机器学习筛选出两种新型超导材料

作者：writer 来源：科学网

本文原地址：https://www.iikx.com/news/progress/40639.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！

机器学习筛选出两种新型超导材料
。科技日报北京6月30日电（记者张佳欣）芬兰阿尔托大学领导的国际科研团队利用一种结合机器学习与量子理论的新方法，从海量材料组合中“淘”出两种新型超导材料，大幅提升了超导材料发现效率，为寻找室温超导体提供了新的技术路径。相关论文29日发表于《物理评论研究》杂志。

超导体能够在零电阻状态下传导电流，这是只有在极低温条件下才会出现的一种量子效应。如今，超导体不仅是量子计算机的重要基础，还广泛应用于神经成像、聚变反应堆、磁悬浮列车等领域。

然而，这类“独角兽”材料极难寻找。理论上，几乎所有元素都可以组成无限多种材料组合，其中任何一种都有可能成为超导体，但真正具备超导性的却寥寥无几。而目前已发现的超导材料，还需要借助昂贵的制冷设备降至接近绝对零度，才能展现其量子特性。

在最新研究中，研究团队首先利用机器学习对海量元素组合进行预筛选，再借助自主开发的算法和量子理论计算，对最具潜力的候选材料开展精确分析，最终锁定了两种新型超导材料。

研究发现，这两种材料都具有一种被称为“笼目晶格”的特殊晶体结构。在这种结构中，电子能够形成有利于超导产生的“平带”状态，为材料表现出超导特性提供了重要条件。

完成理论预测后，美国莱斯大学团队进一步合成了两种材料样品，并通过实验验证了它们的超导特性，实现了从人工智能筛选、理论预测到实验验证的完整研究流程。

过去数十年来，科学家已发现7000多种超导材料，但绝大多数属于偶然发现，通过理论预测找到的仅有20种。新方法采用机器学习进行预筛选，仅对最有希望的候选材料开展高精度计算，可大幅减少计算量，提高筛选效率。

未来借助机器学习，可筛选的材料数量有望扩大至数十亿种，这将显著加快新型超导材料的发现速度，向寻找室温超导体迈出关键一步。

作者：张佳欣 来源：科技日报

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转发