

БІБЛІОТЕКА ЗОБРАЖЕННЯ АТОМАРНОГО РІВНЯ НАЙБІЛЬШ ВАЖЛИВИХ КЛАСІВ ХІМІЧНИХ РЕЧОВИН

В. А. Лук'янова, канд. пед. наук, доцент, **П. А. Козуб**, канд. техн. наук, доцент,
С. М. Козуб, канд. техн. наук, доцент

*Харківський національний університет радіоелектроніки
61002, Харків, пр. Науки, 14
e-mail: viktoriia.lukianova@nure.ua*

Створення нових матеріалів є основою всієї сучасної технології, що є майже неможливим без сучасних методів моделювання їх структури та властивостей. Так, за допомогою теоретичних розрахунків було передбачено такі вуглецеві матеріали як фулерени, нанотрубки, графен, відкрито нові напівпровідникові матеріали, запропоновано нові наноматеріали, напівпровідники та ін. Але у той же час таке моделювання є дуже ускладнено математичними розрахунками, що сповільнює узагальнення отриманих результатів та розповсюдження отриманих закономірностей на інші матеріали.

Використання зображень речовин на атомарному рівні дозволить зв'язати реальні фізико-хімічні об'єкти з моделями, які використовуються для розрахунків, що вкрай важливо для науковців та технологів та викладачів [1, 2].

Зібрані у бібліотеці зображення реальних хімічних об'єктів відображають структуру, розміри та властивості основних класів хімічних сполук у конденсованому стані. Бібліотека відображає основні (принципові) структури речовини та є простою у використанні.

Створена бібліотека може використовуватись для наукових досліджень та у навчанні в якості прикладів існуючих атомарних структур, як додатковий матеріал лекцій з загальної хімії, матеріалознавства, фізичної хімії, для практичних розрахунків геометрії зв'язків у органічних молекулах (одинарні, подвійні, потрійні, водневі зв'язки) та кристалах, вивчення та ілюстрації впливу різних елементів на геометрію зв'язків у органічних сполуках, може бути використана для створення фізичних моделей атомарної структури речовини при створенні нових матеріалів.

При розробці бібліотеки запропонована система класифікації зображень, набір ключових слів для пошуку зображень, методика первинної обробки зображень, та набір додаткових даних (атрибутів) до кожного зображення. Основною відмінністю запропонованого набору зображень є системність, надійність та відображення всіх типів атомних структур, наявність методики пошуку нових зображень та їх підготовки.

Література

1. Single Molecule Scanning Tunneling Microscopy. Erin V. Iski, Mahnaz El-Kouedi, and E. Charles H. Sykes. Encyclopedia of Nanoscience and Nanotechnology 2nd Edition. [Invited Chapter] In press 2010. 3438.
2. Shen, Q., Gao, H.-Y., & Fuchs, H. (2017). Frontiers of on-surface synthesis: From principles to applications. Nano Today, 13, 77–96. doi:10.1016/j.nantod.2017.02.007