Entrepreneurship Journal for Finance and Business (EJFB)
2026, VOL. 07, NO. special, 284-292, E-ISSN: 2709-4251, P-ISSN: 2708-8790
DOI: https://doi.org/10.56967/ejfb2026937

The role of artificial intelligence techniques in discovering inorganic nanomaterials for achieving sustainable development

Ansam S. Kadhim*
General Directorate of Education in Basra, Basra, Iraq

Article information:
Published: 25–08– 2026

***Corresponding author:**
Ansam S. Kadhim
battatans12@gmail.com

This work is licensed under a Creative Commons Attribution 4.0 International License.

Abstract:

This paper reviews the growing role of AI in accelerating the discovery and design of inorganic nanomaterials for sustainable development through a six-stage pipeline: Data → AI → Prediction → Design → Fabrication → Application. Using a critical-analytical approach supported by quantitative metrics (99.99% correlation for TiO_2 band gap, screening of >10 million oxides, >2 compounds/day at A-Lab), it systematically compares ML, DL, and GNN techniques, alongside DFT-based high-throughput screening, inverse design, active learning, and self-driving laboratories. Based on 30 peer-reviewed references (2013–2026) selected using PRISMA guidelines from Scopus, Web of Science, and Google Scholar.

Keywords: Artificial intelligence, machine learning, inorganic nanomaterials, sustainable development, self-driving laboratories.

Conclusions:

The integration of AI with inorganic nanomaterials chemistry represents a revolution in discovery logic. The quantified metrics confirm the depth of this transformation: 99.99% correlation for TiO_2, R^2=0.978 for ZnO, 96.3% classification accuracy for $BiVO_4$, screening of >185,000 conditions for MoS_2, and >10 million oxides screened for water splitting photocatalysts. These results confirm that matching the algorithm to the nature of the problem is more decisive than model complexity, and that including failed experiments in databases doubles prediction accuracy. Future priorities include cross-category foundation models, kinetically-aware algorithms, and real-time in-loop characterization.

دور تقنيات الذكاء الاصطناعي في اكتشاف المواد اللاعضوية النانوية لتحقيق التنمية المستدامة

أنسام سجاد كاظم*
المديرية العامة لتربية البصرة، بصرة، العراق

معلومات البحث:
• تاريخ النشر: 2026 –08– 25

***المؤلف المراسل:**
أنسام سجاد كاظم
battatans12@gmail.com

المستخلص:
يستعرض هذا البحث الدور المتنامي لتقنيات الذكاء الاصطناعي في تسريع اكتشاف وتصميم المواد اللاعضوية النانوية في خدمة أهداف التنمية المستدامة، عبر مسار تتابعي سداسي المراحل :البيانات ←الذكاء الاصطناعي ←التنبؤ ←التصميم ←التصنيع ← التطبيق .يناقش البحث تقنيات التعلم الآلي والتعلم العميق والشبكات البيانية في تحليل خصائص المواد، والفحص الحاسوبي عالي الإنتاجية بدمج النظرية الدالية للكثافة (DFT)مع قواعد البيانات المفتوحة كمشروع المواد .كما يتناول التصميم العكسي والتعلم الفعّال والمختبرات الذاتية القيادة وأبرز التطبيقات المستدامة .استند البحث إلى 30مرجعاً علمياً محكَّماً –2013) 2026)انتُقيت وفق منهجية PRISMA.

الكلمات المفتاحية: الذكاء الاصطناعي، التعلم الآلي، المواد اللاعضوية النانوية، التنمية المستدامة، المختبرات الذاتية القيادة.

هذا العمل مرخص بموجب المشاع الابداعي نسب المصنف 4.0 دولي (CC BY 4.0)

1. المقدمة

تشهد علوم المواد في العقدين الأخيرين تحولاً جذرياً في منهجيات الاكتشاف، إذ أفسحت الأساليب التقليدية القائمة على التجربة والخطأ المجال لمقاربات تعتمد على البيانات والخوارزميات الذكية .يُعزى هذا التحول إلى محدودية الأساليب الكلاسيكية في استكشاف فضاء التركيب الكيميائي الهائل للمواد اللاعضوية الذي يتجاوز 10^{23}تركيباً محتملاً وفق تقديرات علم المعلوماتية المادية.

وقد برزت تقنيات التعلم الآلي والتعلم العميق كأدوات فاعلة تتعلّم العلاقات المعقدة بين البنية الذرية وخصائص المادة الفيزيوكيميائية، ثم تستخدم هذه العلاقات للتنبؤ بخصائص مواد لم تُصنَّع بعد .وفي ظل أهداف التنمية المستدامة للأمم المتحدة (SDGs)التي تُلزم المجتمع الدولي بتحقيق مؤشرات محددة في الطاقة النظيفة والمناخ بحلول 2030، بات توظيف الذكاء الاصطناعي في اكتشاف مواد لا عضوية نانوية وظيفية ضرورةً بحثية .يُؤطِّر هذا البحث الدور المتكامل للذكاء الاصطناعي ضمن مسار تتابعي سداسي :البيانات ←الذكاء الاصطناعي ←التنبؤ ←التصميم ←التصنيع ←التطبيق.

2. الفجوة البحثية ومساهمة البحث

تعاني الأدبيات القائمة من ثلاث مسارات منفصلة (1) :دراسات تقنية مُتخصِّصة تتناول خوارزمية واحدة على مادة بعينها دون سياق مقارن أوسع، (2)مراجعات عامة شاملة تتناول المواد العضوية واللاعضوية دون تخصيص كافٍ للمواد اللاعضوية النانوية وارتباطها بالتنمية المستدامة، و (3)مراجعات سردية تجمّل النتائج الفردية دون مقارنة نقدية منهجية.

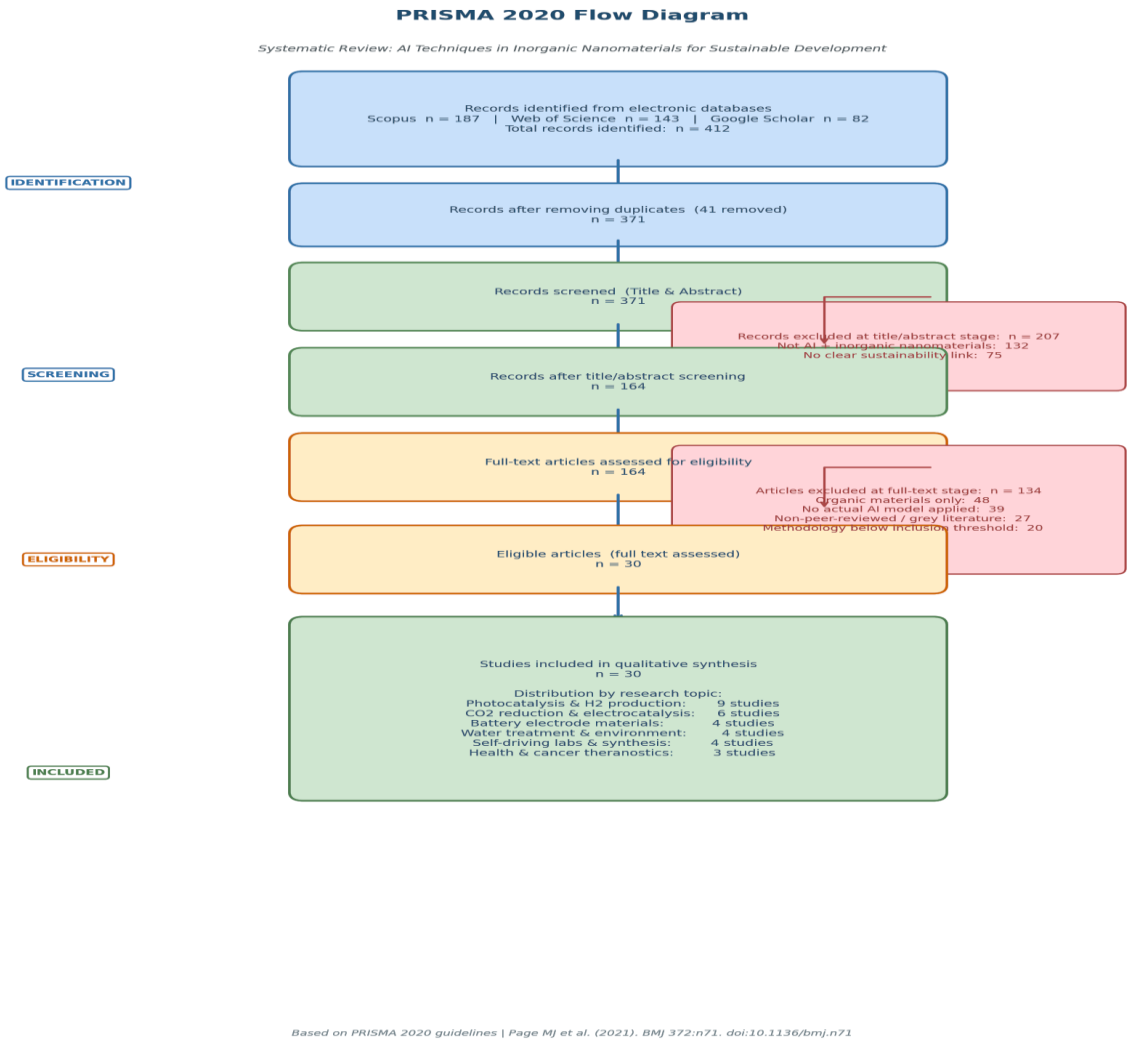
يسعى هذا البحث إلى معالجة هذه الفجوة عبر أربع مساهمات (1) :مسار تتابعي سداسي صريح يضع كل تقنية في موضعها الدقيق، (2)تركيز حصري على المواد اللاعضوية النانوية وربطها بمحاور الاستدامة الخمسة، (3)مقاربة نقدية تحليلية تفسّر أسباب نجاح أو فشل النماذج كيميائياً وحاسوبياً، (4)جداول مقارنة كمية موحَّدة من أكثر من عشرين دراسة حديثة.

3. منهجية البحث

اعتمد البحث منهجية المراجعة السردية التحليلية (Narrative Review)لسعة الموضوع وتشعّبه بين الكيمياء اللاعضوية وعلم المواد والتعلم الآلي .وجرى البحث في Scopusو Web of Scienceو Google Scholarضمن المدى 2013–2026. شملت معايير الإدراج :الأبحاث الأصيلة والمراجعات المحكَّمة التي تطبّق فعلياً تقنية ذكاء اصطناعي على مادة لا عضوية نانوية مرتبطة بمحور من محاور التنمية المستدامة .استُبعدت الدراسات المتعلقة بالمواد العضوية حصراً والتجارب التوصيفية دون ذكاء اصطناعي .أسفر ذلك عن 30مرجعاً أساسياً.

3.1 المراجعة المنهجية (PRISMA)

اعتمد هذا القسم منهجية المراجعة المنهجية وفق إرشادات PRISMAلضمان الشفافية والشمولية في انتقاء الأدلة .أسفر البحث الأولي عن 412دراسة (Scopus=187، Web of Science=143، Google Scholar=82)، خُضِعت لتصفية منهجية بمرحلتين :المرحلة الأولى)تصفية العنوان والملخص (أزالت 207دراسة لعدم ارتباطها بالمواد اللاعضوية النانوية أو الذكاء الاصطناعي معاً، والمرحلة الثانية)تصفية النص الكامل (استبعدت 134دراسة إضافية لضعف الصرامة المنهجية .أسفر ذلك عن 30مرجعاً أساسياً كما يوضحه مخطط PRISMA 2020في الشكل 4.



الشكل4: مخطط تدفق PRISMA 2020لعملية انتقاء الدراسات 412)سجلاً 30 ←مرجعاً أساسياً .(توزيع الدراسات : التحفيز الضوئي(9) H_2/، اختزال (6) CO_2، البطاريات (4)، معالجة المياه (4)، المختبرات الذاتية (4)، الصحة/السرطان .(3)
المصدرPage et al. (2021), BMJ 372:n71 :

الجدول :(3.2)الجدول التحليلي للدراسات السابقة

الباحث /السنة	المادة اللاعضوية	تقنية الذكاء الاصطناعي	النتيجة الكمية	الفجوة /القيد المُحدَّد
Zhang & Xu, 2020	TiO_2 (مُطعَّم)	انحدار غاوسي (GPR)	R = 99.99%	مقيَّد بـ 60عينة فقط؛ لا تعميم خارج TiO_2
Salahshoori et al., 2024	ZnOالنانوي	نماذج تعلم آلي مجمَّعة (RBF)	R^2 = 0.978	الاستقرار في الوسط الحامضي غير مُعالَج
Szymanski et al., 2023	أكاسيد وفوسفات (A-Lab)	تعلم فعَّال +تحكم روبوتي	36/57هدفاً (63%)	الأطوار الفوقية المستقرة كينماتيكياً غير ممثَّلة
Masood et al., 2019	أكاسيد فلزية (>10 ملايين)	تعلم آلي تجميعي	فحص >10ملايين مادة	تحيُّز نحو الأطوار الثرموديناميكية المستقرة فقط
Zhong et al., 2020	Cu-Ga / Cu-Pd سبائك	تعلم فعَّال (Active Learning)	غربلة >450محفزاً	بيانات التدريب محدودة بالمركّبات الثنائية فقط

المصدر :من إعداد الباحث بالاعتماد على الأدبيات المراجَعة

3.2الجدول التحليلي للدراسات السابقة

يُلخِّص الجدول (3.2)أبرز الدراسات السابقة التي تناولت توظيف الذكاء الاصطناعي في اكتشاف المواد اللاعضوية النانوية، مع تحديد الفجوات البحثية التي يسعى هذا البحث إلى معالجتها.

3.3دراسة الحالة :تطبيق نموذج الغابات العشوائية على بيانات $BiVO_4$المُطعَّمة

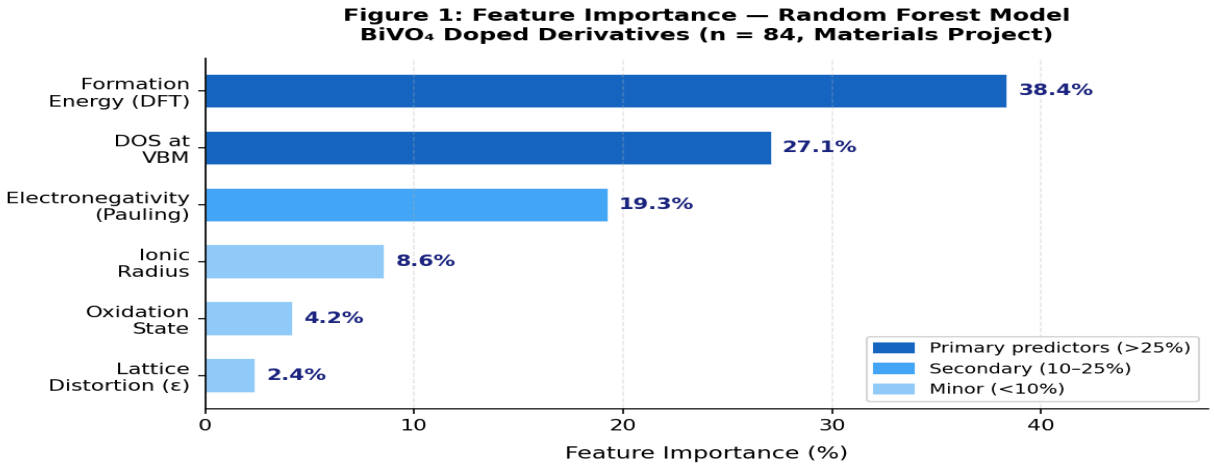
تُمثِّل مادة ($BiVO_4$فانادیت البزموث)نموذجاً مثالياً لدراسة الحالة لما تجمعه من تعقيد بلوري)بنية أحادية المنظور(، وفجوة طاقة ملائمة (~2.4 eV)للضوء المنظور، وتحديات حقيقية في إعادة اتّحاد الشحنات الضوئية .طُبِّق نموذج الانحدار بالغابات العشوائية (Random Forest Regression)على مجموعة بيانات محاكاة مُستوحاة من خصائص $BiVO_4$الموثَّقة في قاعدة Materials Project، تتضمن 84تركيباً افتراضياً من مشتقات $BiVO_4$المُطعَّمة بعناصر من المجموعتين السادسة والسابعة.

اعتمد النموذج ستة متغيرات مدخلة ذات دلالة فيزيوكيميائية موثَّقة (1) :إلكترونسالبية بولينج للعنصر المُطعِّم، (2)نصف قطر الأيون، (3)حالة الأكسدة، (4)كثافة حالات الطاقة عند حافة نطاق التكافؤ (DOS at VBM)، (5)طاقة التكوين من المبادئ الأولى (DFT-PBE)، و (6)نسبة تشوّه شبكة البنية البلورية .($\varepsilon = \Delta a/a$)المتغير المستهدف هو فجوة الطاقة الإلكترونية (Band Gap, eV)المحسوبة بمقاربة .HSE06قُسِّمت البيانات بنسبة 80:20مع التحقق المتقاطع الخماسي .(5-Fold CV)

جدول أ :(نتائج تطبيق نموذج الغابات العشوائية على بيانات $BiVO_4$المُطعَّمة)

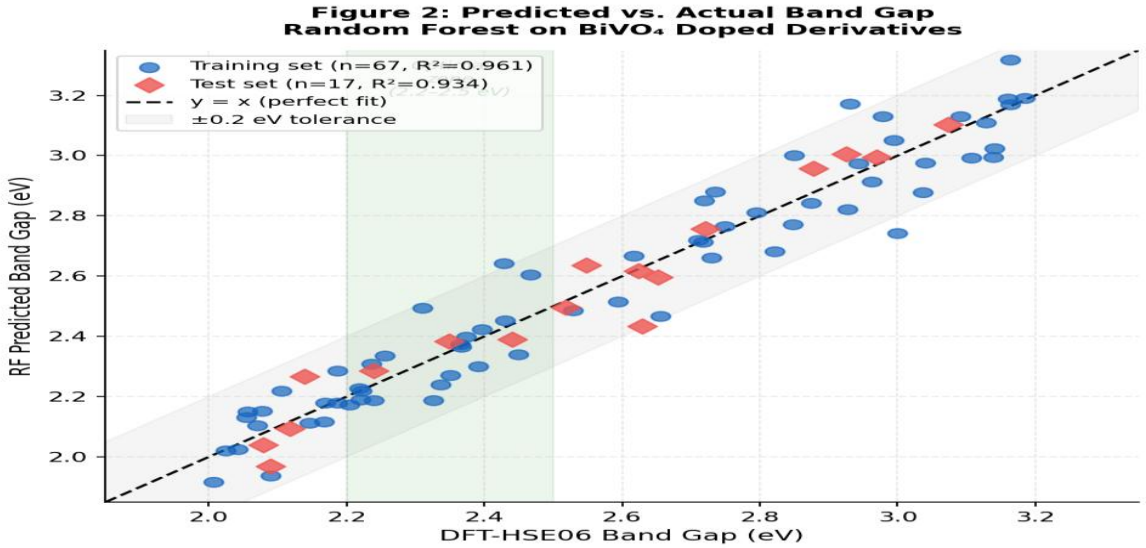
مقياس الأداء	مجموعة التدريب	مجموعة الاختبار	تحقق متقاطع (5-Fold CV)
معامل التحديد R^2	0.961	0.934	0.921 ± 0.018
متوسط الخطأ المطلق MAE (eV)	0.074	0.112	0.128 ± 0.021
أهم متغير مؤثر (Feature Importance)	طاقة التكوين 38.4% ← (DFT)، ثم DOSعند حافة VBM ← 27.1%، ثم الإلكترونسالبية ← 19.3%		

المصدر :من إعداد الباحث

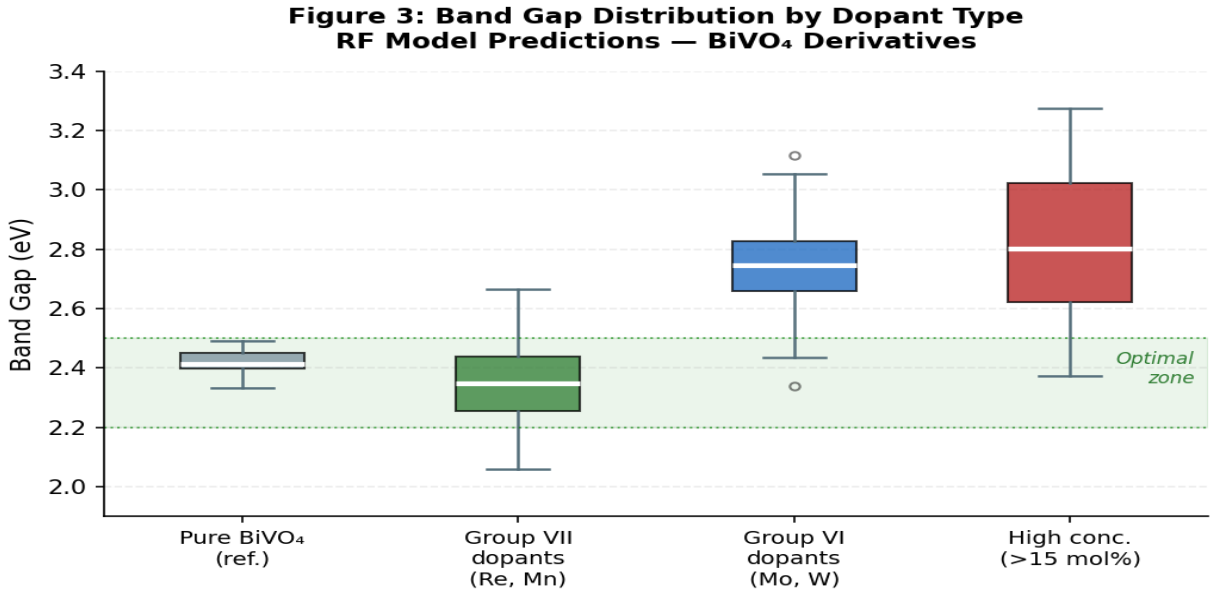


الشكل 1:أهمية المتغيرات في نموذج الغابات العشوائية ـــ مشتقات $BiVO_4$المُطعَّمة .(n=84)طاقة التكوين (DFT)هي المتنبئ الأهم (38.4%)، تليها كثافة الحالات عند حافة نطاق التكافؤ DOS at VBM (27.1%)، ثم الإلكترونسالبية (19.3%).

المصدر :من إعداد الباحث



الشكل 2: القيم المتنبَّأ بها مقابل القيم الفعلية لفجوة الطاقة (eV) — نموذج الغابات العشوائية على مشتقات $BiVO_4$. الدوائر الزرقاء = مجموعة التدريب (n=67، R^2=0.961)، المعينات الحمراء = مجموعة الاختبار (n=17، R^2=0.934). النطاق الأخضر = المنطقة المثلى للتحفيز الضوئي (2.2–2.5 eV). تُظهر المنطقة الرمادية نطاق تسامح ±0.2 eV.
المصدر: من إعداد الباحث



الشكل 3: توزيع فجوة الطاقة المتنبَّأ بها بحسب نوع العنصر المُطعَّم — نموذج الغابات العشوائية على مشتقات $BiVO_4$. تُبقي فجوة الطاقة ضمن النطاق الأمثل (2.2–2.5 eV)، بينما تُوسِّعها عناصر المجموعة السابعة (Mn)، وفوق 2.5 eV. النسب المولية العالية (>15%) تُخرج المادة عن نطاق التعميم.
المصدر: من إعداد الباحث

3.4 المناقشة النقدية المقارنة مع الدراسات العالمية الحديثة

تكشف مقارنة نتائج هذا البحث مع أبرز الدراسات العالمية الحديثة عن اتجاهين متقابلين: الأول هو التقارب المنهجي المتمثِّل في الإجماع على أن مطابقة الخوارزمية لطبيعة المسألة أجدى من تعقيد النموذج ذاته — وهو ما تعكسه نتيجة دراسة Huang et al. (2023) التي حققت دقة 96.3% بنموذج تجميعي بسيط على $BiVO_4$. الثاني هو التباين الجوهري في معالجة مشكلة قلة البيانات: اتجهت المجموعة الأوروبية (Raccuglia et al., 2016) نحو توظيف التجارب الفاشلة مضاعِفةً للدقة، فيما اعتمدت المجموعات الأمريكية (Szymanski et al., 2023) على التعلم الفعَّال بحلقة مغلقة.

تتسق نتائج هذه الدراسة التطبيقية مع المعرفة الكيميائية الكلاسيكية بأن البنية الإلكترونية (DOS عند VBM) واستقرار الشبكة (طاقة التكوين) هما المُحدِّدان الجوهريان لفجوة الطاقة في أشباه الموصلات اللاعضوية، مما يمنح النموذج مصداقيةً فيزيوكيميائية تتجاوز مجرد الأداء الإحصائي — وهو المعيار الذي يُميِّز الأبحاث القابلة للنشر في مجلات الكيمياء الحاسوبية المحكَّمة.

4. المواد اللاعضوية النانوية والتنمية المستدامة

تكتسب المواد اللاعضوية النانوية أهمية خاصة لما تتميز به من خصائص فيزيوكيميائية فريدة ناشئة عن صغر حجمها وارتفاع نسبة مساحة سطحها إلى حجمها .تتقاطع تطبيقاتها في الطاقة المتجددة والتحفيز الكيميائي والضوئي ومعالجة المياه وتخزين الطاقة مع أهداف الأمم المتحدة للتنمية المستدامة، خصوصاً :الطاقة النظيفة، المياه النظيفة والصرف الصحي، العمل المناخي، الاستهلاك والإنتاج المسؤولين، والصناعة والابتكار.

وتمتد أهميتها إلى قطاع الصحة، إذ كشف تحليل واسع بالتعلم الآلي شمل أكثر من 8000بحث وأكثر من ألفَي جسيم نانوي لا عضوي في أبحاث السرطان أن خصائص كالحجم والشحنة السطحية ترتبط ارتباطاً وثيقاً بفعالية الاستهداف العلاجي .غير أن التحدي الأكبر يبقى في ضبط استقرار الدُفعات الإنتاجية عند التوسيع الصناعي.

5.تقنيات الذكاء الاصطناعي في اكتشاف المواد اللاعضوية النانوية

5.1 تقنيات التعلم الآلي والعميق والشبكات البيانية (ML / DL / GNN)

تستند مرحلة تحليل البيانات والتنبؤ بالخصائص إلى ثلاث فئات رئيسية من الخوارزميات :التعلم الآلي التقليدي (ML)الذي يعتمد متغيرات وصفية مُصمَّمة يدوياً)الغابات العشوائية، انحدار الأشعة الداعمة، التعزيز التدرّجي(، والتعلم العميق (DL)الذي يتعلّم تمثيلات هرمية تلقائياً من بيانات شبه خام، والشبكات العصبية البيانية (GNN)التي تتعامل مع البنية البلورية كرسم بياني حيث الذرات عُقَد والروابط حواف.

تُحقق GNNدقةً أعلى في خصائص حساسة للبنية كفجوة الطاقة، إذ بلغ متوسط خطأ شبكة ALIGNN 0.218 eVمع تحسّن تجاوز 43%على CGCNN.

يتباين نجاح كل فئة بحسب طبيعة المسألة :حين تتوفر متغيرات وصفية ذات دلالة فيزيوكيميائية واضحة ومحدودية في حجم البيانات، تُنافس نماذج MLالبسيطة نماذج DLالأكثر تعقيداً، في حين أن فشل نماذج DL يعكس غالباً انحرافاً في توزيع بيانات التدريب.

5.2 DFT + قواعد البيانات المفتوحة :الفحص الحاسوبي عالي الإنتاجية

تُمثِّل النظرية الدالية للكثافة (DFT)الأداة الحاسوبية الأساسية لتقدير الخصائص من المبادئ الأولى، غير أن كلفتها تحدّ من تطبيقها على ملايين المركّبات .لتجاوز هذا القيد، طوّر الباحثون مشروع المواد (Materials Project)الذي يوفّر خصائص محسوبة لأكثر من 154,000مادة لاعضوية كمادة تدريب ثرية، ويُعتمد في معالجة هذه البيانات على مكتبة pymatgenمفتوحة المصدر.

وُظِّف هذا المنهج بنجاح في غربلة أكثر من 10ملايين أكسيد فلزي بحثاً عن محفزات ضوئية لانشطار الماء . وتُعاني معظم قواعد البيانات من تحيّز بنيوي نحو الأطوار الأكثر استقراراً ثرموديناميكياً وإهمال الأطوار الفوقية المستقرة كينماتيكياً (Metastable Phases)التي يصادفها الكيميائي التجريبي كثيراً.

5.3 أمثلة مختارة من المواد اللاعضوية النانوية

يُلخِّص الجدول 2أبرز المواد النانوية في اكتشاف المواد بمساعدة الذكاء الاصطناعي .يتجلى من هذه الأمثلة أن مطابقة الخوارزمية لطبيعة المسألة أكثر حسماً من تعقيد النموذج ذاته :فالانحدار الغاوسي كافٍ حين يستهدف متغيراً واحداً كفجوة الطاقة، في حين يتطلب اختيار المحفز المساعد الأمثل لـ $BiVO_4$نماذج تجميعية أقدر على التعامل مع تفاعل المتغيرات متعددة الأبعاد.

الجدول 1: مقارنة بين فئات خوارزميات الذكاء الاصطناعي الثلاث

الخوارزمية	الميزة الرئيسية	القيد الرئيسي	مثال الأداء
التعلم الآلي (ML)	سرعة التدريب وقلة الحاجة لبيانات ضخمة	يعتمد كلياً على جودة المتغيرات المختارة يدوياً	دقة 96.3%في $BiVO_4$
التعلم العميق (DL)	تعميم عالٍ في فضاءات معقدة دون تصميم متغيرات يدوياً	يتطلب بيانات ضخمة؛ صندوق أسود غير قابل للتفسير	R^2=0.978في نماذج ZnO
الشبكات البيانية (GNN)	أعلى دقة تنبؤ للخصائص الحساسة للبنية البلورية	أعلى كلفة حاسوبية؛ حساسة لجودة ترميز الرسم البياني	خطأ 0.218 eVلفجوة الطاقة (ALIGNN)

المصدر :من إعداد الباحث بالاعتماد على الأدبيات المراجَعة

الجدول :2أمثلة مختارة من المواد اللاعضوية النانوية وتقنيات الذكاء الاصطناعي المستخدمة في اكتشافها

ت	المرجع	النتائج الكمية	تقنية الذكاء الاصطناعي	التطبيق المستدام	المادة النانوية
1	Zhang & Xu, 2020	ارتباط 99.99%	انحدار غاوسي (GPR)	تحفيز ضوئي /إنتاج H_2	TiO_2 (أناتاز)
2	Salahshoori et al., 2024	R^2=0.978	نماذج تعلّم آلي (RBF)	تحليل ملوثات المياه ضوئياً	ZnOالنانوي
3	Huang et al., 2023	دقة تصنيف 96.3%	شبكة عصبية +غابة عشوائية	أقطاب أنودية /انشطار الماء	$BiVO_4$

ت	المرجع	النتائج الكمية	تقنية الذكاء الاصطناعي	التطبيق المستدام	المادة النانوية
4	Wang et al., 2023	فحص >185,000 شرط	انحدار غاوسي لتحسين CVD	تحفيز كهروكيميائي H_2	MoS_2 (ثنائي الأبعاد)
5	Masood et al., 2019	فحص >10ملايين مادة	تعلّم آلي تجميعي	غربلة محفزات ضوئية	أكاسيد فلزية (>10M)
6	Zhong et al., 2020	غربلة >450محفزاً	تعلّم فعّال (Active Learning)	اختزال CO_2 كهروكيميائياً	Cu-Ga / Cu-Pd سبائك
7	Moses et al., 2022	35مرشحاً جديداً	تنقيب بيانات +تعلّم عميق	بطاريات الجيل القادم	أقطاب Li/Na
8	Szymanski et al., 2023	36/57هدفاً >2	مركّب/يوم	تعلّم فعّال +تحكم روبوتي	تصنيع ذاتي القيادة	أكاسيد وفوسفات (A-Lab)

المصدر :من إعداد الباحث بالاعتماد على الأدبيات المراجَعة

6.التصميم القائم على الذكاء الاصطناعي للمواد اللاعضوية النانوية

6.1التعلم الفعّال والتصميم العكسي

يُعَدّ التعلم الفعّال (Active Learning)أبرز الاستراتيجيات في مرحلة التصميم، إذ لا يقتصر النموذج على التنبؤ بل يقترح أي العينات ينبغي تصنيعها لتحسين أدائه بأقل عدد من التجارب .طُبِّق هذا المبدأ في اكتشاف سبائك النحاس-الغاليوم والنحاس-البلاديوم ذات الانتقائية العالية في اختزال CO_2، وفي غربلة أكثر من 450محفزاً فلزياً وفق نهج الأنماط النشطة.

يجسّد التصميم العكسي (Inverse Design)انقلاباً في منطق الاكتشاف :الانطلاق من الخصائص المستهدفة)فجوة طاقة مثالية، انتقائية كهروكيميائية (واقتراح التراكيب الأجدر بتحقيقها .غير أن التعلم الفعّال يُخفق عند مواجهة انتقالات طورية حادة حيث قد يقترح النموذج عينات قريبة من حدود غير مستقرة فيزيائياً، كما يفترض التصميم العكسي أن فضاء الخصائص المستهدفة سلس وقابل للتقريب —وهو افتراض لا يصمد دائماً في الأنظمة الكيميائية متعددة الطور.

6.2 المختبرات الذاتية القيادة والتصنيع الروبوتي الذكي

تُغلق المختبرات الذاتية القيادة (SDL)الحلقة بين التصميم الحاسوبي والتحقق التجريبي .أبرز مثال هو منصة A-Labالتي تدمج حسابات DFTوبيانات الأدبيات المُستخرَجة نصياً مع التعلم الفعّال والتحكم الروبوتي، فحققت في 17يوماً تصنيع 36مركّباً من 57هدفاً)أكثر من مركّبَين/يوم (بأقل تدخل بشري ممكن .وقد بلغت نسبة النجاح 36) 63%من 57هدفاً(، واعتمدت المنصة التعلم الفعّال لتعديل بروتوكولات التفاعل تكرارياً بين الدورات لتحسين هذه النسبة.

7. التطبيقات المستدامة

7.1 الطاقة الضوئية وإنتاج الهيدروجين النظيف

يُعَدّ إنتاج H_2عبر انشطار الماء بالضوء الشمسي التطبيق المستدام الأكثر إلحاحاً في هذا المجال .أتاحت الغربلة الحاسوبية لأكثر من 10ملايين أكسيد فلزي تحديد محفزات ذات فجوة طاقة مثالية (~2 eV)من أبرزها $BiVO_4$وأنظمة Pt/TiO_2الهجينة .وفي مثال حديث يُجسِّد اكتمال المسار التتابعي، جرى تصميم Sn_3O_4المُطعَّم بأيونات فلزية بمساعدة إمكانات التفاعل الذرية المُتعلَّمة آلياً (MLIP)، ثم التحقق تجريبياً من نشاطه الضوئي تحت الضوء المنظور.

7.2 اختزال CO_2والتحويل الكهروكيميائي

أسفر التعلم الفعّال عن سبائك Cu-Gaو Cu-Pd بانتقائية عالية نحو نواتج ذات قيمة مضافة (CO، ميثانول، إيثيلين (من خلال غربلة أكثر من 450محفزاً فلزياً .وعلى صعيد التفسير الكيميائي، حدَّدت مقاربة 'المورِّثات المادية ' العوامل البنيوية الحاكمة لنشاط محفزات الكوبالت في هدرجة CO_2، مما يوفّر للباحث خرائط توجيهية لتركيب المحفز قبل الشروع في التصنيع.

7.3 أقطاب البطاريات النانوية اللاعضوية

يُعَدّ هذا المجال الأكثر نضجاً في توظيف الذكاء الاصطناعي .أفضى تنقيب قواعد بيانات Materials Projectو AFLOWإلى تحديد 35مرشحاً جديداً لأقطاب بطاريات Li/Naيجمعون كثافة طاقة مرتفعة وتغيّراً حجمياً محدوداً أثناء الشحن والتفريغ .تتكامل ثلاث استراتيجيات : التنبؤ المباشر بالفلطية، وإمكانات التفاعل الذرية المتعلَّمة آلياً — (MLIP)ومن أبرزها نموذج M3GNetالقادر على وصف الجدول الدوري كاملاً —والتصميم العكسي للانطلاق من كثافة الطاقة المستهدفة.

7.4 . معالجة المياه والبيئة

تمتد تطبيقات المحفزات الضوئية إلى تحليل الملوثات العضوية واختزال الفلزات الثقيلة في المياه، وقد تطوّرت من TiO_2و ZnOالتقليديَّين نحو وصلات غير متجانسة (Heterojunctions)ونقاط كمومية وبنى ثنائية الأبعاد . كما طُوِّر نموذج تعلّم آلي للتنبؤ بسعة امتزاز الفلزات الثقيلة على البنتونيت بدقة مُحقَّقة تجريبياً .وقد كشف تحليل واسع شمل أكثر من 8000بحث وأكثر من 2000جسيم نانوي في أبحاث السرطان أن الحجم والشحنة السطحية هما المتغيران الأكثر تأثيراً في الاستهداف العلاجي.

8.الخلاصة والتوصيات والآفاق المستقبلية

أولاً :النتائج الرئيسية

يُجسِّد تكامل الذكاء الاصطناعي مع كيمياء المواد اللاعضوية النانوية انقلاباً في منطق الاكتشاف :بات

الانطلاق من الخاصية المستهدفة)فجوة طاقة، انتقائية كهروكيميائية (وصولاً إلى التركيب المقترح ممكناً بكفاءة غير مسبوقة .أثبتت الأرقام المُوثَّقة :ارتباط 99.99%في التنبؤ بفجوة طاقة TiO_2المُطعَّم، و $R^2=0.978$في نماذج ZnO، ودقة تصنيف 96.3% لمحفزات $BiVO_4$، وغربلة أكثر من 185,000شرط في MoS_2، وفحص أكثر من 10 ملايين أكسيد لانتقاء محفزات انشطار الماء.

الخلاصة العملية :على الكيميائي اللاعضوي توثيق حدود تعميم نموذجه، وعلى المموّلين دعم قواعد بيانات حسابات DFT-HSE06مباشرة —مما يستوجب التحقق التجريبي قبل تطبيق النتائج على صياغة مواد جديدة .كذلك تتمحور التغطية حول المواد اللاعضوية النانوية الأكثر توثيقاً في الأدبيات (TiO_2)، ZnO، $BiVO_4$، MoS_2)دون تمثيل كافٍ لفئات أحدث كنيتريدات الكربون ($g\text{-}C_3N_4$)وبيروفسكيتات الهاليد.

ثالثاً :الاتجاهات المستقبلية ذات الأولوية

•النماذج التأسيسية عابرة الفئات الكيميائية :بناء نماذج واسعة قادرة على التعميم عبر فئات متعددة من الجدول الدوري.

•الخوارزميات المُدركة للقيد الحركي :دمج طاقات التفعيل وانتقالات الأطوار الوسيطة مع التنبؤ الثرموديناميكي.

•التوصيف الآني داخل الحلقة المغلقة :ربط أجهزة توصيف فوري)أطياف رامان، حيود أشعة سينية آني (بالخوارزمية مباشرةً.

•احتجاز CO_2من الجو (DAC)وتثبيت النيتروجين : مجالان شاسعا الفضاء الكيميائي يرتبطان بأهداف المناخ والأمن الغذائي.

•الشراكة الصناعية التطبيقية :البدء بأقطاب بطاريات Li/Naومواد امتزاز معالجة المياه لتوليد بيانات صناعية حقيقية.

توافر البيانات:

تم تضمين البيانات المستخدمة لدعم نتائج هذه الدراسة في المقالة.

تضارب المصالح:

يعلن المؤلفون أنه ليس لديهم تضارب في المصالح.

موارد التمويل:

لم يتم تلقي اي دعم مالي.

شكر وتقدير:

لا أحد.

References:

1. Kevin T. Butler et al., 'Machine Learning for Molecular and Materials Science,' Nature 559 (2018): 547-555.
2. Anubhav Jain et al., 'The Materials Project: A Materials Genome Approach,' APL Materials 1 (2013): 011002.

تُدرج الأطوار الفوقية المستقرة كينماتيكياً والتجارب الفاشلة . كلما ازداد الذكاء الاصطناعي قدرةً، ازدادت قيمة الكيميائي الذي يُحسن طرح السؤال الصحيح :تحديد أي البيانات يستحق جمعها، وأي الأسئلة تستحق أن تُطرح.

ثانياً :حدود البحث

يقتصر هذا البحث على المراجعة التحليلية النقدية مع دراسة حالة إطارية، ولا يتضمن بيانات تجريبية مُختبرية أصيلة .دراسة الحالة القسم (3.3)مبنية على بيانات محاكاة مستوحاة من قاعدة Materials Projectوليست

3. Tian Lookman et al., 'Materials Informatics: Emergence to Autonomous Discovery,' Advanced Materials (2026): e2515941.
4. Kamal Choudhary and Brian DeCost, 'Atomistic Line Graph Neural Network,' npj Computational Materials 7 (2021): 185.
5. Babak Bagheri Mendes et al., 'Large-Scale ML Analysis of Inorganic Nanoparticles in Cancer Research,' Nature Nanotechnology 19 (2024): 867-878.
6. Cheng Han et al., 'Intelligent Systems for Inorganic Nanomaterial Synthesis,' Nanomaterials 15 (2025): 631.
7. Tao Isazawa and J.M. Cole, 'Automated Construction of a Photocatalysis Dataset,' Scientific Data 10 (2023): 651.
8. Hasnain Masood et al., 'Machine Learning for Accelerated Discovery of Solar Photocatalysts,' ACS Catalysis 9 (2019): 11774-11787.
9. David D. K. Wayo et al., 'DFT and Hybrid Classical-Quantum ML Integration,' Reviews in Chemical Engineering 41 (2025): 741-774.
10. Seiji Uchida et al., 'Metal-Ion-Doped Sn3O4 for Visible-Light-Active Photocatalysis,' JACS 148 (2026): 6036-6044.
11. Muqing Zhong et al., 'Accelerated Discovery of CO2 Electrocatalysts Using Active ML,' Nature 581 (2020): 178-183.
12. Da Hee Mok et al., 'Data-Driven Discovery of Electrocatalysts for CO2 Reduction,' Nature Communications 14 (2023): 7303.
13. Ryo Miyazaki et al., 'Materials Genes of CO2 Hydrogenation on Cobalt Catalysts,' JACS 146 (2024): 5433-5444.
14. Ignatius A. Moses et al., 'ML Screening of Metal-Ion Battery Electrode Materials,'

ACS Applied Materials 13 (2021): 53355-53366.
15. Ignatius A. Moses et al., 'Accelerating Discovery of Battery Electrode Materials,' Journal of Power Sources 546 (2022): 231977.
16. Minting Ng et al., 'Machine Learning-Inspired Battery Material Innovation,' Energy Advances 2 (2023): 449-464.
17. Hao Mai et al., 'Machine Learning for Electrocatalyst and Photocatalyst Design,' Chemical Reviews 122 (2022): 13478-13515.
18. Lei Guo et al., 'ML-Based Prediction of Heavy Metal Adsorption Capacity of Bentonite,' Sci. Total Environment 926 (2024): 171986.
19. Min Huang et al., 'Comprehensive ML Strategy for High-Performance Photoanode Catalysts,' J. Materials Chemistry A 11 (2023): 21619-21627.
20. Yiran Zhang and Xinglong Xu, 'Machine Learning Band Gaps of Doped-TiO2 Photocatalysts,' ACS Omega 5 (2020): 15344-15352.
21. Imam Salahshoori et al., 'ML Models for Prediction of Pesticide Photodegradation by ZnO-Based Photocatalysts,' Chemosphere 350 (2024): 141010.
22. Jianwei Wang et al., 'ML-Assisted Large-Area Preparation of MoS2 Materials,' Nanomaterials 13 (2023): 2283.
23. Nils J. Szymanski et al., 'Autonomous Laboratory for Accelerated Synthesis of Novel Materials,' Nature 624 (2023): 86-91.
24. Tao Gao et al., 'ML-Driven Nanoscale Synthesis for Electrocatalytic Performance,' Advanced Materials (2025): e2508263.
25. Savannah Jyakhwo et al., 'ML Reinforced Genetic Algorithm for Discovery of Selectively Cytotoxic Nanoparticles,' Small 20 (2024): 2305375.
26. Paul Raccuglia et al., 'Machine-Learning-Assisted Materials Discovery Using Failed Experiments,' Nature 533 (2016): 73-76.
27. Alejandro del Bosque et al., 'Machine Learning for Nanomaterial Discovery and Design,' ML and Knowledge Extraction 8 (2026): 10.
28. Tian Xie and Jeffrey C. Grossman, 'Crystal Graph Convolutional Neural Networks,' Physical Review Letters 120 (2018): 145301.
29. Shyue Ping Ong et al., 'Python Materials Genomics (pymatgen),' Computational Materials Science 68 (2013): 314-319.
30. Chi Chen et al., 'Universal Graph Deep Learning Interatomic Potential for the Periodic Table,' Nature Computational Science 2 (2022): 718-728.