

ной медицины, где каждая имплантация или процедура может быть точно адаптирована под конкретного пациента.

Вывод. Аддитивные технологии и умные материалы представляют собой мощные инструменты для инноваций, которые могут способствовать устойчивому развитию и значительно улучшить методы производства и качество производимых продуктов. 3D-печать с каждым годом все шире вводится в эксплуатацию, предлагая новые возможности для получения индивидуально настраиваемых и высокоэффективных решений в различных сферах нашей жизни. Тем не менее, также важен упор на развитие умных материалов, которые являются неотъемлемой частью успеха аддитивных технологий. Использование материалов, способных адаптировать свои свойства в зависимости от окружающей среды, расширяет возможности в проектировании продуктов с заранее заданными характеристиками.

ЛИТЕРАТУРА

1. Каблов, Е. Н. Аддитивные технологии – доминанта национальной технологической инициативы / Е. Н. Каблов // Интеллект и технологии. – 2015. – № 2 (11). – С. 52–55.
2. Чумаков, Д. М. Перспективы использования аддитивных технологий при создании авиационной и ракетно-космической техники / Д. М. Чумаков // Труды МАИ. – 2014. – № 78. – С. 31.
3. Аббасов, А. Э. Перспективы развития аддитивных технологий / А. Э. Аббасов // Информационные технологии. Радиоэлектроника. Телекоммуникации. 2015. № 5–1. – С. 21–26.

УДК 54.7

ДИЗАЙН МАТЕРИАЛОВ (НОВЫХ СОЕДИНЕНИЙ) С ПОМОЩЬЮ ПРОГРАММ ДЛЯ ПК

М. С. Даценко, А. А. Иванович, студенты группы 10508122 БНТУ, научный руководитель – старший преподаватель А. А. Заболотец

Резюме – в статье рассматривается важность внедрения компьютерных программ для открытия новых соединений и материалов. В отличие от традиционных методов создания материалов программа USPEX, основанная кристаллографом-теоретиком, химиком, профессором РАН Артемом Органовым, позволяет сократить время, ресурсы и затраты на разработку материалов. Все это способствует ускорению процесса новых технологических разработок в различных отраслях.

Resume – the article discusses the importance of implementing computer programs for the discovery of new compounds and materials. Unlike traditional methods for creating materials, the USPEX program, founded by theoretical crystallographer, chemist, professor of the Russian Academy of Sciences Artyom

Organov, allows you to reduce time, resources and costs for developing materials. All this helps to accelerate the process of new technological developments in various industries.

Введение. До недавних времен открытие новых материалов осуществлялось экспериментальным путем. Дизайн новых соединений с помощью компьютерных программ – намерение, которое на протяжении многих десятилетий считалось недостижимым, так как проблема дизайна материалов с помощью программ для компьютеров включала в себя неразрешимый вопрос кристаллических структур. Однако в последние годы человечество преуспело в данной сфере [1].

Дизайн материалов (новых соединений) с помощью программ для ПК. Зачастую изготовление новых материалов традиционным методом является трудоемким и дорогостоящим процессом, порой приводящим к неоправданным результатам.

Для открытия новых соединений требуется смешивание различных веществ под определенной температурой и давлением. Полученный материал анализируется исследователями, и большинство из них отфильтровывается, поскольку не имеет требуемых свойств, таких как прочность, твердость, пластичность. И исследователи продолжают повторять данный процесс годами, при этом тратя значительные средства и время на создание лишь одного материала [2].

Для решения этой проблемы были разработаны новые методы. Один из них – метод компьютерного предсказания. Он позволяет вводить в компьютерный алгоритм запросы с конкретными указаниями, например: «спрогнозировать материал со следующими свойствами: высокая температура плавления, сверхпроводимость, низкая или высокая плотность и другие свойства». Затем программа проводит анализ запроса и предоставляет химический состав и кристаллическую структуру, которые будут соответствовать данным критериям.

Таким образом для существенного сокращения используемых ресурсов, временных затрат и денежных средств Артем Органов основал компьютерную программу USPEX – Universal Structure Predictor: Evolutionary Xtallography. Кроме того, программа стала бесплатной для людей, работающих в фундаментальной науке.

Так, в 2011 году исследователи занимались поиском аллотропа углерода с максимальной плотностью. Стоит обратить внимание на то, что алмаз – материал, обладающий самой высокой плотностью, однако благодаря программе USPEX ученые обнаружили, что существуют еще более плотные фазы углерода, которые обладают редкими оптическими и электронными свойствами. Именно эти свойства могут применяться в различных отраслях промышленности. Например, данный материал с отчётливо высокой плотностью может найти применение в производстве высокопрочных конструкций или же в производстве защитных покрытий. Благодаря своему

уникальному оптическому свойству (очень высокие показатели преломления и дисперсии света), материал можно задействовать в изготовлении оптических приборов, таких как линзы и призмы.

Рассматриваемый подход был протестирован вместе с другими методами дизайна материалов с помощью программ (табл. 1) [3].

Таблица 1 – Сравнение кода USPEX с другой программой

Метод	Процент успеха	Количество релаксаций
USPEX, no symmetry	100	80
CALYPSO, no symmetry	90	500
USPEX, with symmetry	100	77
CALYPSO, with symmetry	100	156–400

Таким образом, программа способна существенно сократить издержки на открытие новых материалов с улучшенными свойствами, что способствует разработке инновационных технологий и конструкций, а также повышает эффективность производства в многочисленных отраслях.

Заключение. Дизайн новых соединений с помощью компьютерных программ – важный инструмент для повышения эффективности производства материалов. Программа USPEX предоставила исследователям мощное приспособление для прогнозирования материалов с указанными свойствами, что позволяет оптимизировать производство материалов. А также данное внедрение привело к созданию новых изделий с улучшенными характеристиками, такими как уникальные электронные и оптические свойства.

ЛИТЕРАТУРА

1. Главная – USPEX [Электронный документ]. – Режим доступа: <https://usrex-team.org/ru>. – Дата доступа: 27.04.2023.
2. Компьютерный дизайн новых материалов – Артем Органов [Электронный документ]. – Режим доступа: <https://www.youtube.com/watch?v=oiGWbONemhg&t=352s>. – Дата доступа: 28.04.2023.
3. Исследования Артема Органова [Электронный документ]. – Режим доступа: <https://usrex-team.org/ru/research/materials>. – Дата доступа: 27.04.2023.