

Fra kvantekemi til AI: Nye værktøjer til overfladekemi

Kvantekemi gav os evnen til at forstå kemiske processer på atomart niveau. AI gør det nu muligt at anvende denne forståelse på realistiske og komplekse systemer.

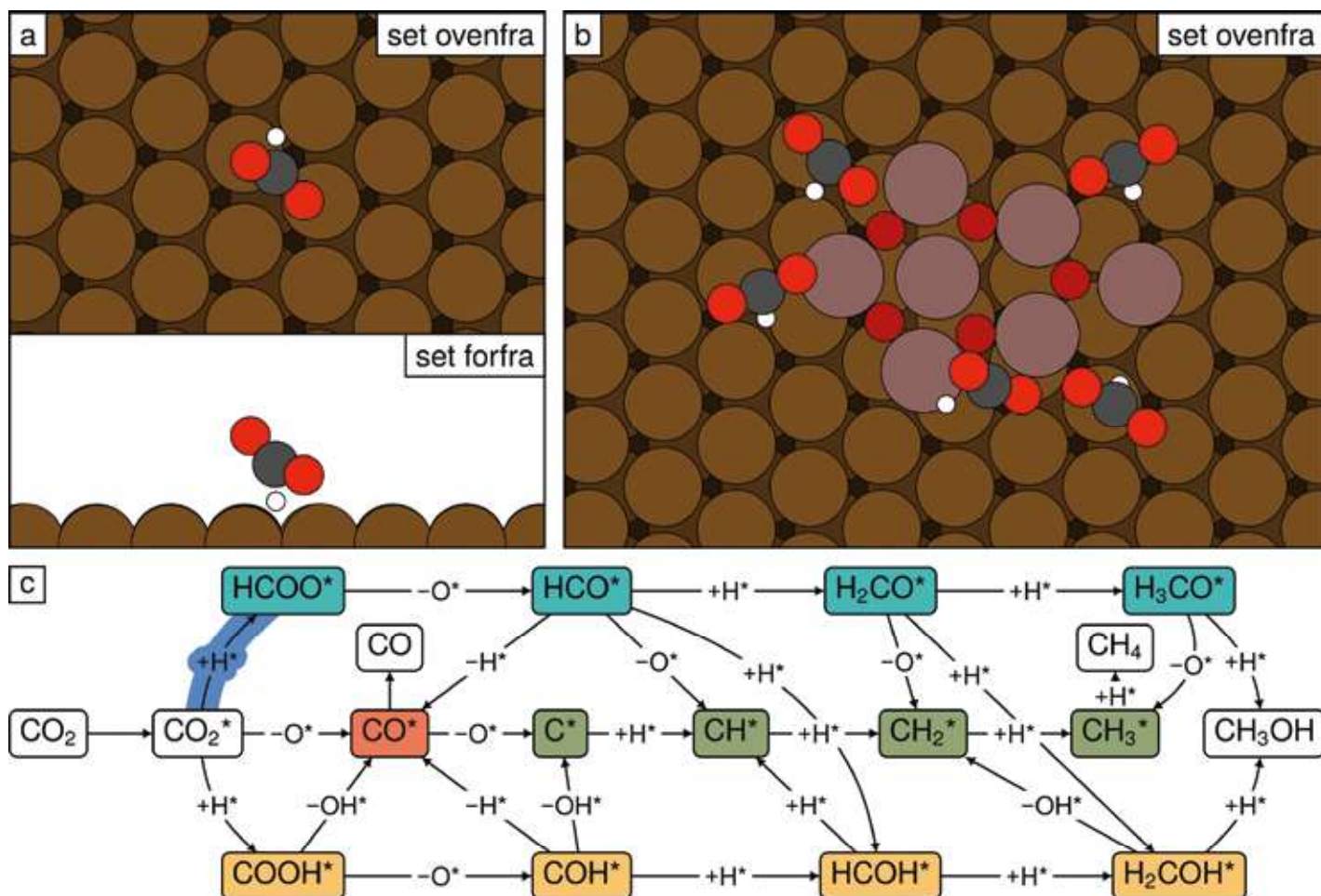
Af Mie Andersen, Marius Juul Nielsen og Luuk Kempen, Institut for Fysik og Astronomi, Aarhus Universitet

Forskning i, hvordan faste stoffers overflader kan katalysere kemiske reaktioner, går over 100 år tilbage. Et af de mest kendte eksempler er Fritz Haber og Carl Boschs udvikling af en jernbaseret katalysator til industriel produktion af ammo-

niak – et gennembrud, der førte til Nobelpriser i kemi i 1918 og 1931.

Fra 1990'erne blev det muligt at supplere laboratorieforsøg med computerberegninger. Fremskridt inden for kvantekemiske metoder, især tæthedsfunktionalteori (DFT), gjorde det muligt med høj nøjagtighed at beskrive molekylære processer som dannelse og brydning af kemiske bindinger.

En grundlæggende udfordring har imidlertid været, at DFT-



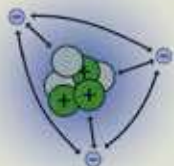
Figur 1. Reaktion mellem CO_2 og H på (a) simpel model af kobberbaseret materiale og (b) mere kompleks model af grænseflade mellem metal- og oxidkomponenter i et katalysatormateriale med mange forskellige typer reaktionssteder. (c) Reaktionsnetværk for konvertering af CO_2 til kemiske produkter som CO , CH_4 og CH_3OH .

Beregningsmetoder

Kvantemekanik

Kemiske reaktioner bestemmes af, hvordan elektroner og atomkerner vekselvirker. Kvantemekanikken giver i princippet mulighed for at beregne disse vekselvirkninger og dermed systemets energi. I praksis er beregningerne (via Schrödingerligningen, vist nedenfor) dog meget krævende, især når mange atomer og elektroner skal beskrives samtidig.

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\mathbf{r}) \right) \Psi = E \Psi$$

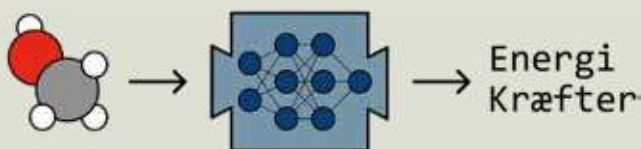


Tæthedsfunktionalteori (DFT)

DFT er en kvantekemisk metode, der gør det muligt at beregne energier og kræfter for systemer med mange atomer ved at bruge en simplere model for vekselvirkningerne mellem elektronerne. DFT bruges derfor ofte som reference, når man vil forstå kemiske reaktioner på atomart niveau.

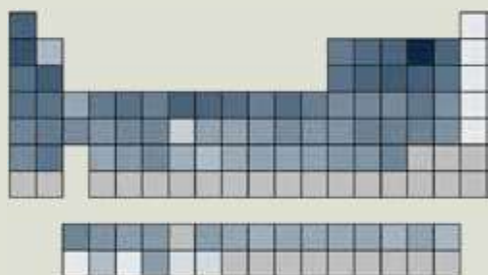
Maskinlæringspotentialer

Et maskinlæringspotential kan i stedet lære sammenhængen mellem atomernes placering og den energi og de kræfter, som en kvantekemisk beregning ville give. Dermed bliver det muligt at udføre beregninger for meget større systemer og over længere tidsskalaer end muligt med DFT.



Universelle maskinlæringspotentialer

Her tages skridtet videre. I stedet for at træne til ét bestemt materiale, trænes de på meget store datasæt, der dækker mange forskellige grundstoffer og kemiske strukturer. Målet er at få én model, der kan bruges på tværs af mange typer kemi.



beregninger kræver betydelige computerressourcer. Derfor har beregningsstudier af katalyse traditionelt været begrænset til stærkt forsimplede modeller af overflader og reaktionsmekanismer (figur 1a, side 9). Denne situation er nu ved at ændre sig markant. Nye AI-baserede metoder kan udføre beregninger med en hastighed, der tidligere var utænkelig, samtidig med at de bevarer en nøjagtighed tæt på DFT. Det åbner mulighed for at studere langt mere realistiske katalysatorer og kemiske processer end hidtil.

Maskinlæringspotentialer

En af de vigtigste udviklinger inden for AI-baserede beregningsmetoder er maskinlæringspotentialer baseret på neurale netværk [1]. På få år har de revolutioneret beregninger inden for katalyse og overfladekemi samt relaterede discipliner som biokemi og materialefysik. Et neuralt netværk består af mange forbundne enheder, kaldet neuroner. Man kan betragte det som en fleksibel matematisk model med et meget stort antal parametre, som automatisk tilpasses et datasæt under træningen.

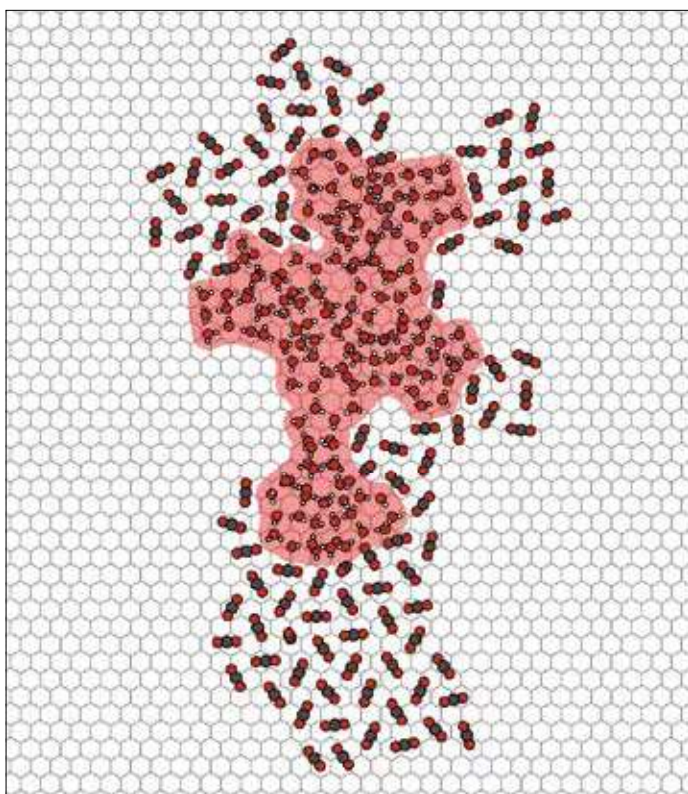
For maskinlæringspotentialer består træningsdata af atomare strukturer – for eksempel molekyler eller faste stoffer – samt deres energier og de kræfter, der virker på atomerne. Disse data beregnes med kvantekemiske metoder som DFT. Under træningen justeres modellens parametre, så den lærer sammenhængen mellem atomernes placering og systemets energi og kræfter. Når træningen er afsluttet, kan modellen effektivt forudsige energier og kræfter for nye atomare strukturer uden at skulle udføre en ny kvantekemisk beregning.

AI til katalyse

I vores forskning udvikler vi AI-baserede beregningsmetoder til at designe katalysatorer, der kan omdanne drivhusgassen CO₂ til værdifulde kemiske produkter som metanol. En central udfordring er, at realistiske katalysatorer er langt mere komplekse end de idealiserede modeller, der traditionelt anvendes i beregninger. De består ofte af flere materialer, for eksempel metaller og oxider, og de kemiske reaktioner kan følge mange forskellige reaktionsveje (figur 1b og c, side 9).

På en simpel metaloverflade, for eksempel kobber, findes kun få forskellige typer reaktionssteder (sites), hvor molekyler kan adsorbere og reagere. På en mere realistisk katalysator med både oxid- og metalkomponenter findes der derimod et stort antal ikke-ækvivalente sites, som alle kan have forskellige kemiske egenskaber. For at forstå katalysatoren må man derfor undersøge reaktioner på mange forskellige sites på overfladen, hvilket hurtigt fører til et meget stort antal nødvendige beregninger.

I et nyligt studie udviklede vi et maskinlæringspotential, der kan forudsige reaktionsbarrierer på tværs af de mange forskellige sites på oxidpartikler understøttet af en metaloverflade [2]. Modellen gør det muligt at beregne reaktionsbarrierer med en nøjagtighed tæt på DFT, men til en brøkdel af beregningsomkostningerne. Dermed bliver det praktisk muligt systematisk at kortlægge, hvordan den lokale atomstruktur påvirker katalysatorens aktivitet, og hvilke egenskaber der gør bestemte steder mere aktive end andre.



Figur 2. Model af karbonbaseret støvkorn (her grafén – et enkelt lag af grafit) med is af H_2O og CO_2 , som er blandt de mest udbredte molekyler i gasskyer i rummet. Modellen er konstrueret ved brug af molekyldynamik-simuleringer drevet af et maskinlæringspotentialer.

Universelle maskinlæringspotentialer

En af de mest markante nyskabelser i de senere år er fremkomsten af universelle maskinlæringspotentialer. Hvor traditionelle maskinlæringspotentialer ofte udvikles til ét specifikt materiale eller problem, forsøger universelle modeller at lære generelle mønstre på tværs af hele det kemiske rum [3].

Udviklingen kan sammenlignes med den rolle, som ChatGPT og andre large language models (LLM'er) har fået inden for tekstbehandling. LLM'er trænes på enorme tekstmængder og kan derfor generere meningsfuld tekst om næsten ethvert emne. På samme måde trænes universelle maskinlæringspotentialer på store mængder kvantekemiske data, så de kan forudsige energier og kræfter for mange forskellige kemiske strukturer – fra små molekyler og krystaller til kemiske reaktioner i gasfasen eller på overflader.

Ligesom LLM'er er de universelle modeller dog ikke fejlfrie. Som vi har vist i et nyligt studie [4], kan de give upræcise resultater for katalytiske systemer, der ligger uden for de typer af strukturer, de er trænet på, eller for særligt vanskelige kemiske problemstillinger. Alligevel udvikler feltet sig med en bemærkelsesværdig hastighed. Nye modeller offentliggøres hver måned og opnår stadig højere nøjagtighed og bedre evne til at generalisere til nye kemiske systemer. Udviklingen drives ikke alene af universiteter og forskningsinstitutioner; også store teknologivirksomheder som Google, Microsoft og Meta investerer betydelige ressourcer i at udvikle næste generation af universelle maskinlæringspotentialer.

Selv om de universelle modeller endnu ikke generelt kan beregne reaktionsbarrierer med samme nøjagtighed som kvantekemiske metoder, udgør de allerede et stærkt udgangspunkt.

Ved at videretræne modellerne på et relativt lille, systemspecifikt datasæt kan deres nøjagtighed forbedres betydeligt [5]. I et nyligt samarbejde med forskere fra Carnegie Mellon University har vi udviklet en metode til netop denne type finjustering for overfladereaktioner, som gør det muligt at opnå DFT-lignende nøjagtighed med beskedne computerressourcer [6].

Yderligere perspektiver

Maskinlæringspotentialer er på få år blevet et centralt værktøj inden for atomistisk modellering og anvendes i dag i forskning inden for kemi, materialefysik, biokemi, geovidenskab og astrokemi. I vores forskning anvender vi dem også til at undersøge, hvordan molekyler som H_2O , CO_2 og CO binder til mikroskopiske støvkorns overflader og danner is i det interstellare rum (figur 2) [7]. Disse isdækkede støvkorn fungerer som reaktionssteder, hvor komplekse organiske molekyler kan dannes. Nogle af disse, for eksempel sukkerstoffer [8], kan have været blandt byggestenene i den præbiotiske kemi, der gik forud for livets opståen. Med AI-baserede beregningsmetoder kan vi nu studere disse processer med en hidtil uset detaljeringsgrad og dermed opnå en bedre forståelse af kemien i støv- og gasskyer, hvor nye stjerner og planeter dannes.

Udviklingen af maskinlæringspotentialer går i øjeblikket meget hurtigt. Sammen med stadig kraftigere AI-modeller tegner det et billede af en fremtid, hvor beregninger, der tidligere var urealistiske, bliver rutine. Det åbner nye muligheder for at forstå og designe materialer og kemiske processer – fra katalysatorer til den kemi, der finder sted mellem stjernerne.

E-mail:

Mie Andersen: mie@phys.au.dk

Litteratur

- Behler, J. and M. Parrinello, Generalized Neural-Network Representation of High-Dimensional Potential-Energy Surfaces. *Physical Review Letters*, 2007. 98(14): p. 146401.
- Kempen, L.H.E., M.J. Nielsen, and M. Andersen, Breaking Scaling Relations with Inverse Catalysts: A Machine Learning Exploration of Trends in CO_2 -to-Formate Energy Barriers. *ACS Catalysis*, 2025. 15(21): p. 17635–17644.
- Chen, C. and S.P. Ong, A universal graph deep learning interatomic potential for the periodic table. *Nature Computational Science*, 2022. 2(11): p. 718–728.
- Kempen, L.H.E., R. Cheula, and M. Andersen, How accurate are foundational machine learning interatomic potentials for heterogeneous catalysis? *The Journal of Chemical Physics*, 2026. 164(19).
- Focassio, B., L.P. M. Freitas, and G.R. Schleider, Performance Assessment of Universal Machine Learning Interatomic Potentials: Challenges and Directions for Materials' Surfaces. *ACS Applied Materials & Interfaces*, 2024. 17(9): p. 13111–13121.
- Cheula, R., M. Andersen, and J.R. Kitchin, Fine-tuning universal machine learning potentials for transition state search in surface catalysis. *npj Computational Materials*, 2026 (in press).
- Vaishnav, A., N.M. Mikkelsen, and M. Andersen, Machine Learning Exploration of Binding Energy Distributions of H_2O at Astrochemically Relevant Dust Grain Surfaces. *ACS Earth and Space Chemistry*, 2026. 10(5): p. 1380–1390.
- Jiménez-Serra, I., et al., Detection of a four-carbon sugar in interstellar space. *Nature Astronomy*, 2026 (in press).