

---

# 人工智能助力化学家研发高韧性塑料

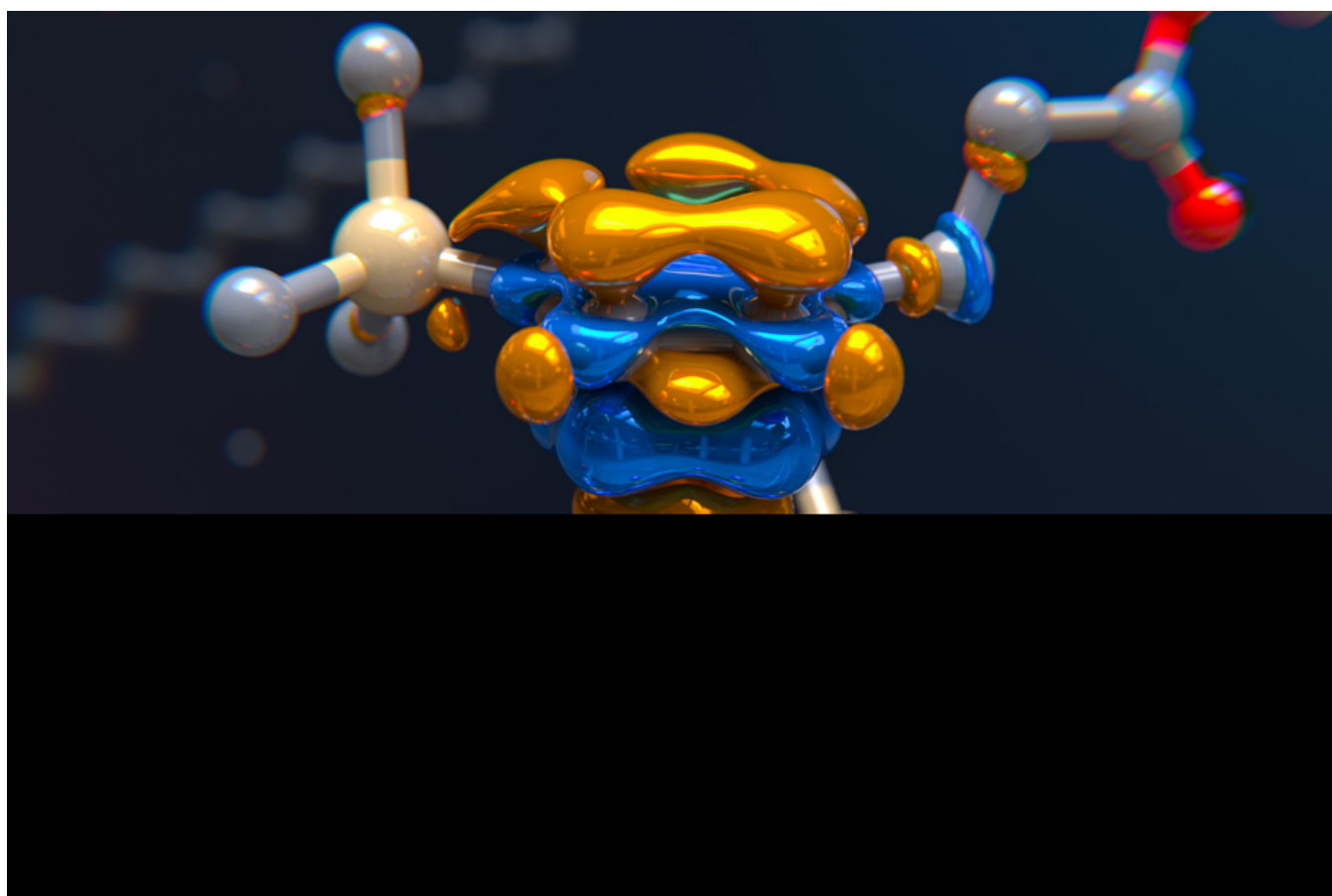
作者：writer 来源：科学网

本文原地址：<https://www.iikx.com/news/progress/35218.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！*

人工智能助力化学家研发高韧性塑料。麻省理工学院（MIT）与杜克大学的研究人员通过引入机器学习模型识别的应力响应分子，成功研制出抗撕裂性更强的聚合物材料。

这项强化聚合物材料的新策略有望催生更耐用的塑料，从而减少塑料废弃物。研究团队利用机器学习识别出可添加至聚合物材料的交联剂分子，使其在撕裂前能承受更大作用力。这类交联剂属于机械力响应分子，能在机械力作用下改变形状或其他特性。近日，相关研究发表于ACS Central Science。



AI助力开发新一代高韧性塑料。图源：MIT

?

---

这些分子有助于制造在受力时更坚固的聚合物。当施加压力时，材料不会开裂或断裂，而是表现出更高的韧性。MIT化学系教授Heather Kulik解释道。本研究发现的交联剂是二茂铁类含铁化合物，此前其机械力响应特性尚未被广泛探索。单次机械力响应分子的实验评估需数周时间，但研究人员证明机器学习模型可显著加速该过程。

机械力响应分子能以独特方式响应外力，通常通过改变颜色、结构或其他特性实现。机械力响应分子的发现与表征通常需耗时实验或计算密集型分子模拟。目前已知的机械力响应分子多为有机化合物。新研究聚焦于具机械力响应潜力的二茂铁类分子，这类金属有机化合物以铁原子为中心，两侧为含碳环结构，可通过添加不同化学基团改变其化学与机械性能。

虽然部分二茂铁化合物已被证实是优良的机械力响应分子，但大多数尚未评估。单次实验测试需数周，计算模拟虽较快仍需数天。面对数千候选分子的评估任务，研究团队决定采用神经网络加速筛选进程。

他们从剑桥结构数据库（含5000种已合成二茂铁化合物）起步。研究团队先对400种化合物进行计算模拟，量化分子内原子分离所需作用力，寻找易断裂的弱键分子以增强材料抗撕裂性。随后基于这些数据与分子结构信息训练机器学习模型，成功预测了数据库中剩余4500种化合物及7000种类似重组分子的机械力响应阈值。

研究发现两个关键特征可提升抗撕裂性：一是二茂铁环附着基团间的相互作用；二是双环连接大体积分子可增强外力响应断裂概率。Kulik指出：后者是化学家无法预先预测的颠覆性发现，完全依赖人工智能的洞察力。

在筛选出约100种候选分子后，实验室合成了包含m-TMS-Fc交联剂的聚丙烯酸酯塑料。力学测试显示：采用弱交联剂m-TMS-Fc的聚合物抗撕裂强度是以标准二茂铁为交联剂的4倍。

这具有重大意义：若能使塑料制品更坚韧，其使用寿命将延长，长期来看可减少塑料产量与废弃物积累。麻省理工学院博士后Ilia Kevlishvili强调。（来源：中国科学报 张晴丹）

相关论文信息：<https://doi.org/10.1021/acscentsci.5c00707>

作者：Heather Kulik 来源：《ACS中心科学》

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