

Yapay Zekâ Tarafından Keşfedilen Malzemeler

Mahir E. Ocak

Aralarında Muratahan Aykol ve Ekin Doğu Çubuk'un da yer aldığı bir grup Google DeepMind çalışanı, yakın zamanlarda arzu edilen özelliklere sahip kristaller keşfedilmesine yardımcı olan yeni bir yapay zekâ uygulaması geliştirdi. GNoME adı verilen uygulama 2,2 milyon yeni kristal yapı tahmin etti. Bu yapıların yaklaşık 380.000'inin görece daha kararlı olduğu ve gelecekte teknolojik cihazlarda kullanılma potansiyeli taşıdığı belirtiliyor. Bilgisayar çiplerinden

güneş panellerine pek çok teknolojik cihazda kristalli katılar kullanılıyor. Geçmişte yeni malzemeler geliştirmeye çalışan araştırmacılar, deneme-yanıma yoluyla çeşitli kombinasyonlar dener ancak bu çalışmalar çok uzun sürelere yayılırdı. Günümüzde yeni kristaller keşfetmeye çalışan pek çok araştırmacı ise önce kuramsal yöntemlere başvuruyor. Bilgisayarların hızından yararlanarak yapılan kuramsal tahminler, kesin sonuçlar vermese de hangi bileşenlerin ve hangi yapıların arzu edilen özelliklere sahip bir malzeme ortaya çıkaracağı hakkında fikir veriyor. Geçtiğimiz on yılda Uluslararası Inorganik Kristal Veri Tabanı'na kuramsal hesaplar

yardımla keşfedilen 28.000 yeni malzeme eklendi.

GNoME tarafından tahmin edilen yapıların 736'sı dünya genelindeki çeşitli araştırma grupları tarafından sentezlendi. Ayrıca Lawrence Berkeley Ulusal Laboratuvarında çalışan bir araştırma grubu da GNoME tarafından tahmin edilen malzemelerin robotik laboratuvarlarda otonom bir biçimde sentezlenebileceğini gösteren bir başka çalışmaya imza attı. Hem Google DeepMind hem de Lawrence Berkeley Ulusal Laboratuvarı araştırmacılarının yaptıkları çalışmaların sonuçları *Nature*'da yayımlandı.

Araştırmacılar geliştirdikleri yapay zekâ uygulamasını ilk olarak kristal yapılar ile ilgili bir veri tabanındaki bilgilerle eğitmiş. Veri tabanına *The Materials Project*'in internet sitesi üzerinden erişilebiliyor. GNoME, grafik sinir ağı (GNN) olarak sınıflandırılan uygulamaların bir örneği. Programa girdi olarak molekül yapılarını betimlemek için çizilenlere benzer grafikler veriliyor.

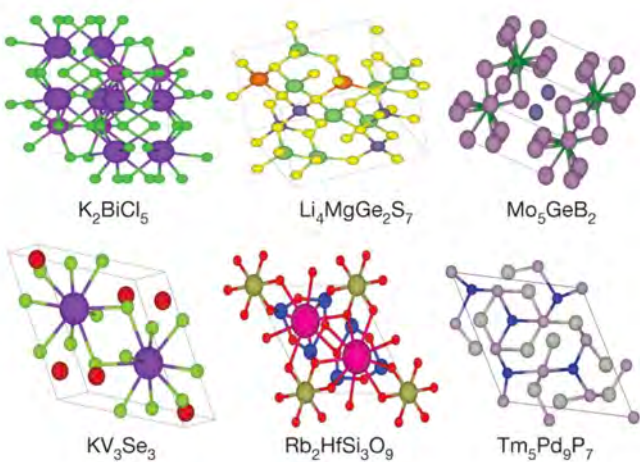
Eğitim sırasında programın yaptığı tahminler kısaca DFT olarak adlandırılan bir kuramsal yöntem aracılığıyla da test edilmiş.

GNoME tarafından keşfedilenler arasında türünün tek örneği kristaller, potansiyel süper iletken adayları, lityum iyon pillerin performansını artıracak iletkenler ve gelecekte teknolojik cihazlarda kullanılmaya aday daha pek çok malzeme var. ■

Zoonotik Hastalıklar İçin Acil Eylem Çağrısı

Özlem Ak

Araştırmacılar, hayvanlardan insanlara bulaşan bazı hastalıkların 2050 yılında 2020 yılına kıyasla 12 kat daha fazla insanı etkileyebileceğini iddia etti. ABD'li biyoteknoloji şirketi Ginkgo Bioworks'tan uzmanlar, küresel halk sağlığı riskinin ele alınması için "acil eylem" çağrısında bulundu. Araştırmacılar, zoonotik hastalıkların neden olduğu salgınların iklim değişikliği ve ormansızlaşma nedeniyle



GNoME tarafından keşfedilen bazı malzemeler görülüyor. Örnekler arasında türünün tek örneği olan, toprak alkali metal içeren, elmas benzeri yapıya sahip $Li_4MgGe_2S_7$ ve potansiyel bir süper iletken adayı olan Mo_5GeB_2 de var.



gelecekte daha sık görülebileceği uyarısında bulundu. Ekibin analizinde Ebola virüsü ve Marburg virüsünü içeren filovirüsler, SARS koronavirüs 1, Nipah virüsü ve Bolivya hemorajik ateşine neden olan Machupo virüsü olmak üzere dört özel viral patojenin tarihsel eğilimleri incelendi.

Çalışma, 2020'de küresel salgına neden olan ve yarasalardan kaynaklanmış olması muhtemel COVID-19'u kapsamıyor. *BMJ Global Health* dergisinde yayımlanan çalışmada 1963-2019 yılları arasındaki 3.150'den fazla salgın incelendi ve 24 ülkede 75 yayılma olayı tespit edildi. Veri tabanı, Dünya Sağlık Örgütü tarafından bildirilen salgınları, 1963'ten bu yana meydana gelen ve 50 veya daha fazla kişinin ölümüne neden olan salgınları, ayrıca 1918 ve 1957 grip pandemileri de dâhil

olmak üzere tarihsel olarak önemli olayları kapsıyor. 17.232 kişinin ölümüne neden olan bu salgınların, 15.771'i filovirüslerden kaynaklanmış ve çoğunlukla Afrika'da meydana gelmiş.

Araştırmacılar, salgın hastalıkların 1963 ile 2019 yılları arasında her yıl neredeyse %5, bunlardan kaynaklanan ölümlerin ise %9 oranında arttığını söylüyor. Ayrıca yıllık artış oranları bu şekilde artmaya devam ederse analiz edilen patojenlerin 2050 yılına gelindiğinde 2020 yılına göre dört kat daha fazla yayılma olayına ve 12 kat daha fazla ölüme neden olmasını beklediklerini de vurguladılar. Araştırmacılara göre rakamların düşük çıkmasının muhtemel nedeni, analize dâhil edilen patojenleri belirlerken katı kriterler uygulamaları ve COVID-19'u dâhil etmemeleri olabilir. ■

Uzayda Fare Embriyoları Büyütüldü

Mahir E. Ocak

Bir grup Japon araştırmacı, Ağustos 2021'de, Uluslararası Uzay İstasyonu'na (ISS) donmuş fare embriyoları göndermişti. Özel cihazlarla çözüldükten sonra mikro kütle çekimi altında dört gün boyunca 37°C'de büyütülen embriyoların normal bir biçimde gelişmeye devam ederek blastositlere (memeli embriyolarının erken gelişim aşaması) dönüştüğü görüldü. Dünya'ya gönderilen blastositler üzerinde yapılan incelemeler, embriyoların

DNA'larında ve genlerinde önemli bir değişiklik olmadığını gösterdi.

Elde edilen sonuçlar, memelilerin uzayda da soylarını devam ettirebileceğine işaret ediyor. Blastositlerin gelecekte farelere nakledilmesi planlanıyor. Blastosit nakledilen farelerin normal doğum yapması hâlinde uzayda büyütülmüş embriyoların gerçekten de sorunsuz olduğu doğrulanmış olacak.

Dr. Sayaka Wakayama ve arkadaşları tarafından yapılan çalışmanın sonuçları *iScience*'ta yayımlandı. ■

