

**ВИКОРИСТАННЯ СУЧАСНИХ КВАНТОВО-ХІМІЧНИХ ПРОГРАМ ПРИ
ВИВЧЕННІ ХІМІЧНИХ ДИСЦИПЛІН**

Галечко Г. М., Дутка В. С., Ковальський Я. П.

Кафедра фізичної та колоїдної хімії
Львівського національного університету імені Івана Франка,
вул. Кирила і Мефодія 6, Львів 79005, Україна
halazastavska@gmail.com

На сьогодні розроблено та впроваджено багато квантово-хімічних програм як в наукові дослідження, так і у навчальний процес. До таких програм належать MOPAC2016, HYPERCHEM, ChemOffice, MathCAD, ORCA, SCHRODINGER та інші. У більшості випадків такі програмні продукти мають комерційний характер, однак для студентів-хіміків вони можуть надаватися на некомерційній основі. Корисною навчальною програмою є програма ADC/Labs. Існує декілька версій цієї програми, яка складається з декількох підпрограм. Застосування цієї програми не складне і нею можуть оволодіти навіть учні середніх шкіл. Програма дозволяє зображати молекули в різних проекціях, знаходити фізико-хімічні властивості речовини та генерувати Z-матрицю, яка є основою подальших квантово-хімічних розрахунків.

Студент має можливість вибрати будь-яку квантово-хімічну програму для проведення розрахунків. В ході розрахунків студенти одержують масив даних, який повністю характеризує досліджувану молекулу. Одержані структурні та енергетичні параметри легко інтерпретуються, дозволяють прогнозувати реакційну здатність досліджуваної молекули. В ході розрахунків студент одержує теплоти утворення досліджуваної речовини, енергію іонізації, енергію ВЗМО та НВМО, площу та об'єм молекули. Отримані дані теоретичного розрахунку варто порівнювати з експериментальними результатами, які є в базах NIST. При задовільному співпадінні обох результатів можна вважати, що розрахунок методами квантової хімії – коректний. Студенти можуть вибирати як напівемпіричні квантово-хімічні методи розрахунку, так і методи *ab initio* (DFT). Наявність великого числа квантово-хімічних програм дозволяє вирішувати більшість питань, які стоять перед молодими хіміками-дослідниками.