

**ВИКОРИСТАННЯ МАТЕМАТИЧНИХ ТА КВАНТОВО-ХІМІЧНИХ СУЧАСНИХ ПРОГРАМ ДЛЯ РОЗРАХУНКІВ ПРИ ВИВЧЕННІ ФІЗИЧНОЇ ТА КВАНТОВОЇ ХІМІЇ**

*Хамар О. О.*, Ковальський Я. П., Дутка В. С.  
Львівський національний університет імені Івана Франка  
вул. Університетська, 1, Львів, 79601, Україна  
oleh.khamar@lnu.edu.ua

Проведення різних розрахунків у фізичній хімії, хімії високомолекулярних сполук та квантовій хімії вимагає використання сучасних математичних програм. На сьогодні існують багато програм, які дозволяють розраховувати теоретично термодинамічні параметри, константи рівноваги, квантово-хімічні функції та ін. Найкращою математичною програмою, яку доцільно застосовувати у навчальній практиці та наукових дослідженнях є MathCAD.

Цю програму можна застосовувати для рішення багатьох проблем фізичної хімії. Крім проведення обчислень програма дозволяє будувати графічні залежності. Програма MathCAD містить підпрограму, яка дозволяє коректно проводити статистичну обробку отриманих експериментальних результатів.

Важливою частиною навчання студента-хіміка є ознайомлення та вміння застосовувати на практиці квантово-хімічних розрахунків.

Існує ряд програм за допомогою яких можна проводити квантово-хімічні розрахунки. До таких програм відносяться MOPAC2016, HYPERCHEM, ORCA, SCHRODINGER та інші. В ході квантово-хімічних розрахунків студенти отримують структурні характеристики молекул та електронні властивості. Розрахунки можна проводити як методами ab initio так і напівемпіричними методами. Для перевірки коректності теоретичних обчислень, отримані результати можна порівняти з експериментальними, які є в базі NIST. В ході обчислень студенти одержують теплоти утворення досліджуваних речовин, енергію іонізації, енергію вищої занятої (ВЗМО) та нижчої вакантної (НВМО) молекулярної орбіталей, площу та об'єм молекули. Сучасні квантово-хімічні програми дозволяють обчислювати ІЧ- та УФ-спектри. Велике число квантово-хімічних програм дозволяє розв'язувати більшість проблем, які стоять перед студентами-хіміками.