

Учёные из Международного научно-исследовательского центра по теоретическому материаловедению (МНИЦТМ) Самарского технического университета создали базу данных для оценки стабильности интерметаллических соединений. Эта разработка поможет создавать новые сплавы с заданными свойствами. Информация об этом появилась на сайте Минобрнауки РФ.

Новая база данных встроена в платформу TopCryst, которая позволяет в режиме онлайн анализировать и классифицировать кристаллическую структуру. Интерметаллиды — это соединения металлов с постоянным составом, используемые в конструкционных материалах, проводниках и магнитах. С их помощью можно создавать сплавы с нужными свойствами.

Директор МНИЦТМ Владислав Блатов отметил, что критерии нестабильности интерметаллидов могут выявлять различные проблемы в кристаллической структуре, такие как ошибки в экспериментальных данных или некорректные структурные модели. Это особенно полезно для проверки и уточнения структурных мотивов, предсказанных теоретическими методами.