

**КВАНТОВАЯ ХИМИЯ - НАСТОЛЬНЫЙ ИНСТРУМЕНТ
ЭКСПЕРИМЕНТАТОРА? СРАВНЕНИЕ ПОЛУЭМПИРИЧЕСКИХ
МЕТОДОВ С ИХ ПОСЛЕДНИМИ ВЕРСИЯМИ (ПАКЕТ МОРАС 2009)**

Р.Ф. Васильев, А.А. Володькин, А.В. Трофимов, Ю.Б. Цаплев

Институт биохимической физики им. Н.М. Эмануэля Российской академии наук

Квантовохимические методы непрерывно совершенствуются (усложняются). Завершающий шаг расчёта — сравнение результатов с опытом. Как правило, расчётные значения постепенно приближаются к экспериментальным по мере усложнения методики - перехода от минимального набора ко всё большему набору базовых функций. Приближение происходит отнюдь не монотонно. Кроме того, следует иметь в виду ряд естественных ограничений для количественной интерпретации, связанных с нестрогостью и приближённым характером любой модели – как *ab initio*, так и полуэмпирической (п.э.). Модели не исключают, но, пожалуй, «в поисках золотой середины» (Л.А. Грибов) начинают дополнять друг друга: данные *ab initio* для отдельных соединений вводят при параметризации п.э. программ, а п.э. расчёты геометрии часто являются предварительным этапом процедуры *ab initio*. Для новых соединений, энергетика которых неизвестна, выбрать надежный вариант расчета трудно. Для экспериментатора всё же предпочтительнее п.э. программы, которые просты в обращении и дружелюбны, так что ими можно пользоваться, "сосредоточившись на научной проблеме и не вдаваясь в квантовую и термодинамическую экзотику" (M.J.S. Dewar). Этим требованиям отвечает пакет "дьюаровских" п. э. методов МОРАС и поздние версии МОРАС 2007 и МОРАС 2009.

В докладе даны примеры применения МОРАС для изучения строения, энергетики, реакционной способности, др. свойств ряда групп органических соединений, в том числе с переходом на электронновозбужденную поверхность потенциальной энергии (фенольные антиоксиданты, пероксиды, свободные радикалы, хемиллюминофоры).