



Конкурс для школьников «Гениальные мысли» Автореферат проекта победителя I степени

Название работы – Разработка и реализация алгоритма определения удельной площади поверхности твёрдого тела исходя из его изображения.

Автор – Зайцев Михаил Геннадьевич (11 класс, Муниципальный бюджетный лицей №32 г. Орла).

Руководитель – Грибанов Евгений Николаевич, доцент кафедры химии ОГУ имени И.С. Тургенева.

Основная идея работы, цели, задачи

Цель: разработка компьютерной программы для определения площади удельной поверхности твердого тела по изображению его поверхности, полученного методами сканирующей зондовой микроскопии.

Задачи:

- получить снимки поверхности твердых тел тестовых образцов с помощью СЗМ;
- составить алгоритм программы, определяющую удельную площадь поверхности;
- написать программу на языке Pascal;
- сравнить результат работы программы (удельную площадь поверхности) и экспериментальных данных, полученных изучением сорбции метиленового синего.

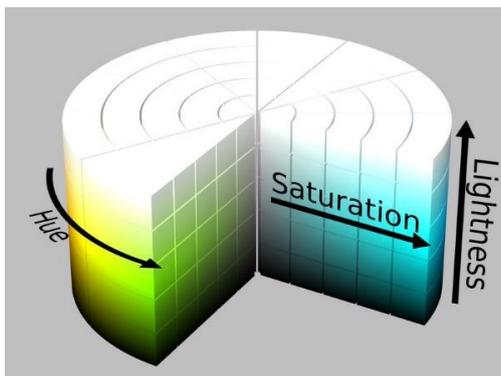
Дополнительные задачи:

- составить алгоритм, отличный от предыдущего;
- написать аналогичную программу с новым алгоритмом решения поставленной задачи;
- сравнить результаты работы двух алгоритмов и программ.

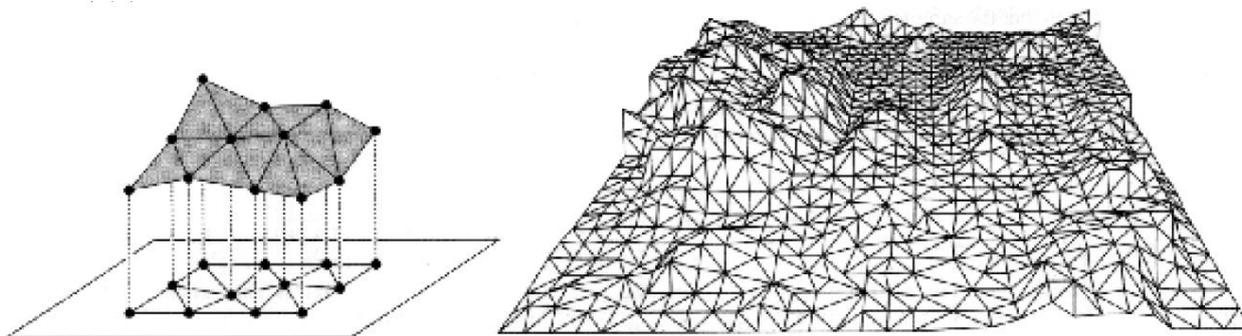
Основные результаты

Алгоритм программы №1 (Nano):

Для инициализации изображения в программе используется формат .bmp (BitMap). С использованием классовых библиотек работы с BitMap'ом написано считывание параметров изображения (длина, ширина, глубина снимка) и перегонка его в матрицу, значения в которой равнялись параметру «Lightness» каждого пикселя из формата hsl.



Предложен метод прохождения по данной матрице с разбиением на треугольники (триангуляцией), считая от самой высокой точки. Далее, с использованием теоремы Пифагора и формулы Герона для определения площади треугольника. Площади всех треугольников суммировались, давая в итоге площадь слоя.

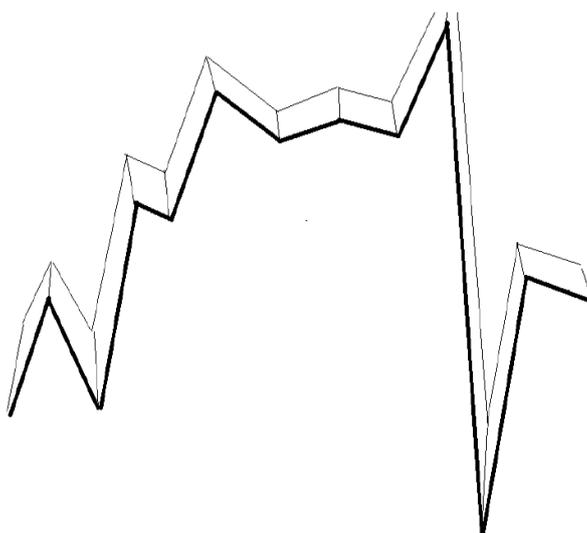


Определение удельной площади поверхности проводили по следующему алгоритму:

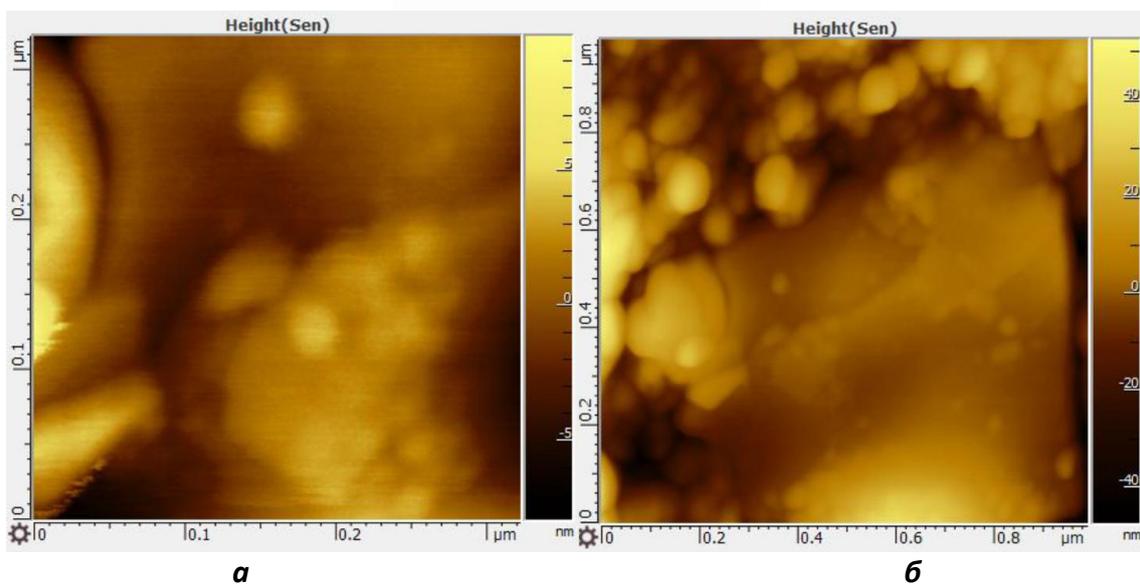
- А) найти удельную площадь поверхности слоя на изображении;
- Б) найти объём параллелепипеда, в котором находится данный слой;
- В) исходя из плотности материала и объема параллелепипеда найти удельную площадь поверхности твердого тела.

Алгоритм программы №2 (Nano 2.0):

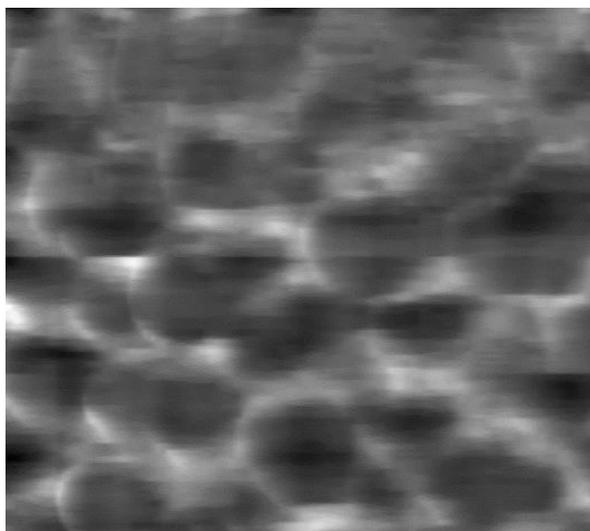
Площадь слоя находится путём представления одного ряда значений матрицы в виде ленты с заданной шириной (учитывая масштабы и количество точек). Т.е. если смотреть на слой в профиль, то мы увидим ближайшую к нам линию границы слоя. Найдя длину линии с помощью теоремы Пифагора, применённой многократно, и умножив её на ширину, найдём площадь ленты. Суммируя площади всех лент, найдём площадь слоя.



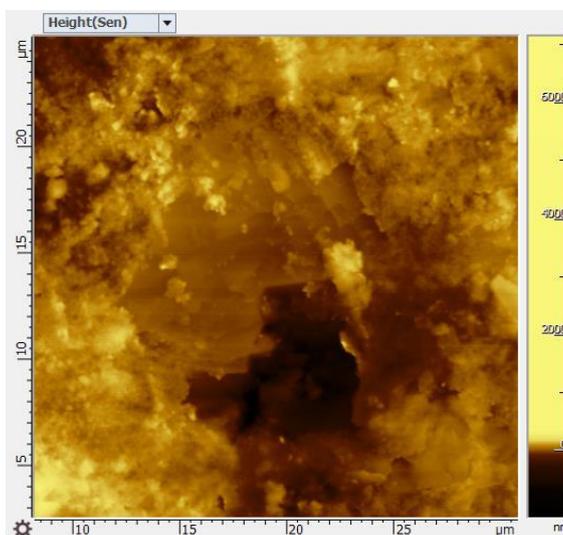
Ниже приведены полученные экспериментально АСМ-изображения поверхности тестовых образцов и определена их удельная площадь с помощью описанного выше алгоритма.



*Рис.1. АСМ-изображение поверхности тестового образца
а) размеры скана 320x320x18 нм; б) размер скана 1000x1000x100 нм*



*Рис.2. АСМ-изображение поверхности тестового образца №2 размеры скана 1200x1200x32
нм*



*Рис.3. АСМ-изображение поверхности тестового образца №3,
размеры скана 25x31x8.3 мкм*

В качестве примера ниже приведены полученные результаты для тестового образца №1:

алгоритм 1:

Площадь слоя (нм²): 103667.342313551
Объем параллелепипеда (нм³): 1843200
Удельная масса(г): 3.6864E-15
Коэффициент: 271267361111111
Удельная площадь(м²/г): 28.1215663827993

алгоритм 2:

Площадь слоя (нм²): 102913.053434359
Объем параллелепипеда (нм³): 1843200
Удельная масса(г): 3.6864E-15
Коэффициент: 271267361111111
Удельная площадь(м²/г): 27.9169524290255

Выводы, заключение, перспективы

- Получаемые с помощью разработанной программы анализа СЗМ-изображений данные адекватно согласуются с результатами определения удельной площади поверхности методом сорбции метиленового синего.
- Оба алгоритма работы показывают сходные результаты.
- В процессе разработки выяснилась необходимость учета алгоритма сжатия исходного изображения и его цветовая палитра для корректной работы программы.
- Перспектива развития – интеграция программы и работы зондового микроскопа для нивелирования погрешности, реализация новых алгоритмов по обработке СЗМ-изображений.

Список цитированных источников

1. Зефилов Н. С. Химическая Энциклопедия.— М.: Большая Российская энциклопедия, 1995. Т. 4. С. 596—597.
2. Пул Ч. – мл., Оуэнс Ф. Нанотехнологии/ М.: Техносфера, 2009. – 336 с.
3. Сканирующий зондовый микроскоп NanoEduktor. Руководство пользователя. «НТ-МДТ». 2006. – 135 с.
4. Суздаев И.П. Нанотехнология: физико-химия нанокластеров, наноструктур и наноматериалов М.: КомКнига, 2006. — 592 с.
5. Д. Кнут. Искусство программирования. М.:Вильямс. 2015. 720 с.
6. Определение удельной поверхности пористых материалов методами БЭТ и Арановича : лабораторная работа / сост.: С. И. Ткаченко, А. Ю. Хоменко. – М.: МФТИ, 2014. – 47 с.