

Российские учёные “научили” ИИ подбирать оптимальные материалы для создания аккумуляторов будущего

Российские учёные разработали систему искусственного интеллекта, которая ускоряет поиск энергоэффективных и пожаробезопасных материалов для твердотельных аккумуляторов. Этот инструмент позволяет быстрее подбирать подходящие электролиты и защитные покрытия для электродов, что важно для замены традиционных литий-ионных батарей. В «Сколтехе» отметили, что использование графовых нейронных сетей сокращает время поиска новых материалов, по сравнению с традиционными квантово-химическими методами.

Твердотельные аккумуляторы считаются перспективной альтернативой, поскольку могут увеличить дальность пробега электромобилей и улучшить их безопасность. Однако сложности с поиском подходящих электролитов, которые обеспечивали бы высокую ионную проводимость и устойчивость к химическим реакциям, тормозят их внедрение. Разработчики пояснили, что раньше подбор материалов требовал длительных расчётов, но новая ИИ-система значительно упрощает этот процесс.

Работоспособность системы проверили на электролите $\text{Li}_{10}\text{GeP}_2\text{S}_{12}$, содержащем литий, германий, фосфор и серу. ИИ выявил несколько защитных материалов, которые могут увеличить срок службы и надёжность твердотельных батарей. Учёные отметили, что подобный подход можно использовать для улучшения других типов электролитов, что ускорит развитие аккумуляторных технологий.