

## ОРГАНИЗАЦИЯ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКОЙ ДЕЯТЕЛЬНОСТИ

Нанотехнологическая разработка одновременно может быть не только фундаментальным, но и прикладным исследованием, считает автор статьи. В этой области научного поиска “коммерческой тайной” могут оказаться даже не результаты, а направления поиска. Здесь возникает вопрос о финансировании исследований, нацеленных на создание нанотехнологий. Соображения автора на этот счёт заслуживают самого пристального внимания.

### “ЗОЛОТОЕ СЕЧЕНИЕ” НАНОТЕХНОЛОГИЧЕСКОЙ НАУКИ

**И. В. Мелихов**

Публикации последнего десятилетия подтверждают мнение о том, что наука вступила в новый этап своего развития, который можно назвать этапом визуализации молекул [1]. Теперь для широкого круга исследователей стало доступным наблюдение за поведением отдельных молекул и их ассоциатов. Становится понятно, что такие наблюдения приведут к качественно новым знаниям о взаимодействии наночастиц, а следовательно, к небывалым технологиям и производствам. Исследователей охватила “нанотехнологическая лихорадка”, существенно ускорившая накопление новой информации о наносистемах [2]. Но при этом изменился характер такой информации. Условно её можно разделить на фундаментальные и прикладные знания о наносистемах, имея в виду под фундаментальными знаниями информацию о явлениях и процессах в наносистемах, а под прикладными – информацию о том, как эти явления и процессы реализуются в конкретных реакторах и аппаратах. Ранее накопление фундаментальных знаний о наносистемах происходило в соответствии с внутренней логикой развития науки, то есть в гармонии с накоплением прикладных знаний, о чём можно судить, например, по работам школ академиков В.А. Каргина, Б.В. Дерягина и П.А. Ребиндера. “Нанотехнологическая лихорадка” эту гармонию нарушила. Появились тысячи публикаций о свойствах наночастиц без

описания условий их образования при неполной характеристике изученных систем. Такие публикации информируют о прикладных исследованиях, которые способствуют разработке конкретных нанотехнологий, но не вносят в нанотехнологическую науку вклада, адекватного затратам на проведение работ.

В связи с этим представляется актуальным вопрос о рациональном соотношении фундаментальных и прикладных знаний при разработке технологий. Принципиальное решение данного вопроса убедительно обосновано в ряде публикаций [3, 4, 5], а применительно к нанотехнологиям – в работе [6]. Тем не менее представляется целесообразным привести дополнительно следующие соображения.

Судя по опыту прошлого столетия, любая новая технология разрабатывается в три этапа. На первом этапе на основе фундаментальных знаний формируется технологическая идея нового производства; на втором – выявляется круг условий, в которых технологическая идея может быть реализована; на третьем – решается вопрос о том, в каких аппаратах эти условия могут быть надёжно обеспечены [7, 8]. При этом знания, которые необходимы для формирования технологической идеи, разработчики стремятся взять из общедоступной теоретической науки, но их всегда оказывается недостаточно, так что приходится проводить специальные фундаментальные исследования тем большего масштаба, чем оригинальное технологическая идея. Знания, необходимые на втором этапе, накапливают в лабораториях, где стараются имитировать то, что может произойти в производстве. Эти знания имеют фундаментальный характер, хотя характеризуют лишь частные явления, отобранные для реализации в результате работ первого этапа. Знания третьего этапа по определению прикладные. Здесь приходится воспроизводить большую часть того, что сделано на втором этапе, но уже в производственных условиях. В результате работ всех трёх этапов набирает-



**МЕЛИХОВ Игорь Витальевич** – член-корреспондент РАН, заведующий лабораторией гетерогенных процессов химического факультета Московского государственного университета им. М.В. Ломоносова.



ся “критический объём” знаний, без которых технология не может обеспечить стабильного и безопасного производства. Объём знаний, поступивших в “критический объём” из общедоступной литературы, ранее был достаточно большим, особенно на этапе формулирования технологической идеи, в условиях же “нанотехнологической лихорадки” он резко сокращается. Сейчас “коммерческой тайной” становится не только основная часть знаний, собираемых на втором и третьем этапах, но часто даже направление поиска. Кроме того, общедоступные знания о наносистемах имеют множество пробелов, так что из литературы многого не возьмёшь. В результате каждая нанотехнологическая разработка превращается в почти автономное фундаментально-прикладное исследование, затраты на проведение которого в значительной мере определяются стоимостью накопления фундаментальных знаний.

В связи с данным обстоятельством становится актуальным вопрос о правильном финансировании фундаментальных исследований в рамках нанотехнологических разработок. По-видимому, здесь нет однозначного решения, так что приходится выдвигать гипотезы о том, при какой структуре затрат нанотехнология будет развиваться наиболее быстро и наименее затратно. Одной из таких гипотез является предложение о том, что затраты на накопление знаний на каждом из этапов разработки по нанотехнологии должны быть соизмеримы. Фактически на первом этапе накапливаются знания, достаточные для того, чтобы понять, что технологическая идея может быть реализована, а на втором и третьем этапах подтверждают, что эти знания достоверны в лабораторных, а затем в производственных условиях. Поэтому если принять, что затраты на накопление “единицы” знаний на всех этапах соразмерны, то можно прийти к гипотезе о том, что финансирование фундаментального поиска в рамках каждой автономной нанотехнологии целесообразно держать на уровне 2/3 общих затрат. По-видимому, такого же распределения средств имеет смысл придерживаться при разработке множества нанотехнологий в рамках, например, Программы развития нанотехнологий и наноиндустрии в Российской Федерации.

При разработке множества технологий появляется возможность экономии за счёт “кооперативного эффекта”, обусловленного тем, что при разработке многих технологий могут быть использованы одни и те же фундаментальные знания. Пусть основная их часть сохраняется в виде коммерческой тайны, но уже тайны не одной технологии, а программы в целом. При этом, естественно, кооперативный эффект будет тем существеннее, чем более удачно будут выявлены белые пятна на фронте накопления фундаментальных знаний, и станет понятно, где ожидать новые технологиче-

ские идеи. По-видимому, можно выделить пять таких белых пятен, связанных со следующими направлениями поиска.

**Механика множеств наночастиц с переменной массой и формой.** Множества укрупняющихся движущихся наночастиц имеют место при получении нанодисперсных веществ (в том числе фуллеренов, нанотрубок и т.д.) конденсационным методом. Такие множества загрязняют окружающую среду при пожарах и обуславливают важнейшие потребительские свойства многих наноматериалов. Однако закономерности движения наночастиц в этих множествах известны лишь приближённо. В результате периодически приходится сталкиваться с неожиданными фактами, которые свидетельствуют о необходимости детализации классических уравнений движения применительно к множествам взаимодействующих наночастиц переменной массы и формы [9]. В таких множествах распределение наночастиц по скоростям отличается от максвелловского, а кинетическое уравнение для функции распределения наночастиц по состояниям неизбежно отличается от уравнений Больцмана или Власова. При этом нет надежды, что в ближайшее время истинное уравнение будет сформулировано из “первых принципов”. Его необходимо формулировать на основе экспериментальных данных, накопление которых должно привести к разработке новых методов синтеза нанодисперсных веществ, при которых, управляя траекторией движения наночастиц в неоднородной среде, можно будет получать вещества с требуемой функцией распределения наночастиц по свойствам.

Однако для того, чтобы вывести уравнение движения, нужно иметь сведения о потенциале взаимодействия наночастиц. Сейчас эти сведения столь ограничены, что вид потенциала, как правило, приходится постулировать. А это делает расчёты методами молекулярной динамики или Монте-Карло гипотетическими. Поэтому следует экспериментально определить потенциалы взаимодействия наночастиц фуллеренов, тубуленов и ряда других технически важных веществ, например, методом атомно-силовой микроскопии, и доказать их адекватность реальной динамике множеств наночастиц. Если это удастся сделать, то в выигрыше окажутся все проекты национальной программы.

**Физика наночастиц, локализованных на поверхности твёрдых тел.** В технических наносистемах распространена ситуация, при которой наночастицы локализованы на твёрдых телах (подложках). Имеются многочисленные факты, указывающие на неожиданное поведение наночастиц в такой ситуации. В частности, обнаружены агрегаты наночастиц, которые, без видимых на то оснований, принимают причудливые формы [10].



Эти факты свидетельствуют о необходимости специального изучения переноса энергии и импульса от наночастиц, поступающих из среды к подложке, с учётом возможности электронного возбуждения и ионизации атомов в анизотропном поле поверхностных сил. По-видимому, целесообразно уточнять представление о деформации нанотела, перемещающегося по подложке, оптике нанотекстурированных тел и систем типа “фотонных кристаллов”, а также накапливать информацию по электродинамике нанокристаллов. Такие исследования, проведённые на важнейших прикладных системах по методологии фундаментального поиска, должны привести к новым технологическим идеям, связанным с разработкой нанодвигателей, наноманипуляторов, наногетероструктур и т.д.

**Топохимия наносистем.** В последнее время внимание исследователей привлекает возможность, изменяя условия синтеза или химически модифицируя наночастицы, “подгонять” их свойства под требования техники. Однако для этого необходимо знать особенности протекания топохимических процессов на малых кристаллах, а они известны только в общих чертах, так что их количественное описание может быть целью целого направления поиска – эволюционной топохимии [11]. Данное направление должно привести к описанию того, как изменяются свойства нанодисперсного вещества во времени с момента зарождения наночастиц в пересыщенной жидкости или паре до момента их исчезновения в результате испарения, растворения или топохимических процессов на их поверхности. Большинство технически важных веществ может пребывать в нанодисперсном состоянии только определённое время, причём это время сокращается за счёт “химической деградации” веществ при их использовании. Разработка способов расчёта времён пребывания вещества в нанодисперсном состоянии – важнейшая задача топохимического направления поиска.

**Нанопизика и нанохимия биологических систем.** Ожидается, что использование нанодисперсных веществ и нанотехники в медицине приведёт к решению множества диагностических и лечебных задач. Уже имеются примеры того, что нанодисперсные лекарственные средства дают эффект, недоступный макродисперсным формам [12]. В связи с этим необходимо сосредоточиться на изучении физико-химических механизмов взаимодействия наночастиц различных лекарств с молекулами белков, липидов, полисахаридов и с клеточными биологическими структурами. Выявление закономерностей образования и распада комплексов “наночастица–биоактивная молекула”, их подвижности, ферментативной и конформационной активности вне и внутри клеток или органов должно привести к отсутствующей сей-

час количественной основе решения проблемы адресной доставки нанолечарств при заданной пролонгированности действия. Возможно, будут разработаны теоретические основы использования неаддитивности действия нанодисперсных веществ и акустического, электрического или магнитного полей на биологические объекты. Высокая эффективность сочетания действия наночастиц и, например, акустического поля уже продемонстрирована [13]. Методические подходы к проблеме взаимодействия наночастиц и биоактивных молекул сейчас в достаточной мере разработаны, но не хватает экспериментальных данных о силах и скоростях взаимодействия. Накопление таких данных с использованием атомно-силовой и туннельной микроскопии, методов физической кинетики, экспериментальной цитологии, фармакологии и клинической медицины представляется необходимым.

**Нанометрология.** Успех нанотехнологических разработок во многом зависит от того, насколько полную информацию о свойствах отдельных наночастиц дают используемые экспериментальные методы. В связи с этим актуальна проблема обновления методик, обеспечивающих согласованную всестороннюю характеристику наночастиц, а также проблема получения и использования эталонных наночастиц. Можно полагать, что в рамках метрологического направления должны быть разработаны способы всесторонней характеристики каждого атома наночастицы.

Указанные направления поиска не исчерпывают проблемы. Любое из них можно исключить, дополнить, детализировать и переименовать. Однако они характеризуют объём информации, с недостатком которой сталкиваются те, кто изучает наносистемы. Каждое из данных направлений нужно финансировать в первую очередь. В связи с этим возникает вопрос о формах и объёме первоочередного финансирования.

По-видимому, целесообразно финансировать специальный Национальный проект фундаментальных исследований наносистем. Имеет смысл формировать проблематику работ по проекту не через конкурсы, а отражая логику научного поиска. Конкурсными могут быть только способы решения поставленных задач, хотя при современном уровне общедоступных знаний о наносистемах оптимальный способ может быть выбран априорно. Объектом фундаментальных исследований должна быть продукция, которую Россия предполагает производить. Финансирование работ стоило бы проводить через РФФИ или через специальный “мозговой центр”, формулирующий программу исследований. При определении объёма финансирования можно ориентироваться на затронутую выше гипотезу соизмеримого вклада трёх этапов работ в “критический объём” знаний,



согласно которой если финансирование третьего этапа оценено, исходя из планируемых требований к производству и целевым продуктам, то для оценки общих затрат финансирование третьего этапа следует утроить. Такой подход не ориентирован на запросы исследователей, но отражает финансовые возможности национального проекта. Запросы исследователей всегда будут тем больше, чем более детальную информацию о наносистеме они собираются накопить. Финансовые же возможности определяют тот уровень детализации знаний, который проект может себе позволить. Однако целесообразно, чтобы ограничения в средствах не привели к исключению из финансирования хотя бы одного из направлений поиска, приведённых выше. Только в этом случае фундаментальная наука сможет обеспечить разработку нанотехнологий с минимальными затратами средств и времени.

### ЛИТЕРАТУРА

1. Мелихов И.В. Физикохимия наносистем: успехи и проблемы // Вестник РАН. 2002, № 10.
2. Шабанова Н.А., Попов В.В., Саркисов П.Д. Химия и технология нанодисперсных оксидов. М.: ИКЦ "Академкнига", 2006.
3. Патон Б.Е. Наука, техника, прогресс. М.: Наука, 1987.
4. Капица П.Л. Эксперимент, теория, практика М.: Наука, 1987.
5. Шейндлин А.Е. Новая энергетика М.: Наука, 1987.
6. Третьяков Ю.Д. Проблема развития нанотехнологий в России и за рубежом // Вестник РАН. 2007. № 1.
7. Кутепов А.М., Бондарева Т.И., Беренгартен И.А. Общая химическая технология М.: ИКЦ "Академкнига", 2003.
8. Ajayan P.M., Schadler L.S., Braun P.V. Nanocomposite Science and Technology. Weinheim: Wiley VCH, 2003.
9. Мелихов И.В., Симонов Е.Ф., Божевольнов В.Е., Веденягин В.В. Хемореактивное движение твёрдых тел, реагирующих с газом. М.: УДК, 2006.
10. Mann S. Biomineralization. Principles and Concepts in Bioinorganic Material chemistry. Oxford: Univ. Press, 2001.
11. Мелихов И.В. Физико-химическая эволюция твёрдого вещества. М.: Бином, 2006.
12. Нанотехнология в ближайшем десятилетии. Прогноз направлений исследований / Ред. М. Роко, З. Уильямс, П. Аливисатос. М.: Мир, 2002.
13. Мелихов И.В., Николаев А.Л., Андропова Н.В., Трещалина Е.М. // Доклады АН. 2003. Т. 390. № 1.

