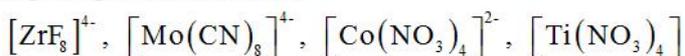


## КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ В ПРЕПОДАВАНИИ ДИСЦИПЛИНЫ «ХИМИЯ ЭЛЕМЕНТОВ»

Осипов Р. А., Замалютин В. В., Подзоров А.А., Скрыбина А.Ю., Рукк Н.С.  
МИТХТ им. М. В.Ломоносова, Россия, 119571, Москва, проспект Вернадского д.86,  
тел. 8(495)9368912, roukkn@inbox.ru

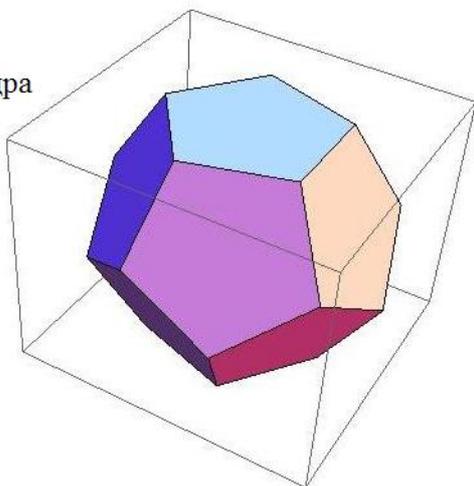
Программа «ChemPolyhedra», созданная в математическом пакете Wolfram Mathematica 7, предусматривает возможность выбора моделей наиболее часто встречающихся координационных полиэдров, характерных для комплексных соединений, прежде всего переходных элементов. Рассмотрение строения комплексных соединений различных элементов Периодической системы с помощью созданной программы позволяет наглядно продемонстрировать зависимость координационного числа (КЧ) и типа координационного полиэдра от порядкового номера элемента (Z), показать тенденцию увеличения КЧ с ростом Z, а также продемонстрировать

Примеры соединений:



Координационный полиэдр: додэкаэдр

3D-модель  
коорд. полиэдра



Развертка координационного полиэдра

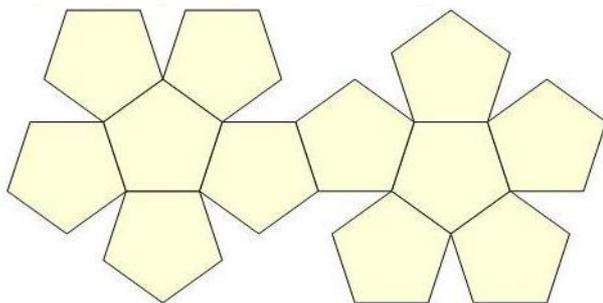


Рис. 1. Пример работы программы ChemPolyhedra.

поливариантность набора координационных полиэдров для высоких КЧ. Программа позволяет ознакомиться со всеми координационными полиэдрами с помощью их компьютерных 3D моделей, получить распечатку развертки любого из них, с последующим изготовлением наглядных пособий (рис. 1). Использование разработанной авторами программы может найти

применение для организации семинарских и дополнительных занятий по дисциплине «Химия элементов».

### Литература

1. Гринвуд Н., Эрншо А. Химия элементов в 2 томах; пер. с англ. М.: БИНОМ: Лаборатория знаний. 2008. (1 Т. – 608 с.; 2 Т. – 670 с.).
2. Wolfram Mathematica 7 [Электронный ресурс] Режим доступа: <http://www.wolfram.com/products/mathematica/index.html>