



- регистрация образцов;
- назначение анализов и списков анализов на образец;
- ввод результатов анализов.

Список действий, которые может выполнять пользователь системы с ролью Инженер:

– все действия, которые может выполнять, пользователь с ролью Лаборант;

- подтверждение/отклонение/авторизация результатов анализов;
- работа с модулем M0094 Quality Analyst Interface;
- формирование отчетов.

Список действий, которые может выполнять пользователь системы с ролью Главный инженер:

- все действия.

Для каждой роли пользователя был создан свой графический интерфейс, представляющий собой страницу в формате HTML (HyperText Markup Language – язык разметки гипертекста). Для отображения данной страницы программный комплекс LabWare LIMS использует стандартный браузер операционной системы Windows – Internet Explorer. При создании интерфейса были использованы технологии HTML и CSS (Cascading Style Sheets – каскадные таблицы стилей), а также язык программирования JavaScript.

Помимо описанных выше функций в разработанной лабораторной информационной системе могут быть реализованы и другие необходимые, так как LabWare LIMS имеет модульную структуру и её функциональные возможности зависят от количества установленных модулей.

Библиографические ссылки

1. ГОСТ 15467-79. Управление качеством продукции. Основные понятия. Термины и определения. [Электронный ресурс]. – Режим доступа: <http://www.complexdoc.ru/scan/ГОСТ%2015467-79> (дата обращения: 24.04.2011).

УДК 548.55-522:004.942-021

Г.Ю. Аверчук, Э.М. Кольцова

Российский химико-технологический университет им. Д.И. Менделеева, Москва, Россия

МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССА ХИМИЧЕСКОГО ОСАЖДЕНИЯ ИЗ ГАЗОВОЙ ФАЗЫ МОНОКРИСТАЛЛИЧЕСКОЙ АЛМАЗНОЙ ПЛЁНКИ

An algorithm developed for modeling the chemical vapor deposition of diamond films, by a cellular automaton, using three-dimensional array with a shift of layers like the crystal lattice of



diamond. The algorithm describes the process in 7 steps and allows us to trace the growth and morphology of the simulated film.

Разработан алгоритм моделирования процесса осаждения алмазной плёнки из газовой фазы, методом клеточного автомата, использующим трёхмерный массив со сдвигом слоёв подобно кристаллической решётке алмаза. Алгоритм описывает процесс в 7 этапов и позволяет проследить рост и морфологию моделируемой плёнки.

1. Введение

В последнее время, алмазные плёнки стали находить много коммерческих применений в электронике, режущих инструментах, медицинских покрытиях, и оптике [1]. Химическое осаждение из газовой фазы (CVD) алмазных плёнок, уже 20 лет используется исследователями для выращивания алмазов и алмазных покрытий. За это время было проведено множество экспериментов, но механизмы происходящие при осаждении алмаза из газовой фазы, до сих пор остаются спорными. Определение механизмов осложняется тем, что провести измерения концентраций реагентов на растущей поверхности, во время эксперимента – является не простой задачей, а невозможность определения газовой-поверхностных процессов, подтолкнула многие научные группы к теоретическим методам исследования данного процесса [2].

Процесс осуществляется в специальных реакторах, позволяющих получить высокотемпературный шар плазмы из смеси газов, находящийся над подложкой, с которой взаимодействуют активные газообразные виды, получаемые из этой плазмы. Температура над подложкой – порядка 1000 °С. Смесь исходных газов в основном состоит из водорода, лишь с небольшим добавлением углерод содержащего газа (чаще всего метана), около 1%CH₄/H₂. При увеличении содержания метана, в исходной газовой смеси, плёнки получают более шероховатыми, с большим количеством графитного углерода. Иногда в газовую смесь добавляют и другие газы, такие как N₂, O₂, Ar, что позволяет качественно изменить морфологию получаемой алмазной плёнки.

Материал подложки может быть различным, например: алмаз, кремний, оксид кремния, стекла, алюминий, оксид алюминия, магний, вольфрам и т. п. Неалмазную поверхность предварительно подготавливают, натиранием микроскопическими алмазами, с целью снабдить поверхность микроразростками алмаза, благодаря которым будет осуществляться дальнейший рост плёнки. В случае использования неалмазных поверхностей, плёнки получают поликристаллическими и часто с большим количеством дефектов. При осаждении на алмазную подложку, плёнки также могут получаться поликристаллическими, и это зависит от условий протекания процесса осаждения (тип реактора, состав исходной газовой смеси, температура плазмы, температура подложки, давление в реакторе и пр.).

Теоретическое исследование процесса осуществляется посредством квантово-химических вычислений возможных механизмов, с определением энергетических барьеров и констант скоростей реакций. Результаты расчётов подвергаются дополнительному анализу, для выявления возможных последовательностей газовой-поверхностных реакций. Полученные пути реак-



ций являются базисом для проведения вычислительного эксперимента, который чаще всего осуществляется с использованием метода кинетического моделирования Монте Карло (КМС) [2-4]. Получающиеся модели не совсем точно описывают эксперимент, поскольку не всегда учитывают все факторы, и как следствие не могут достаточно точно предсказать наблюдаемые скорости и состав растущих алмазных плёнок.

Настоящая работа использует метод клеточного автомата [5]. Используемый метод клеточного автомата позволит описать процессы на поверхности дифференциальными уравнениями диффузии и теплообмена, а также учесть локальную морфологию получаемой плёнки, влияющую на вероятность возможных процессов, происходящих на поверхности растущего кристалла. Получаемая модель является достаточно сложной, и требует большого количества времени вычисления, поэтому её целесообразнее рассчитывать на больших параллельных вычислительных системах.

2. Теоретическое описание процессов

Изначально, поверхность растущего кристалла алмаза насыщается атомами водорода, находящемся в избытке, в газовой фазе. Водород способствует образованию на поверхности, так называемых димеров, на которые, после активации водородом, могут адсорбироваться углеводородные радикалы газовой фазы. Главным углеводородным видом, способствующим росту алмазной плёнки, считает метил радикал (CH_3) [6]. Вышесказанное описывают три следующие реакции:



где C_d – атом углерода на поверхности, C_d^* – активированный атом углерода на поверхности, C_dH – дезактивированный атом на поверхности, C_xH_y – углеводород газовой фазы [2].

Осаждаемый CH_3 присоединяется к димеру, после чего при удачном удалении (посредством реакции с водородом газовой фазы или миграции к соседнему активному сайту) одного из атомов водорода, адсорбированный метил радикал преобразовывается в CH_2 мостовую группу, установленную на двух атомах С изначального димера. При активации мостовой группы водородом газовой фазы, и при наличии других доступных, активированных димеров, вокруг рассматриваемого димера, мостовая группа может мигрировать на эти димеры. Миграцией мостовых групп объясняется получение гладких плёнок, наблюдаемых в эксперименте [7]. Мостовая группа мигрирует по поверхности до тех пор, пока не встретит другую мостовую группу, после чего они объединятся и образуют димер на новом уровне, либо пока не найдёт уже образованный выступ на поверхности и таким образом встроится в алмазную решётку, в углу этого выступа, либо пока не будет стравлена с поверхности, посредством реакции травления водородом газовой фазы или реакцией β -разрыва, препятствующей образованию длинных полимер-



ных углеводородных цепей на поверхности, способствующих образованию графитного углерода. Димеры, образуемые на новом уровне – не стабильны, и могут быть стравлены с поверхности, после преобразования в sp^2 мостовую группу, с последующей реакцией β -разрыва. Для того, чтобы димер был устойчивым, необходимо образование димерных рядов.

Приведённое описание не содержит процессов образования дефектов на поверхности, а следовательно образование и рост новых кристаллитов, в поликристаллической алмазной плёнке, поскольку на данном этапе исследования, моделируется рост монокристаллической плёнки.

3. Моделирование

Моделирование роста алмазной плёнки использует метод клеточного автомата. Объём кристалла описывается трёхмерной матрицей на уровне атомов, с необходимым смещением атомных слоёв для описания кристаллической решётки алмаза. Характер сдвига атомных слоёв изображён на рисунке 1. Каждый атом углерода является ячейкой автомата, и представляет собой структуру, содержащую две переменные содержащие количество активных связей и количество атомов водорода, а также состояние – входит ли атом в состав димера или нет. Димер считается критически важной структурой, для роста алмазной плёнки, поскольку именно димер, после активации, может принять на себя углеводород газовой фазы. В зависимости от координаты Z , димеры имеют различную ориентацию (по X или по Y), что отражают различные цвета на рисунке 1б. Границы по X и Y зациклены, образуя так называемый тор.

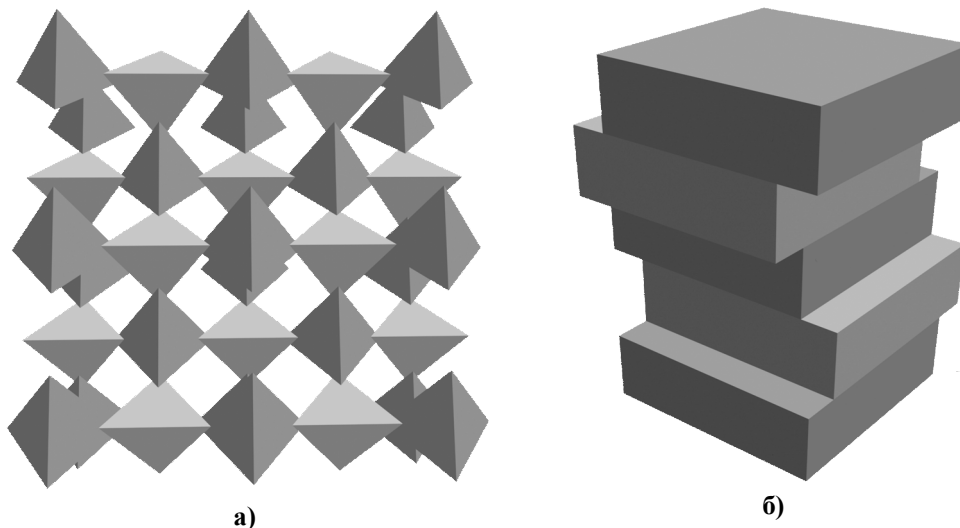


Рис. 1. Структура алмазной решётки (а); сдвиг слоёв в массиве, описывающем структуру алмазной решётки (б); верхние уровни каждого из рисунков, соответствуют нижним.

Процесс описывается в 7 этапов:

1. *Образование димеров.* Если 2 соседние в одну сторону (по X или Y , в зависимости от Z) ячейки не входят в состав димеров и имеют активные связи – они образуют димер;



6. *Осаждение углерода.* Процесс присоединения CН_3 к активному димеру, и его дальнейшее преобразование в мостовую группу, описывается в один этап.

Таким образом, если димер активен, то на него может установиться новая мостовая группа, а димер при этом дезактивируется;

7. *Миграция мостовой группы.* После активации мостовой группы, и при наличии димеров или двух атомов углерода с активными связями, вокруг того димера, на котором установлена мостовая группа, эта мостовая группа может мигрировать на соседние димеры или атомы с активными связями.

На каждом этапе, состояния изменяемых ячеек рассчитывается исходя из кинетических констант, взятых из литературы. Сначала определяется число атомов, которые могут быть преобразованы на данном этапе, затем происходит вычисление количества изменяемых атомов, и из множества рассматриваемых атомов, случайным образом выбираются те, с которыми происходит изменение.

Результаты вычислений (см. рис. 2), в настоящий момент, отображаются в виде строк, содержащих виды структур, наполняющие ячейки автомата. Ниже представлены результаты вычислений с размерами массивов $7 \times 14 \times 3$. Шаг по времени 3×10^{-5} с.

Представленные результаты, отражают случайный характер заполнения поверхности новыми углеводородными видами, с их дальнейшей активацией. Помимо этого, ясно видно, что с течением времени нижние слои постепенно принимают вид алмаза (см. рис. 2, шаг по времени 100, левый слой).

4. Выводы

В результате выполнения работы были изучены механизмы, протекающие на поверхности растущей алмазной плёнки. Механизмы были описаны алгоритмами с использованием метода клеточного автомата. Алгоритмы реализованы на языке программирования Ruby и позволяют проследить рост и морфологию моделируемой алмазной плёнки.

Работа поддерживалась грантом РФФИ (№11-08-01072-а) и в рамках государственного контракта с Министерством образования и науки РФ (02.740.11.0475).

Библиографические ссылки

1. P. W. May, Science 319, 1490 (2008).
2. P. W. May/ P. W. May, N. L. Allan, M. N. R. Ashfold, J. C. Richley and Yu. A. Mankelevich.//J. Appl. Phys. 108, 014905 (2010).
3. A. Netto / A. Netto and M. Frenklach// Diamond Relat. Mater. 14, 1630 (2005).
4. C. Andrieu/ C. Andrieu, N. Freitas, A. Douce and M. I. Jordan. Machine Learning, 50, 5 (2003).
5. Лобанов, А.И. / А.И. Лобанов. Компьютерные исследования и Моделирование, 2010. Т.2. №3. С. 273–293.



6. S. Skokov/ S. Skokov, B. Weiner, and M. Frenklach.// J. Phys. Chem. 98, 7073 (1994).
7. M. Frenklach/ M. Frenklach and S. Skokov// J. Phys. Chem. B 101, 3025 (1997).

УДК 66.011

П.А. Калашников, Э.М. Кольцова, И.С. Кряжевских, И.В. Сергеев, М.Г. Игонина

Российский химико-технологический университет им. Д.И. Менделеева, Москва, Россия

МОДЕЛИРОВАНИЕ СОРБЦИИ АНТИТРОМБИНА III НА АФФИННОМ ХРОМАТОГРАФИЧЕСКОМ СОРБЕНТЕ МОДИФИЦИРОВАННОМ ГЕПАРИНОМ

Research of antithrombin III on heparin-modified chromatography media is considered. Adsorbed antithrombin III fluctuations are discovered during batch method. Two mathematical models were developed which fit experimental data with fine accuracy. Also process kinetic parameters were calculated: constant of adsorption and liquid film mass transfer coefficient on media particle surface.

Рассматривается исследование сорбции антитромбина III на хроматографическом сорбенте, модифицированном гепарином. При batch-методе обнаружены колебания концентрации антитромбина III на сорбенте. Разработаны две математические модели, с достаточной точностью совпадающих с экспериментальными данными. Также рассчитаны такие кинетические параметры процесса, как константа сорбции и коэффициент массопереноса белка через пленку жидкости на поверхности частиц сорбента.

Человеческая плазма представляет собой уникальный природный источник белков, обладающих терапевтическими свойствами. Из более чем трехсот белков, входящих в состав плазмы, к настоящему времени выделено и исследовано около двадцати. Столь небольшое число объясняется низкой концентрацией в плазме и необходимостью разработки воспроизводимых методик выделения. Промышленно производятся препараты следующих белков: альбумин, иммуноглобулин, факторы свертывания VIII и IX. Концентрации альбумина и иммуноглобулина в плазме относительно высоки (десятки грамм в литре), что позволяет выделять эти белки методом спиртового осаждения. Для выделения других белков, в том числе факторов свертывания, применяется хроматографический метод, основанный на специфической сорбции целевого продукта на носителе при определенных условиях с последующей десорбцией продукта. Хроматографический сорбент представляет собой сферические гранулы, поверхность которых химически модифицирована тем или иным образом для определенного типа взаимодействия. Одним из компонентов донорской плазмы является белок антитром-