
人工智能在催化剂合成领域有了新进展

作者：writer 来源：科学网

本文原地址：<https://www.iikx.com/news/progress/33693.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！

人工智能在催化剂合成领域有了新进展。近日，中国科学院大连化学物理研究所研究员邓德会团队与新加坡南洋理工大学李昊博博士团队合作，受邀撰写了人工智能在催化剂设计与合成领域的Perspective评述文章，系统梳理了人工智能技术在多相催化剂设计与合成中的研究进展，并前瞻性地展望了该领域未来的发展方向。相关成果发表在《物质》上。

催化剂作为化工、能源和环保等领域不可或缺的关键材料，其传统开发依赖经验驱动的试错法，存在周期长、成本高及数据重复性差等问题，亟需探索新的研究范式实现高效精准设计。近年来，人工智能特别是机器学习的发展及其在各个领域的成功应用，为催化剂设计与合成领域研究带来了重要机遇，推动该领域向数据驱动、自动化和智能化方向转型。

该评述系统梳理了人工智能技术在催化剂设计与合成领域的最新进展，详细阐述了机器学习方法在催化剂结构与性能预测、合成条件优化、高通量自动化实验与表征方面的重要应用。团队提出了通过机器学习有效识别影响催化剂性能的关键描述符，从而降低传统理论计算成本、提高研究效率的新策略，并重点论述了主动学习和生成模型等前沿技术如何实现更高效精准的催化剂设计与合成流程。除此之外，文章还特别强调了人工智能驱动的闭环自动化合成系统在提升催化剂设计、合成、表征及优化全流程的数据准确性与可重复性、减少人为误差方面的核心价值。

本研究还深入探讨了该领域在催化体系泛化能力、跨领域数据整合与共享，以及自动化实验异常识别与分析能力等方面的机遇和挑战，前瞻性地展望了对应的解决方案与技术发展路径，为推动催化领域向更高水平的自动化与智能化研究范式转型提供了借鉴。（来源：中国科学报孙丹宁）

相关论文信息：<https://doi.org/10.1016/j.matt.2025.102138>

作者：邓德会等 来源：《物质》

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