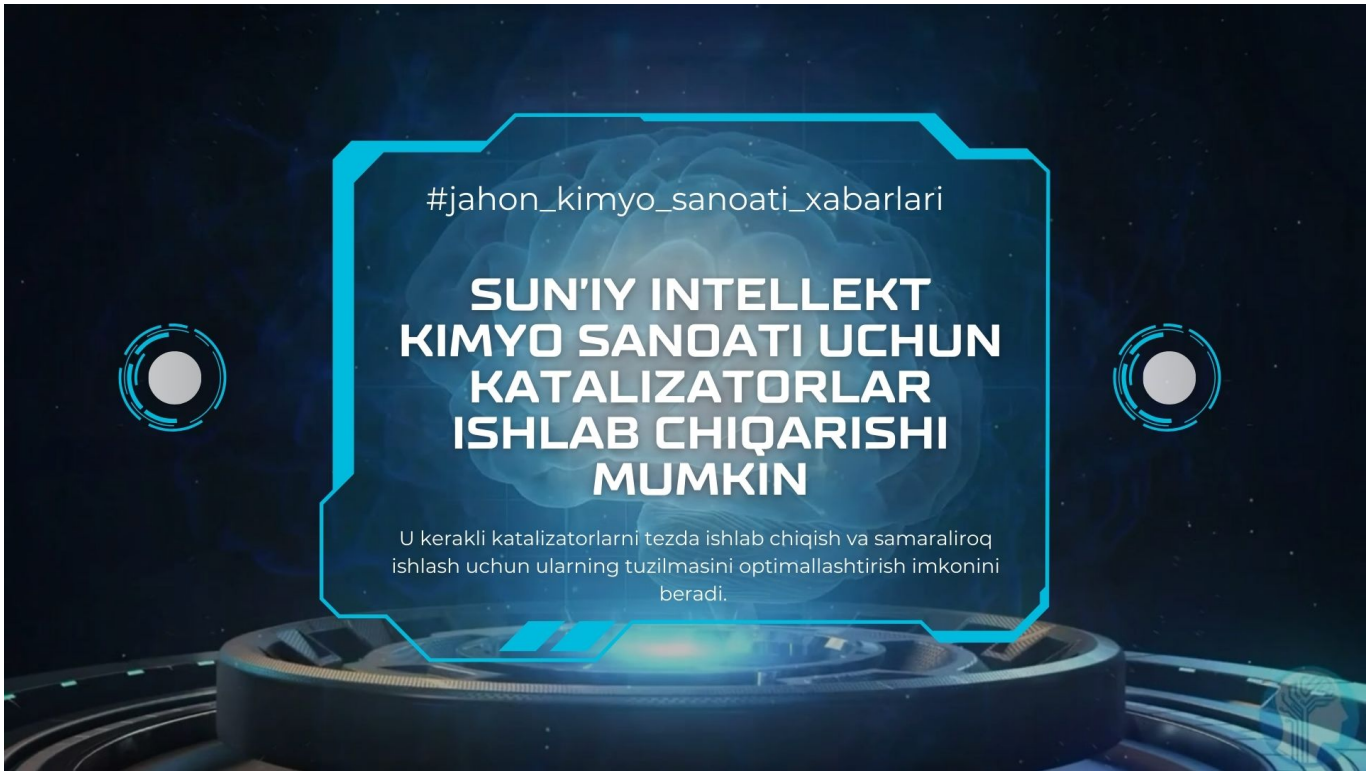
# Сунъий интеллект кимё саноати учун катализаторлар ишлаб чиқариши мумкин

// 13.02.2025
https://uzkimyosanoat.uz/uz/press/news/suniy-intellekt-kimyo-sanoati-uchun-katalizatorlar-ishlab-ch




Янги рақамли маҳсулотни Хитой фан ва технология университети профессори Сюн Юйцзе бошчилигидаги америкалик, европалик ва хитойлик кимёгарлар гуруҳи яратишди. Сунъий интеллект асосидаги тизим керакли катализаторларни тезда ишлаб чиқиш ва самаралироқ ишлаш учун уларнинг тузилмасини оптималлаштириш имконини беради.

Олимлар мазкур ишланмани яратишда яқинда тақдим этилган AlphaFold дастуридан илҳомланишганини қайд этишган.

Уларнинг таъкидлашича, айни пайтда кимёвий реакцияларнинг энг самарали тезлатгичларини хатоликлар ва синов усули билан танлашга эришилмоқда. Бунинг учун вақт ҳам кўпроқ талаб этилади. Ишлаб чиқилган нейротармоқ эса, жами 2 минг турдаги моддалар учун аниқ квант-кимёвий ҳисоблаш натижалари асосида катализаторнинг 180 мингдан ортиқ мумкин бўлган структуравий ўзгаришларини ҳисоблайди.

Мисол тариқасида, олимлар ёруғлик зарраларини ўзлаштира оладиган ва карбонат ангидрид молекулаларини парчалаш учун энергиясидан фойдаланадиган 3,4 мингдан ортиқ фотосинтезлайдиган катализаторлар учун ҳисоб-китобларни амалга оширишган. Нейротармоқ уларга катализаторларнинг еттита истиқболли шаклини танлашда ёрдам берди.

Ушбу молекулаларни лабораторияда ўрганиб чиққандан сўнг, тадқиқотчилар уларнинг ишлашини айрим ҳолларда таққослаш мумкин, бошқаларида эса мавжуд катализаторлардан ошиб кетади деган хулосага келишди.

Кобалт ва мис ионларини ўз ичига олган энг яхши вариант карбонат ангидрид молекулаларининг 93% дан кўпроғини углерод оксидига айлантирди ва тахминан 80 соат ишлаш учун ўз хусусиятларини сақлаб қолди.

**“Ўзкимёсаноат” АЖ Матбуот хизмати**