机器人平台加速银纳米晶的高通量研究

作者：writer 来源：科学网

本文原地址：https://www.iikx.com/news/progress/23420.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！

机器人平台加速银纳米晶的高通量研究。

近日，中国科学院深圳先进技术研究院材料所喻学锋、赵海涛团队在国际学术期刊《化学工程杂志》上发表最新研究成果。

研究团队将光学仿真、数据建模、自动化合成、原位表征、机器学习等方式融合实现银纳米晶的高通量及其原位应用研究，加速材料应用在可视化传感检测当中，实现胶体光学材料高通量数据驱动研究的科学新范式。

银纳米晶由于优异的光电性质，在传感检测、能源催化、抗菌医药等领域具有广泛的应用，而其光学性质又与材料形貌结构、尺寸分布、表面配体等密切相关。

此前，科学家们主要通过单因素优化实现材料的可控合成，进而调控材料的光学性质，需要依靠经验式方法和密集型人力劳动，造成有效样本容量少、结果可重复性差等问题，严重制约了银纳米晶的研究和应用。

随着人工智能在材料科学领域的兴起，为材料大数据样本的获取提供了可能，结合光学仿真和机器学习对材料基因组信息进行有效的分类和筛选，有望实现多因素作用下材料的可控合成和目标应用。研究人员通过整合光学仿真、数据建模、自动化合成、原位表征、机器学习等技术方式，实现了多因素作用下银纳米晶的优化合成和高通量筛选，突破传统胶体光学材料在可控合成和色彩应用上的局限，加速目标材料应用于可视化检测汞离子当中。

首先，研究人员通过米氏(Mie)理论对材料的理想光学性能进行仿真预测，建立目标光学性质(光谱半峰宽、峰位)与材料形貌尺寸(分布状况、尺寸)之间的数字化联系，进而数据驱动指导银纳米晶的自动化合成和高通量筛选。

针对自动化合成中的稳定剂、形貌控制剂、还原剂等关键参数，进行高通量湿化学合成和原位光学表征(光谱、色彩)，对大样本数据进行有效的分类和筛选，结合机器学习算法，建立多因素合成参数与材料形貌分布之间的复杂模型。在实现可控合成的基础上，进一步构建了材料色彩与晶粒尺寸之间的数学模型，可以作为快速鉴定银纳米晶尺寸的可视化指标和经验数据库。

得益于这些模型的构建，实现了对目标材料配方进行有效放大和精细化量产，作为基底应用在可视化传感检测当中，显著提升了溶液中汞离子可重复检测的线性范围和灵敏度，比色法性能明显优于其它已报道的材料基底。

该研究展示的高通量研究方法具有优越的科学性和应用潜力，其数据驱动材料创新可以拓展应用在其它胶体光学材料当中，并为人工智能、机器人、材料科学、环境检测等领域的交叉研究开辟了新的道路。

该研究中，深圳先进院博士后邢理想为论文第一作者，深圳先进院研究员喻学锋、副研究员赵海涛为论文共同通讯作者。深圳先进院为论文第一单位。 (来源：中国科学报 刁雯蕙)

相关论文信息：https://doi.org/10.1016/j.cej.2023.143225

作者：喻学锋等 来源：《化学工程杂志》

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