

ЗАСТОСУВАННЯ СУЧАСНИХ МАТЕМАТИЧНИХ ТА КВАНТОВО-ХІМІЧНИХ ПРОГРАМ ПРИ ВИВЧЕННІ ХІМІЧНИХ ДИСЦИПЛІН

Володимир Дутка, професор, **Наталія Ощановська**, молодший науковий співробітник, **Ярослав Ковальський**, науковий співробітник кафедра фізичної та колоїдної хімії

Львівський національний університет імені Івана Франка,

На сьогодні розроблено та впроваджено багато математичних та квантово-хімічних програм як в наукові дослідження, так і у навчальний процес. До таких програм належать MOPAC2016, HYPERCHEM, ChemOffice, MathCAD, Maple, ORCA, SCHRODINGER та інші. У більшості випадків такі програмні продукти мають комерційний характер, однак для студентів-хіміків чи учнів шкіл вони можуть надаватися на некомерційній основі. Математична програма MathCAD дозволяє успішно розв'язувати більшість задач фізичної хімії. За допомогою програми можна скласти систему кінетичних диференціальних рівнянь і отримувати розв'язки для складних випадків хімічної кінетики. Ефективною програма MathCAD є при обчисленнях термодинамічних параметрів. Наявність багатьох застосунків дає змогу розв'язувати практично будь-які задачі з хімії. Програма MathCAD містить застосунки, які можуть проводити статистичну обробку різних даних.

Важливу роль у вивченні хімічних дисциплін відіграють квантово-хімічні програми, які можна застосовувати при вивченні таких курсів як "Будова речовини", "Супрамолекулярна хімія", "Квантова механіка та квантова хімія". За допомогою квантово-хімічних програм учні можуть будувати моделі різних молекул, характеризувати їх вимірюючи між'ядерні віддалі, плоскі та дієдральні кути. Квантово-хімічні програми дають змогу розраховувати теплоти утворення (ΔH^0), дипольні моменти молекул (D), потенціали іонізації (I_s), об'єм (V) та площу (S) молекул, енергію вищої занятої ($E_{\text{ВЗМО}}$) та нижчої вакантної ($E_{\text{НВМО}}$) молекулярних орбіталей тощо. Для перевірки коректності отриманих розрахунків, отримані параметри доцільно співставляти з експериментальними даними, які є системі NIST. Квантово-хімічні розрахунки дозволяють прогнозувати реакційну здатність речовин. Визначення парціальних електричних зарядів на кожному атомі, який входить до складу молекул, вказують на імовірні центри електрофільної чи нуклеофільної атаки, обчислювати індекси вільної валентності. Окремі застосунки квантово-хімічних програм дозволяють проводити розрахунки теоретичних УФ- та ІЧ-спектрів і порівнювати їх з експериментальними. Використання математичних та квантово-хімічних програм при вивченні хімічних дисциплін дозволяє учням та студентам глибше зрозуміти хімію та успішно використовувати отримані знання на практиці.