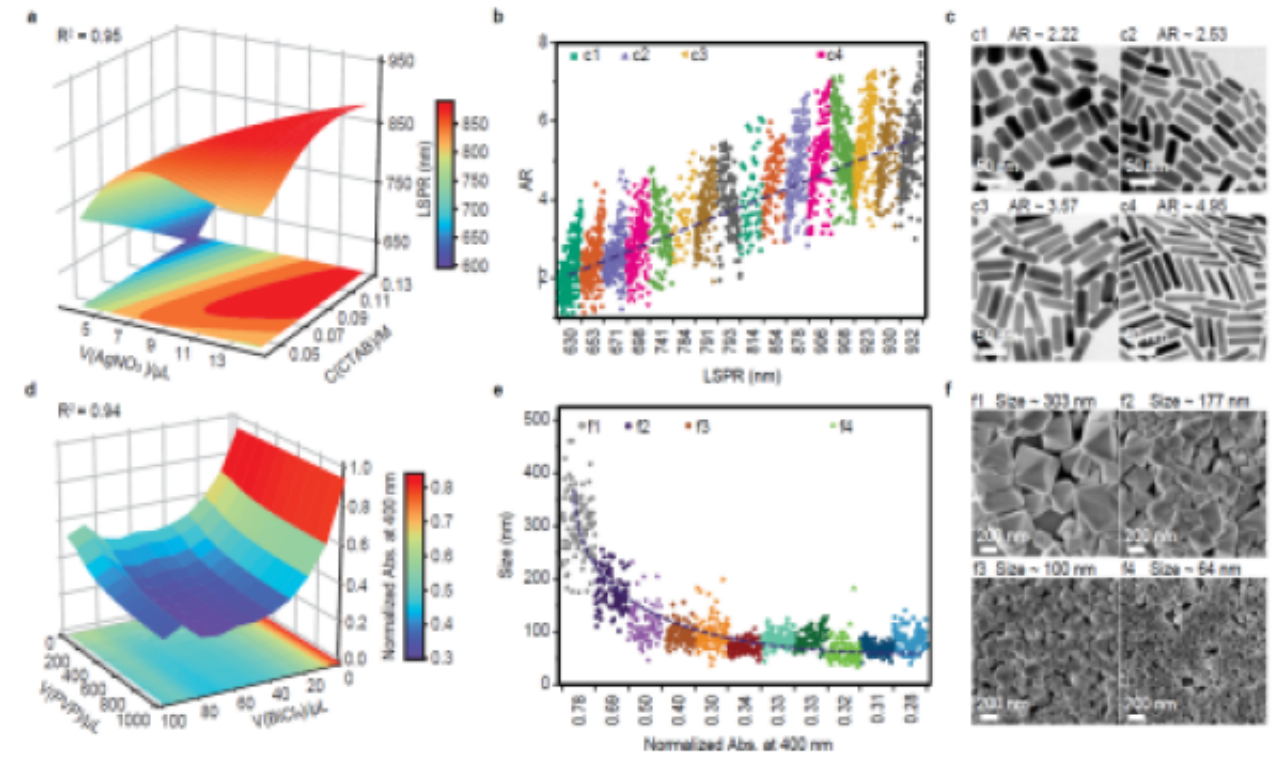


图2.可控合成原位表征机器学习模型与异位表征验证

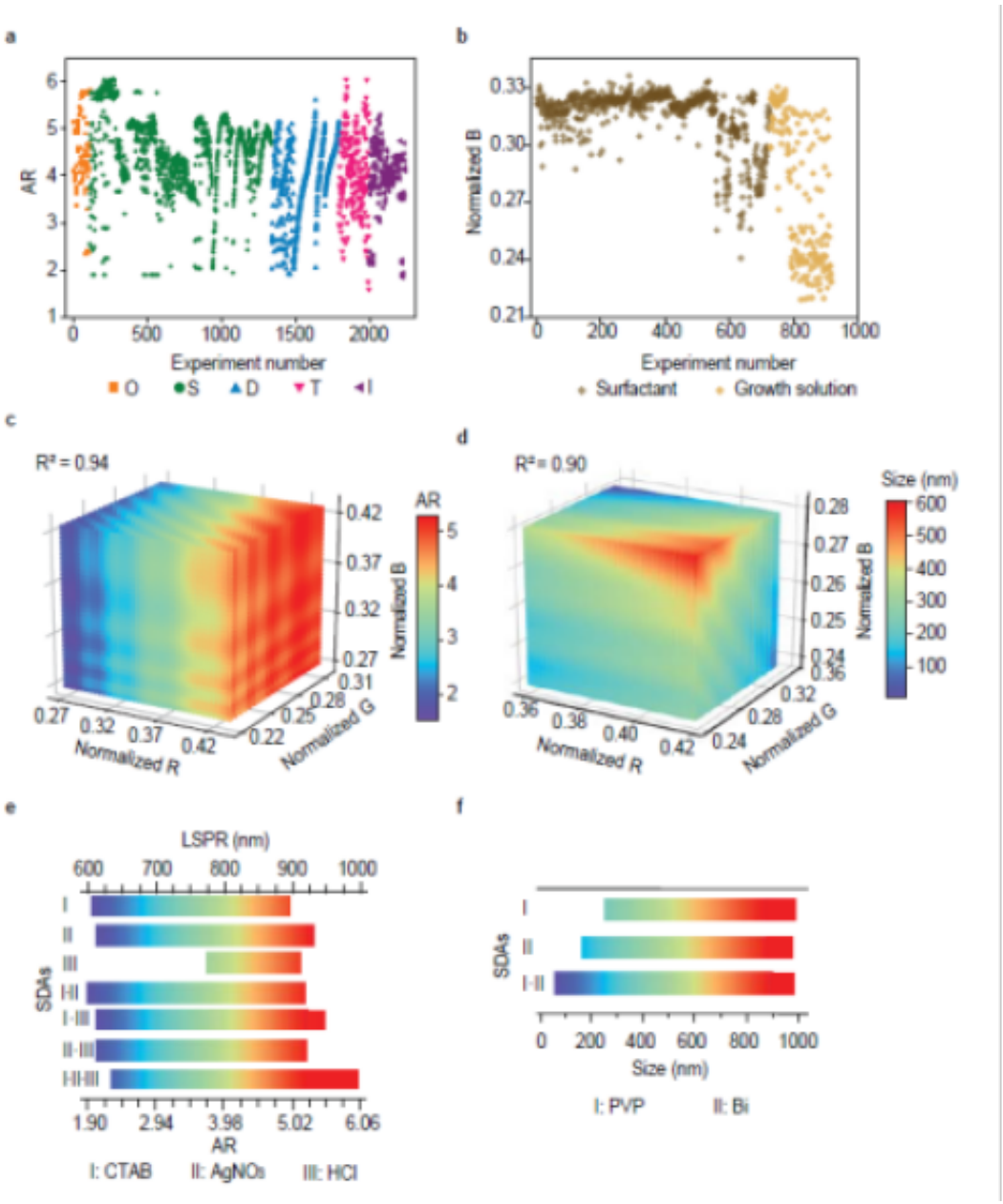


图3.实验数据库、机器学习模型与纳米晶逆向合成

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。(来源：中国科学院深圳先进技术研究院)

相关论文信息：https://doi.org/10.1038/s44160-023-00250-5

作者：喻学锋等 来源：《自然—合成》

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转发