

Studium průmyslově významných materiálů "in silico"

29.5.2024 - | Přírodovědecká fakulta UK

Zeolity jsou třídou mikroporézních aluminosilikátů s obrovskou strukturální a chemickou různorodostí, která pochází z nepřeberného množství stabilních uspořádání kovalentně vázaných tetraedrů oxidu křemíku a hliníku. To z nich činí všestrannou třídu materiálů s využitím v různých průmyslových oblastech od ukládání tepelné energie až po separaci plynů a čištění vody, avšak dominantně v heterogenní katalýze. Dosud však byl zevrubný průzkum jejich strukturální a chemické diverzity založen do značné míry na metodě pokus-omyl v experimentech a na zjednodušených teoretických modelech.

S nástupem strojového učení se otevírá okno příležitosti jak pro obrovské zrychlení výpočetních simulací, tak pro zavedení mnohem realističtějších a komplexnějších modelů (katalytických) materiálů. Právě toho skupina doc. Grajciara a Dr. Hearda využila a vyvinula model založený na konvolučních neuronových sítích, který je schopen řádově urychlit atomistické simulace různých tříd materiálů. Konkrétně se tato skupina zaměřila zejména na extrémně důležitou třídu tzv. kyselých zeolitů, které jsou jedním z pilířů stávajících petrochemických procesů, vyráběných v megatunovém měřítku, a také jedním z hlavních kandidátů na nové aplikace v udržitelné chemii. Je důležité si uvědomit, že kromě zrychlení atomistických simulací se ukázalo, že modely strojového učení jsou schopny objevovat v těchto materiálech nečekané chemické procesy a speciace. Navíc bylo také ukázáno, jak lze tyto základní modely neuronových sítí rozšířit o další pokročilé nástroje strojového učení pro další zlepšení přesnosti a efektivity vzorkování.

Závěrem lze říci, že tento nový nástroj založený na strojovém učení představuje velký krok směrem k rozsáhlým simulacím extrémně důležité třídy katalytických materiálů – zeolitů. Tento přístup je schopen začít řešit dlouhotrvající výzvy v oboru, od porozumění mechanistickým základům hydrotermální (ne)stability zeolitů až po určení charakteru (katalyticky) aktivních míst a defektů za provozních podmínek. Tato práce představuje důležitý příklad toho, jaký potenciál má strojové učení vzhledem k racionálnímu dizajnu nových materiálů.

Tato práce je částí disertace doktorandského studenta MSc. Indranila Saha a je podpořena zejména OP VVV "Excellent Research Teams" project č. CZ.02.1.01/0.0/0.0/15_003/0000417—CUCAM, Grantovou agenturou České republiky (projekt č. 23-07616S) a grantovým programem Univerzity Karlovy Primus (PRIMUS/20/SCI/004).

Erlebach, A., Šípka, M., Saha, I., Nachtigall, P., Heard, C. J. and Grajciar, L.. A reactive neural network framework for water-loaded acidic zeolites. *Nature Communications* **15**, 4215 (2024)

<https://www.natur.cuni.cz/fakulta/aktuality/studium-prumyslove-vyznamnych-materialu-nemusi-zahrnovat-jen-vedce-v-bilych-plastich>