
研究人员利用人工智能揭示材料中的原子缺陷

作者：writer 来源：科学网

本文原地址：<https://www.iikx.com/news/progress/39061.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！

研究人员利用人工智能揭示材料中的原子缺陷。近日，美国麻省理工学院的研究人员构建了一个人工智能模型，能够利用来自非侵入性中子散射技术的数据对某些缺陷进行分类和量化。该模型在2000种不同的半导体材料上进行了训练，可以同时检测材料中多达六种点缺陷，这是仅使用传统技术不可能做到的。3月30日，这项研究发表在《物质》上。



一种新模型可测量缺陷，利用这些缺陷可以改善材料的机械强度、热传递和能量转换效率。图源：MIT

现有技术无法在不破坏材料的情况下，以一种通用且定量的方式准确表征缺陷。论文第一作者、麻省理工学院材料科学与工程系博士生Mouyang Cheng说。对于没有机器学习辅助的传统技术来说，检测六种不同的缺陷是不可想象的。这是你用其他任何方式都无法做到的。

研究人员表示，该模型是在半导体、微电子、太阳能电池和电池材料等产品中更精确地利用缺陷迈出的第一步。

在实验中，研究人员构建了一个包含2000种半导体材料的计算数据库。他们为每种材料制作了样品对，一组掺杂产生缺陷，另一组保持无缺陷，然后使用一种中子散射技术来测量固体材料中原子的不同振动频率。他们根据结果训练了一个机器学习模型。

这构建了一个覆盖元素周期表中56种元素的基础模型。Cheng说。该模型利用了多头注意力机制，就像ChatGPT正在使用的那样。它同样提取有缺陷和无缺陷材料之间的数据差异，并输出关于使用了何种掺杂剂以及浓度的预测。

研究人员对他们的模型进行了微调，在实验数据上进行了验证，并证明该模型可以测量一种常用于电子的合金和一种独立的超导材料中的缺陷浓度。

研究人员还对材料进行了多次掺杂，以引入多种点缺陷并测试模型的极限，最终发现该模型可以同时预测材料中多达六种缺陷，缺陷浓度低至0.2%。

我们真的很惊讶它效果这么好。Cheng说。解码来自两种不同类型缺陷的混合信号已经非常具有挑战性，更不用说六种了。

研究人员相信他们的研究证明了人工智能技术在解释缺陷数据方面的固有优势。（来源：中国科学报 张晴丹）

相关论文信息：<https://doi.org/10.1016/j.matt.2026.102728>

作者：Mouyang Cheng 来源：《物质》

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