

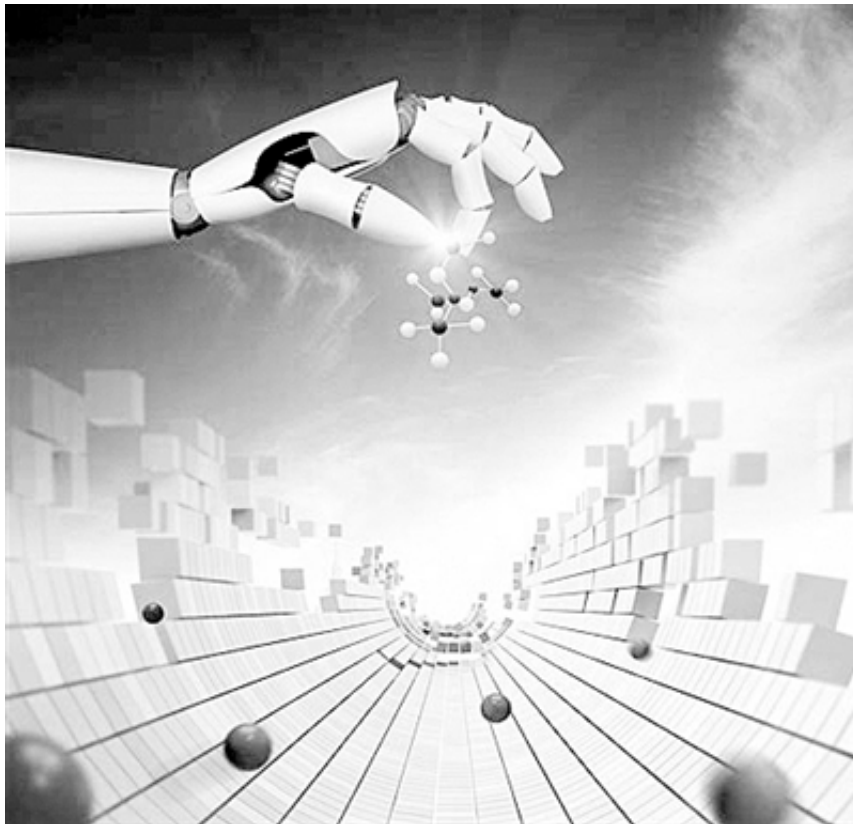
---

# AI “魔法”助金属玻璃问世

作者：房琳琳 来源：科技日报

本文原地址：<https://www.iikx.com/news/progress/446.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！



在适当的条件下，一种被称为金属玻璃的未来合金，会比现在的钢材更坚固轻便，也更耐腐蚀和磨损。过去50年中，人们在数百万种可能的成分组合中，已经评估过几千种，但只有少数几种可能是有用的。

现在，由美国能源部SLAC国家加速器实验室、国家标准与技术研究院(NIST)和西北大学的科学家领导的一个科学小组报告，他们找到了发现和改进金属玻璃的捷径，仅用较少时间和成本，就能发现新材料。

**发现新材料速度快200倍**

理想的状况是，将两种或三种金属融合在一起，会得到看起来像金属的合金，其原子排列成刚性几何图形。

---

科学小组利用斯坦福同步辐射光源中一个结合了机器学习的新系统，能快速筛选数百种样品材料，使团队发现了3种新混合物制成的金属玻璃成分，速度比以前快200倍。

西北大学教授克里斯·沃尔夫顿是使用计算机和人工智能预测新材料的先驱，也是论文合作者之一。他说，通常需要十年或二十年的时间，新材料才能完成从发现到商用的过程，“这一成果极大缩短了新材料发现所花费的时间。”

### 材料科学的前景将改变

在过去的半个世纪里，科学家一共才研究了大约6000种金属玻璃的组成成分，而这套新系统能够制作并筛选20000种成分。

虽然有其他团队也在使用机器学习预测寻找不同种类的金属玻璃，但此次科学家通过实验的快速验证和预测，然后将结果循环到下一轮机器学习和实验中，是此次进步的独特之处。

实际上，这种方法可以用于各种实验，特别是在寻找材料，如金属玻璃和催化剂方面大有裨益。NIST材料研究工程师杰森·海垂科-席目尔说，人工智能将改变材料科学的前景。

### 为全球科学家提供实用工具

该论文是美国能源部资助此项目的第一个科学成果，SLAC正在与硅谷人工智能公司Citrine Informatics合作，改变了新材料的发现方式，为全世界科学家提供了实用的工具。

该公司由斯坦福大学和西北大学的前研究生创立，他们创建了一个材料科学数据平台，其中电子表格和实验室笔记中的数据以一致的格式存储，所以能用来供人工智能系统学习使用。

近来，评估新材料的速度非常缓慢，即使每天都可以检测5种潜在类型的金属玻璃，仍要花上一千年时间来研究每一种可能的金属玻璃组合，以克服有毒、昂贵成分，或去掉易碎的性质等。

沃尔夫顿说，最终的目标，是让科学家能够获得机器学习模型中的直接反馈结果，并在第二天甚至下一个小时内，就准备好另一套待测试的样本。

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