

ПРОГРАМНА СИСТЕМА ДЛЯ ВІЗУАЛІЗАЦІЇ МОЛЕКУЛЯРНОЇ ХІМІЇ

Люліна К. П.

Науковий керівник – ст. викл. Новіков Ю.С.
Харківський національний університет радіоелектроніки
(61166, Харків, пр. Науки, 14, каф. програмної інженерії,
тел. (057) 702-14-46)

Nowadays the problem of learning Chemistry and its main regularities among students has been risen due to the misunderstanding how the atoms are structured and how they react. The visualization of the chemical reaction can help to understand what happens with the atoms' structure and what makes them react.

Фактично метою роботи є проектування та розробка програмної системи, яка дозволяє візуалізувати базові закономірності в неорганічній хімії. Об'єктом дослідження є закономірності періодичної системи Менделєєва, особливості її будови, будова атома, а також моделювання взаємодії між атомами на енергетичному рівні.

Метою системи є спрощення розуміння законів неорганічної хімії. Цільовою аудиторією програмного продукту є школярі та викладачі хімії.

Програмна система представляє з себе десктопний UWP-додаток, орієнтований на Windows-платформу. Мінімальною підтримуваною версією Windows є April 2018 Update (1803), цільовою - Windows 10 October 2018 Update (1809). Система була написана з використанням мови програмування C# та СКБД Microsoft SQL Server 2016.

Програмна система реалізована з використанням такого шаблону проектування архітектури додатків MVVM. MVVM-патерн дозволяє розділити візуальну частину додатку від логіки (див. рис. 1).

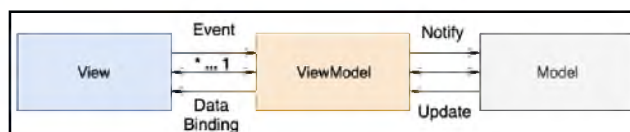


Рисунок 1 – Структура шаблону проектування MVVM

Реалізована програмна система включає в себе три основні функціональні одиниці:

- побудова та відображення таблиці Менделєєва;
- візуалізація будови атома та руху його електронів навколо ядра;
- візуалізація будови молекул та неорганічних хімічних речовин, а також принцип взаємодії неорганічних речовин.

Атом – це електронейтральна неподільна частинка, що складається з ядра (протонів та нейтронів) та електронів, що рухаються навколо[1].

Електрони рухаються на різних енергетичних рівнях, що можуть включати в себе такі електронні орбіталі як s, p, d, f. Електронні або атомні орбіталі є областями простору з однаковою густиною заряду, вони розрізняються за формою (див. рис. 2), а також за максимальною кількістю електронів[1].

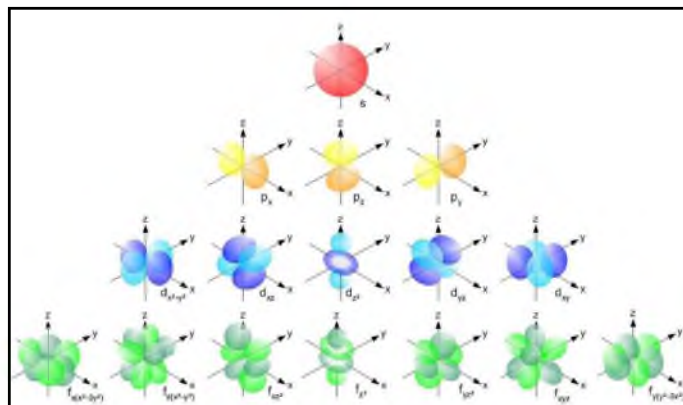


Рисунок 2 – Атомні орбіталі (s, p, d, f – згори вниз)

Таблиця Менделєєва дозволяє структурувати хімічні елементи за кількістю електронів у атомі, за порядком розміщення електронів на орбіталях та кількістю вільних електронів на останньому енергетичному рівні [2].

Для генерації таблиці Менделєєва та моделювання структури атома було використано правило Клечковського. Правило Клечковського дозволяє енергетично описати розподіл орбіталей атомів. Для моделювання структури атома достатньо знати заряд його ядра, у той час як для таблиці Менделєєва – кількість енергетичних рівнів (наразі виділяють 7)[2].

Для моделювання руху електронів було використано метод Монте-Карло, так як можливо визначити лише їх ймовірне розташування в рамках електронної орбіталі та не доки не існує закону, що міг би описати траєкторію руху електронів навколо ядра.

Для моделювання взаємодії між атомами та молекулами було взято за основу основні правила обміну електронами в неорганічній хімії.

Таким чином, у результаті роботи була реалізована програмна система, що є повноцінним інструментом для візуалізації основних законів неорганічної хімії.

Список використаної літератури:

1. Мануйлов А. В. Электронное строение атома. [Електронний ресурс] / А. В. Мануйлов, В. И. Родионов – Режим доступу до ресурсу: <http://www.hemi.nsu.ru/ucheb125.htm>.
2. Правила заполнения электронами атомных орбиталей [Електронний ресурс] – Режим доступу до ресурсу: <https://studfile.net/preview/604454/page:3/>.