



УТВЕРЖДАЮ

Директор ИХВВ РАН

Буланов А.Д.

« » _____ 2018 г.

**План работы по основным направлениям научных исследований
Всероссийской постоянно действующей Выставки-коллекции веществ
особой чистоты на 2018(II полугодие)-2021 годы**

Научные исследования в 2018(II полугодие)-2021 гг. будут выполняться по теме плана НИР ИХВВ РАН «Развитие Постоянно действующей Выставки-коллекции веществ особой чистоты. Базы данных по высокочистым веществам и материалам для микроэлектроники и фотоники».

Работа Выставки-коллекции, в том числе в рамках данной темы, направлена на задачи, решение которых позволяет получить новые фундаментальные данные о взаимосвязях химический состав-структура-свойство.

Особое внимание будет уделяться высокочистым веществам и материалам для микроэлектроники и фотоники (высокочистым химреактивам, моноизотопным и изотопно-обогащенным веществам и др.), востребованным для развития в России современной материаловедческой базы данных направлений и создания собственных наукоемких производств.

Реализация проектов Выставки-коллекции делает необходимым развитие новых высокочувствительных методик анализа, метрологической базы аналитической химии высокочистых веществ.

Все указанные аспекты значимы для развития направления V. Химические науки и науки о материалах 44. Фундаментальные основы химии Программы фундаментальных научных исследований государственных академий наук на 2013-2020 годы.

Исследования в 2018(II полугодие)-2021 годах включают комплекс задач, продолжающих реализовывать цели Выставки-коллекции и развивающих основные научные направления ее работы.

Анализ и метрологическая аттестация поступивших образцов высокочистых веществ и материалов, в том числе для микроэлектроники и фотоники. Процедура метро-

логической аттестации образцов, предполагающая максимально полное описание их примесного состава, включает проведение сопоставительных анализов в ведущих аналитических лабораториях страны, аккредитованных для работы с высокочистыми веществами и статистическую обработку результатов. Новые аналитические данные будут внесены в базу Информационно-расчетной системы «Высокочистые вещества и материалы» (ИРС) и проведена их экспертная оценка; изучена структура данных для отдельных образцов и ее адекватность применяемой модели примесного состава; с использованием модулей ИРС по неполным данным анализа будут установлены интегральные статистические характеристики полного примесного состава и сформированы паспорта новых образцов; будут выявлены доминирующие примеси и установлен вклад различных классов примесей в их суммарное содержание в привязке к методам получения и глубокой очистки образцов; установлен уровень чистоты новых образцов в сопоставлении с поступившими ранее выставочными образцами данных веществ (при их наличии) и мировым уровнем. Будет продолжено формирование новых разделов Выставки-коллекции и их обобщенное описание.

Развитие системы мониторинга уровня чистоты высокочистых веществ и материалов. Актуальная информация о производителях высокочистых веществ в России и мире, уровне чистоты веществ различных классов, нормативной документации. Заполнение и актуализация интегрированной в ИРС базы данных по химреактивам для микроэлектроники и фотоники. Будет сформирован раздел ключевых высокочистых неорганических и органических химреактивов, собраны данные об отечественных и зарубежных производителях данных реактивов и достигнутом уровне их чистоты. Разделы ключевых высокочистых химреактивов для микроэлектроники и фотоники будут включены в базу данных ИРС.

Развитие и совершенствование методик прогнозирования полного примесного состава по неполным данным анализа для различных классов высокочистых веществ. Будет разработана методика прогнозирования теоретической оценки суммарного содержания примесей в образцах при малом числе примесей с измеренной концентрацией и получены данные о вероятном суммарном содержании примесей в таких образцах.

Изучение структуры и закономерностей формирования примесного состава высокочистых природных моноизотопных и изотопно-обогащенных простых веществ. На

примере массива образцов Выставки-коллекции впервые будет проведена полная и объективная характеристика примесного состава данных веществ с применением новых методов прогнозирования полного примесного состава: установление его уточненных интегральных характеристик, функции распределения примесных элементов по концентрации, оценок вклада различных классов примесей в их суммарное содержание в отдельных образцах и их подмножествах (щелочных и щелочноземельных элементов, переходных металлов, редкоземельных элементов, р-элементов) в сопоставлении с аналогичными характеристиками для массивов образцов, к которым принадлежат различные подмножества природных моноизотопных и изотопно-обогащенных простых веществ.

Изучение влияния изобарного фактора на примесный состав высокочистых природных моноизотопных веществ. Будет изучен вклад примесей – изобар основного вещества в примесный состав указанных объектов и оценено влияние изобарного фактора на изотопный состав примесей.

Изучение примесного состава высокочистых веществ различных классов: оксиды металлов. С использованием массива образцов Выставки-коллекции впервые будут установлены статистические характеристики важного класса высокочистых веществ – высокочистых оксидов металлов. Будут получены оценки среднего и суммарного содержания элементов-примесей для массива наиболее чистых образцов оксидов, оценен вклад отдельных классов в суммарное содержание примесей, что позволит более точно охарактеризовать примесный состав образцов и уточнить статистические характеристики его описания.

Председатель Комитета Выставки-коллекции
научный руководитель ИХВВ РАН
академик

М.Ф. Чурбанов

Ученый секретарь Выставки-коллекции
ученый секретарь ИХВВ РАН
д.х.н.

О.П. Лазукина