

东南大学物理学院教授在机器学习预测新材料研究中取得重要进展

近日，东南大学物理学院王金兰教授课题组通过结合机器学习(ML)技术和密度泛函理论(DFT)，提出了一套智能化的材料设计新策略，成功预测了5000余种潜在有机无机杂化钙钛矿材料(HOIPs)的带隙，并且从中挑选出了多种环境稳定、带隙适中的无铅HOIPs太阳能电池材料。该研究成果在线发表在Nature子刊《自然·通讯》(Nature Communications)上，标题为Accelerated discovery of stable lead-free hybrid organic-inorganic perovskites via machine learning。

能源危机的大背景下，迫切需要高效无毒的新型太阳能电池材料来取代传统的化石能源。然而传统的材料设计方法存在着效率低下，资源浪费严重等问题，尤其是面对成千上万种候选材料时，这种方法更是捉襟见肘。最近，ML技术在材料设计领域崭露头角。通过绕过复杂的量子力学，ML技术不仅可以大大加快新型功能材料的设计，而且还能从材料数据中学习材料基本的构效关系。这一新的材料设计策略已经在分子有机发光二极管、形状记忆合金、压电体等领域得到成功应用，然而还未在极具光伏应用潜力的有机无机杂化钙钛矿领域得到有效探索。

东南大学物理学院王金兰教授课题组基于ML技术和DFT计算，开发了一种靶向驱动法用于发现高效、稳定的无铅HOIPs。研究人员从212个已报道的HOIPs带隙值中训练ML模型，成功预测了5000多种潜在HOIPs的带隙，最终筛选出六种具有适当太阳能带隙和室温热稳定性的正交无铅HOIPs，其中两种在可见区域具有直接带隙和优异的环境稳定性。研究人员还通过ML技术进行大数据挖掘，获得了影响理想HOIPs太阳能电池性能的关键因素。这一靶向驱动法克服了传统试错法的主要障碍，不仅可以瞬间达到DFT精度，而且特别适用于小数据集。这一工作极大地加速了具有光伏应用潜力的杂化钙钛矿材料设计进程，并可应用于其他功能材料的设计与发现。本文第一作者为东南大学物理学院硕士一年级学生陆帅华，物理学院教师周翌桦老师为共同第一作者，王金兰教授为论文唯一通讯作者。该工作受到国家重点研发计划、国家杰出青年基金等项目资助。(蒋红燕)

原文地址：<http://www.china-nengyuan.com/tech/128263.html>