

麻省理工学院发现性能远优于硅的半导体“立方砷化硼”

来自麻省理工学院研究人员及其合作伙伴已经发现了一种性能比硅好得多的材料。下一步是找到实用和经济的方法来制造它。硅是地球上最丰富的元素之一，以其纯粹的形式，这种半导体材料已成为许多现代技术的基础，包括微电子计算机芯片和太阳能电池。然而，硅作为一种半导体的特性实际上远非理想。

其中一个原因是，尽管硅允许电子轻易地在结构中流动，但它对“空穴”——电子带正电的对应物的适应性要差得多，而利用这两者对特定类型的设备至关重要。此外，硅在传输热量方面做得很差，这导致了计算机中频繁的过热问题和昂贵的冷却系统。

现在，来自麻省理工学院、休斯敦大学和其他机构的一个科学家团队已经进行了实验，显示一种名为立方砷化硼的材料克服了这两个限制。除了为电子和空穴提供高迁移率外，它还具有出色的导热性。据研究人员说，它是迄今发现的最好的半导体材料，也许是可能的最好的材料。

迄今为止，立方砷化硼只在实验室规模的小批次中被制造和测试，为了测试材料中的小区域，科学家们不得不使用最初由麻省理工学院博士后白松开发的特殊方法。要确定立方砷化硼是否能以实用、经济的形式制成，更

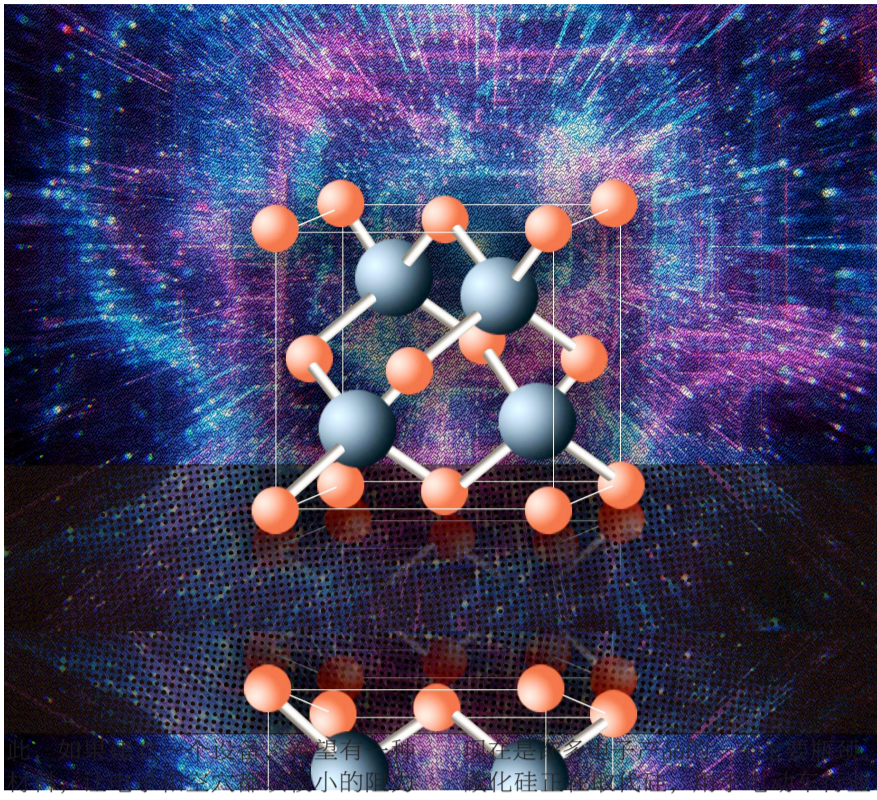
不用说取代无处不在的硅还需要更多的工作。但研究人员说，即使在不久的将来，这种材料也能找到一些用途，其独特的性能将产生重大的影响。

今年7月21日，麻省理工学院博士后 Jungwoo Shin 和麻省理工学院机械工程学教授 Gang Chen；休斯敦大学的 Zhifeng Ren；以及麻省理工学院、休斯敦大学、得克萨斯大学奥斯汀分校和波士顿学院的其他14人在《科学》杂志上报告了这些发现。

早期的研究包括 David Broido 的工作，他是新论文的共同作者，从理论上预测该材料将具有高导热性。随后的工作通过实验证明了这一预测。这项工作通过实验证实了 Chen 的小组在2018年做出的预测，从而完成了分析，“立方砷化硼也将具有非常高的电子和空穴迁移率，这使得这种材料真的很独特。”Chen说。

早期的实验表明，立方砷化硼的导热率几乎是硅的10倍。“因此，它就散热而言，这非常有吸引力。”Chen说。他们还表明，这种材料有一个非常好的带隙，这一特性使它作为一种半导体材料具有巨大的潜力。

现在，新的工作填补了这一空白，表明凭借其电子和空穴的高迁移率，砷化硼具有理想半导体所需的所有主要品质。“这很重要，因为在半导体中，正电和负电都是等价的。因



立方砷化硼的晶格结构。这种材料具有非常高的电子和空穴迁移率，这使得它成为一种非常理想的半导体材料。图：麻省理工学院

移动。”Chen说。硅具有良好的电子迁移率，但空穴迁移率较差，而其他材料，如广泛用于激光器的砷化镓，同样具有良好的电子迁移率，但空穴迁移率不高。论文的主要作者 Shin 说：“热量

可能的关键里程碑是因为麻省理工学院的超快激光光栅系统的进展。”这种技术最初是由 Song 开发。他说，如果没有这种技术，就不可能证明这种材料的电子和空穴的高流动性。

立方砷化硼的电子特性最初是根据 Chen 的小组所做的量子力学密度函数计算来预测的，而这些预测现在已经通过在麻省理工学院进行的实验得到了验证，该实验使用光学检测方法来对 Ren 和休斯敦大学的团队成员制作的样品进行检测。

该材料的导热性不仅是所有半导体中最好的，而且科学家们还说它的导热性在所有材料中排名第三——仅次于钻石和富含同位素的立方氮化硼。“而现在，我们预测了电子和空穴的量子力学行为，也是从第一原理出发，这也被证明是真实的，”Chen说，“这令人印象深刻，因为除了石墨烯之外，我实际上不知道有任何其他材料具有所有这些特性。而这是一种具有这些特性的散装材料。”

Chen 表示，现在的挑战是找出实用的方法，以可用的数量制造这种材料。目前制造它的方法产生了非常不均匀的材料，因此该团队必须找到方法来测试只是小块的材料，这些材料足够均匀以提供可靠的数据。虽然他们已经证明了这种材料的巨大潜力，但“它是否或在哪里会被真正使用，

我们并不知道。”Chen说，“硅是整个行业的主力，我们已经有了一种更好的材料，但它是否真的会威胁这个行业？我们不知道。虽然这种材料看起来几乎是一种理想的半导体，它是否真的能进入设备并取代目前的一些市场，我认为这仍有待证明。”

而且，虽然该材料热和电性能已被证明是优秀的，但一种材料的许多其他性能还有待测试，例如它的长期稳定性，Chen说：“为了制造设备，还有许多其他因素我们还不知道。”这有可能真的很重要，而人们甚至还没有真正注意到这种材料。现在，砷化硼的理想特性已经变得更加明确，表明这种材料在许多方面是最好的半导体，也许人们会更加关注这种材料。

展望商业用途，Ren说：“一个巨大的挑战将是如何像硅一样有效地生产和净化立方砷化硼。……砷化硼，我实际上不知道有任何其他材料具有所有这些特性。”Chen说，这种开发的必要资金是否能得到，还有待观察。（逸文）

DeepMind详解机器学习架构帮助构建算法模型

机器学习架构 Transformer 自2017年被谷歌推出后，在自然语言处理（NLP, Natural Language Processing）和计算机视觉领域得到广泛应用且获得巨大成功，一定程度上对之前的神经网络（RNN, Recurrent Neural Network）形成了替代。

5年以来，行业人士针对 Transformer 开发出了众多变体，但人们对其描述通常都是图形化或口头形式的。尽管它们很受欢迎，但几乎没有人为任何变体发布过伪代码。

在计算机科学中，伪代码是对算法或其他系统如何实现的重点描述，用于人类阅读而不是机器阅读，比传统的编程语言代码更易理解，类似于自然语言，可读性好。

伪代码的语法没有具体标准，因为它并不是用于可执行程序。伪代码的主要意义在于使算法被各种编程语言更容易地表示。

不过，不知什么原因，深度学习领域的从业者好像并不想为自己的模型写伪代码。

近日，与谷歌同为 Alphabet 子公司的 DeepMind，将 Transformer 架构进行了详细解读，并将相关论文以《Transformers 架构的形式化算法》（Formal Algorithms for Transformers）为题提交在 arXiv 上。

据了解，Transformer 非常擅长 NLP 或建模序列数据，常用于的两种任务是序列建模和序列到序列的预测。许多预训练模型，如 GPT-2、GPT-3、BERT、XLNet 和 RoBERTa，证明了 Transformer 执行各种 NLP 相关任务的能力，并可应用于机器翻译、文档生成、生物序列分析、视频理解等方面。

本次的研究报告旨在成为 Transformer 独立的、数学上精确的算法概述，并对 Transformer 的定义、训练方法、用途和关键架构组件、较



有名的模型做了说明。

论文开篇有一段引言，DeepMind 写道：“曾有同事引一位著名的复杂性理论家寄过一篇非常好的论文。但理论家却表示，在论文中找不到一个定理，不知道这篇论文是关于什么的。”

该公司提到，这个真实故事很好地表达了他们在浏览许多深度学习论文时的感觉：无法准确地找出算法建议。

在过去的几年里，深度学习取得了极大进步，每年发表的关于该方面的论文可达数千篇。

但这些论文往往缺乏科学的精确性和细节，其中很多只是介绍了他们的模型相较于之前有何变化，甚至有的论文只包含几行散文式的描述，最多有一些图表，而没有对模型的精确解释，完全没有伪代码。

也有人会说，大多数深度学习模型都是一些核心架构的微小变化，因此，一个增加了对变化的描述的参考应该就足够了。

但模型的核心算法应该附带调用它们的包装器算法，例如（前）训练、微调、提示、推理、部署。对于行业人士，这些论文也许已经十分精简，但理论家一般要更细致地介绍说明。

无论如何，如果这些事情没有被较好地说明，算法模型仍然很难被人

所理解。

正确地解释这些模型是如何被训练和使用的也同样重要，因为有时甚至不清楚所描述的模型的输入和输出是什么。当然，有经验的人通常能够正确地猜测，但这显然不是一个能够科学应用的方法。

值得一提的是，开放源代码很有效，但这并不能很好地替代伪代码的作用。在基本将算法完整描述的情况下，源代码往往要几千行，而一个包含所有重要内容的伪代码通常还不到一个页面。但很少有深度学习从业者能在设计算法的同时写出伪代码。

有人也对伪代码的必要性提出疑问，它有什么用处，真的有人需要伪代码吗？

在深度学习中，提供伪代码可以用于许多用途。相比动辄上千行的实际代码，伪代码能让研究者更简单地开发新模型。

研究人员在论文中提到：“伪代码能够对需要完整和精确公式的理论研究者、从零实现 Transformer 的实验者和使用形式 Transformer 算法扩充论文或书籍的人提供非常大的帮助。”

理论家需要紧凑、完整和精确的描述来进行推理，并最终证明算法的性质。他们通常不愿意或无法对实际代码进行反向工程，或去猜测单词、图表的具体含义。

综上所述 DeepMind 的研究人员因此正式描述了 Transformer 架构、典型任务、标记化（文本的表示方式）、训练和推理的所有方面。

在论文中，DeepMind 还表示，当在消化了论文中的内容后，人们可进一步地更深刻理解 Transformer，并在此基础上，能够为有关 Transformer 领域的文献作出贡献，且能基于伪代码从零创建 Transformer 模型。

（麻省）

以色列耗资2亿元打造量子中心

量子计算或对未来社会经济、技术、安全、工程等多领域发展产生极大影响，并彻底改变广泛行业。这也是如今各国都在投资量子技术的原因之一。

近日，负责促进以色列国内工业研发发展的以色列创新局打算以2900万美元的预算，建立一个量子计算研究中心。

据了解，该研究中心由以色列初创公司 Quantum Machines 领导，将针对多项量子计算技术进行全栈软硬件研发，主要在光量子、超导量子及冷原子三方面。

Quantum Machines 成立于2018年，其曾打造了专为量子控制设计的混合架构“量子编排平台”和量子计算机的标准通用语言，该语言允许研究人员使用统一的代码为各种量子计算机编写程序。该公司已经为十几个国家和地区的客户提供了量子计算服务。

在2022年2月，以色列创新局和该国国防部宣布，计划花费大约6000万美元来开发国家量子计算机，为以色列在量子领域奠定基础。本次2900万美元预算的新量子计算中心也是该计划的一部分，剩余预算将用于军事用途量子技术的开发。同时该计划也是2018年启动的以色列国家量子计划（价值3.9亿美元）的一部分。

新的量子计算中心预计将在1-3年内投入运营，最初采用超过50个量子位的量子系统，目标是在未来几年内扩展到数百个和数千个量子位，建成后的量子计算机将提供给商界和学术界。

以色列创新局在一份声明中表示：“量子行业必须发展教育和基础设施，以便为其发展塑造增长引擎。量子计算是不能忽视的技术，它已在各个层面上显示出成为国家安全与技术优势的重要组成部分的迹象。”

新的量子中心建设是对现有战略

市场和政府政策的回应，这将让以色列获得最先进的量子技术和服务，或可使以色列公司在广泛的部门 and 行业中获得领先的全球地位。

据了解，量子计算是一个相对较新的、极其复杂的领域，它会对网络安全、材料和制药、银行和金融以及先进制造业等行业带来非常有益的改变。

简单来说，量子计算是利用量子力学来快速解决过于复杂问题的一门技术。

与经典计算机相比，量子计算机处理的数据呈指数级增长。在经典计算机中，每个位都可以采用1或0的值来表示。开发人员用来编写程序。

而量子计算机的基本单元被称为量子位（量子比特）。量子位由可处于叠加态的量子粒子（通常是亚原子粒子，如电子或光子）组成，能同时表示0和1，因此量子计算机能进一步做极其大量数据的计算。

值得注意的是，量子计算机并不会对传统的计算机形成全面替代。经典机器依然是多数问题最简单、经济的解决工具。

量子计算机主要是解决经典计算机无法解决或者需要大量时间（可能达到成千上万年）解决的问题。其最有前途的应用之一是模拟物质在分子水平上的行为，比如通过模拟汽车电池的化学反应来帮助找到提高其性能的新方法。除此之外，还有

望推动材料科学、制药研究等的突破，甚至还可以用来加速 AI 的发展。

量子机器也非常适合解决优化问题，因为它能非常快地生成大量潜在的解决方案。例如，可以用来帮助航空公司计算飞机最省油的上升和下降路径或者规划城市公共汽车和出租车的最佳路线，以尽量减少拥堵。

不过，目前的量子计算机非常昂贵，难以建造和运行。因为生成和管理量子位是一项科学和工程挑战。

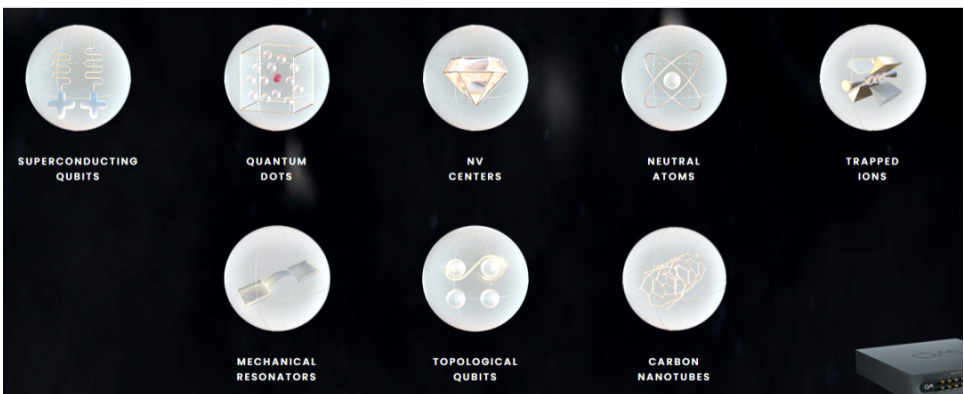
为在受控的量子态中隔离量子位，一些公司如 IBM、谷歌和 Rigetti Computing，会使用将温度降低到比星际空间更冷的方法，而量子计算公司 IonQ 采用的是将原子捕获在超高真空室里的电磁场中。

量子位的量子态极易被打破，细微的振动或温度改变（“噪声”干扰）可能导致量子粒子在正确完成工作之前从叠加状态中脱离出来。由于量子位会受周边环境的影响导致其量子行为衰变并最终消失（量子退相干），因

此量子计算机比经典计算机更容易出错。这就是研究人员要尽最大努力在超低温或真空中保护量子位免受外界影响的原因。

尽管量子计算机可能还需要较长时间才能充分发挥其潜力，但当其真正发展起来，势必会改变众多行业并加速全球创新。当然，这同时也会带来诸多全新的安全问题，可能会使当前的网络加密变得毫无用处。

（麻省）



首款3D打印纳米结构高熵合金问世

美国马萨诸塞大学阿默斯特分校和佐治亚理工大学科学家在最新一期《自然》杂志在线发表论文称，他们采用3D打印方法，制作出一种双相纳米结构高熵合金（HEA），其强度和延展性优于现有其他先进的3D打印材料，有望催生出用于航空航天、医学、能源和运输等领域的高性能部件。

过去15年，HEA越来越受欢迎。HEA是由5种或5种以上等量或大约等量的金属制成的合金，具有许多理想的性质，因此在材料科学及工程领域备受重视。3D打印技术目前已用于材料开发领域，基于激光的3D打印可以产生大的温度梯度和高冷却

速率，而传统方法很难做到这一点。

此次，研究人员将 HEA 与先进的3D打印技术——激光粉末床熔融结合，开发出具有前所未有的性能的新材料。由于该工艺使材料熔化和凝固速度非常快，所得到材料的微观结构与传统方法制造出的材料大相径庭。新材料的微观结构看起来像一种网状结构，由名为面心立方（FCC）和体心立方（BCC）的纳米层状结构交替组成，这些层被嵌入微米级晶团中，分级纳米结构 HEA 使两相能够协同变形。

研究人员表示，这种不寻常微观结构的原子重排使其拥有超高强度和更高的延展性，与传统金属铸件相比，

新材料的强度提升了3倍，延展性不减反增。使 HEA 拥有更强韧性和更好延展性有助于研制出机械效率高且节能的轻质结构。

研究团队还开发出了双相晶体塑性计算模型，以了解 FCC 和 BCC 纳米片层所起的作用，以及它们如何协同工作以增加材料的强度和延展性。结果显示，BCC 纳米片层具有极坚固的特性，这对于实现合金卓越的强度-延展性协同作用至关重要。未来，科学家们有望利用3D打印技术和 HEA 研制出可广泛应用于生物医学、航空航天等领域的高性能部件。

（逸文）