

Mensch gegen (Synthese-)Maschine

10.08.2017, 13:00 | Wissenschaft, Forschung, Bildung

Pressemitteilung von: *Gesellschaft Deutscher Chemiker e. V.*

Presseagentur: *Gesellschaft Deutscher Chemiker e. V.*



Mensch gegen Roboter als Experimentator (c) Wiley-VCH

Aktives Maschinenlernen zur Entdeckung und Kristallisation von Polyoxometallat-Riesenmolekülen

Wer ist der bessere Experimentator, Mensch oder Roboter? Wenn es um das Ausloten von Synthese- und Kristallisationsbedingungen anorganischer „Riesenmoleküle“ geht, dann hat die aktiv lernende Maschine eindeutig die Nase vorn, wie britische Wissenschaftler jetzt in der Zeitschrift *Angewandte Chemie* am Beispiel eines Polyoxometallats zeigen.

Polyoxometallate entstehen durch eine selbstorganisierte Zusammenlagerung einer größeren Anzahl über Sauerstoffatome verbrückter Metallatome. Potenzielle Anwendungen finden sich etwa in der Katalyse, der Elektronik und der Medizin. Erkenntnisse über die beteiligten Selbstorganisationsprozesse könnten zudem bei der Entwicklung funktionaler chemischer Systeme, z.B. „molekularer Maschinen“, helfen.

Polyoxometallate bieten eine nahezu unbegrenzte Strukturvielfalt. Dennoch ist es nicht leicht, neue zu finden, denn die Zusammenlagerung komplexer anorganischer Moleküle zu Riesenmolekülen ist ein schwer absehbarer Vorgang. So

müssen Bedingungen gefunden werden, unter denen sich die Bausteine zusammenlagern und zudem kristallisieren, sodass sie sich charakterisieren lassen.

Das Team um Leroy Cronin von der Universität Glasgow (Großbritannien) hat jetzt einen neuen Ansatz entwickelt, um den Rahmen geeigneter Bedingungen für Synthese und Kristallisation von Polyoxometallaten abzustecken. Er basiert auf jüngsten Fortschritten auf dem Gebiet des Maschinenlernens, bekannt als aktives Lernen. Ihre trainierte Maschine ließen sie dann gegen die Intuition erfahrener Experimentatoren antreten. Testbeispiel war $\text{Na}_6[\text{Mo}_{120}\text{Ce}_6\text{O}_{366}\text{H}_{12}(\text{H}_2\text{O})_{78}] \cdot 200 \text{ H}_2\text{O}$, ein neuer ringförmiger Polyoxometallat-Cluster, der kürzlich vom automatisierten chemischen Robotersystem der Forscher entdeckt worden war.

Bei ansonsten vorgeschriebenem Versuchsprotokoll sollten die Mengenverhältnisse der drei benötigten Reagenzienlösungen variiert werden. Ausgangspunkt für den experimentellen Wettstreit war ein Datensatz erfolgreicher und erfolgloser Kristallisationsexperimente. Zehn Experimente sollten geplant und basierend auf deren Ergebnissen jeweils der nächste Satz von zehn Experimenten angegangen werden – insgesamt 100 Kristallisationsversuche.

Auch wenn die Experimentatoren aus Fleisch und Blut insgesamt mehr erfolgreiche Kristallisationen vorweisen konnten, zeigte sich der weitaus „mutiger“ vorgehende Maschinen-Algorithmus unterm Strich überlegen, indem er einen deutlich breiteren Bereich des „Kristallisationsraums“ abdeckte. Die Vorhersagegenauigkeit, ob ein Experiment zu Kristallen führt, konnte durch die Versuche der Maschine deutlich stärker erhöht werden als durch die der Experimentatoren. Eine Reihe aus 100 rein zufälligen Versuchen brachte dagegen keinerlei Verbesserung. Die Maschine entdeckte zudem einen Bereich von Bedingungen, der zu Kristallen führte, für den dies rein intuitiv nicht zu erwarten gewesen wäre. Neuartige Verbindungen lassen sich durch diese „unvoreingenommene“ automatisierte Methode mit höherer Wahrscheinlichkeit entdecken als durch menschliche Intuition. Die Forscher suchen jetzt nach Wegen zu besonders effizienten „Teams“ aus Mensch und Maschine.

Angewandte Chemie: Presseinfo 34/2017

Autor: Lee Cronin, University of Glasgow (United Kingdom), <http://www.chem.gla.ac.uk/cronin/>

Link zum Originalbeitrag: <https://doi.org/10.1002/ange.201705721>

Angewandte Chemie, Postfach 101161, 69451 Weinheim, Germany.

Weitere Informationen:

- <http://presse.angewandte.de>

Quelle: idw

Portrait

-

News-ID: 963026 • Views: 354 (Stand: 02.06.2026)

Link zur Pressemitteilung:

<https://www.openpr.de/news/963026/Mensch-gegen-Synthese-Maschine.html>