**СОВРЕМЕННЫЕ ПОДХОДЫ К РЕШЕНИЮ ПРОБЛЕМЫ СИНТЕЗА НОВЫХ МАТЕРИАЛОВ С ЗАДАННЫМИ СВОЙСТВАМИ**

***Зацаринный Александр Алексеевич1****,*

*д.т.н., г.н.с., руководитель отделения ФИЦ ИУ РАН,*

*e-mail:* [*alex250451@mail.ru*](mailto:alex250451@mail.ru)

***Абгарян Каринэ Карленовна1,2****,*

*д.ф.-м.н., главный научный сотрудник, зав. отделом ФИЦ ИУ РАН,*

*e-mail:* [*kristal83@mail.ru*](mailto:kristal83@mail.ru)

*1Федеральный исследовательский центр «Информатика и управление» Российской Академии наук (ФИЦ ИУ РАН), Россия, 119333,Москва, ул. Вавилова, д.44.*

**Аннотация:** В статье рассматриваются современные подходы к решению задач, связанных с синтезом новых материалов. Отмечена актуальность этой важнейшей стратегической задачи инновационного развития в современных условиях. Новые материалы с заданными свойствами крайне необходимы для производства доверенных российских программно-аппаратных изделий как широкого, так и специального назначения. Показана значимость разработки методов математического моделирования и программных решений на их основе для развития инновационных подходов в области синтеза новых материалов. Отмечено, что для дальнейшего развития требуется отечественная высокопроизводительная среда для научных исследований, обладающая комфортным пользовательским интерфейсом, гибкостью в настройке ресурсов, высокой производительностью и надежностью.

**Ключевые слова:** цифровая трансформация, синтез новых материалов, новые материалы, многомасштабное моделирование, высокопроизводительная исследовательская инфраструктура.

**Введение**

Важнейшими событиями в этом году явились 300-летие создания Российской академии наук [1] и утверждение Президентом России новой Стратегии научно-технологического развития Российской Федерации, разработанной в соответствии с поручением Президента на заседании Совета по науке и образованию 8 февраля 2023 г. [2].

В Стратегии определены цель и основные задачи научно-технологического развития Российской Федерации, уточнены приоритеты развития (их стало 9) [3]. В Послании Президента Федеральному собранию 28 февраля 2024 г. [4] отмечено, что в условиях масштабных экономических и финансовых санкций Запада против России обеспечено устойчивое состояние экономики и системы управления. Вместо ожидавшегося спада в 2023 году российская экономика показала рост (по разным оценкам - на 2,5-3,0 %) и вышла на пятое место в мире [5].

При этом немаловажную роль в обеспечении стабильного функционирования российской экономики в сложнейших условиях сыграли процессы, связанные с интенсивным развитием информационных технологий [6]. Новая стратегия учитывает это обстоятельство: первый приоритет, определяющий, по существу, процессы цифровой трансформации, в основном остался без изменений, при этом появились новые акценты в виде интеллектуальных производственных решений и высокопроизводительных вычислительных систем.

Президент России В.В. Путин в Приветствии X Российскому форуму «Микроэлектроника 2024» отметил, что электронная промышленность — одна из ключевых, стратегических отраслей современной экономики, от развития которой во многом зависят обороноспособность и безопасность нашей страны, её индустриальный и научный потенциал, состояние инфраструктуры, финансового сектора, качество жизни граждан [7].

В настоящей работе рассматриваются проблемные вопросы развития технологий создания новых материалов, а также применения высокопроизводительных вычислительных средств для моделирования.

**1. Актуальность проблемы синтеза новых материалов**

Одним из важнейших направлений в рамках этого приоритета является развитие передовых технологий синтеза новых материалов с заданными свойствами на основе математического моделирования. Эта проблематика очень сложная, наукоемкая, многоаспектная и требует, с одной стороны, всестороннего обсуждения в научном сообществе, а с другой, мощной государственной поддержки.

Обозначенный В.В. Путиным вектор развития отечественной электронной промышленности [4,7], а по существу – ее возрождения, обусловлен целым рядом объективных факторов. Отметим основные из них [8,9,10]:

* новые материалы с заданными свойствами являются основой инновационного развития в рамках цифровой трансформации;
* синтез новых материалов требует новых прорывных технологий для создания отечественной импортонезависимой электронной компонентной базы;
* новые отечественные материалы с заданными свойствами обеспечивают условия для кардинального решения проблемы обеспечения информационной безопасности компьютерных систем различного назначения, прежде всего в интересах государственного управления, обороны, безопасности и правопорядка;
* острая потребность создания перспективных комплексов вооружения и военной техники на отечественной электронной компонентной базе за счет создания новых комплектующих элементов и материалов, а также технологий их получения;
* необходимость развития современной исследовательской инфраструктуры с использованием высокопроизводительных вычислительных средств.
* интенсивное внедрение технологий искусственного интеллекта, которые могут существенно повлиять на все процессы создания новых материалов – от научных исследований до производственных процессов.

Успешное решение приведенных проблем возможно на основе развития современных научно-методических инструментов, которые требуют адекватной поддержки в виде высокопроизводительной исследовательской инфраструктуры.

Необходимо отметить, что роль этих факторов не только сохраняется, но и усиливается. Другими словами, современные факторы, определяемые потребностями цифровой трансформации общества, определяют актуальность представления вычислительных систем для научных исследований в виде высокопроизводительной цифровой платформы.

Для восстановления российской микроэлектроники необходимо решить целый ряд задач, связанных с:

* Воссозданием научных школ проектирования микроэлектронной техники и подготовкой высококвалифицированных специалистов в области радиоэлектроники;
* Накоплением знаний с учетом мирового опыта;
* Развитием отечественных программных средств для разработки и оптимизации полупроводниковых приборов, а также технологий их производства с использованием средств автоматизированного проектирования;
* Изысканием необходимого прямого финансирования всего жизненного цикла микроэлектронной техники, включая фундаментальные научные исследования;
* Созданием конкурирующих научно-производственных и производственных групп
* Организацией производства с необходимой мощностью;
* Поиск заинтересованных инвесторов;
* Обоснование новых логистических цепочек взаимодействия предприятий как внутри России, так и с другими странами (с учетом санкционных ограничений).

Комплексное решение поставленных задач позволит не только создать необходимый набор аналогов существующих материалов и ЭКБ, но и даст возможность выйти на уровень обеспечения полного технологически независимого отечественного жизненного цикла создания материалов с требуемыми свойствами. Именно такой подход позволит придать широко используемому понятию «импортозамещение» новое, более актуальное, содержание, а именно – «импортонезависимость».

Необходима системная постановка работ по разработке технологий создания микроэлектронной компонентной базы, в том числе для аппаратуры военного и двойного назначения. Микроэлектроника должна быть обозначена на государственном уровне как базовая для всего комплекса высокотехнологичных отраслей.

Понимание таких подходов к модернизации данного направления в рамках общих целей развития страны в новых геополитических и экономических условиях должно обеспечить мобилизацию и сплоченность научного сообщества перед лицом реальных глобальных угроз. Особую значимость для нашей страны представляет собой проблема консолидации интеллектуальной элиты, решение которой необходимо для обеспечения сплоченности российского общества.

Определенный оптимизм вызывает в связи с этим комплекс мероприятий в рамках 6-й подпрограммы фундаментальных научных исследований, финансирование которой открыто с 2024 года.

В год 300-летия образования Российской академии наук необходимо отметить огромный вклад в развитие фундаментальных теоретических основ в области физики и химии. Следует вспомнить достижения российских и советских ученых в области химии и физики, удостоенных Нобелевской премии [17]. Среди них выдающиеся ученые - Л.Д. Ландау, П.Л. Капица, Ж.И. Алфёров, Андрей Гейм и Константин Новосёлов. Их открытия мирового уровня и многие другие научные результаты, полученные российскими учеными являются основой синтеза новых материалов в различных отраслях производства.

1. **Некоторые позитивные тренды** **в обеспечении импортонезависимости в области ЭКБ**

Разработка материалов с новыми свойствами для разных областей применения — одно из приоритетных направлений Стратегии научно-технологического развития Российской Федерации по ряду направлений. В условиях жестких санкций со стороны западных компаний в России предпринимаются интенсивные усилия по созданию целого ряда новых материалов, которые необходимы для производства доверенных российских программно-аппаратных изделий как широкого, так и специального назначения. В этом направлении уже достигнуты значимые научно-практические результаты. Достаточно привести некоторые из них.

*Микросхемы.* В начале 2024 года Минпромторг заключил с МИЭТом и Зеленоградским инновационно-технологическим центром (ЗИТЦ) контракты на выполнение опытно-конструкторских работ (ОКР) по созданию технологий и установок для выпуска микросхем с топологией в диапазоне 250–65 нанометров со сроком окончания в 2026 году [11]. ЗИТЦ предстоит разработать и изготовить опытные образцы установок лазерного устранения дефектов и контроля координат топологических элементов и критических размеров структур на фотошаблонах для производства интегральных схем с топологическими нормами 90–65 нм. Главное то, что произведенная по таким нормам продукция будет являться отечественной, независимой от экспорта, и при этом востребованной применительно ко многим областям, в которых высокая норма не является критически необходимой.

Еще один госконтракт Минпромторг заключил с Научно-исследовательским институтом молекулярной электроники (НИИМЭ) на разработку и освоение серийного производства микросхем. Планируется, что эти микросхемы должны стать заменой интегральных схем американской корпорации Intel (Altera) [12].

*Фоторезист.* Значимым результатом является получение специалистами НИИМЭ опытного образца отечественного фоторезиста, полимерного светочувствительного материала, необходимого для одной из ключевых операций в микроэлектронном производстве [13]. Разрабатываемые микросхемы будут применяться в бортовых цифровых вычислительных системах авиационной и космической техники, в том числе в качестве замены зарубежных программируемых логических интегральных схем (ПЛИС). Прямые отечественные аналоги такого продукта сейчас отсутствуют, ближайшим зарубежным аналогом является микросхема ПЛИС 5CEFA9 от Intel (Altera), которая, по данным из открытых источников, была выпущена еще в 2011 году по технологии 28 нанометров [13].

*Фотолитография.* Фотолитография — это ключевая операция в микроэлектронике, а фотолитограф предназначен для формирования структуры микросхемы на кремниевой пластине, покрытой слоем фоторезиста. Наметились существенные сдвиги в области создания отечественной фотолитографии. На форуме «Микроэлектроника» в научно-технологическом университете «Сириус» в Сочи зеленоградские компании «Микрон» и Нанотехнологический центр (АО «ЗНТЦ») подписали соглашение о сотрудничестве в освоении технологий и производстве отечественного фотолитографического оборудования с нормами 350–90 нанометров [7,14]. По словам руководителя АО «ЗНТЦ» Анатолия Ковалева, сегодня в мире меньше десяти стран, способных произвести фотолитограф, поскольку эта задача «требует мощнейшего научного потенциала» [21]. Он отметил, что фотолитографическое оборудование разрабатывается АО «ЗНТЦ» совместно с белорусским ОАО «Планар», а в рамках сотрудничества с «Микроном» планируются совместные исследования, экспериментальные работы и тестирование этого оборудования. Чипы, которые будут выпускаться с помощью разрабатываемого оборудования, используются в силовой электронике, автоэлектронике и промышленных системах.

*Синтез материалов для фотонных суперкомпьютеров*. Ученые из Тюменского государственного университета первыми в мире смогли получить в промышленном объеме целый ряд уникальных химических соединений [15]. Новые химические соединения, ставшие основой для синтезированных материалов, открывают возможность для разработки и создания фотонных суперкомпьютеров, а также солнечных батарей нового поколения. Основа новой технологии – сложные сульфиды, вещества, наделенные ярко выраженными полупроводниковыми свойствами. Секрет успеха кроется в новой методике синтеза редких соединений. Полупроводниковые системы с элементами на сложных сульфидах могут быть применены в различных экстремальных устройствах, например, при исследовании извержений вулканов или в космосе, при непосредственном воздействии солнечного излучения, так как материалы выдерживают до 1300 градусов по Цельсию.

В перспективе - создание подводных солнечных батарей для применения на глубине до 50 метров. Это становится возможным благодаря поглощению сульфидами зеленого и желтого спектров из видимого солнечного света, что позволяет их применять под водой.

*Новые материалы для солнечных батарей.* Новый тип материалов для одного из элементов солнечных батарей предложили специалисты Уральского федерального университета и Института органического синтеза Уральского Отделения РАН [16]. Солнечная энергетика сейчас привлекает большое внимание ученых и инвесторов, поскольку традиционные ресурсы для получения энергии — уголь, нефть и газ — исчерпаемы. Найденные соединения позволят заметно сократить расходы на производство солнечных батарей. В основе предложенной технологии лежит использование солнечных полупроводниковых элементов, улавливающих фотоны и превращающих их энергию в электричество.

*Материал со световыми «антеннами».* Ученые Института химии Дальневосточного отделения РАН (ИХ ДВО РАН) совместно со специалистами Дальневосточного Федерального университета (ДВФУ) разработали новые материалы на основе ионов европия со световыми «антеннами» [17]. Некоторые из них можно применять для увеличения КПД солнечных панелей, другие — использовать в виде добавок к функциональным покрытиям, что позволяет визуально наблюдать места наибольшего механического напряжения материала при нагрузках. Эти результаты получены коллективом лаборатории светотрансформирующих материалов ИХ ДВО РАН при участии лаборатории электронного строения и квантово-химического моделирования ДВФУ. Благодаря плодотворному сотрудничеству коллективов этих коллективов удается прогнозировать свойства новых материалов. В дальнейшем ученые планируют добавить к соединениям редкоземельных элементов переходные металлы (например, цинк) для получения гетерометаллических комплексов. Эти результаты - пример эффективного сотрудничества ученых академического института и государственного университета.

*Новый композитный двумерный материал.* Ученые из ФИЦ «Красноярский научный центр СО РАН» совместно с Сибирским федеральным университетом синтезировали новый многофункциональный композитный двумерный материал на основе природного минерала точилинита, который состоит из чередующихся слоев сульфида железа и гидроксида магния, связанных за счет электрических зарядов, и образует чешуевидные наночастицы [18]. Этот материал может применяться в нанофотонике, оптоэлектронике, использоваться в качестве сорбентов, электродов и наноантенн. Двумерные материалы, включая отмеченный Нобелевской премией графен, имеют толщину всего в один атом и обладают уникальными свойствами, которые могут привести к созданию новых устройств и технологий с улучшенными характеристиками. Такие материалы открывают новые возможности как для научных исследований, так и для практического внедрения в различных областях техники.

*Новый композитный материал на основе соединений металлов и хлора.* Учёные из Института проблем машиноведения (ИПМаш) РАН в Санкт-Петербурге и Уфимского университета науки и технологий провели успешное моделирование перспективных двумерных хлоридов металлов, включая никель, ванадий, цинк, кадмий, марганец, железо и магний, а также тройной нитрид цинка для изучения возможности их синтеза и реальных свойств [19]. Исследователи оценили устойчивость этих материалов к механическим и температурным воздействиям и пришли к выводу, что они обладают высокой целостностью и устойчивы к дефектам. Для синтеза нового материала применялось компьютерное моделирование на основе теории функционала плотности с использованием суперкомпьютера. Учёным удалось создать математические модели материалов, максимально приближенные к физическим объектам. Эти очень трудоёмкие процессы требуют мощных вычислительных ресурсов, но позволяют получить высокоточные результаты. Материалы, предсказанные с помощью такого моделирования, впоследствии успешно синтезируются и в будущем могут стать основой для новых промышленных композитов при создании изделий микроэлектроники, миниатюрных высокопроизводительных устройств, оптоэлектронных приложений.

Таким образом, российские ученые только за последние годы достигли существенных научных результатов в области синтеза новых композитных материалов с заданными свойствами, которые должны найти применение в промышленности при создании передовой отечественной микроэлектроники. Эти результаты создают реальную основу для преодоления накопленных проблем в этой области, которые привели к отставанию России от развитых зарубежных стран [20,21].

1. **Современная высокопроизводительная среда для моделирования**

Успешное решение задач в области синтеза новых материалов с заданными свойствами невозможно без применения методов математического моделирования с использованием высокопроизводительной исследовательской инфраструктуры [22-25].

В марте 2023 г. власти Китая объявили о масштабных мерах по развитию сферы

исследований и разработок [26]. Китайская академия наук приняла дорожную карту развития больших исследовательских инфраструктур до 2050 года, которая охватывает более 50 крупных инфраструктурных исследовательских объектов [27].

Как показывает анализ мирового опыта, основными тенденциями являются использование гибридных вычислительных архитектур, организация вычислений в территориально распределенных вычислительных комплексах; виртуализация вычислительных сред и миграция вычислительной среды к источнику данных за счет использования технологий виртуализации и контейнеризации [28,29].

С учетом указанных тенденций для повышения эффективности проведения экспериментальных исследований в ФИЦ ИУ РАН создана и развивается современная цифровая платформа для научных исследований, которая предоставляет исследователям традиционные облачные услуги, а также технологии научного сервиса как услуги (RaaS - Research as a Service) в виде предметно-ориентированных программ [29,30].

.

На базе платформы зарегистрирован центр коллективного пользования (ЦКП) [31] «Информатика», на котором успешно решается целый ряд задач, связанных с реализацией многомасштабных математических моделей, построенных для проведения исследований для создания новых материалов с заданными свойствами в области структурного материаловедения [24,32,33]. Отметим экспериментальные исследования по моделированию сложных физических и технических систем. К ним относятся исследования по разработке отечественной системы автоматизированного проектирования для создания ячеек энергонезависимой памяти в области материаловедения [32,33],

Наряду с научными коллективами ФИЦ ИУ РАН ЦКП используется коллективами и других организаций в рамках решения задач по проектированию отечественной электронной компонентой базы в области микроэлектроники (ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН, НИИМЭ и др.). Важно, что ЦКП предоставляет возможность практической отработки знаний, полученных в ходе обучения, студентам базовых кафедр в МГУ им. М.В. Ломоносова, Высшей школы экономики (ВШЭ) и Российского университета дружбы народов (РУДН).

При решении задач пользователи имеют возможность выполнять расчеты в высокопроизводительной вычислительной среде ЦКП с применением таких систем моделирования как Ansys, Intel oneAPI, Gromacs, Matlab, Orca, Pytorch, Tensorflow, Keras, Quantum Espresso в фоновом (пакетном) и интерактивных режимах [34]. Имеется возможность интеграции других систем математического моделирования в высокопроизводительную вычислительную среду ЦКП.

Конечно же, ЦКП по своим характеристикам уступает не только отечественным суперкомпьютерам, но и последним из ТОР-500 (Китайский суперкомпьютер Inspur TS10000, 34 400 ядер и GPU, 3.0 PFlops). И поэтому для решения ресурсоемких задач синтеза материалов необходимы мощные суперкомпьютеры.

В этой связи необходимо упомянуть о новом суперкомпьютере «МГУ-270» в МГУ имени М.В. Ломоносова (на факультете ВМК), который открылся в сентябре 2023 года. Архитектура суперкомпьютера «МГУ-270» сочетает в себе центральные процессоры (CPU), графические процессоры (GPU) и нейронные процессоры (NPU). Его вычислительная мощность достигает 400 петафлопс по операциям искусственного интеллекта [35]. За минувший год факультетом ВМК под руководством академика И.А. Соколова проделана огромная работа по привлечению десятков научных коллективов для решения задач в различных областях науки.

Вместе с тем, как показывает опыт применения ЦКП и суперкомпьютеров, наличие высокопроизводительных вычислительных средств не является достаточным условием успешного решения задач синтеза новых материалов. Необходимо одновременно решать проблемы подготовки кадров высшей квалификации, способных выполнять постановки задач на основе современных математических методов, разрабатывать сложные программные модели, обработку и анализ больших объемов данных (методы искусственного интеллекта, машинного обучения, теории управления, системного анализа). Наряду с этим крайне необходимо совершенствовать технологии доступа к ресурсам суперкомпьютеров с гибридной архитектурой, обеспечивающие эффективное их использование.

**Заключение**

Новые материалы – важнейший компонент успешного развития цифровой трансформации. Создание отечественной электронной компонентный базы становится стратегической задачей в рамках цифровой трансформации. Без её решения невозможно обеспечить создание базовых доверенных компонентов.

В год 300-летия образования Российской академии наук необходимо отметить огромный вклад российских ученых в развитие фундаментальных теоретических основ в

Необходимо отметить, что на сегодня проблемы, связанные с синтезом новых материалов с заданными свойствами, невозможно решать без применения методов математического моделирования, которые позволяют существенно сэкономить время и финансовые затраты на их получение. Для программной реализации разработанных компьютерных моделей требуется отечественная высокопроизводительная среда, обладающая комфортным интерфейсом для пользователей, гибкостью в настройке ресурсов, высокой производительностью и надежностью.

Острой проблемой является подготовка высококвалифицированных кадров в области математического моделирования и программирования.

Для решения назревших проблем необходима системная постановка работ по созданию технологий создания микроэлектронной компонентной базы для аппаратуры военного и двойного назначения. Необходимо признание микроэлектроники базовой отраслью для всего промышленного комплекса.

Создание российской электронной промышленности без опоры на результаты научных исследований, включая фундаментальные, в принципе невозможно.

Международные конференции MММЭК вносят достойный вклад в развитие научной составляющей проблемы синтеза новых материалов в России.

**Литература**

1. 300-летие РАН: К истории российской науки. 5.02.2024

<https://sakhalife.ru/300-letie-ran-k-istorii-rossijskoj-nauki/>

1. Заседание Совета по науке и образованию 8 февраля 2023 г. Москва, Кремль <http://www.kremlin.ru/events/president/transcripts/deliberations/70473>
2. О Стратегии научно-технологического развития Российской Федерации. Утверждена Указом Президента РФ от 28.02.2024 г. № 145, <http://publication.pravo.gov.ru/document/0001202402280003?ysclid=ltjwa4m3to687779932>
3. Послание Президента Федеральному собранию, 24 февраля 2024 г., <https://dzen.ru/a/ZeBJ3dty9GeXcthO2>
4. Всемирный банк включил Россию в топ-5 экономик мира впереди Германии и всей Европы <https://www.dp.ru/a/2023/08/04/vsemirnij-bank-vkljuchil-rossiju>
5. Итоги 2023 года для ИТ-рынка России: главные тренды и прогнозы на 2024. КРОК, 13 дек 2023 <https://habr.com/ru/companies/croc/news/780442/>
6. Российский форум «Микроэлектроника» – ведущая межотраслевая коммуникационная площадка России, <https://microelectronica.pro/?ysclid=m1tnqbg61w57157837>
7. Зацаринный А.А., Абгарян К.К. Факторы, определяющие актуальность создания исследовательской инфраструктуры для синтеза новых материалов в рамках реализации приоритетов научно-технологического развития России// Материалы I Международной конференции «Математическое моделирование в материаловедении электронных компонентов» (МММЭК-2019). Москва: МАКС Пресс. С. 8-11.
8. Zatsarinny A.A., Abgaryan K.K. Factors determining the relevance of creating a research infrastructure for synthesizing new materials in implementing the priorities of scientific and technological development of Russia// Russian Microelectronics. 2020. Т. 49. № 8. С. 600-602.
9. Зацаринный А.А., Абгарян К.К. Актуальные проблемы создания исследовательской инфраструктуры для синтеза новых материалов в рамках цифровой трансформации общества //Материалы 2-й международной конференции «Математическое моделирование в материаловедении электронных компонентов» (МММЭК-2020). Москва: МАКС Пресс. С. 3-13.
10. Контракты МИЭТ и ЗИТЦ на создание технологий для выпуска микросхем <https://www.netall.ru/economy/news/1349119.html>
11. НИИМЭ заказали создание аналога микросхемы Intel. <https://www.netall.ru/economy/news/1380426.html>
12. Зеленоградские ученые получили опытный образец фоторезиста

<https://www.netall.ru/economy/news/1401703.html?ysclid=m1tnys7tex733215956>

1. Зеленоградские компании договорились совместно разрабатывать фотолитограф <https://www.netall.ru/economy/news/1400764.html>
2. Проблема синтеза материалов для фотонных суперкомпьютеров

<https://finobzor.ru/106091-v-rossii-vpervye-v-mire-reshena-problema-sinteza-materialov-dlja-fotonnyh-superkompjuterov.html>

1. Ученые синтезировали новые материалы для перовскитных солнечных батарей

<https://colab.ws/news/386?ysclid=m1v4yu2aeb87111734>

1. Материал со световыми «антеннами» разработали ученые ДВФУ и ДВО РАН. <https://www.dvfu.ru/news/fefu-news/material_so_svetovymi_antennami_razrabotali_uchenye_dvfu_i_dvo_ran/?ysclid=m1x4vr29oy711939623>
2. Новый композитный двумерный материал. <https://cleverrussia.ru/uchenye-razrabotali-novyj-kompozitnyj-dvumernyj-material-na-osnove-prirodnogo-minerala/?ysclid=m1v5s9dy5068300221>
3. Учёные из России «срезали» одно из измерений у материала и получили новый композитный материал

<https://news.rambler.ru/science/50911744-uchenye-iz-rossii-srezali-odno-iz-izmereniy-u-materiala-i-poluchili-novyy-kompozitnyy-material/?ysclid=m1v557tkuw935774097>

1. Гавриленко В. А. Композиты 21 века: возможности и реальность», Neftegaz.RU, №2, 2019. <https://magazine.neftegaz.ru/archive/189769/>
2. Военное обозрение. Почему так сложно решается проблема производства композитных материалов в РФ: факты и комментарии

<https://topwar.ru/166584-pochemu-tak-slozhno-reshaetsja-problema-proizvodstva-kompozitnyh-materialov-v-rossii.html>

1. Зацаринный А.А., Абгарян К.К. Синтез новых материалов как приоритетное направление инновационного развития промышленности// Материалы 4-й международной конференции «Математическое моделирование в материаловедении электронных компонентов» (МММЭК-2022). Москва: МАКС Пресс. С. 8-14.
2. Зацаринный А.А., Абгарян К.К. Об актуальности проблемы синтеза новых материалов в условиях инновационного развития промышленности. Известия высших учебных заведений. Материалы электронной техники. 2023;26(4). https://doi.org/10.17073/1609-3577j.met202307.560
3. Абгарян К.К. Многомасштабное моделирование в задачах структурного материаловедения. - М.: МАКС Пресс. 2017. 284 С.
4. Столбовский, А. В. Математическое моделирование процессов в материаловедении с использованием MS Excel: учебное пособие / А. В. Столбовский, М. Л. Лобанов. — Екатеринбург: Изд-во Урал. ун-та, 2018. — 96 с.
5. Китай расставляет акценты в научно-технической политике. <https://issek.hse.ru/mirror/pubs/share/822379879.pdf>
6. Развитие крупных исследовательских инфраструктур в Китае: дорожная карта до 2050 года (Китайская академия наук) 2011-е издание, автор: Хэшенг Чен (редактор), <https://www.amazon.com/Large-Research-Infrastructures-Development-China/dp/3642193676?ysclid=m1x874z1k1142490168>
7. Почему гибридная архитектура – это будущее? <https://habr.com/ru/companies/inferit/articles/744876/>
8. A.A. Zatsarinnyy. The experience of the FRC CSC RAS in creating a digital platform for scientific research in the cause of digital transformation // The International Science and Technology Conference “Modern Network Technologies, MoNeTec-2020”
9. Волович К.И., Денисов С.А., Кондрашев В.А. Архитектура сети обработки данных для параллельных вычислений в высокопроизводительном комплексе для задач материаловедения // Материалы 4-й международной конференции «Математическое моделирование в материаловедении электронных компонентов» (МММЭК-2022). Москва: МАКС Пресс. С. 30-36.
10. ЦКП «Информатика» // [Электронный ресурс] - http://www.frccsc.ru/ckp

(дата обращения 19.09.2023)

1. Абгарян К.К. Интеллектуальные информационные системы в микроэлектронике // В сборнике Математическое моделирование в материаловедении электронных компонентов. Материалы V международной конференции, 2023, с. 8-14
2. Абгарян К.К., Гаврилов Е.С. Системы автоматизации научных расчетов для многомасштабного моделирования нанокомпозиционных материалов // В сборнике Математическое моделирование в материаловедении электронных компонентов. Материалы V международной конференции, 2023, с. 15-17.
3. Денисов С.А., Кондрашев В.А. Подходы к созданию высокопроизводительных вычислительной среды для моделирования ячеек энергонезависимой памяти на ЦКП «Информатика» // Материалы 6-й международной конференции «Математическое моделирование в материаловедении электронных компонентов» (МММЭК-2024). Москва: МАКС Пресс (в печати).
4. МГУ появился мощный суперкомпьютер для работы с ИИ. 1.09.2023 <https://www.gazeta.ru/tech/2023/09/01/17518010.shtml>.

**MODERN APPROACHES TO SOLVING THE PROBLEM OF SYNTHESIS OF NEW MATERIALS WITH SPECIFIED PROPERTIES**

**Zatsarinny Alexander Alekseevich**

Doctor of Technical Sciences, Chief Researcher, director of the Department of the Federal Research Centre "Computer Science and Control"(FRCCSC), of the Russian Academy of Sciences, (FRC CSC RAS). Vavilov st. 44, 119333 Moscow, Russia,

e-mail: [alex250451@mail.ru](mailto:alex250451@mail.ru)

**Abgaryan Karine Karlenovna**

Doctor of Physical and Mathematical Sciences, Chief Researcher, head Federal Research Centre "Computer Science and Control"(FRCCSC), of the Russian Academy of Sciences, (FRC CSC RAS). Vavilov st. 44, 119333 Moscow, Russia

e-mail: [kristal83@mail.ru](mailto:kristal83@mail.ru)

**Abstract:** The article discusses modern approaches to solving problems related to the synthesis of new materials. The relevance of this most important strategic task of innovative development in modern conditions is noted. New materials with specified properties are essential for the production of trusted Russian software and hardware products for both general and special purposes. The importance of developing mathematical modeling methods and software solutions based on them for the development of innovative approaches in the field of synthesis of new materials is shown. It is noted that further development requires a domestic high-performance environment for scientific research, which has a comfortable user interface, flexibility in setting up resources, high performance and reliability.

**Keywords:** digital transformation, synthesis of new materials, new materials, multiscale modeling, high-performance research infrastructure