

МИНОБРНАУКИ РОССИИ

**Федеральное государственное автономное
образовательное
учреждение высшего образования
«Новосибирский национальный
исследовательский государственный
университет»
(Новосибирский государственный
университет, НГУ)
Центр НТИ по новым функциональным
материалам**

ул. Пирогова, д. 1, Новосибирск, 630090
Тел. (383) 363-42-97. Факс (383) 330-42-80
Адрес в интернете: [//www.nsu.ru](http://www.nsu.ru)
E-mail: cnfm@nsu.ru

28 октября 2025 г. № ЦНФМ-НИОКР-19/18
[Программный комплекс «НИКОЛЬ-кристалл»]

Коммерческое предложение

«НИКОЛЬ-кристалл — от атома к покрытию, от модели к материалу»

1. Назначение и область применения

- Программное обеспечение «НИКОЛЬ-кристалл», разработанное в Центре новых функциональных материалов НГУ (ЦНФМ НГУ), предназначено для прогноза макроскопических свойств многокомпонентных никелевых сплавов на основе атомистического моделирования.
- Программа применяется для виртуального проектирования новых жаропрочных и коррозионностойких материалов, используемых в:
 - газотурбинных и авиационных двигателях;
 - энергетических установках;
 - изделиях с термобарьерными покрытиями (ТБП) на основе никеля и циркония;
 - элементах с экстремальными температурными и механическими нагрузками.

2. Технологическая основа

- Атомистическое моделирование (молекулярная динамика, LAMMPS)
- Оптимизация межатомных потенциалов MEAM (дополнительный модуль)
- Генетические алгоритмы для автоматизированного подбора параметров
- Валидация моделей по экспериментальным и квантово-химическим данным
- Масштабируемость до сотен тысяч атомов

3. Функциональные возможности

- Прогноз упругих констант, теплопроводности, энергии образования вакансий и поверхностей
- Оценка температуры плавления и поведения дислокаций
- Поддержка до 5 легирующих элементов в одном сплаве
- Мгновенная оценка влияния изменения состава на свойства
- Итерационный подбор оптимального состава
- Возможность интеграции с внешними системами расчётов (Ansys, MSC.MARC и др.)

4. Преимущества для разработчиков ТБП

Проблема	Решение с помощью «НИКОЛЬ-кристалл»
Длительный цикл подбора состава сплава (6–24 мес.)	Сокращение до 2–8 недель за счёт виртуального скрининга
Высокая стоимость экспериментальных плавов	Снижение затрат на 30–50 %
Непредсказуемость свойств при изменении легирования	Повышение точности прогнозов
Отсутствие цифрового двойника материала	Создание цифрового аналога сплава от атомного уровня до макросвойств
Необходимость интеграции с расчётом поведения ТБП	Возможность передачи данных в КЭ-модели для оценки термомеханической стойкости покрытий

5. Форматы лицензирования

Тип лицензии	Описание	Стоимость (ориентировочно)
Годовая академическая	Для университетов и НИИ. Доступ ко всем модулям, без права коммерческого использования	от 180 000 руб./год
Годовая промышленная	Для предприятий и инжиниринговых компаний	от 480 000 руб./год
Бессрочная лицензия	Неограниченное использование с техподдержкой 1 год	от 500 000 руб.
Дополнительный модуль	Оптимизация МЕАМ-потенциалов под конкретные системы (Ni-Al, Ni-Cr и др.)	от 600 000 руб.

6. Дополнительные услуги

- Адаптация моделей под конкретные сплавы и покрытия (в т.ч. Ni–Al–Cr–Y–Zr)
- Проведение НИОКР и обучение персонала
- Интеграция с корпоративными базами данных и CAD/CAE-системами
- Техническая поддержка (обновления, консультации специалистов ЦНФМ НГУ)

7. Контакты

Центр новых функциональных материалов Новосибирского государственного университета (ЦНФМ НГУ)

630090, г. Новосибирск, ул. Пирогова, 1

+7 (383) 363-42-97

cnfm@nsu.ru

www.cnfm.ru

<https://www.nsu.ru/n/research/new-materials-center/>

Директор ЦНФМ НГУ, к.т.н.

 А.Г. Квашнин