



НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ
УНИВЕРСИТЕТ

Факультет компьютерных наук
Департамент программной инженерии
Курсовая работа
Программа активации таблицы Д. И. Менделеева

Выполнил студент группы БПИ-173

Кожакин Кирилл Геннадьевич

Научный руководитель:

Профессор департамента программной
инженерии, д. т. н.

Подбельский Вадим Валериевич

ОПИСАНИЕ ПРЕДМЕТНОЙ ОБЛАСТИ

Предметная область – исследовательская деятельность (материаловедение, химия).

Неформальная постановка задачи

Создать программу активации таблицы Д. И. Менделеева.

ЦЕЛЬ И ЗАДАЧИ РАБОТЫ

Цель работы

Создать приложение, которое позволит получать информацию по различным свойствам химических элементов и соединений, а также рассчитывать формулы на их основе.

Задачи работы

1. Создать возможность просмотра и редактирования данных по химическим элементам, соединениям и системам соединений;
2. Добавления новых соединений и систем соединений;
3. Разработать методы поиска данных по таблицам свойств различных элементов и соединений;
4. Разработать методы расчета формул.

АКТУАЛЬНОСТЬ РАБОТЫ

Одной из основных задач материаловедения является установление зависимости между составом, строением и свойствами материалов. Моя программа позволяет установить некоторые из таких зависимостей путем расчета формул, аргументами которых являются различные свойства различных элементов и соединений.

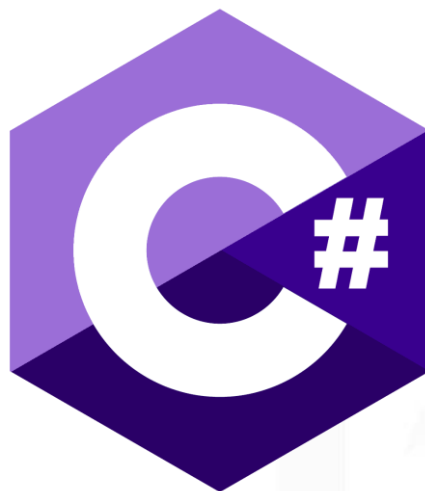
АНАЛИЗ СУЩЕСТВУЮЩИХ РЕШЕНИЙ

| Параметр | Программа активации таблицы Д.И. Менделеева | Mendeleyev (Windows) | Kalzium (Linux) |
|--|---|-------------------------|--------------------|
| Возможность редактирования данных | + | - | + |
| Кристаллохимические данные по элементам и соединениям | + | - | - |
| Возможность расчета формул с использованием данных программы | + | - | ± |
| Общие данные по элементам и соединениям | ±(их можно добавить) | + | + |

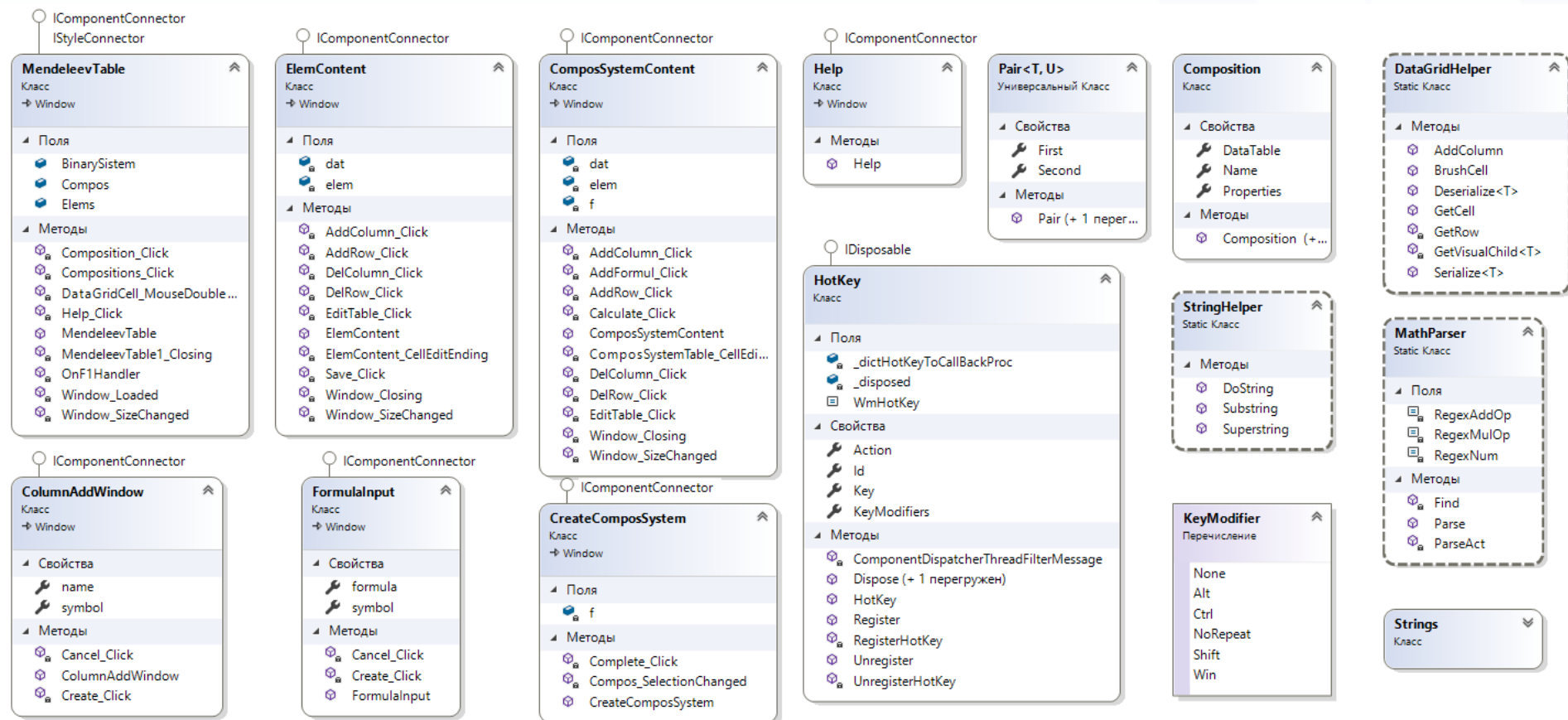
Mendeleyev: автор Феофанов Александр, сайт - shdo.net.

Kalzium: автор Carsten Niehaus(KDE developers), сайт - edu.kde.org/kalzium/

ТЕХНОЛОГИИ И ИНСТРУМЕНТЫ РЕАЛИЗАЦИИ



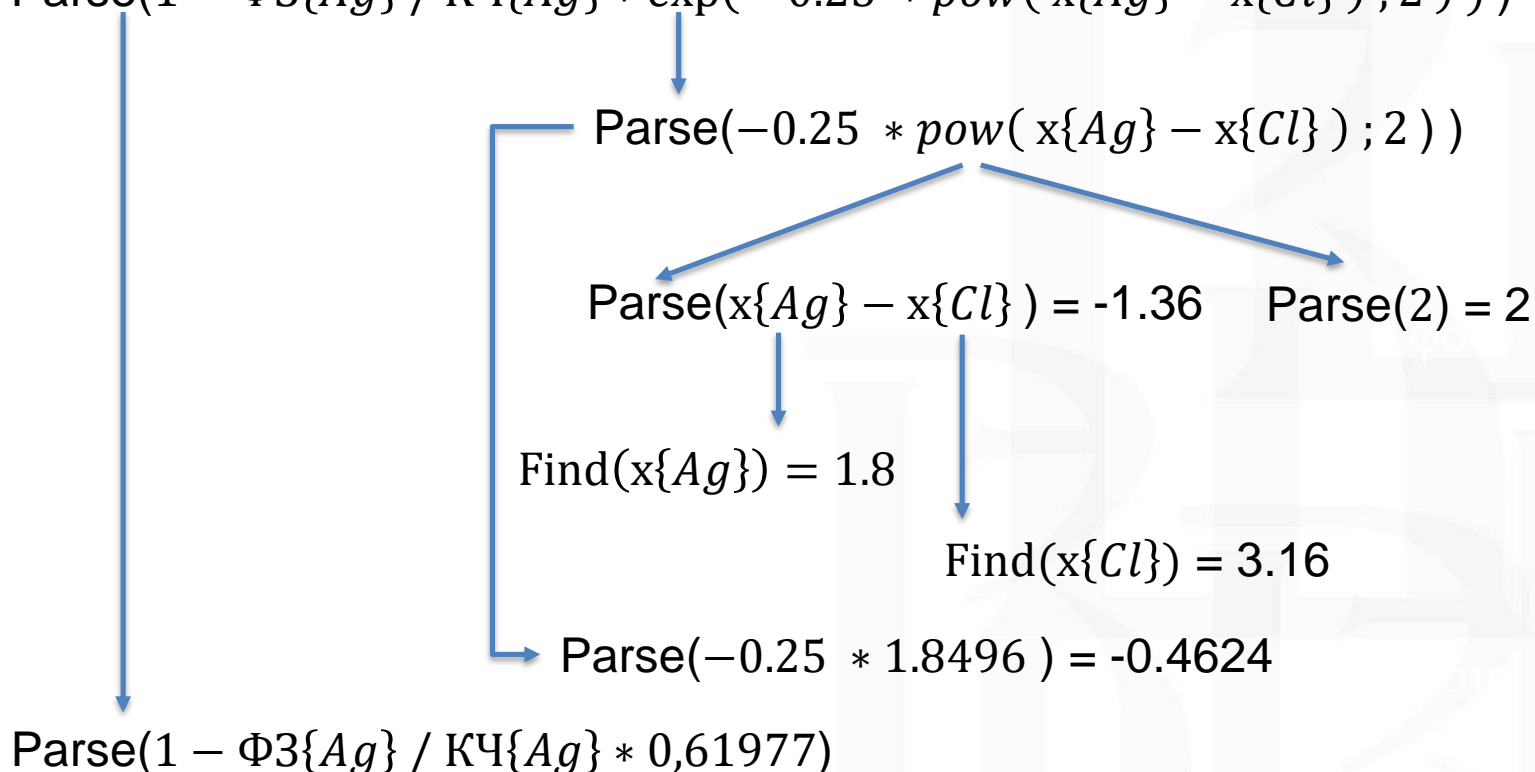
ТЕХНОЛОГИИ И ИНСТРУМЕНТЫ РЕАЛИЗАЦИИ



Парсинг формул(на примере формулы степени ионности соединения AgCl)

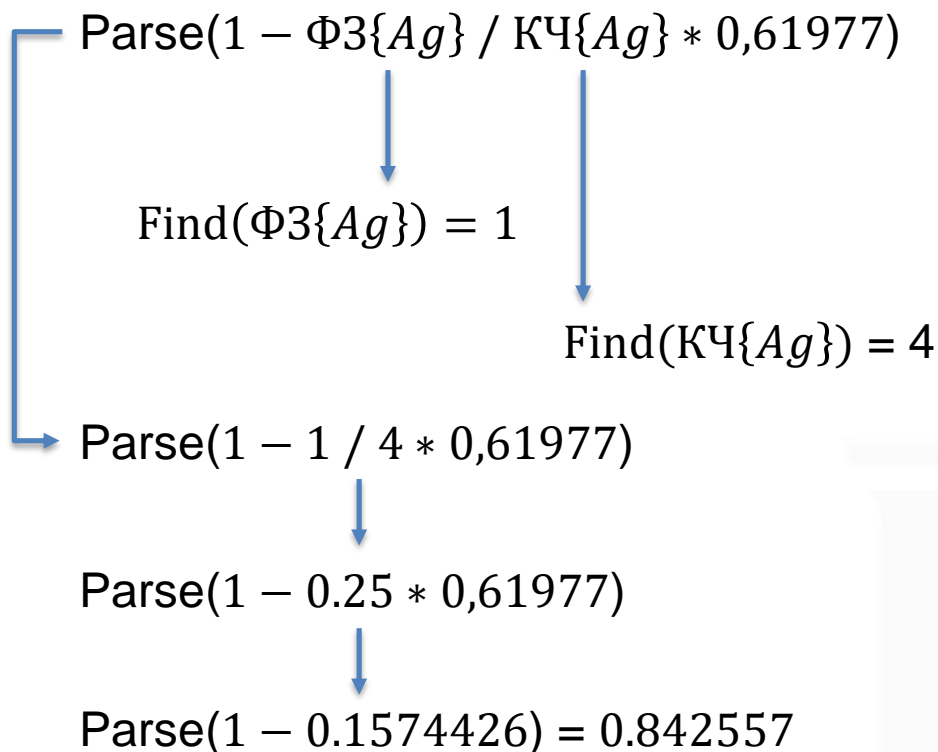
$$e = 1 - \Phi 3\{Ag\} / KЧ\{Ag\} * \exp(-0.25 * \text{pow}(x\{Ag\} - x\{Cl\}); 2))$$

Parse($1 - \Phi 3\{Ag\} / KЧ\{Ag\} * \exp(-0.25 * \text{pow}(x\{Ag\} - x\{Cl\}); 2))$)



ОПИСАНИЕ ВЫБРАННЫХ АЛГОРИТМОВ

$$e = 1 - \Phi 3\{Ag\} / K\check{C}\{Ag\} * \exp(-0.25 * \text{pow}(x\{Ag\} - x\{Cl\}); 2))$$



ОСНОВНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ РАБОТЫ



ОСНОВНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ РАБОТЫ

Свойства элемента Li

| Радиус атома, R(a) | Радиус металла, R(m) | Формальный заряд, ФЗ | Координационное числ | Радиус иона, R(i) | Электроотрицательность |
|--------------------|----------------------|----------------------|----------------------|-------------------|------------------------|
| | | 1 | 6 | 0,59 | 0,98 |

Свойства элемента I

| Радиус атома, R(a) | Радиус металла, R(m) | Формальный заряд, ФЗ | Координационное числ | Радиус иона, R(i) | Электроотрицательность |
|--------------------|----------------------|----------------------|----------------------|-------------------|------------------------|
| | | 1 | 6 | 2,20 | 2,66 |

Свойства элемента Cl

| Радиус атома, R(a) | Радиус металла, R(m) | Формальный заряд, ФЗ | Координационное числ | Радиус иона, R(i) | Электроотрицательность |
|--------------------|----------------------|----------------------|----------------------|-------------------|------------------------|
| | | 1 | | 1,81 | 3,16 |

Таблица соединения LiCl

$$e = 1 - \exp(-0.25 * \text{pow}(x\{\text{Li}\} - x\{\text{Cl}\}; 2)) * \Phi 3\{\text{Li}\} / K4\{\text{Li}\}$$

0,949200027677375

Таблица соединения Lil

$$e = 1 - \exp(-0.25 * \text{pow}(x\{\text{Li}\} - x\{\text{I}\}; 2)) * \Phi 3\{\text{Li}\} / K4\{\text{Li}\}$$

0,917697966994442

Таблица системы LiCl-Lil

| X, x | $a = \text{pow}(K4\{\text{Li}\}; 2) * (-1 + \text{pow}(1 + 1,81 * 4 / 3))$ | $dh = x * (1 - x) * 2 * \Phi 3\{\text{I}\} * \Phi 3\{\text{Cl}\} * (332 * 1,72$ | $ds = -1,987 * (x * \ln(x) + (1 - x) * \ln(1 - x)) +$ |
|------|--|---|---|
| 0 | 1,72713866732838 | 0 | 0 |
| 0,25 | 1,72713866732838 | 1,68869010049685 | 1,20793521644848 |
| 0,5 | 1,72713866732838 | 2,0876306212886 | 1,49805049322716 |
| 0,32 | 1,72713866732838 | 1,91815935573658 | 1,35070524856005 |
| 0,34 | 1,72713866732838 | 1,96609140953472 | 1,38213799454986 |
| 1 | 1,72713866732838 | 0 | 0 |

ОСНОВНЫЕ ВОЗМОЖНОСТИ ПРОГРАММЫ

1. Просмотр и редактирование данных по химическим элементам, соединениям и системам соединений;
2. Добавление новых соединений и систем соединений;
3. Расчет формул с использованием данных таблиц свойств элементов и соединений.

ПУТИ ДАЛЬНЕЙШЕЙ РАБОТЫ

1. Увеличение функционала программы (возможность построения и анализа диаграмм на основе данных таблиц свойств).
2. Упрощение формата формул для удобства пользователя.
3. Добавление возможности выбора формул из существующих вместо их набора.

СПИСОК ИСПОЛЬЗОВАННЫХ ИСТОЧНИКОВ

1. [Russian] Руководство по WPF [Электронный ресурс]. URL: <https://metanit.com/sharp/wpf/> (дата обращения: 12.05.2019)
2. [Russian] Хранилище технической документации, справочных материалов по API, примеров кода, кратких инструкций и руководств для разработчиков и ИТ-профессионалов. [Электронный ресурс]. URL: <https://docs.microsoft.com> (дата обращения: 12.05.2019)



НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ
УНИВЕРСИТЕТ

Спасибо за внимание!

Кожакин Кирилл Геннадьевич,
kgkozhakin@edu.hse.ru

Москва - 2019