

МЕТОДЫ ОЦЕНКИ И ПОДГОТОВКИ СПРАВОЧНЫХ ДАННЫХ ПО СВОЙСТВАМ НАНОСТРУКТУР И НАНОМАТЕРИАЛОВ

А.В. Елецкий¹, А.О. Еркимбаев², В.Ю. Зицерман²,
Г.А. Кобзев², М.С. Трахтенгерц²

¹РНЦ «Курчатовский институт», Москва, eletskii@imp.kiae.ru

²ОИВТ РАН, Москва, vz1941@mail.ru

Рассмотрены проблемы накопления, систематизации и аттестации численных данных по свойствам наноразмерных объектов. Показано, как особенности наноструктур и наноматериалов должны отражаться при создании систем справочных данных об их физико-химических и эксплуатационных свойствах. Выявлена и проиллюстрирована специфика численных данных для наноструктур: зависимость признаков и характеристик от конкретного класса; промежуточное положение между одиночной молекулой и макроскопическим веществом; определяющая роль размерного эффекта; высокий уровень неопределенности данных, вплоть до полной невоспроизводимости измерений в одной или разных лабораториях. Показано, что размерный эффект (зависимость свойств от размеров объекта) служит одним из основных и **принципиально неустранимых** источников неопределенности. Приведены многочисленные примеры для углеродных наноструктур, иллюстрирующие высокую чувствительность транспортных свойств или модуля Юнга к размеру [1, 2] объекта. Дополнительным источником неопределенности служат неоднозначность в определении поперечных размеров, а также особая чувствительность к сорбированным на поверхности частицам, поскольку поверхность доминирует в наноразмерных объектах.

К общей характеристике данных относится и **многофакторность** описания, то есть потребность в идентификации посредством целого набора признаков, определяющих структуру, размеры, метод синтеза и т.п. Аналогично и данные по свойствам наноразмерных объектов требуют развернутого описания метода измерений, состояния образца, внешней среды и др. Для представления многофакторных данных использована концепция *materials metrology* [3], согласно которой результат измерения представим только в связке с данными по методу и объекту, а полнота этих данных определяет меру достоверности численных значений.

Предложены общий подход и технологические процедуры для разработки соответствующих БД по свойствам наноразмерных объектов. Проектирование БД включает две линии: идентификация объекта и характеристика свойств. Первая линия включает: (1) отнесение объекта к одной из рубрик классификационной схемы, основанной на топологии объекта [4]; его выделение в пределах рубрики посредством идентифицирующих признаков, детализирующих *химизм* мономерного звена, размер объекта, морфологию, метод синтеза и проч. Набор признаков

различен для каждого из классов, что требует использования соответствующих технологий полуструктурированных данных, допускающих вариации логической структуры [5]. Аналогично и характеристика свойств включает набор процедур, допускающих вариации типа и объема данных. Особую роль в представлении данных с нерегулярной структурой играет развитая система **метаданных** [6], описательной информации о структуре и смысле данных. Разъясняя содержание, метаданные определяют названия, обозначения, единицы измерения, метод измерения/оценки, наконец, форму представления физической величины и ее неопределенности.

В качестве завершающего этапа в подготовке и оценке данных, предложена аттестация – совокупность процедур, включающих многоплановую экспертизу представленных данных, и заканчивающаяся итоговой оценкой неопределенности в виде значения погрешности и присвоения данным определенной категории достоверности. В более сложных случаях достаточно, чтобы итогом аттестации было решение, принятое по набору критериев о приемлемости набора данных.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (проект № 10-08-00623).

Л и т е р а т у р а

1. Елецкий А.В. Механические свойства углеродных наноструктур и родственных материалов// УФН. - 2007. Том. 177. -№3.- С. 233-274.
2. Елецкий А.В. Транспортные свойства углеродных нанотрубок// УФН. - 2009. - Том. 179.- №3.- С. 225-241.
3. Munro R.G. Data Evaluation, Theory and Practice for Materials Properties. Special Publication 960-11. - Materials Science and Engineering Laboratory. June 2003. U.S. Department of Commerce. NIST.
4. Pokropivny V.V., Skorokhod V.V. New dimensionality classifications of nanostructures// Physica E. – 2008. - Vol. 40. - No 7.- P. 2521-25235.
5. Еркимбаев А.О., Зицерман В.Ю., Кобзев Г.А., Фокин Л.Р. Логическая структура физико-химических данных. Проблемы стандартизации и обмена численными данными// Журнал физической химии. -2008.- Том 82.- №1.- С. 20-31.
6. Еркимбаев А.О., Зицерман В.Ю., Кобзев Г.А.. Роль метаданных в создании и использовании информационных ресурсов о свойствах веществ и материалов// Научно-техническая информация. Серия 1. - 2008. - №11.- С. 13-19.