新型AI框架加速拓扑材料发现

作者：writer 来源：科学网

本文原地址：https://www.iikx.com/news/progress/41446.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！

新型AI框架加速拓扑材料发现。安徽大学物理学院量子计算团队特任教授Arif Ullah与合作者在人工智能赋能凝聚态物理与材料发现方面取得重要进展，提出新型机器学习框架TXL Fusion，将大语言模型与物理、化学描述符深度融合，实现了对拓扑材料的高效识别，并为发现传统方法难以判定的新型候选材料提供了新途径。相关成果发表于《先进功能材料》，安徽大学为第一完成单位。

拓扑绝缘体和拓扑半金属具有独特而稳定的量子电子态，在杂质、缺陷等扰动下仍能保持部分关键性质，因此被认为是量子计算、自旋电子学和低能耗电子器件的重要候选材料。

但找到这些材料并不容易。传统材料发现往往依赖试错式路线：通过大量计算筛选，再结合昂贵的合成实验和表征逐一验证。面对数十万种已知材料，这一过程不仅计算耗时，而且实验成本高、周期长。

针对这一瓶颈，研究团队开发了TXL Fusion。该框架融合三类互补信息：材料组成所反映的化学信息、对称性和电子结构等物理描述符，以及经过微调的大语言模型对材料文本信息的表征。

研究人员介绍，该模型通过可学习的门控机制，根据不同材料自适应调整不同信息源的重要性，从而实现更有效的特征融合。相比单一信息源模型，这种方法在提升预测性能的同时，也保留了与物理和化学特征相对应的可解释性。

研究人员在大规模材料数据上训练TXL Fusion。结果表明，该框架整体优于纯数值描述符模型和纯组分模型，其中对拓扑绝缘体的识别提升尤为明显。

更具挑战性的是，研究团队进一步将模型应用于传统对称性方法难以判定的候选材料，即现有筛选方法的典型盲区。模型筛选出一批高置信度候选材料，其中部分经过进一步第一性原理计算验证，最终均被确认具有外尔半金属特征。这一结果表明，AI不仅能够加速已知材料的发现，还能够帮助研究人员从传统方法难以覆盖的材料空间中寻找值得进一步研究的新候选材料。

研究人员强调，这项工作的核心并不是用AI取代物理计算或实验，而是把AI作为材料发现的前置筛选器：先以较低成本从大规模材料空间中锁定最有希望的候选材料，再将昂贵的计算资源和实验投入到少数目标材料上。

目前，研究团队已公开相关代码、模型和数据集。未来，这种融合大语言模型与物理、化学知识的AI框架有望进一步拓展到超导、催化和电池材料等领域，为面向未来量子科技的新材料发现提

供更加高效的路径。（来源：中国科学报 王敏）

相关论文信息：https://doi.org/10.1002/adfm.202529788

作者：Arif Ullah 来源：《先进功能材料》

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