

падения эксплуатационных свойств изделия. По показателям прочности и жесткости такой материал будет превосходить ненаполненный полиэтилен высокой плотности в 3-4 раза, в тоже время сохраняя способность у биоразложению и оказывая эффект подкормки. Перспективным направлением дальнейших исследований представляется изучение скорости выделения из композита дисперсной удобряющей фазы, и поиск способов ее регулирования.

Список использованных источников

1. Shiping W. Surface modification of pyrophyllite for optimizing properties of castor oil-based polyurethane composite and its application in controlled-release fertilizer / W. Shiping, L. Xiang, R. Kun // Arabian Journal of Chemistry. - 2023. – V. 16, I. 2.

2. Babar A. Review on materials & methods to produce controlled release coated urea fertilizer / A. Babar, K. KuZilati, B. Zakaria // Journal of Controlled Release. – 2014. – V. 181, P. 11-21.

3. Исследование физико-механических свойств композиционных материалов с полимерной фазой диацетата целлюлозы и древесной мукой / П. С. Захаров, К. А. Усова, А. Е. Шкуро, В. В. Илюшин // Деревообрабатывающая промышленность. – 2023. – № 1. – С. 99-105.

4. Получение биокompозитов с полимерной фазой пластифицированных ацетатов целлюлозы с различной степенью ацетилирования / А. Е. Шкуро, В. В. Глухих, К. А. Усова [и др.] // Известия высших учебных заведений. Лесной журнал. – 2023. – № 4. – С. 155-168. – DOI 10.37482/0536-1036-2023-4-155-168.

УДК 620.22

Н.С. Зинчик, О.В. Кадырова

Санкт-Петербургский государственный экономический университет
Санкт-Петербург, Россия

К ВОПРОСУ РАЗВИТИЯ ЦИФРОВОГО МАТЕРИАЛОВЕДЕНИЯ В РОССИИ

Аннотация. В статье рассмотрено современное состояние и области применения цифрового материаловедения, сформулированы вызовы, препятствующие развитию данного направления и определены перспективы цифрового материаловедения в России.

N.S. Zinchik, O.V.Kadyrova

St. Petersburg State University of Economics
Saint-Petersburg, Russia

ON THE DEVELOPMENT OF DIGITAL MATERIALS SCIENCE IN RUSSIA

***Abstract.** The article examines the current state and areas of application of digital materials science, formulated the challenges that hinder the development of this direction and identified the prospects of digital materials science in Russia.*

Повсеместная цифровизация затрагивает все новые сферы жизни и диктует новый подход к результатам научно-исследовательских разработок. В сложившихся обстоятельствах необходимо расширять горизонт формирования и развития цифровых технологий, выявлять успешно внедренные практики, тиражировать их. Фундаментальные научные исследования и концептуальные разработки затронули область моделирования новых материалов с перспективными свойствами и инструменты цифрового материаловедения.

Цифровое материаловедение сегодня – это наука, объединяющая материаловедение и вычислительные методы для исследования и проектирования новых материалов. Исследования проводятся по направлениям разработки новых материалов, улучшения свойств материалов, изучения структуры материалов на атомном уровне и прогнозирование поведения материалов в экстремальных условиях. Изучение структуры, свойств и поведения материалов на молекулярном и атомном уровне происходит с использованием компьютерного моделирования, симуляции и анализа данных. Компьютерное моделирование и симуляции помогают предсказывать свойства и поведение материалов до их физического создания, что позволяет ускорить процесс разработки новых материалов и сократить затраты на их тестирование. Возможность моделирования изменений таких характеристик материалов, как прочность, эластичность, теплопроводность и пр., способствует созданию более прочных и легких материалов для авиационной и автомобильной промышленности, повышению эффективности солнечных батарей. Симуляторы позволяют исследователям изучать и оценивать воздействие на материалы высоких температур, высокого давления или химических веществ, помогая в разработке новых материалов, выдерживающих экстремальные условия для применения, например в аэрокосмической, энергетической отраслях. Технология работы по созданию новых материалов включает несколько этапов (таблица 1).

Таблица 1 -Этапы создания новых материалов

| Этап | Наименование этапа | Основные действия |
|------|---|--|
| 1 | Сбор данных о материалах | Этап предполагает использование экспериментальных данных, полученных в результате лабораторных испытаний, а также данных предыдущих исследований, симуляций и моделирования |
| 2 | Создание компьютерных моделей | Для анализа и изучения материалов создаются компьютерные модели структуры материала, включая атомы, молекулы и их взаимодействие |
| 3 | Компьютерное моделирование и симуляции | Появляется возможность проводить эксперименты и анализировать поведение материалов при различных условиях, например изменение температуры, давления и других внешних и внутренних факторов |
| 4 | Анализ данных | На этапе проводятся вычисления физических свойств материалов, анализ структуры, изучение взаимодействия между атомами и молекулами, а также выявление закономерностей и тенденций |
| 5 | Валидация и экспериментальное подтверждение | Результаты, полученные в ходе предыдущих этапов, должны быть проверены и подтверждены экспериментально, что предполагает проведение физических испытаний и тестирование материалов в реальных условиях |
| 6 | Оптимизация и дальнейшее исследование | После валидации результатов исследования, полученные знания и данные могут быть использованы для оптимизации свойств материалов, разработки новых материалов или для дальнейшего исследования |

Главное внимание исследователей направлено на такие тренды в отрасли новых материалов, как самовосстанавливающиеся, суперконструкционные материалы, цифровые паспорта материалов и создание инфраструктуры ускоренной разработки материалов. Создаются материалы, которые способны самовосстанавливаться, а это значит, что экран мобильного телефона не будет трескаться при падении, а неудачная парковка автомобиля не приведет к поездке в автосервис. Разрабатываются облегченные материалы – углеродонаполненные материалы на основе новых связующих ПЭЭК, ПЭКК и пр., так называемые суперконструкционные термопласты, которые значительно легче, чем традиционные конструкционные материалы сталь, титан или алюминий. Для авиационной промышленности внедрение таких материалов позволит снизить стоимость готовых изделий за счет сокращения количества компонентов, увеличить межсервисный интервал обслуживания,

снизить выбросы углекислого газа. Создание и использование цифрового паспорта материалов – электронного документа, содержащего информацию о свойствах и характеристиках конкретного материала – помогает улучшить качество и надежность материалов, упростить процессы контроля качества и повысить эффективность производства. В России цифровые паспорта материалов активно разрабатываются и внедряются в таких отраслях, как металлургия, химическая промышленность, строительство и другие.

Очевидно, что в России цифровое материаловедение имеет огромный потенциал, однако остановимся на существующих барьерах и ограничениях. К ним можно отнести недостаточный или низкий уровень цифрового моделирования с применением суперкомпьютеров на базе искусственного интеллекта, охват фундаментальных исследований или уровень автоматизации и роботизации производственных технологий, кроме того, нехватку или отсутствие уникального научно-технологического оборудования и площадей, компетенций мирового уровня в области химии, механики веществ на нано-мезоуровне, понимания нужд промышленности на горизонте стратегического планирования.

Цифровое материаловедение в России – это относительно новая исследовательская область, которая объединяет в себе знания и методы материаловедения с использованием современных цифровых технологий. Основные направления исследований в этой области включают в себя разработку новых методов и инструментов для анализа и моделирования свойств материалов, создание баз данных и информационных систем для хранения и обработки материаловедческой информации, а также применение искусственного интеллекта и машинного обучения для решения задач материаловедения. К лидерам, разрабатывающим новые технологические решения для развития наукоемких отраслей, можно отнести госкорпорацию Росатом и ряд других промышленных и инновационных предприятий, исследовательские институты РАН – Институт машиноведения им. А.А. Благонравова, Институт проблем химической физики, среди образовательных университетов – Московский государственный технический университет им. Н.Э. Баумана, Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого, Санкт-Петербургский государственный морской технический университет, Дальневосточный федеральный университет и др. Перед исследователями стоит задача создания подхода к проектированию, разработке и применению новых материалов и веществ. Для решения задачи был сформирован Центр компетенций

НТИ «Цифровое материаловедение: новые материалы и вещества», выступающий драйвером развития цифрового материаловедения в России.

Большой потенциал заложен в цифровом материаловедении, заключающийся в сокращении времени и расходов на исследования новых материалов, улучшении их свойств и создании более эффективных технологий производства. Уже сегодня достижения в материаловедении в дополнении с новыми цифровыми инструментами и языками позволяют обойти ограничения проектирования и способствуют развитию сотрудничества между научными и промышленными организациями, что обеспечивает повышение конкурентоспособности российской промышленности.

Список использованных источников

1. Материалы нового века. – [Электронный ресурс]. – URL: <https://atomvestnik.ru/2023/03/30/materialy-novogo-veka/>
2. Тенденции цифрового материаловедения в 2023 году. – [Электронный ресурс]. – URL: <https://compositeworld.ru/articles/market/id641c6af6c0b2e200121f9576>

УДК 669. 017:536.4

Ф.Ш. Зокиров

Таджикский технический университет им. М.С. Осими
Душанбе, Таджикистан

ТЕМПЕРАТУРНАЯ ЗАВИСИМОСТЬ КОЭФФИЦИЕНТА ТЕПЛООТДАЧИ АЛЮМИНИЕВОГО СПЛАВА АК12М2 С БАРИЕМ

Аннотация. В статье приведены результаты исследования температурной зависимости коэффициента теплоотдачи алюминиевого сплава АК12М2 с барием в диапазоне температуры 300–800К. Установлено, что модифицирующий компонент в изученном концентрационном интервале (0,01÷0,5 мас.%) уменьшает коэффициент теплоотдачи исходного сплава.

Ключевые слова: алюминиевый сплав АК12М2, барий, теплоёмкость, коэффициент теплоотдача.