

ДИЗАЙН ХИМИЧЕСКИХ ВЕЩЕСТВ (НОВЫХ СОЕДИНЕНИЙ) С ПОМОЩЬЮ ПРОГРАММЫ ДЛЯ ПК

Химия вступает в цифровую эпоху: новые вещества и явления теперь открывают не в пробирке, а в виртуальном мире с помощью искусственного интеллекта. Это не только оказалось быстрее и дешевле, но и привело к революционным открытиям. В реалиях XXI в. чрезвычайно важной становится задача открывать материалы не долгим, основанным на удаче и случайности, методом, с небольшой долей научного прозрения, а более систематичным, научным, быстрым и безотказным — методом компьютерного предсказания [1].

Цель работы состоит в том, чтобы разобраться в исследованиях, которые могут иметь большое значение для производства новых материалов, в изобретениях и применении новых теоретических методов — в частности, методов предсказания кристаллической структуры. В работе рассматривается «новая химия под давлением» — область исследований, которая совершила огромный рывок благодаря компьютерному изучению свойств веществ в экстремальных условиях. Исследуются применение, развитие и усовершенствование эволюционных алгоритмов: сочетание быстрого и надежного эволюционного поиска структуры с самой низкой энергией и квантовой механики. Кроме того, анализируется роль компьютерного дизайнера химических веществ в различных областях.

Сегодня компьютер, перебирая многочисленные варианты, может дать ответ на вопрос, какой химический состав и какая кристаллическая структура будут отвечать конкретным требованиям. То есть какой материал, с каким составом, с какой температурой будет иметь нужные свойства: высокую температуру проводимости, низкую плотность, высокую твердость, высокую электропроводность [3]. Один из самых известных российских ученых — кристаллограф-теоретик Артем Оганов — решил задачу предсказания кристаллической структуры вещества на основе его химического состава, создал компьютерную программу, способную предсказывать устойчивые химические соединения по набору исходных элементов [1]. Идея — в создании случайного набора структур, из которых худшие отбраковываются, а лучшие получают возможность стать «родителями» следующего поколения структур материалов. Созданная Огановым программа называется USPEX. Сегодня метод USPEX лидирует в мире по всем своим параметрам [2].

Человеческую цивилизацию нельзя представить без технологий, а технологии — без внедрения новых материалов. Несомненно, в ближайшем будущем метод USPEX станет ведущим в поиске, а также

в дизайне и оптимизации новых химических соединений. Он проложит абсолютно новый путь в технологии будущего. Компьютер однозначно становится таким же инструментом исследования, как и привычный химический или физико-химический эксперимент [3].

Источники

1. *Брайкова, А. М.* Компьютерный дизайн новых химических соединений (материалов) — это уже не мечта / А. М. Брайкова, В. В. Паневчик // Экономический рост Республики Беларусь: глобализация, инновационность, устойчивость : материалы XV Междунар. науч.-практ. конф., Минск, 19–20 мая 2022 г. / Белорус. гос. экон. ун-т ; редкол.: А. В. Егоров (отв. ред.) [и др.]. — Минск, 2022. — С. 251–252.

2. Может ли алгоритм открыть новый материал раньше ученых? [Электронный ресурс] // Истовый инженер. — Режим доступа: <https://engineer.yadro.com/interview/discover-new-supermaterials/>. — Дата доступа: 23.11.2023.

3. Компьютерный дизайн новых материалов [Электронный ресурс] // ПостНаука. — Режим доступа: <https://postnauka.org/video/20749>. — Дата доступа: 24.11.2023