

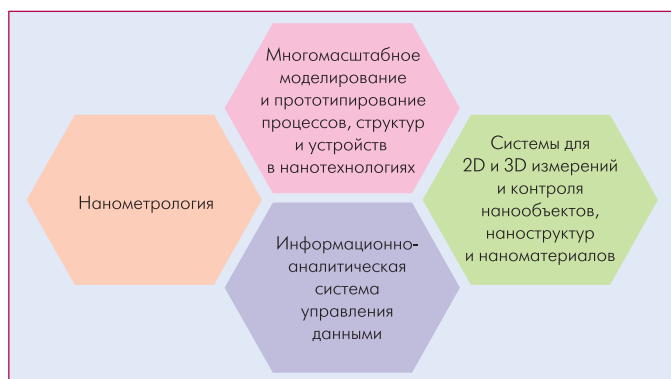
# ИНФОРМАЦИОННО-АНАЛИТИЧЕСКИЙ ИНСТРУМЕНТАРИЙ ДЛЯ НАЦИОНАЛЬНОЙ НАНОИНДУСТРИИ

**Б**урный рост исследований в России в сфере нанотехнологий и планируемый широкомасштабный переход от лабораторного уровня к промышленному производству изделий требует решения проблемы метрологического обеспечения и качественного контроля параметров выпускаемой продукции. Откликом на эту потребность явилась разработка концепции многомасштабного анализа и моделирования наноматериалов и устройств, реализацией которой стал аналитический комплекс SIAMS-CP Nanotech, созданный компанией SIAMS совместно с Центром фотохимии РАН.

Приоритет развития методов и средств измерений в высокотехнологичных областях, каковой является нанотехнология, уже не раз обсуждался в журнале "Наноиндустрия" [1,2]. Важной и актуальной задачей является возможность предоставления исследователю и производителю эффективного информационно-аналитического инструментария для поддержки технологических процессов в наноиндустрии на всех этапах: от лабораторных исследований структуры и свойств наноматериалов до контроля качества конечного изделия.

Для решения этой задачи потребовалась интеграция усилий ученых и разработчиков программного обеспечения.

Разработанный аналитический комплекс SIAMS-CP Nanotech отвечает инновационному подходу к многомасштабному анализу структуры, свойств материалов и происходящих процессов. SIAMS-CP Nanotech представляет собой компьютерные программы для проектирования, исследования и прототипирования материалов и устройств в области нанотехнологий. В комплексе объединены новейшие достижения информационных технологий, методов цифровой микроскопии, алгоритмов анализа изображений и структурно-имитационного моделирования, многомасштабного структурирования и анализа данных.



Информационно-аналитический инструментарий для национальной наноиндустрии

## СИСТЕМЫ ДЛЯ ДВУХ- И ТРЕХМЕРНЫХ ИЗМЕРЕНИЙ И КОНТРОЛЯ НАНООБЪЕКТОВ, НАНОСТРУКТУР И НАНОМАТЕРИАЛОВ

Анализ изображений позволяет в исследовательских работах численно сопоставлять взаимосвязь "процесс – структура – свойства" и принимать решения по количественным данным при контроле качества материалов наноиндустрии.

Проектирование наноматериалов, структурные и функциональные характеристики которых определяются свойствами атомов, молекул и структур, требует комплексного подхода к обработке результатов, изучения объекта на раз-



Парадигма "процесс-структура-свойства" для создания наноматериалов

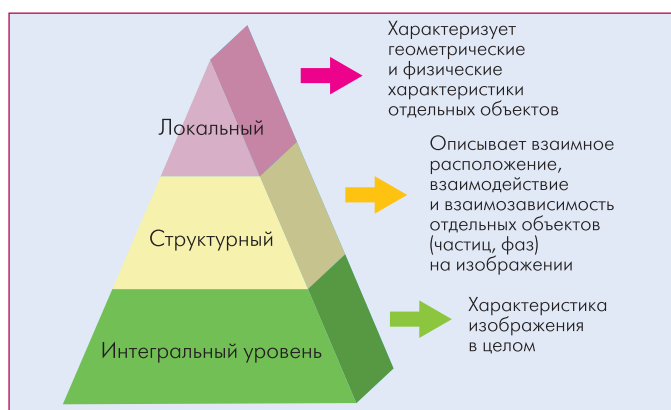
личных уровнях (нано-, микро- и макро-), создания аналитического инструментария, реализующего единую систему контроля и анализа информации с различных уровней иерархии структуры [3].

Используемые для анализа изображений программные продукты направлены, прежде всего, на получение интегральных и локальных стереологических параметров. Особенностью многомасштабного анализа изображений нанообъектов является двойственность иерархического описания их свойств. С одной стороны, свертки локальных характеристик объектов порождают интегральные характеристики, с другой, – практически любой интегральный параметр можно использовать для описания свойств отдельного объекта.

Для описания структурной иерархии свойств изображений в SIAMS-CP Nanotech вводятся следующие уровни:

- интегральный, характеризующий изображение в целом;
- структурный, описывающий взаимное расположение, взаимодействие и взаимозависимость объектов (частиц или фаз) на изображении;
- локальный, характеризующий геометрические и цветовые характеристики объектов.

В аналитическом комплексе SIAMS-CP Nanotech реализованы уникальные возможности автоматизированного анализа двумерных и трехмерных изображений нано- и микроструктур, нанообъектов и наноматериалов, получаемых основными аппаратными методами: сканирующей электронной микро-

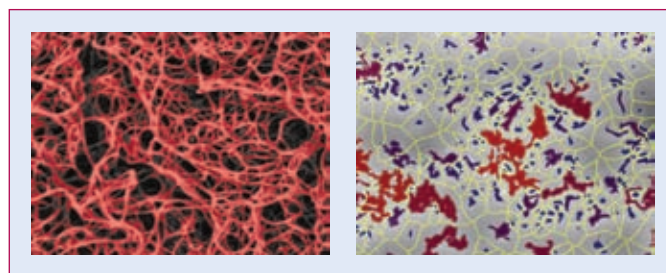


Структурная иерархия свойств изображений нанообъектов

скопией и просвечивающей электронной микроскопией, сканирующей зондовой, конфокальной и оптической микроскопией, магнитно-резонансной и компьютерной томографией, лазерным сканированием и др.

Среди наиболее востребованных в России и за рубежом решений в области анализа изображений можно выделить, в частности:

- Определение размерных и морфологических параметров нанотрубок и нановолокон.
- Определение размерных и морфологических параметров неагломерированных наночастиц и наночастиц в составе агрегатов.
- Анализ структуры самоорганизованных массивов наночастиц.
- Анализ наноструктур для полупроводниковой промышленности.
- Анализ наноразмерных биообъектов (биомаркеров, квантовых точек, клеток и тканей, флуоресцентных изображений).
- Анализ шероховатости и трехмерной визуализации поверхностей.



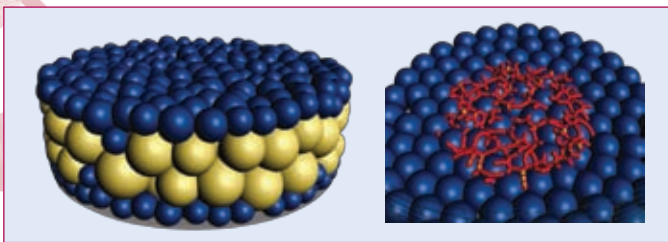
Примеры автоматизированного анализа изображений нанообъектов

## МНОГОМАСШТАБНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ И ПРОТОТИПИРОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ, СТРУКТУР И УСТРОЙСТВ В НАНОТЕХНОЛОГИЯХ

Одним из определяющих факторов успешного продвижения российских исследований в области нанотехнологий [4,5] является многомасштабный подход к компьютерному моделированию процессов и материалов.

Во-первых, прототипирование нанотехнологий позволяет существенно сократить цикл разработки и производства новых материалов и устройств.

Во-вторых, управление производственными процессами и жизненными циклами изделий в нанотехнологиях зависит от прогнозирования и управления иерархией физических, химических, биологических явлений, протекающих в различных масштабах размеров и времени. Следовательно, развитие методов многомасштабного моделирования процессов и структур решает задачу интеграции целого спектра технологий.



Компьютерное моделирование наноструктурированных материалов

В-третьих, в стратегической перспективе многомасштабность играет роль объединяющей парадигмы языка науки и техники, осуществляя двухстороннюю передачу знаний и информации из вычислительных в научные модели и представления.

Примером программного инструментария для проектирования наноструктур, наноматериалов и устройств с заданными свойствами и исследования их поведения в различных физико-химических процессах, происходящих на разных масштабных уровнях, может служить система SIAMS-CP Multiscale Modeling.

Эта компьютерная программа позволяет прототипировать наноструктурированные материалы и устройства путем моделирования целенаправленного изменения их состава, структуры и свойств, обеспечивая требуемые сочетания служебных свойств материалов, изделий и конструкций.

В программном продукте SIAMS-CP Multiscale Modeling реализован метод многомасштабного моделирования наносистем с иерархической системой организации, содержащих упорядоченные или неупорядоченные ансамбли элементов разных размеров и архитектур. Объектами моделирования выступают:

- наноструктурированные ансамбли органических, металлических и полупроводниковых частиц;
- коллоидные частицы сферической и асимметричной формы;
- микрокапли водных суспензий наночастиц.

Математические алгоритмы структурно-имитационного моделирования и анализа учитывают широкий диапазон временных и размерных эффектов, происходящих при самоорганизации ансамблей наночастиц в одно-, двух- и трехмерные структуры.

## ИНФОРМАЦИОННО-АНАЛИТИЧЕСКАЯ СИСТЕМА УПРАВЛЕНИЯ ДАННЫМИ

Интеграцию научно-практических данных в наукоемкий информационный ресурс призваны обеспечить информационные, методологические и программные инструменты, в роли которых выступают информационно-аналитические системы управления данными.

Для эффективного развития инфраструктуры наноиндустрии необходимо, чтобы подобные системы выполняли следующие функции:

- Сбор, регистрацию, систематизацию и анализ разномасштабных данных, получаемых различными методами цифровой микро- и наноскопии.
- Организацию и отслеживание связей между различными характеристиками исследуемых объектов.
- Синтез обобщенных отчетов по результатам исследования объектов, анализ причинно-следственных связей между параметрами, измеренными на различных масштабных уровнях.
- Организацию сетевого взаимодействия пользователей.
- Регламентирование работы исследователей, протоколирование действий операторов, распределение заданий.

## НАНОМЕТРОЛОГИЯ

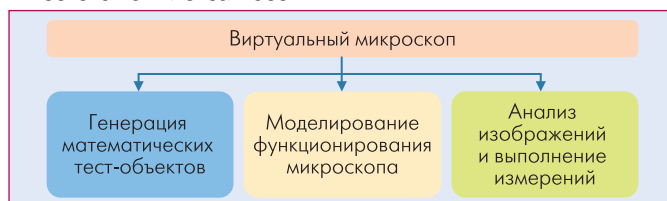
Широкое внедрение нанотехнологий в промышленное производство достигается высоким уровнем стандартизации, что невозможно без опережающего развития методов и средств измерений [1,2,6].

Под метрологическим обеспечением наноиндустрии понимается комплекс методов и средств линейных измерений для их унификации в нанометровом диапазоне. Нанометрология включает в себя эталонные стандартные образцы и измерительные комплексы (реальные и виртуальные), для аттестации методов визуализации и методик измерений параметров материалов и изделий.

Для калибровки и настройки программно-аппаратных комплексов для анализа нанообъектов, созданных на базе микроскопов и систем анализа изображений, реализуется концепция сопоставления результатов реальных измерений и данных, полученных при имитации процедуры измерения на основе математических и программных моделей тест-объектов и измерительных устройств.

Эта концепция разрабатывается на базе измерительного комплекса "Виртуальный микроскоп" коллективом разработчиков в составе Научно-исследовательского центра по изучению свойств поверхности и вакуума, компании SIAMS, Московского физико-технического института, Института проблем механики РАН, Уральского государственного технического университета – УПИ.

Создание аналитического инструментария для многомасштабного анализа изображений и моделирования наноматериалов проводилось в рамках государственных контрактов Федеральных целевых программ "Исследования и разработки по приоритетным направлениям развития научно-технологического комплекса России".



Функциональная структура "Виртуального микроскопа"

## ЛИТЕРАТУРА

1. Новиков Ю., Тодуа П. Нанотехнология и нанометрология. – Наноиндустрия, № 1, 2007, с. 20–22.
2. Киреев В. Нанотехнологии: история возникновения и развития. – Наноиндустрия, № 2, 2008 (8), с. 2–10.
3. Алфимов М.В., Кадушников Р.М., Антонов И.В. Структурная иерархия характеристик нанообъектов в задачах анализа и контроля перспективных материалов. – Нанотехнологии и информационные технологии – технологии XXI века: Материалы научно-практической конференции. – М.: Изд-во МГОУ, 2006, с. 31–32
4. Алфимов М.В. Нанотехнологии. Роль компьютерного моделирования. – Российские нанотехнологии, 2007, т.2, № 7–8, с.1–5.
5. Кадушников Р.М., Алфимов М.В., Стриханов М.Н., Петров А.Н. Многомасштабное моделирование процессов и материалов нанотехнологий. – I Всероссийская конференция "Многомасштабное моделирование процессов и структур в нанотехнологиях". Сборник тезисов докладов. – М.: МИФИ, 2008, с. 118.
6. Тодуа П.А. Метрология и стандартизация в нанотехнологиях. – I Всероссийская конференция "Многомасштабное моделирование процессов и структур в нанотехнологиях". Сборник тезисов докладов. – М.: МИФИ, 2008, с. 301–302.

## НОВЫЕ КНИГИ

**Нанотехнологии. Наноматериалы. Наносистемная техника. Мировые достижения – 2008 год.**  
**Сборник под ред. д.т.н., профессора**  
**П.П. Мальцева.** – М.: Техносфера, 2008. – 416 с., ISBN 978-5-94836-180-2

Издание является продолжением серии публикаций издательства "Техносфера" по мировым достижениям в области нанотехнологий. Книга включает материалы, опубликованные в 2006-2008 гг. в журнале "Нано- и микросистемная техника" и сгруппированные по разделам: наноматериалы, наноэлектроника, нанодатчики и наноустройства, диагностика наноструктур и наноматериалов, нанобиотехнология, применение нанотехнологий в медицине.

В иллюстрированном издании представлены примеры реализации и применения технологии формирования наноструктур, методов исследования наноматериалов, метрологического обеспечения и основ технологии наносистемной техники.

По просьбе читателей в книгу введен раздел АНГЛО-РУССКИЙ ТЕРМИНОЛОГИЧЕСКИЙ СЛОВАРЬ ПО МИКРО- И НАНОСИСТЕМНОЙ ТЕХНИКЕ.

Сборник представляет интерес для ученых, инженеров и преподавателей высшей школы, аспирантов и студентов, специализирующихся в области нанотехнологий, наноматериалов, наноэлектроники, микро- и наносистемной техники.

**Как заказать наши книги?**

По почте: 125319 Москва, а/я 91

По тел./факсу: (495) 956-3346, 234-0110

E-mail: knigi@technosphera.ru; sales@technosphera.ru