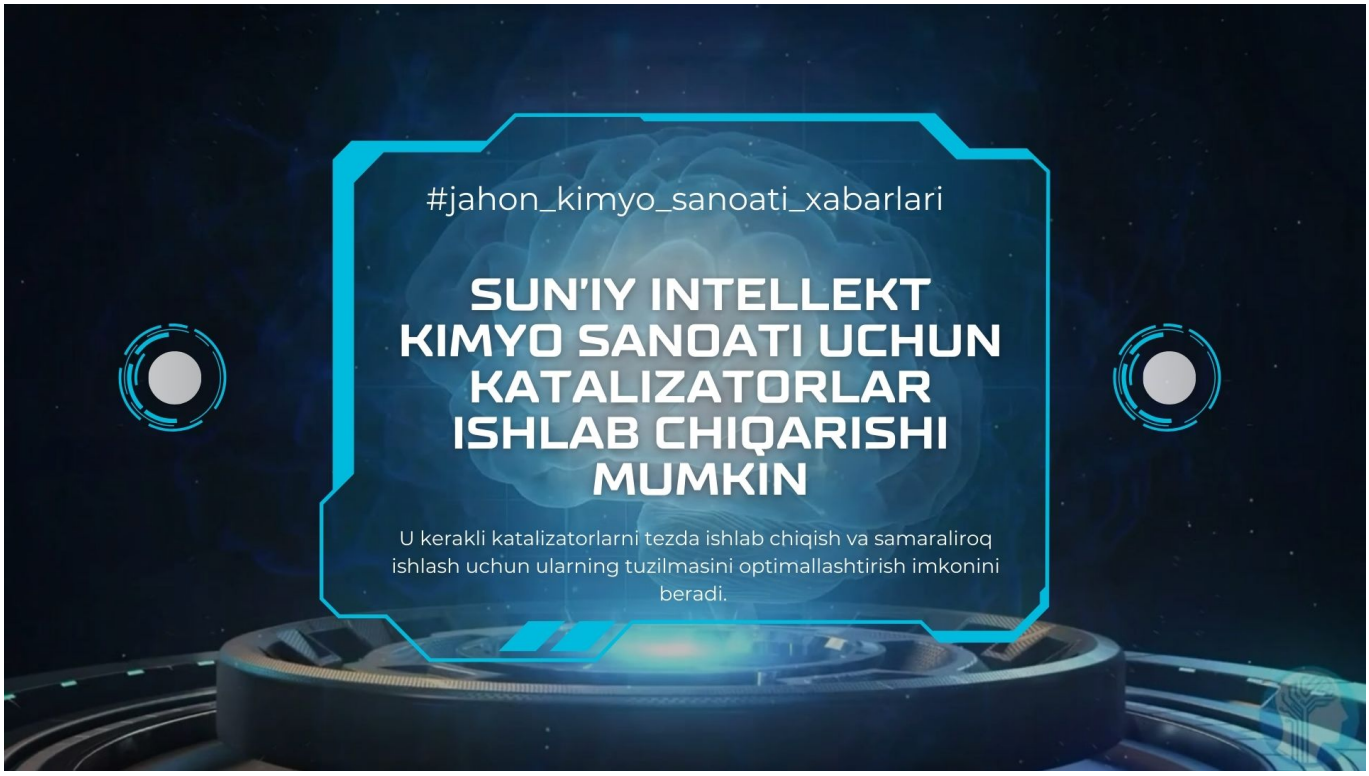
Sun’iy intellekt kimyo sanoati uchun katalizatorlar ishlab chiqarishi mumkin

// 13.02.2025
https://uzkimyosanoat.uz/oz/press/news/sun-iy-intellekt-kimyo-sanoati-uchun-katalizatorlar-ishlab-c



Yangi raqamli mahsulotni Xitoy fan va texnologiya universiteti professori Syun Yuysze boshchiligidagi amerikalik, yevropalik va xitoylik kimyogarlar guruhi yaratishdi. Sun’iy intellekt asosidagi tizim kerakli katalizatorlarni tezda ishlab chiqish va samaraliroq ishlash uchun ularning tuzilmasini optimallashtirish imkonini beradi.

Olimlar mazkur ishlanmani yaratishda yaqinda taqdim etilgan AlphaFold dasturidan ilhomlanishganini qayd etishgan.

Ularning ta’kidlashicha, ayni paytda kimyoviy reaksiyalarning eng samarali tezlatgichlarini xatoliklar va sinov usuli bilan tanlashga erishilmoqda. Buning uchun vaqt ham ko‘proq talab etiladi. Ishlab chiqilgan neyrotarmoq esa, jami 2 ming turdagi moddalar uchun aniq kvant-kimyoviy hisoblash natijalari asosida katalizatorning 180 mingdan ortiq mumkin bo‘lgan strukturaviy o‘zgarishlarini hisoblaydi.

Misol tariqasida, olimlar yorug‘lik zarralarini o‘zlashtira oladigan va karbonat angidrid molekulalarini parchalash uchun energiyasidan foydalanadigan 3,4 mingdan ortiq fotosintezlaydigan katalizatorlar uchun hisob-kitoblarni amalga oshirishgan. Neyrotarmoq ularga katalizatorlarning yettita istiqbolli shaklini tanlashda yordam berdi.

Ushbu molekulalarni laboratoriyada o‘rganib chiqqandan so‘ng, tadqiqotchilar ularning ishlashini ayrim hollarda taqqoslash mumkin, boshqalarida esa mavjud katalizatorlardan oshib ketadi degan xulosaga kelishdi.

Kobalt va mis ionlarini o‘z ichiga olgan eng yaxshi variant karbonat angidrid molekulalarining 93% dan ko‘prog‘ini uglerod oksidiga aylantirdi va taxminan 80 soat ishlash uchun o‘z xususiyatlarini saqlab qoldi.

“O‘zkimyosanoat” AJ Matbuot xizmati