

А. Н. Чирич

КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ПОТЕНЦИАЛЬНЫХ КРИВЫХ ДВУХАТОМНЫХ МОЛЕКУЛ

В работе представлены результаты разработки приложения для компьютерного моделирования потенциальных кривых двухатомных молекул по дисциплине специализации «Молекулярная спектроскопия». С использованием программной среды Borland Delphi составлена программа для расчета и графической иллюстрации потенциальных кривых основного и возбужденных электронных состояний различных двухатомных молекул.

Современный период развития цивилизованного общества характеризуется процессом информатизации.

Одним из приоритетных направлений процесса информатизации современного общества является **информатизация образования** – процесс обеспечения сферы образования методологией и практикой разработки и оптимального использования современных или, как их принято называть, новых информационных технологий, ориентированных на реализацию психолого-педагогических целей обучения и воспитания.

Одной из форм применения информационных технологий в образовательном процессе являются информационные обучающие системы. Одной из разновидностей информационных обучающих систем являются системы виртуальной реальности, а основной формой применения таких систем на занятиях становится выполнение виртуальных лабораторных работ по различным дисциплинам.

Виртуальный лабораторный практикум представляет собой один из прогрессивно развивающихся видов проведения лабораторных занятий, суть которого заключается в замене реального лабораторного исследования на математическое моделирование изучаемых физических процессов.

Можно выделить следующие преимущества лабораторных работ, смоделированных в компьютерных комплексах [1]:

1. используя существующие технологии можно моделировать реальные процессы достаточно достоверно;

2. посредством программных моделей можно имитировать работу с объектами, процессами и оборудованием, применение которых в вузах проблематично;

3. создаются условия для повышения в разумных пределах интенсивности обучения, для выполнения за время проведения лабораторной работы большего числа экспериментов;

4. создается возможность решить проблему загрузки лабораторного оборудования – программную модель можно выполнить в любое время, в любом месте, на любом числе рабочих мест; что позволяет проводить лабораторные занятия фронтально, когда каждый студент выполняет индивидуальное задание;

5. стоимость разработки и эксплуатации виртуальных лабораторных практикумов обычно существенно ниже по сравнению с реальными лабораторными практикумами.

Компьютерное моделирование является одним из эффективных методов изучения физических систем. Часто компьютерные модели проще и удобнее исследовать, их использование позволяет проводить вычислительные эксперименты, реальная постановка которых затруднена

или может дать непредсказуемый результат. Логичность и формализм компьютерных моделей позволяют выявить основные факторы, определяющие свойства изучаемых объектов, исследовать отклик физической системы на изменение ее параметров и начальных условий [2].

Одной из систем, которую можно использовать для моделирования физических систем и явлений, является интегрированная среда разработки Borland Delphi. Delphi – это объектно-ориентированная среда для визуального проектирования Windows приложений с развитыми механизмами повторного использования программного кода. Основным конкурентом Delphi является среда разработки Microsoft Visual C++, имеющая свои преимущества и недостатки, однако являющаяся более популярной, в основном, потому что разработана именно фирмой Microsoft. Существенной чертой Delphi является компонентная модель разработки программных продуктов. Суть модели заключается в поддержке системой постоянно расширяемого набора объектных компонентов, из которых и строится программа. Компоненты в Delphi просты для использования и развития, как результат сокрытия значительной части той структуры программы, которая близка к взаимодействию с операционной системой. Таким образом, для создания в Delphi несложных программных продуктов совершенно не обязательно понимать внутреннюю структуру Windows-приложения, получаемого после разработки в Delphi. Достаточно просто уметь работать с некоторыми компонентами, поставляемыми вместе со средой разработчика. Этому отчасти способствует удобный интерфейс среды разработчика (рисунок 1), не перегруженный излишними вопросами к разработчику [3].

В рамках данной работы реализована возможность построения потенциальных кривых для основного и возбужденного электронных состояний двухатомной молекулы. В качестве математической основы использована формула, описывающая функцию Морзе:

$$U(r) = D_e(1 - e^{-\alpha(r-r_e)})^2, \text{ где } \alpha = \omega_e \left(\frac{2\pi^2 \mu c}{D_e h} \right)^{1/2}.$$

В работе предусмотрен вывод таблицы молекулярных постоянных, на основании которой

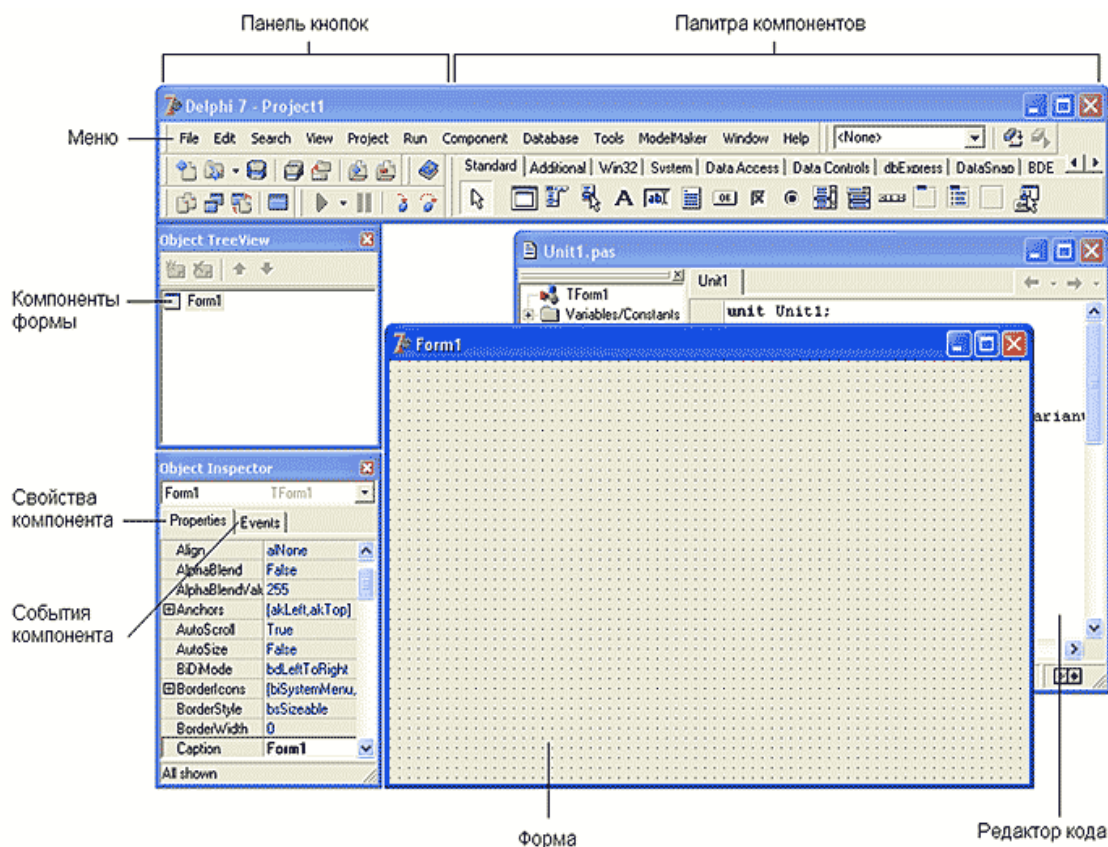


Рисунок 1 – Внешний вид интерфейса среды разработки Delphi

возможен выбор молекулы для расчета и построения потенциальных кривых, которые выводятся в виде графиков зависимости электронной энергии молекулы от ее межъядерного расстояния. В качестве примера взята молекула АЮ, но также возможно и дополнение списка заранее объявленных молекулярных соединений, и ручной ввод значений констант.

Разработанная программа имеет простой и интуитивно понятный интерфейс (рисунок 2) и ее использование требует минимальных навыков работы на персональном компьютере. Для построения графика достаточно выбрать нужное химическое соединение из выпадающего списка либо изменить требуемые параметры в таблице и затем нажать кнопку «Построить». При необходимости построения кривой для другой молекулы действия аналогичные. Предусмотрена также возможность вывода графика на печать нажатием кнопки «Печать графика», после чего его можно прикрепить к отчету о выполненной работе.

По виду кривых можно судить о таких характеристиках молекул как параметр ангармоничности и энергия диссоциации. Также из сравнения потенциальных кривых разных молекул можно сделать выводы о физических и химических свойствах этих соединений.

Построение потенциальных кривых является отправной точкой в решении более широкой задачи: имея потенциальные кривые для основного и возбужденного состояний молекул, представляется возможным определение переходов между энергетическими уровнями и построение вращательно-колебательных спектров молекул.

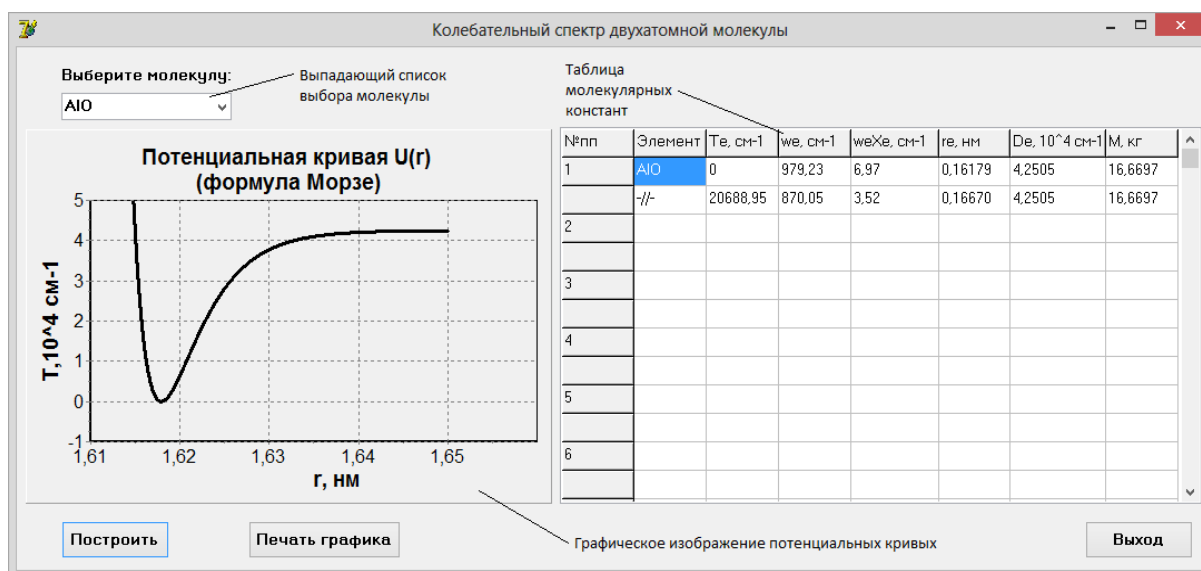


Рисунок 2 – Внешний вид интерфейса виртуальной лабораторной работы

Следует отметить, что проектирование и воплощение данной лабораторной работы не требуют глубоких знаний принципов работы операционной системы, взаимодействия ее компонентов и внутреннего устройства. Требуется лишь умение составлять алгоритмы (математические и поведения программы). Все это реализуется в контексте языка программирования Object Pascal из Delphi.

Использование данной виртуальной работы позволит студентам наглядно увидеть спектры молекулярных соединений, которые не представляется возможным зарегистрировать в условиях существующей лаборатории в силу большой стоимости либо недоступности исследуемых веществ или отсутствия регистрирующей аппаратуры нужного разрешения.

Литература

1 Кочковская, С. С. Реализация лабораторного практикума с использованием информационно-коммуникационных технологий при подготовке бакалавров в области

электроэнергетики и электротехники: материалы конференции Университетский комплекс
как региональный центр образования, науки и культуры Оренбург, 2013. – С. 1862 –
1867.

2 Сухарев, М. В. Основы Delphi. Профессиональный подход – СПб. : Наука и Техника,
2004. — 600 с. ISBN 5 94387 129 2

3 Майер, Р. В. Основы компьютерного моделирования: Учебное пособие. – Глазов:
ГГПИ, 2005. – 25 с.