

ПРОСТО О СЛОЖНОМ

Эволюция против научного тыка

До недавнего времени материаловедение развивалось спонтанно. Исследователи брали разные вещества, смешивали их буквально «на глазок» и смотрели, какой состав можно получить и какими он будет обладать свойствами. Развитие компьютерной техники позволило вывести этот процесс из лабораторий в дата-центры: теперь ученые просчитывают новые материалы с помощью математического аппарата

Свойства субстанции во многом определяются ее кристаллической структурой. Например, графит и алмаз состоят из одних и тех же атомов — углерода — но упакованных по-разному, что влияет и на их качества: один мягкий, ломкий и черного цвета, а другой — самое твердое в мире вещество и прозрачен, как стекло.

— Однако если вы решите подарить своей возлюбленной кольцо из графита, она не оценит, и объяснение, что он состоит из одинаковых с бриллиантом атомов, не поможет. Информация — 100%, — смеется аспирант Московского физико-технического института и победитель Science Slam (Москва) Олег Фея.

Структура влияет не только на твердость материала, но и на его форму. Существуют даже вещества с «памятью», которые при изменении условий, например, при нагреве, могут вернуть себе исходные конфигурации. Такими свойствами обладает нитинол — состав из никеля и титана. Подобные материалы можно использовать в разных сферах: для изготовления авиадвигателей, закрылков самолетов, протезов, лечения зубов и так далее. Очень интересными качествами наделен кремнеземный аэрогель: он твердый и легкий одновременно (на столько, что если его поместить в газксенон, будет в нем парить), к тому же имеет низкую теплопроводность и на 98,8% состоит из воздуха. Его сейчас используют для того, чтобы ловить космическую пыль. Кристаллическая структура также определяет оптические свойства. Например, плеохроизм — способность вещества менять свой цвет при изменении угла падения света — есть у турмалина.

Существует предположение: французскую армию подкосили не столько военные действия, сколько бои с морозом. Все дело в том, что у солдат Бонапарта заправки и застежки на кителях были из белого олова, а оно при температуре ниже плюс 13 °C начинает превращаться в серое хрупкое. При минус 30 °C распад металла происходит взрывным образом. Этот процесс называется фазовый переход — бета-олово становится альфа-оловом. Если бы у императора был кристаллограф, он бы сказал: «Наполеон, при плюс 13,2 °C бета-олово станет альфа-оловом, давай сделаем медные заправки». И неизвестно, как бы повернулась история!

— Как же открывать материалы? Структуру веществ раньше определяли по рентгеновским лучам. Я хоть и прохожу такие лабораторные работы у себя в университете, не всегда могу сказать по этим точечкам, каким образом будет выглядеть кристалл. А экспериментаторы могут! Например, именно таким способом расшифровали структуру несоизмерного (то есть включающего атомы двух типов) кристалла рубидия, где рубидий-1 — жесткая система, рубидий-2 — пластичная (частицы можно немного смещать, от чего значительно меняются свойства), — говорит Олег Фея. — Как же искать материалы с помощью компьютера? Задача стоит в том, чтобы посчитать состояние, в котором у атома будет самый минимум энергии. Объясню на собственном примере. Я достаточно ленивый, и у меня дома есть кресло. Если я сажусь в него, то мне потом не очень хочется встать, а все дела кажутся не важными — это локальный энергетический минимум. Есть еще диван. Вот если я ложусь на диван, то там теряю уже полдня, потому что встать нет желания совсем. Это — глобальный энергетический минимум. Ученым нужно найти атомы, «сидящие на диване».

Если делать это методом обычного перебора, то потребуется очень много времени. Например, даже при условии, когда энергию одного атома, у которого есть только один способ изменения, компьютер считает за одну секунду, то для десяти частиц потребуется тысяча

лет, а при увеличении количества атомов до 20 — сто миллионов миллиардов лет! К сожалению, возраст нашей Вселенной всего 13 миллиардов лет, поэтому сомнительно, что на компьютере можно просчитать все варианты этих частиц. Здесь же ученым приходят эволюционные алгоритмы.

— Я расскажу, как они работают, на примере кенгуру. Представим: нам нужно найти самую высокую точку на земле с помощью кенгуру. Мы посадим их на равнине и разрешим размножаться, они заполнят ближайшие холмы и небольшие горы, а потом через некоторое время придет охотник отстреливать тех, кто находится в низинах. В итоге, кенгуру будут забираться все дальше в горы, следующее потомство сумчатых будет знать, что где-то там внизу есть человек с ружьем, поэтому надо забираться выше. Значит, вот так, отстреливая и отстреливая кенгуру, можно добраться до последнего животного в самой верхней точке, — поясняет Олег Фея.

Для кристаллов ученые, а точнее российский теоретик-кристаллограф доктор технических наук **Артем Ромаевич Оганов**, придумали аналогичный эволюционный метод, на основе которого была создана программа USPEX (Universal Structure Predictor: Evolutionary X-ray Crystallography). Как она работает? Сначала случайным образом создаются кристаллы, например, 50 комбинаций, ученые считают для них энергию и признают, что первое поколение было не очень удачным. Тогда берутся два «родителя», от каждой структуры отсекается половина атомов, они смешиваются, и получается новая структура, объединяющая свойства своих предков. Таким образом исследователи используют операторы наследственности. Есть и другие, например, мутация — ячейка материала меняется случайным образом, или координатная мутация, когда несколько атомов переставляются. В результате каждое поколение становится все лучше и лучше. И так продолжается, пока не будет найдена самая низкоэнергетическая структура. Для таких расчетов требуется не 1000 лет, а всего лишь несколько недель. С помощью этой системы было открыто множество новых веществ, в частности, ряд материалов, возникающих при высоком давлении.

*Самый первый, наверное, ударно-волновой эксперимент под давлением был описан в Библии. В нем принимают участие снаряд — камень, ускоритель — праща, экспериментатор — Давид и мишень — череп большого воина Голиафа. Президент РАН академик **Владимир Евгеньевич Фортв** посчитал, что для создания отверстия в голове Голиафа, требуется давление 0,15 гигапаскаль (примерно 1500 тыс. обычных земных атмосфер).*

С помощью USPEX был открыт материал под названием «фаграфен» — родственник графену, в котором скорость электронов зависит от направления (тогда как в веществе, отмеченном Нобелевской премией, она во все стороны одинакова). Или некоторые сочетания натрия и хлора, возможные при высоких давлениях, например, NaCl₂, полученный по результатам компьютерных прогнозов в лаборатории.

Эволюционный метод позволяет предусмотреть не только вещества и условия их образования, но и свойства. Например, поверхностей. Их начали изучать не так давно: первую Нобелевскую премию за это получил **Альберт Эйнштейн** в 1921 г., и до 70-х гг. это была сложная и малопонятная сфера исследований, доступная немногим. Создано огромное количество микроскопов различных видов, в конце концов, появился сканирующий туннельный микроскоп, который позволяет оперировать отдельными атомами. Однако те же манипуляции можно проводить и на компьютере с помощью специальной программы.



— Чем же поверхности так сложны? Дело в том, что атомы в объеме чувствуют себя очень комфортно, они «сидят на диване» в окружении соседей, и их энергия минимальна. А если кристалл расщепить, то на поверхности атомы разлучаются друг с другом. Можно использовать такое сравнение: если семьи разделяются, каждый родственник ощущает себя плохо, пытается что-то сделать, чтобы найти пропавших. Так поступают и частицы, — рассказывает Олег Фея. — Как атомы будут компенсировать свою «душевную боль» от того, что они разлучились с другими? За счет реконструкции, то есть они будут менять свое расположение так, чтобы рядом с ними оказалось как можно больше других родственников. На картинке это выглядит очень красиво. И если после обрезки у атома было, например, 49 обрубленных связей, то после реконструкции — уже только 19.

— От свойств поверхности зависят и канцерогенные качества материалов. Я изучаю кремнезем: он используется в часах, украшениях, микросхемах, но люди, непосредственно контактирующие с ним на производстве, страдают силикозом легких и онкологическими заболеваниями. Но не все формы кремнезема одинаково опасны, например, кристобалит и кварц — канцерогены первой группы, то есть вдыхая их, человек с большой вероятностью приобретет недуг. А стишовит не имеет таких эффектов, — говорит Олег Фея.

У ученых есть гипотеза, почему так происходит: легкие состоят из большого количества альвеол — маленьких пузырьков, каждый из которых изнутри выложен слоем сурфактанта — слизи, не дающей легким слипаться и выполняющей определенные защитные функции. Вероятно, что-то проходит через этот барьер, добирается до клеток и разрушает их. Есть гипотеза, что это делают свободные радикалы (молекулы, у которых не хватает электронов). Особенно агрессивны в таком качестве атомы кислорода. При взаимодействии они пытаются недостающий электрон получить, и таким образом могут разрушить клеточную мембрану или вызвать мутацию, приводящую к раку.

— В своей работе я обнаружил, что кварц и кристобалит действительно содержат такие радикалы, а стишовит — нет. То есть в зависимости от конфигурации поверхностный слой вещества может быть опасным и канцерогенным, — объясняет Олег Фея.

Записала Юлия Позднякова
Лекция о поиске и предсказании новых материалов состоялась в 2015 году в рамках фестиваля науки **Eureka!Fest** в Новосибирске

КОНКУРС

ФГБУН Институт автоматизации и электротехники СО РАН объявляет конкурс на замещение вакантной должности ведущего научного сотрудника (доктор физико-математических наук) по специальности 01.04.05 «оптика». Срок конкурса — два месяца со дня публикации объявления. Документы направлять по адресу: 630090, г. Новосибирск, пр. Ак. Коптюга, 1, комн. 201. Справки по тел.: 333-28-33. Объявление о конкурсе и перечень необходимых документов размещены на сайте института (<http://www.iae.nsk.su>).

ФГБУН Институт горного дела Севера им. Н.В. Черского СО РАН объявляет конкурс на замещение должностей: научного сотрудника лаборатории георадиолокации по специальности 25.00.20 «геомеханика, разрушение горных пород, рудничная аэрогазодинамика и горная теплофизика», имеющего опыт георадиолокационных исследований мерзлых горных пород россыпных месторождений криолитозоны и грунтов оснований инженерных сооружений, донных отложений водных объектов, а также дистанционных исследований ледяного покрова на затеропасных участках северных рек методом георадиолокации, стаж работы не менее десяти лет; младшего научного сотрудника лаборатории открытых горных работ по специальности 25.00.22 «геотехнология (подземная, открытая и строительная)», специалист по бестранспортной технологии внутреннего отвалообразования при разработке пластовых месторождений криолитозоны, опыт натурных наблюдений и лабораторных исследований свойств горных пород, стаж работы по специальности не менее пяти лет; младшего научного сотрудника лаборатории обогащения полезных ископаемых по специальности 25.00.13 «обогащение полезных ископаемых», специалист в

области технологии дробления и измельчения рудного материала, стаж работы по специальности не менее пяти лет. Требования к кандидатам — в соответствии с квалификационными характеристиками, согласно приложению 2 к постановлению Президиума СО РАН от 31.03.2008 г. № 202, утвержденному постановлением Президиума РАН от 25.03.2008 г. Срок конкурса — два месяца со дня публикации объявления. Документы направлять в конкурсную комиссию по адресу: 677980, г. Якутск, пр. Ленина, 43. Справки по тел.: (4112) 33-59-37 (ученый секретарь), 39-00-47 (отдел кадров). Объявление о конкурсе и перечень необходимых документов размещены на сайте института (<http://www.igds.ysn.ru>).

ФГАОУВО «Новосибирский национальный исследовательский государственный университет», физический факультет, объявляет выборы на замещение вакантной должности заведующего кафедрой химической и биологической физики — одна вакансия. Требования к претенденту: высшее профессиональное образование, наличие ученой степени и ученого звания, стаж научно-педагогической работы или работы в организациях по направлению профессиональной деятельности, соответствующей деятельности кафедры, не менее пяти лет. Документы принимаются в течение одного месяца со дня опубликования объявления в учебно-методическом отделении физического факультета НГУ по адресу: 630090, г. Новосибирск, ул. Пирогова, 2, комн. 249, в рабочие дни с 14:00 до 16:00 (тел.: 363-43-20).

Новосибирский государственный университет объявляет о выборах профессора кафедры уголовного права, уголовного процесса и криминалистики (кандидатом может быть квалифицированный специалист соответствующего профиля, имеющий ученую степень

или ученое звание и стаж научной или научно-педагогической работы не менее пяти лет); заведующего кафедрой административного и финансового права (кандидатом может быть квалифицированный специалист соответствующего профиля, имеющий ученую степень или ученое звание и стаж научной или научно-педагогической работы не менее пяти лет). Срок подачи заявлений — один месяц со дня опубликования объявления. Документы направлять по адресу: 630090, г. Новосибирск, ул. Пирогова, 2. Справки по тел.: 8(383) 330-09-55 (отдел кадров НГУ), 363-40-30 (деканат юридического факультета).

ФГБУН Институт горного дела им. Н.А. Чинакала СО РАН объявляет конкурс на замещение вакантных должностей старшего научного сотрудника в лабораторию физико-технических геотехнологий по специальности 25.00.22 «геотехнология (подземная, открытая, строительная)», старшего научного сотрудника в центр коллективного пользования геоинженерных, геофизических и геоинженерных измерений по специальности 25.00.20 «геомеханика, разрушение горных пород, рудничная аэрогазодинамика и горная теплофизика». Требования к кандидатам — в соответствии с квалификационными характеристиками, утвержденными постановлением Президиума РАН от 25.03.2008 г. № 196. Срок конкурса — два месяца со дня публикации объявления. Дата проведения конкурса — 24 февраля 2016 г. Перечень необходимых документов содержится на сайте ИГД СО РАН: www.misd.ru в разделе «Конкурсы». Документы (с пометкой «на конкурс») направлять в конкурсную комиссию по адресу: 630091, г. Новосибирск, Красный проспект, 54. Справки по тел.: 8 (383) 217-03-54 (отдел кадров); 217-07-82 (отдел организации научной работы); e-mail: org@misd.nsc.ru.

Уважаемые читатели!

В публикации «В волшебном мире жужелиц» № 25 (3010) от 17 декабря 2015 г. была допущена неточность: мастер-класс проходил не в выставочном зале Дому ученых, а в Выставочном центре СО РАН. Приносим извинения организаторам мероприятия.

Редакция

