

Введение Проблема соотношения фундаментальных и прикладных исследований в науке приобретает сегодня небывалую остроту от конкретной тематики ученого до широких научных исследований, поскольку от решения этого вопроса зависит, с каким уклоном дальше будет развиваться наука, и какой будет ее будущий облик [1]. Эта проблема всегда традиционно рассматривалась в философии и методологии науки и техники, и современную методологию интересует анализ не отдельных областей науки и техники, а «переплетение» различных областей знания, их междисциплинарность и интеграция, механизмы и модели взаимодействия. Такой междисциплинарной областью знания выступает нанохимия, наука, связанная не только с естественнонаучным массивом знания, но и имеющая непосредственный выход в нанотехнологию. В нанохимии проводятся как фундаментальные, «чистые» исследования, так и прикладные, находящие применение в нанотехнологии. Целью данного философского анализа является рассмотрение соотношения фундаментальных и прикладных исследований в нанохимии и нанотехнологии, а также выявлению механизмов их взаимодействия с точки зрения концепций, сложившихся в философии техники. Концепции соотношения фундаментальных и прикладных исследований в философии техники В настоящее время в философии техники широко обсуждается вопрос о соотношении фундаментального и прикладного знания в технауче (нано, био и информационная технология), где сходятся интересы двух различных областей исследовательской деятельности человека – науки и технологии. Можно рассмотреть это разделение на примере нанонауки и нанотехнологии. Нанонаука занимается исследованием феноменов в масштабе от 1 до 100 нм, а нанотехнология создает и контролирует объекты на этой же шкале с целью получения новых материалов со специфическими свойствами и функциями, способных оказать революционное воздействие на развитие цивилизации [2]. Получается, что нанонаука занимается фундаментальными исследованиями, а нанотехнология – прикладными. Различаются эти области знания по цели деятельности ученого: цель фундаментальных исследований – познавательная, открытие новых явлений и их изучение, поиск истины как основополагающей ценности науки, ради чего и осуществляется познание вообще; цель прикладных исследований – утилитарная, связанная с применением фундаментального знания на практике, его ценность иная – эффективность практико-технологического решения. В философии техники есть различные модели соотношения фундаментального и прикладного знания [3]. Первая точка зрения считает, что фундаментальные исследования занимаются производством знания, а прикладные применяют полученные знания в практической деятельности. При этом приоритетными являются фундаментальные исследования, поскольку они генерируют свои идеи в область прикладных и вызывают их развитие. Такая модель взаимодействия фундаментального и прикладного знания получила название линейной. Вторая

точка зрения сводится к тому, что фундаментальные и прикладные исследования обладают относительной самостоятельностью, так как за ними видятся различные социальные институты с разными научными идеалами, ценностями и целями познания. Взаимодействие между фундаментальными и прикладными исследованиями осуществляется не по принципу субординации, а координации. Координация развития фундаментальных и прикладных исследований может иметь как эмпирическую, так и теоретическую составляющие: иногда наука использует прикладное знание для получения собственных результатов, а иногда научные результаты успешно используются в прикладных исследованиях. Эту модель взаимодействия называют когерентной. Третья точка зрения считает, что сегодня фундаментальные и прикладные исследования нельзя разделить, а наука и технология сливаются в одно целое – технонауку (симбиоз науки и технологии). При этом фундаментальные исследования приобретают все более прикладной характер и теряют свою самостоятельность, а прикладные исследования становятся все более теоретизированными. Условно назовем эту модель смешанной. Именно эту точку зрения сегодня поддерживает большинство ученых и философов, начинающих всерьез обсуждать необходимость фундаментальной науки с точки зрения ее полезности. Усматривая в ней только источник технологических новаций, они пишут о том, что фундаментальная наука уже все открыла и «все теоретические пузыри уже полопались», а «университетская профессура отмирает как класс и платить нужно только тем теоретикам, которые работают в реальных проектах» [4]. Ясно, что последняя точка зрения связана с недооценкой соотношения фундаментального и прикладного знания, что приводит к принижению роли фундаментальной науки и ее функций (объясняющей и предсказывающей) в исследованиях, причем ответственность за это несет и философия техники.

Фундаментальные исследования в нанохимии: методы познания, концептуальный аппарат и теоретические основы В нанохимии проводятся как фундаментальные, так и прикладные исследования [5]. Фундаментальные исследования сосредотачиваются на проблемах эволюции наночастиц, на описании размерных эффектов и поисках их закономерностей, на исследовании физико-химических свойств наносистем и попытке их предсказания, а также на выявлении механизмов структурообразования наносистем. Фундаментальные исследования охватывают область размерных эффектов, имеющих значение как для теоретической нанохимии, так и для практической (синтетической). Размерные эффекты затрагивают вопросы, интригующие всех нанохимиков: «как свойства индивидуальных молекул могут преобразовываться в свойства фазы при их объединении, как строятся мосты от единичной молекулы до макроскопического вещества, в конечном итоге, как иерархия количества преобразуется в иерархию свойств. Насколько одиночные молекулы теряют себя как «химические личности», когда из них формируются коллоидные системы или

материалы? Ответы на эти вопросы определяют границы нанохимии как науки (от наночастиц до нанокластеров и ультрадисперсных систем), ее предмет и концептуальный аппарат» [6]. В концептуальном аппарате нанохимии существуют два ключевых понятия – наночастица и нанореактор. Наночастица характеризуется размерным (пространственным) эффектом, а нанореактор определяет функцию наночастицы, т.е. физико-химические свойства наночастицы зависят от ее размера, последнее и есть самая привлекательная сторона нанохимии, поскольку от этого зависит ее технологическое применение. Так, кластер железа почти полностью теряет свои специфические свойства (энергия ионизации, магнетизм) и приближается к металлическому железу при числе атомов в кластере $n = 15$. При $n > 15$ он остается кластером в размерном смысле и никаких аномальных свойств не обнаруживает. Изучение размерных эффектов проводится с помощью двух теоретических подходов: микроскопического и термодинамического [7]. Оба подхода отслеживают поверхностные свойства наносистем и составляют научную основу для широкого внедрения в нанотехнологии трехмерных кластеров, квазиодномерных кластеров (нанопроводов) и нанотрубок. Микроскопический подход прибегает к атомно-молекулярной детализации наносистемы, а термодинамический характеризует поверхностные свойства на языке энергии и энтропии. Микроскопический подход представляет собой различные приемы (методы, модели, правила), транслируемые из квантовой механики и квантовой химии в область нанохимии. В основном используется метод молекулярных орбиталей (МО) и теория кристаллического поля. Эти методы имеют важное теоретическое значение, состоящее, во-первых, в том, что метод МО позволяет конструировать химические связи и образовывать из атомов молекулу, нано-кластер и наночастицу, внося тем самым вклад в теорию химического строения; во-вторых, теория кристаллического поля совместно с методом МО позволяет рассчитывать энергетические характеристики орбиталей, ширину запрещенной зоны, валентную зону и зону проводимости, плотность состояний электронов в зонах, работу выхода электрона на поверхность нанокластера, что позволяет предсказывать его электрические и магнитные свойства. Критерием истины в этом случае выступает эксперимент, позволяющий соотносить расчетные характеристики с экспериментальными. Так, поверхностные электронные состояния определяются с помощью группы методов электронного и ионного проектора. Электронный проектор дает спектр электронов с поверхности металла, входящего в состав нанокластера, и позволяет получить максимумы электронной плотности при определенных значениях энергии, соответствующие расчетам для орбиталей ниже уровня Ферми. Спектроскопия ионного проектора отражает состояние вакантных электронных уровней и зон на поверхности и тоже хорошо коррелирует с расчетными характеристиками энергетических уровней. Теоретическое значение микроскопического подхода проявляется в

том, что он описывает структурные свойства атомов и молекул, входящих в состав поверхности наносистемы или адсорбированных на ней. При этом рассматривается не только активность атомов на поверхности, но и элементарные акты химической реакции, например, в процессе адсорбции или катализа, зависящие от размера наносистемы. Фундаментальные исследования размерных эффектов с помощью микроскопического метода привели к прогрессивным химико-технологическим решениям в области гетерогенного катализа. Термодинамический подход имеет важное теоретическое значение в нанохимии. Во-первых, он позволяет рассчитывать многие поверхностные явления, такие как химические реакции на поверхности наноструктуры, поверхностная перестройка атомов и формирование поверхности, адсорбция на языке свободной энергии Гиббса или Гельмгольца. Во-вторых, этот подход включает применение понятий величины поверхностного натяжения и химического потенциала к проблеме нуклеации и образования нанокластеров. С помощью термодинамического подхода можно предсказывать существование наноструктур на поверхностях адсорбентов и в пористых материалах. Этапы образования и роста нанокластеров, описанные с помощью теоретической термодинамики, находят свое подтверждение в эксперименте с применением мессбауэровских спектров. Здесь также критерием истины выступает эксперимент. Для понимания строения и свойств наноструктур большое значение имеет построение как микроскопических, так и термодинамических моделей. Микроскопические модели позволяют предсказывать стабильные состояния кластеров, которые действительно были обнаружены у многих щелочных и благородных металлов. С помощью термодинамических моделей было предсказано существование таких критических размеров кластеров, менее которого кластер теряет магнитное упорядочение скачком и намагниченность исчезает с повышением температуры. Эти модели нашли свое подтверждение в области создания наноматериалов с гигантским магнитосопротивлением, они уже используются в качестве магнитных переключателей и элементов магнитной записи. Безграничные возможности открываются также в варьировании структуры и свойств матричных наносистем, называемых органико-гибридными наносистемами, включающими полимеры, органические макромолекулы, различные нанокластеры, а также супрамолекулярные структуры. Эти возможности открывают методы компьютерного моделирования, с помощью которых можно, не обращаясь к эксперименту, осуществлять конструирование и сборку проектируемой наносистемы по схеме «снизу вверх» (атомная структура, молекулы, супрамолекулярные системы и нанокластеры). Для этого используют такие основные методы нанохимии как квантовомеханические расчеты «из первых принципов» и полуэмпирические методы, основанные на положениях молекулярной динамики и моделях Монте-Карло. Если раньше методы компьютерного моделирования больше применялись

для описания процессов, происходящих в наноматериалах, то сегодня их используют для прогнозирования их физико-химических свойств. Это приводит к созданию новых наноматериалов с уникальными прочностными, электрическими, магнитными и биологическими свойствами. В ряде случаев компьютерное моделирование оказалось катализатором для экспериментальных исследований и производства наноструктур. Подводя итог, можно сделать заключение о том, что сегодня в нанохимии выделяются три основные направления, способствующие не только росту теоретического знания в этой области, но и оказывающих влияние на ход развития прикладных исследований, и обеспечивающих их успех в нанотехнологии. К ним относятся: специальные теоретические способы познания нанообъектов (микроскопический и термодинамический подходы), позволяющих отслеживать размерные эффекты, наличие группы экспериментальных методов (спектральных), позволяющих соотносить теоретические расчеты с экспериментальными данными, а также методы моделирования, ставшие сегодня основными расчетными методами нанотехнологии. Все методы исследования, концептуальный и математический аппарат фундаментальных исследований сконцентрирован в теоретических основах нанохимии, представляющих собой область междисциплинарного взаимодействия различных наук: квантовой и классической механики, термодинамики необратимых процессов, коллоидной химии, квантовой химии, математики, нанофизики и биологии. Фундаментальные исследования постоянно обогащаются новыми идеями и концепциями за счет взаимодействия различных наук, способствующего росту научного знания. Происходит трансляция системно-структурных представлений, пространственно-временных характеристик изучаемых объектов, типологии объектов, типов взаимодействия между объектами из областей различных наук в нанохимию. Чем больше исследования связаны с квантовомеханической или квантовохимической трактовкой наносистем, тем более они становятся теоретичными и фундаментальными, поскольку без нее невозможно ни объяснить, ни предсказывать физико-химические особенности и поведение наносистем. Физико-химическое знание (аксиомы, уравнения, принципы запрета, правила, методы) выступает базовым по отношению ко всему знанию нанохимии в целом. Структурные характеристики наносистем, их физико-химические свойства, зарождение, рост и динамика наносистем рассматриваются в различных областях этих наук, но вклад этих наук в теоретические основы нанохимии и нанотехнологии не однозначен. Современная технология стремится к предельно возможным характеристикам своего продукта, используя для этого физические явления и эффекты, возникающие на границе перехода из одного качественного состояния материи в другой, такие, например, как размерные эффекты, обуславливающие необычные потребительские свойства наноматериалов. Поэтому не все теоретическое содержание этих наук входит в научные основы

нанохимии и используется в нанотехнологии. Особое теоретическое значение имеют квантовая физика, квантовая химия, классическая и неклассическая термодинамика и математическое моделирование, составляющие ядро теоретических основ нанохимии, и обеспечивающие ее объяснительный и предсказательный потенциал. Появление теоретических основ нанохимии, концептуального и математического аппарата, наличие специальных методов познания свидетельствует о том, что фундаментальные исследования в этой области знания являются самостоятельными и мало зависящими от прикладных. Прикладные исследования в нанохимии и их связь с нанотехнологией

Прикладные исследования нацелены на применение полученных фундаментальных знаний в различных областях науки и техники и учитывают их технические, медицинские, экологические и синтетические аспекты. Последнее обстоятельство делает прикладные исследования относительно самостоятельными. Прикладные исследования начинают обретать свой предмет исследования и свой круг интересов. Так, техническая нанохимия изучает круг явлений, связанных с использованием нанотел в технических устройствах, медицинская нанохимия изучает функционирование ультрадисперсных лекарств в живых организмах, а экологическая нанохимия изучает миграции ультрадисперсных поллютантов в окружающей среде. Подавляющая часть прикладных работ ведется в области синтетической нанохимии и направлена на синтез наноструктур. Синтетическая нанохимия связана с нанотехнологией. Она занимается формированием новых наноматериалов на основе кластеров, нанотрубок, металлосодержащих фуллеритов и фуллеренов. Практическое значение синтетической нанохимии очень высоко и достаточно полно описано для России и других стран в работе [8]. В ней выделяется множество перспективных направлений, которые привели к созданию многих современных материалов с необычными свойствами. Одним из них является синтез углеродных кластеров и создание на их основе сверхпроводников, полупроводников, магнетиков, сегнетоэлектриков, нелинейных оптических материалов. Новые фуллереновые технологии принесли успех в синтезе алмазов и алмазоподобных соединений сверхвысокой твердости. На основе фуллеренов получены новые классы полимеров с заданными электрическими и магнитными свойствами для записи и хранения информации. По этому направлению наблюдается наибольшее количество публикаций, достигающих 90%. Особое направление в синтетической нанохимии – это получение углеродных нанотрубок, представляющих наноматериалы, используемые в наноустройствах в виде нанопроводов, нанодиодов, полевых транзисторов и холодных эмиттеров. Объекты синтетической нанохимии и наноматериалы на их основе способны обеспечить крупные прорывы в будущем – в создании нанолазеров, нанопроводов, оптических нанопреобразователей и наноисточников, нанокатализаторов, наномеханических устройств, нанорезонаторов,

нановолноводов и нанодиодов, ведущих к появлению новой измерительной техники, информационных технологий нового поколения и средств связи. За ними видится будущее техногенной цивилизации, поскольку ее материальная культура основана на новой информационной технике и технологии. Число прикладных исследований постоянно увеличивается, но без теоретического осмысления связи поведения наночастиц со свойствами составляющих их атомов, они так и останутся областью разрозненных эмпирических данных. В связи с этим сегодня усиливается интерес к квантово-химической трактовке опытных данных и молекулярно-динамическому моделированию наносистем как попытке обобщения данных о наносистемах самой различной природы.

Взаимосвязь фундаментальных и прикладных исследований в нанохимии и нанотехнологии

Фундаментальные и прикладные исследования взаимосвязаны: фундаментальные исследования в нанохимии стимулируют развитие прикладных, и наоборот. Можно проиллюстрировать эту взаимосвязь сначала на примерах из области теоретической химии, а затем физики. Так, фундаментальные исследования кластеров в области элементоорганической химии привели к предсказанию существования стабильных замкнутых поверхностных структур углерода – фуллеренов, которые были получены в 1996 г. Тогда были выявлены крупные атомные агрегаты C₆₀ и C₇₀ в ходе изучения масс-спектров паров графита, полученных в результате лазерного воздействия. Позже была разработана технология получения фуллеренов в больших количествах. Фуллерены сразу привлекли внимание многих исследователей необычностью своей структуры и свойств: оказалось, что эти кристаллические структуры, только собранные в другую форму, могут входить в состав нанотрубок. Прикладные разработки в области фуллеренов и их производных позволили создавать новые наноматериалы – углеродные нанотрубки, имеющие перспективное применение в технике. Здесь сразу стоит отметить полупроводниковую технику и аккумуляцию водорода для создания новых типов батарей и двигателей, работающих на водородном топливе. В то же время, прикладные разработки в области фуллеренов и нанотрубок стимулируют развитие фундаментальных исследований в области адсорбции и удержания водорода в нанотрубках, изучения проводимости нанотрубок, их водорастворимости и прочностных свойств, что будет иметь в будущем огромное практическое значение [9]. Другим ярким примером является влияние фундаментальных исследований в области коллоидной химии на прикладные успехи всей нанохимии. Систематическое изучение строения коллоидных систем с высокой дисперсностью, выявление зависимости, связывающей геометрию частиц с их физико-химическими свойствами (принцип Эренфеста) привело к открытию размерных эффектов в теоретической нанохимии. Теперь они привлекают внимание многочисленных прикладных разработок с целью использования этих эффектов в наноструктурах для создания наноматериалов с

необычными свойствами. Квантовая физика также демонстрирует свои успехи в прикладной области знания – нанотехнологии. Вот один из примеров. Сначала явление кулоновской блокады было теоретически предсказано в харьковском физико-техническом институте, затем было экспериментально подтверждено в МГУ им. Ломоносова, а сейчас на основе этого явления создан одноэлектронный транзистор и с ним связан прогресс в чувствительности прибора и создание на его основе новой измерительной техники. Другим примером является теоретическое изучение квантоворазмерных эффектов в наногетероструктурах, таких как: туннелирование электронов, изменение электронных состояний в квантовых точках, спиновые явления. Все эти явления рассчитываются с помощью квантовомеханического аппарата и необходимы для объяснения и предсказания необычных электрических и магнитных свойств наногетероструктур. Это – практическое применение квантовой механики для описания и расчета квантовых явлений, нашедших применение в нанoeлектронике. Широкий фронт фундаментальных исследований втягивает в свою орбиту прикладные, обозначая им перспективные направления развития, создавая возможности практического применения уникальных физико-химических свойств наносистем на основе теоретического изучения размерных эффектов. В свою очередь, прикладные исследования ограничивают спектр теоретических исследований своей практической направленностью, небольшим выбором методологических приемов и средств. Но иногда прикладные исследования способны приводить к фундаментальным открытиям, вызывающим новый всплеск теоретических разработок. Так, открытию квантового эффекта Холла, вызвавшему переворот в современной физике, предшествовали прикладные разработки в области создания двумерных (2D) электронных систем, реализуемых, например, в кремниевых структурах металл-окисел-полупроводник высокого качества, появившихся в результате многолетней работы физиков и химиков-технологов [10]. Во взаимодействии фундаментальных и прикладных исследований первенство отдается фундаментальной науке. Так же считает и Ж. Алферов, приводя такой сильный аргумент, что исследование физико-химических процессов в нанотехнологиях, разработка методов конструирования, диагностики и исследования наноструктур, наноматериалов и наноустройств, изучения их свойств и новых явлений, возникающих на наноуровне, невозможно без участия фундаментальной науки [11]. Фундаментальная наука выступает основой прикладных исследований в нанохимии и нанотехнологии. Она является генератором идей и играет в исследованиях эвристическую и методологическую роль, транслируя в прикладное знание новые теоретические представления, на базе которых создаются новые уникальные материалы. Модели взаимодействия фундаментальных и прикладных исследований в нанохимии и нанотехнологии Теперь рассмотрим приведенные выше модели

взаимодействия фундаментальных и прикладных исследований, выработанных в философии техники, и сделаем вывод о том, какая из трех моделей (линейная, когерентная, смешанная) реализуется в нанохимии и нанотехнологии. Суть линейной модели в нанохимии сведется к тому, что технологические инновации начинаются с фундаментальных исследований. Но предыдущий анализ показал, что источником развития нанотехнологии не всегда выступает фундаментальная наука, ей могут предшествовать открытия в прикладной области знания или предшествующая технология, как это было, например, с открытием квантового эффекта Холла. Кроме того, источником развития нанотехнологии могут выступать различные методы получения и использования наночастиц и нановещества в прикладных областях нанохимии. Так, традиционные методы взрыва, плазмохимии и конденсации в реакциях, проводимых в газовой среде и растворах электролитов, используемые ранее для получения частиц металлов и других веществ, таких как гели, золи, кластеры, коллоидные металлы и ультрадисперсные частицы, привели к реализации их необычных свойств в нанотехнологии еще в конце XX в. А в начале XXI в. развитие инструментальных методов атомной и электронной спектроскопии привело к новым техническим возможностям создания тончайших поверхностных пленок, супрамолекул и нанотрубок [12]. В связи с этим нельзя однозначно трактовать причинно-следственную связь между наукой и технологией и делать вывод о том, что технологией движет только фундаментальная наука. Поэтому линейная модель не совсем адекватна действительности. Более убедительной представляется вторая модель – когерентная. Во-первых, это – достаточно разнообразная модель, в ней есть самостоятельные фундаментальные и прикладные исследования, и взаимодействие между ними. Во-вторых, в рамках этой модели можно отстаивать тезис о том, что основой прикладных исследований и нанотехнологий является фундаментальная наука, поскольку объяснять и предсказывать можно только на основе теоретических представлений. Фундаментальная наука может в явном (через законы и теоретические положения) и неявном виде (через технологические разработки) входить в прикладные исследования [13]. Вопрос только в том, по каким механизмам идет это взаимодействие? Пока философия техники не может ответить на поставленный вопрос, для этого нужны специальные эпистемологические исследования. Третья модель – смешанная, не различающая фундаментальные и прикладные исследования. Можно ли говорить о симбиозе науки и технологии, какие есть для этого аргументы? Смещение различий между фундаментальными и прикладными исследованиями может происходить, например, вследствие того, что на одном и том же оборудовании проводятся как те, так и другие. С помощью атомно-силового микроскопа можно не только наблюдать, но и манипулировать микрообъектами. Когда происходит преобразование объекта с целью получения новых материалов, то говорят о прикладных исследованиях, но

когда исследование направлено на выявление новых свойств объекта, построения моделей его поведения, или новых методов исследования и доказательства, то в данном случае имеют место фундаментальные исследования. Разделение между ними соответствует различию по цели познавательной деятельности человека. Кроме того, весь предыдущий анализ показывает, что нет никакого слияния фундаментальных и прикладных исследований – они остаются самостоятельными при взаимоотношениях. Правильнее было бы говорить о том, что растет доля прикладных исследований в нанохимии и это является констатацией общемировой тенденции. Существует еще один аспект этих взаимоотношений. Утверждается, что поскольку все покупается и продается, то наука становится товаром и должна приносить прибыль. Но фундаментальная наука не может быть товаром, в лучшем случае отдача от фундаментальных исследований бывает через несколько лет, по мере освоения технологий. Примером могут служить фундаментальные разработки Ж. Алферова в области гетероструктур, начатые еще в 70 – е годы XX в., а прибыль от продажи приводов CD - DVD получают только сейчас. Товаром становятся прикладные исследования, поскольку они связаны с различными технологическими разработками, они больше патентуются и засекречиваются, особенно если они связаны с ключевыми стратегическими направлениями развития экономики и обороноспособности страны. Конечно, никто не может предсказать, какие из фундаментальных исследований приведут к новой технологической революции, но фундаментальная наука работает на опережение, всегда рождает новые теоретические представления и новые идеи, которые могут востребоваться через много лет. Сегодня ясно одно – фундаментальные исследования сохраняют себя как источник общих представлений и моделей для прикладных, которые без них превратятся в совокупность технологических сведений. Заключение Философский анализ такой трансдисциплинарной области знания, как нанохимия, привел к выявлению в ней методологических особенностей фундаментальных и прикладных исследований, и раскрыл их взаимосвязь. Дальнейшее исследование возможных реализаций концепций соотношения фундаментальных и прикладных исследований, выработанных в философии техники, применительно к нанохимии и нанотехнологии, показал, что в этих областях знания реализуется координационная модель, а основой, но не источником прикладных исследований выступает фундаментальная наука.