

---

# 迭代式机器学习加速新型电池催化剂开发

作者：writer 来源：科学网

本文原地址：<https://www.iikx.com/news/progress/36935.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！**

**迭代式机器学习加速新型电池催化剂开发。**近日，电子科技大学基础与前沿研究院教授王斌、特聘研究员刘芯言和光电科学与工程学院程教授建丽提出一种基于机器学习辅助的过渡金属化合物（TMCs）筛选方法，用于快速发现适用于Li-CO<sub>2</sub>与Li-Air电池的高效催化剂。相关论文于11月7日发表于《美国化学会志》。

过渡金属化合物（TMCs）因其丰富的化学组成与可调的电子结构，作为Li-CO<sub>2</sub>和Li-Air电池的正极催化剂，受到广泛关注。然而，过渡金属候选材料数量庞大，传统的试错法材料设计方法不仅耗时漫长，而且研发周期复杂。

针对这一挑战，研究团队提出了一种迭代式机器学习工作流程，以加速高性能Li-CO<sub>2</sub>电池正极催化剂的发现，并通过实验验证了其有效性。该方法在机器学习模型的指导下，通过不断补充训练数据集实现模型的自我优化，能够直接预测催化剂的关键性能指标——过电位。

在该体系中，研究人员从15,012种过渡金属化合物中高效筛选出三种具有代表性的TMC催化剂并成功合成。实验验证结果表明，预测模型的平均绝对误差仅为0.106 V，显示出优异的预测精度。其中，Co<sub>0.1</sub>Mo<sub>0.9</sub>N表现出最优的催化性能，被进一步用于Li-CO<sub>2</sub>电池和Li-Air电池的机理分析与电化学性能测试。在50 mA g<sup>-1</sup>电流密度下，Co<sub>0.1</sub>Mo<sub>0.9</sub>N在Li-CO<sub>2</sub>和Li-Air电池中分别实现了仅0.55 V和0.65 V的低过电位。机理分析表明，Co掺杂有效调控了MoN的电子结构，促进了电子转移，从而显著提升了催化活性。

该研究为利用机器学习加速新型电池催化剂的筛选与设计提供了新的技术路径，也为构建更加高效、可持续的电化学能源体系奠定了基础。（来源：中国科学报 杨晨）

相关论文信息：<https://doi.org/10.1021/jacs.5c15395>

作者：王斌等 来源：《美国化学会志》

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](http://iikx.com)转发