

на создание вертикально интегрированных структур и иных процессов экономической концентрации. Практический опыт такого использования результатов оценки изменения конкурентного потенциала при создании вертикально интегрированных структур имеется: принят к использованию территориальными органами МАРТ в рамках экономического обоснования при подаче документов для получения согласия на создание ВИС;

- определения инвестиционной привлекательности организации, приоритетов инвестирования и развития организации.

Таким образом, практическая значимость и широкая область применения оценки конкурентного потенциала не вызывают сомнения.

А. М. Брайкова, канд. хим. наук, доцент
alina-tsynkel@yandexby
В. В. Паневчик, канд. хим. наук, доцент
vpan1948@mail.ru
БГЭУ (Минск)

КОМПЬЮТЕРНЫЙ ДИЗАЙН НОВЫХ ХИМИЧЕСКИХ СОЕДИНЕНИЙ (МАТЕРИАЛОВ) — ЭТО УЖЕ НЕ МЕЧТА

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.

Компьютерный дизайн новых материалов — это мечта, которую человечество лелеяло уже многие десятилетия. Долгое время она считалась недостижимой из-за считавшейся нерешаемой проблемы кристаллических структур, однако в последние годы удалось не только приблизиться к этой мечте, но и во многих случаях даже ее достигнуть.

До настоящего времени поиск и получение новых материалов осуществляются методом проб и ошибок, иначе называемым дисоновским, но в реалиях XXI в. чрезвычайно важно открывать материалы научным, быстрым и безотказным методом — методом компьютерного предсказания.

Один из самых известных российских ученых — кристаллограф-теоретик Артем Оганов — решил считавшуюся нерешаемой задачу предсказания кристаллической структуры вещества на основе его химического состава, создал компьютерную программу, способную предсказывать устойчивые химические соединения по набору исходных элементов. Это открытие настолько впечатляющее, что многие считают ученого одним из вероятных кандидатов на Нобелевскую премию в ближайшие годы.

Проработав за границей — в Англии, Швейцарии, США — 17 лет, в 37 лет он вернулся в Россию, где стал профессором Сколтеха — Сколковского института науки и технологий — нового технологического университета, созданного в 2011 г. в Москве командой российских и зарубежных профессоров с мировым именем, и возглавил лабораторию компьютерного дизайна материалов Московского физико-технического института.

Созданная Артемом Огановым программа называется USPEX (аббревиатура от англ. Universal Structure Predictor: Evolutionary Xtallography). Она бесплатна для любого человека, работающего в фундаментальной науке, а компаниям — среди них Sony, Toyota, Fujitsu — ее предоставляют за плату.

В конце 2014 г. китайские ученые, применив его метод, предсказали, что соединение серы и водорода под давлением будет иметь не привычную всем формулу H_2S — сероводорода, которым пахнут тухлые яйца, — а H_3S . Это вещество будет обладать очень высокой

температурой сверхпроводимости — $-73\text{ }^{\circ}\text{C}$, а такая температура уже встречается на Земле. Через пару месяцев после выхода статьи гипотеза была подтверждена экспериментально: российские ученые получили H_3S с предсказанной температурой сверхпроводимости этого материала.

Наши теории пока очень размытые и неполные. Например, мы поняли, что при экстремальных условиях, таких как высокое давление, все меняется самым драматическим образом и перед нами разворачивается необъятное поле новой, а иногда даже запрещенной химии.

Законы химии утверждают, что единственным возможным соединением натрия и хлора является NaCl — поваренная соль. Однако под давлением, как оказалось, образуются соединения, увидев которые у вас в тетради любой учитель химии за голову бы схватился: Na_3Cl , Na_2Cl , Na_3Cl_2 , даже NaCl_7 — это просто какой-то триумф двоечников!

Компьютерный дизайн новых материалов позволяет безошибочно находить новые материалы. Нет никаких сомнений, что в ближайшем будущем этот способ станет доминировать в поиске, а также в дизайне и оптимизации новых материалов и проложит совершенно новый путь в технологии будущего.

А. М. Брайкова, канд. хим. наук, доцент

alina-tsynkel@yandex.by

Т. А. Гапонова, канд. техн. наук

tagar0nova@yandex.by

БГЭУ (Минск)

ИССЛЕДОВАНИЕ МИГРАЦИИ ТЯЖЕЛЫХ МЕТАЛЛОВ ИЗ ХРУСТАЛЬНОЙ ПОСУДЫ, КОНТАКТИРУЮЩЕЙ С АЛКОГОЛЬНОЙ ПРОДУКЦИЕЙ

Цель данной работы — исследование миграции тяжелых металлов, таких как цинк, кадмий, свинец и медь, из хрустальной посуды в алкогольную продукцию. В качестве образцов посуды были выбраны рюмки производства ОАО «Неман» (Республика Беларусь) объемом 50 см^3 , изготовленные из хрустала, содержащего 24 % оксида свинца. Рюмки не были в использовании и не обрабатывались водой или моющим средством. В качестве алкогольной продукции была выбрана водка «Бресть-Литовскъ» с концентрацией спирта 40 % производства Брестского ликеро-водочного завода «Белалко».

В ходе эксперимента алкогольную продукцию заливали в образец хрустальной посуды, выдерживали в течение 2, 20, 40, 60, 120, 240 и 4320 мин и отбирали аликвоты объемом $0,5\text{ см}^3$ для определения концентрации миграции металлов. Содержание Zn, Cd, Pb, Cu в образце алкогольной продукции, выдержанном в хрустальной рюмке, определяли методом инверсионной вольтамперометрии с помощью анализатора АВА-3 в условиях, описанных в работе [1]. Результаты проведенного исследования представлены на рисунке.

Согласно постановлению Министерства здравоохранения Республики Беларусь № 119 от 30.12.2014 г. «Об утверждении Санитарных норм и правил "Требования к миграции химических веществ, выделяющихся из материалов, контактирующих с пищевыми продуктами"», а также ТР ТС 005/2011 «О безопасности упаковки», предельно допустимые концентрации свинца и кадмия, выделяющихся из стеклянной (хрустальной) посуды объемом до $1,1\text{ дм}^3$, контактирующих с пищевыми продуктами, составляют: для свинца — $2,0\text{ мг/дм}^3$, кадмия — $0,5\text{ мг/дм}^3$; содержание цинка и меди не нормируется. Полученные результаты исследования не превышают норму.