

СОЗДАНИЕ И ПРИМЕНЕНИЕ МАТЕМАТИЧЕСКИХ МОДЕЛЕЙ ДЛЯ ВИЗУАЛИЗАЦИИ ИЗМЕНЕНИЯ СВОЙСТВ ХИМИЧЕСКИХ ВЕЩЕСТВ

Осипов Р. А., Рукк Н. С., Скрыбина А. Ю., Гирина А. О.

Для одновременного отображения совокупности табличных данных в пакете Mathcad 13 разработана математическая модель, напоминающая по своему виду очертания человека. Модель позволяет визуализировать изменение численных параметров, а также характеризовать их с помощью цветовой палитры.

Введение. Цель научно-исследовательской работы в любой области науки, в том числе и в химии, заключается в выявлении закономерностей в изменении свойств, как простых веществ, так и химических соединений, в зависимости, например, от порядкового номера элемента. Последнее особенно важно для химии лантаноидов, обладающих подобными свойствами. Для одновременной визуализации изменения ряда параметров была разработана соответствующая математическая модель (изображение человека), реализованная при помощи пакета Mathcad 13 (Дьяконов, 2004; Алексеев, Чесноков, 2005). Данные по свойствам были взяты из литературных источников (Гринвуд и Эрншо, 2008; Эмсли, 1993; Рукк и др., 2002). Построенная модель позволяет отражать до 17 численных и 13 цветовых параметров. С помощью моделей такого типа существенно упрощается выявление, сопоставление и запоминание закономерностей в изменении свойств, что особенно важно с методической точки зрения.

Модель. Построенная при помощи пакета Mathcad 13 математическая модель позволяет фиксировать численные данные в виде геометрической фигуры, внешне напоминающей силуэт человека. Модель состоит из трех основных блоков:

1) задание переменных и параметров модели — ввод из таблицы численных значений, отобранных для визуализации, а также параметров, отвечающих за внешний вид модели (рис. 1 и 2);

Вертикальный диаметр головы:	gol_v_text =	<input type="text" value="1"/>
Горизонтальный диаметр головы:	gol_d_text =	<input type="text" value="1"/>
Длина шеи:	weia_text =	<input type="text" value="0.9832"/>
Вертикальный диаметр туловища:	td_v_text =	<input type="text" value="1.0000"/>
Горизонтальный диаметр туловища:	td_d_text =	<input type="text" value="1.0000"/>
Длина левой руки:	ruka_l_text =	<input type="text" value="1.0020"/>
Длина левой ладони:	lad_l_text =	<input type="text" value="0"/>
Длина правой руки:	ruka_p_text =	<input type="text" value="1.0000"/>
Длина правой ладони:	lad_p_text =	<input type="text" value="0"/>
Длина левой ноги:	noqa_l_text =	<input type="text" value="1.0000"/>
Длина левой стопы:	stopa_l_text =	<input type="text" value="0"/>
Длина правой ноги:	noqa_p_text =	<input type="text" value="0.9997"/>
Длина правой стопы:	stopa_p_text =	<input type="text" value="0"/>

Рис. 1. Блок задания численных значений элементов модели.

Угол отклонения правой руки от уровня 0 в долях $\pi/2$	Угол отклонения левой руки от уровня 0 в долях $\pi/2$
$\Psi_{r_p_text} =$ <input type="text" value="0.4"/>	$\Psi_{r_l_text} =$ <input type="text" value="0.4"/>
Угол отклонения правой ноги от уровня 0 в долях $\pi/2$	Угол отклонения левой ноги от уровня 0 в долях $\pi/2$
$\Psi_{n_p_text} =$ <input type="text" value="0.9"/>	$\Psi_{n_l_text} =$ <input type="text" value="0.9"/>
Угол отклонения правой ноги по туловищу от уровня 0 в долях $\pi/2$	Угол отклонения правой руки по туловищу от уровня 0 в долях $\pi/2$
$\Psi_{n_p_text} =$ <input type="text" value="-0.9"/>	$\Psi_{r_p_text} =$ <input type="text" value="0.4"/>
Область построения	Густота закраски (количество точек)
$M_text =$ <input type="text" value="3"/>	$N_naks_text =$ <input type="text" value="1000"/>

Рис. 2. Блок задания численных значений параметров внешнего вида модели.

2) обработка данных — нахождение алгоритма, устанавливающего взаимно однозначное соответствие между величинами, введенными в 1), и их функциональными представлениями (для последующего построения изображения в блоке 3)) (рис. 3);

```

noqa_p = str2num(noqa_p_text)   ruka_l = str2num(ruka_l_text)   stopa_l = str2num(stopa_l_text)   gol_g = str2num(gol_g_text)
stopa_p = str2num(stopa_p_text)   ruka_p = str2num(ruka_p_text)   noqa_l = str2num(noqa_l_text)   lad_p = str2num(lad_p_text)
td_v = str2num(td_v_text)         gol_v = str2num(gol_v_text)       td_g = str2num(td_g_text)       lad_l = str2num(lad_l_text)
weia = str2num(weia_text)

Psi_r_p = str2num(Psi_r_p_text) * pi/2   Psi_r_l = str2num(Psi_r_l_text) * pi/2   M = str2num(M_text)             Psi_r_p = str2num(Psi_r_p_text)
Psi_n_l = str2num(Psi_n_l_text) * pi/2   Psi_n_p = str2num(Psi_n_p_text) * pi/2   N_naks = str2num(N_naks_text)   Psi_n_p = str2num(Psi_n_p_text)
    
```

Эллипс туловища с осями $\frac{td_g}{2}$ и $\frac{td_v}{2}$

$$Tulovitsa(x) = \begin{pmatrix} \cos(x) \cdot \frac{td_g}{2} \\ \sin(x) \cdot \frac{td_v}{2} \end{pmatrix}$$

Шея длины weia

$$Weia = \begin{pmatrix} 0 \\ \frac{td_v}{2} + weia \end{pmatrix}$$

Эллипс головы с осями $\frac{gol_g}{2}$ и $\frac{gol_v}{2}$

$$Golova(x) = \begin{pmatrix} \cos(x) \cdot \frac{gol_g}{2} \\ \sin(x) \cdot \frac{gol_v}{2} + weia + \frac{gol_v}{2} + \frac{td_v}{2} \end{pmatrix}$$

Рис. 3. Часть блока обработки данных.

3) построение изображения — на основании данных, введенных в 1) при помощи блока 2), строится изображение, которое служит визуализацией рассматриваемых физических величин (рис. 4).

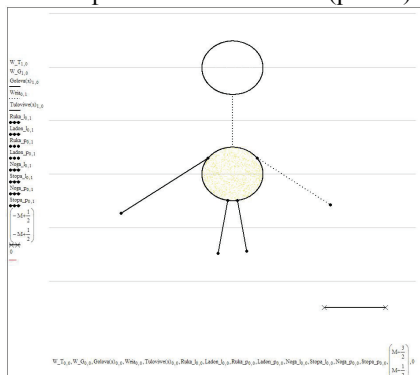


Рис. 4. Изображение полученной модели.

Результаты. На рис. 5, 6 показано соответствие частей тела «человечков» и параметров, за которые они отвечают, как для простых веществ (рис. 5), так и для комплексных производных иодидов лантаноидов с антипирином (АП) (рис. 6). Цвет туловища совпадает с цветом соединения соответствующего лантаноида в степени окисления (+III). Результаты представлены на рис. 7 и 8.

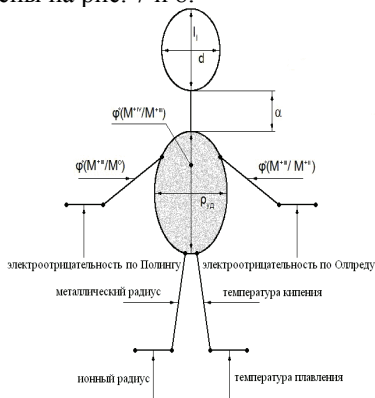


Рис. 5. Модель «человечка» для простых веществ.

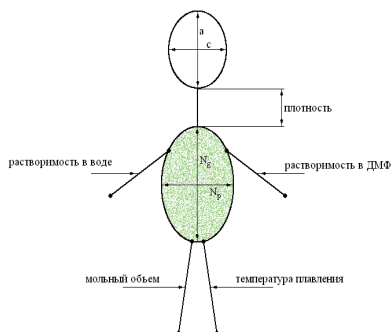


Рис. 6. Модель человека для соединений состава $[\text{Ln}(\text{АП})_6]\text{I}_3$.

В литературе (Бандуркин, Джуринский и др., 1984; Рукк, Исхакова, 2002) описаны виды периодичности и отмечено немонотонное изменение свойств соединений лантана и лантаноидов в зависимости от порядкового номера элемента. Немонотонность изменения свойств определяется наличием заполненного наполовину 4f-подуровня для гадолиния(III). Кроме того, необходимо учитывать эффект лантаноидного сжатия, так как 4f-электроны плохо экранируют заряд ядра от последующих f-электронов, поэтому увеличение заряда ядра приводит к возрастанию силы притяжения между ядром и электронами, что и приводит к уменьшению размеров ионов. Заглубление 4f-оболочки, а, следовательно, и её влияние на свойства лантаноидов, происходит неравномерно: до гадолиния быстрее, а после гадолиния — медленнее. По-видимому, это связано с тем, что до гадолиния увеличиваются обменные взаимодействия между неспаренными электронами, число которых до гадолиния увеличивается, а после гадолиния — уменьшается. Это приводит к «гадолиниевому излому» в ходе изменения ряда свойств.

В случае отсутствия экспериментальных данных для того или иного свойства, соответствующий элемент тела «человечка» обозначается пунктирной линией, а абсолютная величина этого свойства условно считается равной 0,5. Абсолютные значения физико-химических параметров могут быть оценены путем умножения на соответствующий переводной коэффициент (табл. 1).

Для ряда простых веществ (рис. 7) можно видеть, что при переходе от церия к лютецию уменьшаются как металлический радиус (с максимумами для европия и иттербия), так и ионный радиус (Ln^{+III} , КЧ=6).

В связи с этим легко объяснимы минимумы плотности, температуры плавления и кипения, а также максимумы температурного коэффициента линейного расширения для европия и иттербия. Значения стандартных потенциалов $\varphi^\circ(M^{+III}/M^{+II})$ (предплечья правых рук) позволяют подтвердить легкость перехода в состояние со степенью окисления (+II) для тех же элементов. На гадолинии наблюдается перегиб в изменении удельного сопротивления (наибольшая «окружность талии»).

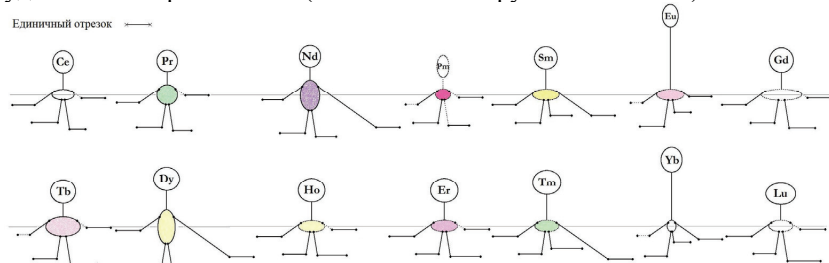


Рис. 7. Изменение свойств для лантаноидов — простых веществ.

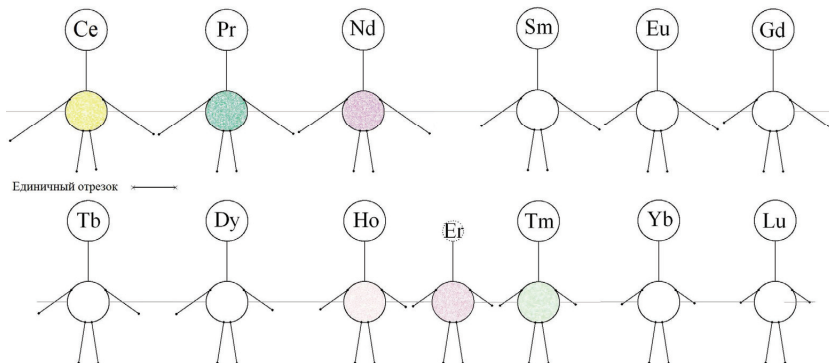


Рис. 8. Изменение свойств для антипириновых производных иодидов лантаноидов.

Для ряда антипириновых производных иодидов лантаноидов видно (рис. 8), что при переходе от церия к лютецию уменьшается растворимость веществ, как в воде, так и в диметилформамиде (ДМФ), причем некоторое замедление уменьшения растворимости наблюдается на гадолинии («левая и правая рука»). В целом, для этого ряда соединений

свойства изменяются более монотонно. Поэтому в данном случае рекомендуется использовать переводные коэффициенты для оценки значений физико-химических параметров (табл. 1).

Таблица 1. Переводные коэффициенты к рис. 8.

Физическая величина	Значение переводного коэффициента
$\Gamma_{\text{мет}}, \text{нМ}$	0,1812
$\Gamma_{\text{ион}}, \text{нМ}$	0,0932
$\varphi^{\circ}(\text{M}^{+\text{IV}}/\text{M}^{+\text{III}}), \text{В}$	3,6640
$\varphi^{\circ}(\text{M}^{+\text{III}}/\text{M}^{+\text{II}}), \text{В}$	-0,8583
$\varphi^{\circ}(\text{M}^{+\text{III}}/\text{M}^0), \text{В}$	-2,2829
$T_{\text{пл}}, ^{\circ}\text{С}$	1200,5714
$T_{\text{кип}}, ^{\circ}\text{С}$	2674,0000
$I_1, \text{кДж/моль}$	557,7857
$d, \text{г/см}^3$	7,8438
$\rho_{\text{уд}}, \text{мкОм см}$	78,5000
$\alpha, 10^{-6} \text{ К}^{-1}$	11,9315
χ по Поллингу	1,1970
χ по Оллреду	1,0843

Зависимости изменения объема элементарной ячейки для простых веществ и температуры плавления для антипириновых производных иодидов лантаноидов от порядкового номера элемента изменяются симбатно: наблюдается «гадолиниевый излом», а также в некоторой степени проявляется дополнительная внутренняя периодичность («дубль-дубль-эффект»).

Закключение. При помощи пакета Mathcad 13 была реализована модель «человечка», которая позволяет не только отражать до 17 численных и 13 цветовых параметров, но и визуализировать изменение свойств веществ, сопоставлять и запоминать их, что немаловажно с методической точки зрения.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- Дьяконов М. П. Энциклопедия Mathcad 2001i и Mathcad 11. — М.: СОЛОН-Пресс, 2004. — 832 с.: ил.
- Алексеев Е. Р., Чесноков О. В. Mathcad 12. — М.: НТ Пресс, 2005. — 345 с.: ил.
- Гринвуд Н., Эрншо А. «Химия элементов». — М.: БИНОМ, 2008. Т. 2. — С. 546–566.
- Эмсли Дж. Элементы. Пер. с англ. — М.: Мир, 1993. — 256 с.
- Бандуркин Г.А., Джурицкий Б.Ф., Тананаев И.В. Особенности кристаллохимии соединений редкоземельных элементов. — М.: Наука, 1984. — 232 с.
- Рукк Н.С., Исхакова Л.Д., Крейнгольд С.У. // Коорд. химия. 2002. — Т. 28, №8. — С. 630.

PICTORIAL VISUALIZATION OF CHEMICAL SUBSTANCE PROPERTIES

Osipov R. A., Rukk N. S., Skryabina A. Yu., Girina A. O.

A man-contour-like visualization for simultaneous representation of tabular data was created in Mathcad 13. It allows to visualize variations in numeric parameters by means of shape and color.