
研究提出基于机器学习的加速非线性光学材料理论设计新方式

作者：writer 来源：中国科学院

本文原地址：<https://www.iikx.com/news/progress/32143.html>

本文仅供学习交流之用，版权归原作者所有，请勿用于商业用途！

研究提出基于机器学习的加速非线性光学材料理论设计新方式。

近期，中国科学院新疆理化技术研究所研究团队在利用机器学习辅助新型非线性光学材料设计方面取得进展。该团队提出了通过机器学习方法探索未知化学空间的新策略，实现了从红外到紫外再到深紫外非线性光学多元复杂体系的倍频系数在机器学习方面的定量预测，为新型光学材料设计提供了理论指导工具。

由于未知化学空间的广阔性以及理论预测框架缺乏，实验探索新型非线性光学材料是颇具挑战性的任务。该研究提出了将机器学习技术与晶体结构生成方法相结合的新型理论设计与预测方法，通过描述符信息指导新型非线性光学材料合成。该研究训练了用于预测材料的最大非线性光学系数的机器学习模型。这一模型融合化学组分和结构描述符，能够系统分析结构与性能之间的构效关系。

为进一步提升发现新型非线性光学材料的效率，该研究引入了快速晶体结构生成技术，建立了探索未知化学空间的高效预测流程

。基于这一理论流程，仅需输入晶体结构文件，即可在较短时间内获得目标化学结构的倍频系数。以红外非线性光学材料为应用案例，这一预测流程识别出7种具备理想倍频响应的红外化合物，其中一种已在实验中合成并完成表征，验证了该理论设计方法的有效性。

上述研究克服了通过机器学习模型定量预测二次谐波系数的难题，为加速探索和合成具有强二次谐波响应的非线性光学新材料提供了理论指导。

相关研究成果发表在Small

上。研究工作得到国家自然科学基金、中国科学院相关项目、新疆维吾尔自治区相关项目的支持。

[论文链接](#)

研究发现符合预期的具有强二次谐波效应的非线性光学材料

研究团队单位：新疆理化技术研究所

更多 科学进展 请访问 <https://www.iikx.com/news/progress/>

本文版权归原作者所有，请勿用于商业用途，[爱科学iikx.com](https://www.iikx.com)转发