

нәтижелерді салыстыра алады. Нәтижелерге талдау жасай отырып, күрделі қорытындыларды жасай алуға мүмкіндігі бар. Өкінішке орай, оқу зертханасы жағдайында да кейбір күрделі экспериментті көрсетуге әрдайым мүмкіндік болмайды. Мұндай жағдайларда компьютер экранында түрлі жарқын түстермен сәнделген виртуалды эксперименттер студенттердің назарын бірден өзіне аударады, сонымен қатар, күрделі мәселелерді зерттеу үшін оқу процесін ұйымдастыруда жақсы әдістемелік қолдау болады. Осы мәселелердің барлығын қарастыра келе қазіргі заманға сай дамып жатқан кванттық-химиялық әдістердің маңыздылығы мен қажеттілігі басым екенін көре аламыз.

Кванттық химия, жалпы химияның (бейорганикалық, органикалық, коллоидты және басқалармен қатар) тағы бір саласы ғана емес, олардың теориялық іргетасы болып табылады, ал оның мәні атомдар мен молекулалардың құрылымын, сондай-ақ олардың мүмкін болатын ауысуларын анықтау үшін кванттық механиканы қолданудан тұрады.

Кванттық химия соңғы 15-20 жылда заманауи химияның басты теориялық іргетасына айналды. Кванттық-химиялық есептеулердің нәтижелері химияның нақты ғылыми және қолданбалы міндеттерін шешуде кеңінен қолданыла бастады. Қазіргі уақытта пайдаланушылар үшін HYPERCHEM, MOPAC кванттық-химиялық бағдарламалар пакеті кең түрде қол жетімді болды, бұл әдістер энергияның түрлерін, молекулалардың электрондық құрылысы мен қасиеттерін, олардың реакциялық қабілетін, ауыспалы күйлердің құрылымын қарастырумен қатар жартылай эмпирикалық әдістерді пайдалана отырып, электрондық спектрлерді есептеуді жүргізуге мүмкіндік береді. Сонымен қатар, GAMESS және GAUSSIAN бағдарламаларының пакеттері кеңінен қолданылады. Кванттық-химиялық есептеулер молекулалардың тепе-теңдіктегі ядроаралық қашықтықтары және валентті бұрыштары, химиялық байланыстар энергиясы, ішкі айналу кедергілері және әртүрлі конформациялар арасындағы өту кедергілері, қарапайым химиялық реакциялардың активтендіру энергиясы, сондай-ақ эксперимент жүзінде анықтау қиын немесе тіпті мүмкін емес шамалардың сипаттамаларын жеткілікті жоғары

дәлдікпен есептеуге мүмкіндік береді. Бүгінде әлемде жыл сайын бірнеше жүз мың мүлдем жаңа заттар синтезделеді және олардың физикалық-химиялық қасиеттері сипатталады. Бірақ синтезделініп алынған заттардың көп бөлігі қолданылмайды. Жаңа заттарды іздеу қалай жүзеге асады? Заттың синтезі – бұл процестің негізгі, бірақ күрделі және өте қымбат фазасы болып табылады. Сондықтан алдымен, нақты қолдануға қажет ықтимал реагенттердің кванттық есептеулері жүргізіледі. Содан кейін реагенттердің есептеулерден алынған нәтижелердің қасиеттеріне қарай ең қолайлысы іріктеледі. Содан кейін олар синтезделеді. Осылайша жаңа заттарды іздеу процесі жылдам жүзеге асады.

Кванттық-химиялық әдістері арқылы жасалған есептеулер химиялық реакцияларды сипаттау үшін де, яғни олардың кинетикасын түсіну үшін маңызды. Молекулалары күрделі заттардың электрондық құрылымын білу олардың белсенді орталықтарын анықтауға мүмкіндік береді. Сонымен қатар, есептеулердің нәтижелері материалдардың белгілі қасиеттерін жақсарту үшін ықтимал химиялық қосылыстардың қайсысы неғұрлым перспективті болатынын немесе белгілі қосылыстарды қалай түрлендіру қажеттігін көрсете алады. Айта келгенде, бұл перспективті емес тәжірибеге арналған уақыт пен қаржылай шығындарды болдырмауға мүмкіндік береді.

Модельдік жұмыстар нақты эксперименттер жасау үшін қол жетімсіз жағдайларда химиялық процестерді зерттеуге, шын мәнінде мүмкін емес, бірақ химиялық модельдер мен теорияны зерттеу үшін маңызды тарихи тәжірибелерді, ойлы эксперименттерді іске асыруға мүмкіндік береді. Осылайша, олар химиялық модельдерді тереңірек зерттеуді жүзеге асыруға мүмкіндік береді, сонымен қатар студенттердің танымдық белсенділігін арттыру үшін маңыздығы жоғалмайды және тәжірибелік жұмыстың белсенді орындалуына себепкер болады, сонымен қатар өлшеу нәтижелерін өңдеу әдістерін қолдануды үйретеді. Бұдан компьютерлік және әдеттегі зертханалық жұмыстар бір-біріне альтернативті емес, бірін бірі толықтыратын әдістер екенін көруге болады. Компьютерлік эксперимент үлгіні көрнекі ете отырып, химиялық ғылымның модельдік жағын