



Разработанный российскими учеными метод упростит создание новых материалов

Команда исследователей из Института AIRI и МГУ представила метод, который позволяет прогнозировать возможность легирования сплавов на основе железо-родий (Fe–Rh). Результаты были [опубликованы](#) в международном журнале семейства Nature — Scientific Reports. В сентябре созданный учеными датасет также будет выложен в публичный репозиторий на GitHub для поддержки научного сообщества.

Легирование — это процесс изменения химического состава материала для придания ему необходимых физических, химических или механических свойств за счет введения в состав дополнительных элементов. Оно широко используется как в науке, так и в множестве отраслей промышленности. Например, для увеличения прочности металлоконструкций или их устойчивости к коррозии. Однако, несмотря на широкое распространение легирования, и теоретическое прогнозирование, и компьютерное моделирование новых материалов с модифицированным химическим составом остаются серьезной научной проблемой. Так, при добавлении в известные сплавы новых элементов специалисты все еще не понимают, как изменится исходная структура сплавов, какие при этом возникнут типы точечных дефектов и, например, будут ли атомы какого-то конкретного элемента в большей степени подвержены замене на новые.

Сплавы на основе железа-родия могут быть использованы для создания «магнитных» холодильников — устройств, которые обеспечивают достижение экстремально низких температур и работают без традиционного теплоносителя, применяя для охлаждения и нагрева магнитное поле. Кроме того, такие сплавы рассматриваются как перспективные материалы для точечной доставки лекарств. Управляемое перемещение частиц в организме дает возможность подачи лекарства к пораженным участкам с минимальными побочными эффектами и большей результативностью лечения.

Созданный российской командой метод основан на использовании квантово-механических расчетов и классического машинного обучения. В ходе работы над проектом, стартовавшем в начале 2023 года, ученые разработали вычислительный пайплайн, который позволяет анализировать энергетические характеристики сплавов с включением третьего элемента. Команда также представила датасет для дальнейшего обучения нейросетей и их применения в анализе других сплавов и материалов.

«Новизна нашего подхода заключается в том, что команда рассматривала термодинамические характеристики тернарных (состоящих из трех компонентов) составов на основе железа-родия, а построенная модель прогнозирования их термодинамических свойств является интерпретируемой. Мы предложили метод, который позволяет определить, насколько энергетически выгодно замещать железо или родий в каждом конкретном случае. Метод уже показал отличный баланс между точностью и вычислительными затратами и будет полезен значительной доле российского научного сообщества: физикам, химикам, биологам, исследователям ИИ и другим специалистам», — подчеркнул **Артур Кадури**н, **руководитель научной группы «Глубокое обучение в науках о жизни»** Института AIRI.

.....

Вопросы: pr@airi.net

Научно-исследовательский институт [AIRI](#) — автономная некоммерческая организация, занимающаяся фундаментальными и прикладными исследованиями в области искусственного интеллекта. На сегодняшний день более 180 научных сотрудников AIRI задействовано в исследовательских проектах Института для работы совместно с глобальным сообществом разработчиков, академическими и промышленными партнерами.