

## Использование программы gauss view и gaussian98w в процессе преподавания предмета «квантовая химия»

**М.Х. Мамарахмонов\*, И.Р. Аскарлов, Ю.Т. Исаев, Ш.М. Киргизов**

\*-170100, Андижан, ул. Университетская 129, АГУ, ст. преп., muhamatdin@umail.uz

В настоящее время преподавание предмета квантовой химии в ВУЗах требует от преподавателя высокие навыки владения информационными технологиями и компьютерными программами. Надо отметить, что при усвоении студентами большого теоретического материала, удобно пользоваться компьютерными программами, которые легко иллюстрируют графические схемы, и вычисляют физико-химические величины. Одной из таких современных квантовохимических программ является GAUSSIAN98W. Полное использование возможностями этой программы, интерпретация вычислительных данных помогает студентам легко усваивать многие абстрактные термины: делокализация электронных зарядов, молекулярная орбиталь, ВЗМО, НСМО, полуэлектрон, колебания атомов и групп, колебательные спектры, конфигурационное взаимодействие, основное и возбужденные электронные состояния молекулы.

В комплекте имеется программа Gauss View5.0, которая дает возможность пользователю легко конструировать структуру исследуемой молекулы, готовить входной файл в \*.gjf и других форматах, задавать соответствующие требования при вычислениях. Совокупность этих программ является мощным рабочим инструментом для вычисления химической структуры. В комплекте приведен (*руководство*) файл, в котором досконально написано об использовании вышеперечисленных программ. Студенты изучая эти программы, учитывают химические свойства молекулы, задают нужные базисные наборы и выбирают соответствующий растворитель, в среде которой проходит изучаемая реакция.

В последнее время учеными мира широко используются квантовохимические программы для изучения реакционной способности молекул и их превращений. Во многом, погрешность вычисления не превышает экспериментальных [1-4]. Возможность учета среды при вычислениях, предлагает вычислителю свободу выбора растворителя, так как в основном, химические реакции проходят в средах различных растворителей.

По нашему мнению ВУЗы страны, преподающие химию, нуждаются в хорошем учебнике по квантовой компьютерной химии, для облегчения усвоения студентами сложного теоретического материала по квантовой химии.

### Использованная литература

- 1 Тим Кларк, Компьютерная химия, М., Мир, 1990г.
- 2 М. Х. Мамарахмонов, Л. И. Беленький, и др., Известия Академии наук. Серия химическая, 2014, № 2, С. 350-356.
- 3 М. Х. Мамарахмонов, Л. И. Беленький, и др., Известия Академии наук. Серия химическая, 2014, № 9, С. 1986-1992.
- 4 М. Х. Мамарахмонов, Л. И. Беленький, и др., Известия Академии наук. Серия химическая, 2015, № 3, С. 534-539.

## Резюме

**М.Х. Мамарахмонов\*, И.Р. Аскарлов, Ю.Т. Исаев, Ш.М.Киргизов**

170100, Андижан, ул. Университетская 129, АГУ, ст. преп., muhamatdin@umail.uz

**В статье предложено использование современных квантовохимических программ параллельно при обучении теоретического материала. Показана эффективность, удобность, доступность и достоверность предложенного метода**

*Ключевые слова: квантовая химия, GaussView5.0, Gaussian98W, реакционная способность молекул, делокализация зарядов, растворитель, молекулярная орбиталь, ВЗМО, НСМО.*

## ANNOTATION

M. Kh. Mamarakhmonov\*, I.R. Asqarov, Yu.T. Isayev, Sh.M. Kirgizov  
\*-170100, Andijan city, University St. Bd. 129, Andijan state University, senior teacher

### **USING THE PROGRAM GAUSS VIEW & GAUSSIAN98W ON THE TEACHING PROCESS OF THE SUBJECT "QUANTUM CHEMISTRY"**

In this article, we offer to use modern quantum chemical programs together with teaching theoretical material. It's shown that efficiency, useful, accessibility and validity of the offered method.

Keywords: quantum chemistry, GaussView5.0, Gaussian98W, reactivity of the molecules, delocalization of the charges, solvent, molecular orbital, HOMO, LUMO