

## КВАНТОВЫЕ ВЫЧИСЛЕНИЯ, ХИМИЯ И КОНСТРУКЦИОННЫЕ МАТЕРИАЛЫ

Новые технологии в области конструкционных материалов – одна из наиболее востребованных инноваций. Существующие подходы к разработке, во многом, исчерпали свой потенциал. Квантовые вычисления могут стать прорывным инструментом для материаловедения.

Первая половина 20 века – время стремительного развития авиации. От конструкций из полотна и дерева до сверхзвуковых пассажирских лайнеров и полетов на Луну. Но на рубеже 70-х гг. видимый прогресс в этих отраслях существенно замедлился. Направление дальнейшего развития (на уровне концепций) было очевидным. Преодоление гиперзвукового барьера, создание воздушно-космических транспортных систем с аэродромным взлетом и посадкой, коммерческие сверхзвуковые полеты, детонационные химические ракетные двигатели.

### Динамика рекордов скорости для пилотируемых аппаратов и круизной скорости пассажирских воздушных судов, км/ч



*Текущий рекорд скорости установлен LockheedSR-71 в 1976 году*

Причин, по которым проекты остались, в большинстве, нереализованными или не оправдали ожидания, было несколько. Но ключевой стало отсутствие конструкционных материалов с комплексом необходимых свойств: прочность, легкость, способность выдерживать высокие температуры. Почти для каждого из направлений решение было найдено, но существующие материалы работали на пределе своих возможностей. Как следствие, надежность всего изделия оказывалась недопустимо низкой.

Очередной революции в авиационной и космической технике не произошло. Современные воздушные суда и космические аппараты – результат эволюционного развития последних сорока лет. Они экономичны, но полет из Москвы в Гонконг требует 12 часов, вместо 6 на сверхзвуковом лайнере или 2 на потенциально возможном гиперзвуковом воздушно-космическом пассажирском шаттле.

Проблема в том, что развитие материаловедения и его основы – химии – во многом базируется на лабораторном поиске. Компьютеры, построенные на классической архитектуре, не позволяют эффективно моделировать химический синтез, прогнозировать свойства новых веществ и материалов. Интересный пример одной из последних разработок в области материаловедения – сплав золото-титан  $\beta$ -Ti3Au, разработанный группой ученых из университетов Техаса и Флориды. Основа этого открытия – анализ закономерностей изменения свойств титановых сплавов с тяжелыми инертными металлами – медью и серебром. Лабораторные исследования показали рост прочности титановых сплавов по мере роста атомной массы второго компонента. Ученые предположили, что золото покажет наилучший результат, эта гипотеза блестяще подтвердилась.

Другой пример подобного подхода к анализу – открытие ксенонового наркоза. Многочисленные наблюдения показывали, что легкие инертные газы – аргон, неон при определенных условиях (высокая концентрация, давление) могут давать легкий одурманивающий эффект. Было сделано предположение, что с ростом атомной массы эффект усилится. Это предположение оказалось верным – и ксеноновый наркоз давно и прочно вошел в медицинскую практику. Важно отметить, что биохимический механизм ксенонового наркоза остается не вполне очевидным.

Важно, что сейчас использование лабораторного метода для разработки новых конструкционных материалов требует огромного времени и инвестиций. При этом все «низковисящие фрукты», то есть очевидные решения, уже найдены. Надежды, которые возлагались на композиционные материалы, в том числе и на основе наноструктур, пока не оправдываются. Разработки ведутся уже не первое десятилетие, но прорыва пока нет. Сплавы на основе металла скандия имеют выдающиеся характеристики, но скандий – очень редкий и дорогой материал. Поэтому промышленное использование таких технологий сомнительно.

Прорывом в разработке конструкционных материалов и в развитии химии в целом может стать использование квантовых компьютеров. Одна из их ключевых особенностей – возможность моделирования большого числа параллельных процессов. Это очень хорошо подходит для численного моделирования свойств материалов.

Сложность использования классических компьютеров для химического анализа и моделирования отмечал еще один из основателей современной кибернетики Ричард Фейнман. Проблема заключается в необходимости параллельно оценивать квантово-механические взаимодействия внутри молекул – сотни электронов на оболочках разных уровней.

Модель для такого анализа была разработана в сотрудничестве JSRcorp-стартапа, специализирующегося на исследованиях в области нефтехимии и Кембриджского университета. В основе – сочетание квантовых вычислений (используется 20-кубитный процессор IBM) и технологий машинного обучения, которые можно настраивать на поиск новых веществ (например, сплавов) с требуемыми свойствами.

Потенциал этой разработки очень велик. В новых материалах остро нуждается не только самолетостроение. Это – безопасная ядерная энергетика, высокоскоростной транспорт, значительно более эффективное химическое производство. Кроме разработки новых материалов, практическим применением может стать, например, разработка новых лекарств. Даже усовершенствование традиционных алгоритмов анализа в сочетании с технологиями искусственного интеллекта, используемого для обработки больших массивов информации, уже начинает менять рынок фармацевтики.

Развитие облачных сервисов, в том числе удаленный доступ к квантовым вычислениям и искусственному интеллекту, позволяет включить в разработку новых конструкционных материалов, лекарств, удобрений и пр. большое число компаний малого и среднего бизнеса. Это важный и перспективный рынок, свою долю на котором могут занять и российские предприниматели, резюмировала глава Института анализа инвестиционной политики Елена Скрынник.