

чується і переходить у захворювання. До психосоматичних захворювань, викликаних стресом, традиційно відносять так звану "чикагську сімку" захворювань, що виникають як реакції на стрес. Це – нейродерміт і псоріаз; виразка шлунку і дванадцятипалої кишки; неспецифічний виразковий коліт; бронхіальна астма; гіпертонія; тиреотоксикоз і ревматоїдний артрит. Можливий і інший тип реакції: виникнення не соматичних, а психічних порушень. Все більше спеціалістів схильються до думки, що причини хронічних захворювань у дітей психосоматичного походження, так як емоційні фактори здійснюють прямий вплив на роботу органів і систем тіла.

**Висновки та рекомендації.** Отже, ми можемо зробити висновок про те, що фізичне і психічне здоров'я дитини залежить безпосередньо від особливостей мікроклімату в сім'ї. Основними методами збереження та зміцнення здоров'я в умовах сім'ї мають стати: культура міжродинних взаємин у повсякденному житті; дотримання правил психогігієни; термінове звернення до відповідних спеціалістів при наявності глибоких довготривалих конфліктів або кризи у відносинах.

#### Література

1. Битянова М.Р. Организация психологической работы в школе / М.Р. Битянова. – М.: Генезис, 2000.
2. Ващенко І.В. Особливості сімейних взаємин у сучасних подружніх парах / І.В. Ващенко, Л.В. Кондрацька// Наука і освіта: наук.практ. жл. – Одеса, 2005. – №34. – С. 317.
3. Ващенко І.В. Психологічні аспекти дослідження сімейних конфліктів /І.В. Ващенко//Вісник ХДПУ ім. Г.С. Сковороди. – Серія: Психологія. – Харків: ХДПУ, 2004. – Вип. 13. – Ч.1. – С. 51-57.
4. Кондрацька Л.В. Вплив сімейних конфліктів на психічне здоров'я дитини /Л.В. Кондрацька// Наука і освіта: науково-практичний журнал Південного наукового Центру АПН України. – №56. – 2006. – С. 173.
5. Эйдмиллер Э.Г. Психология й психотерапия rodziny / Э.Г. Эйдмиллер, В. Юстицкис. – СПб., 1999. – С. 190.

### ПОРІВНЯЛЬНА ХАРАКТЕРИСТИКА КВАНТОВО-ХІМІЧНИХ РОЗРАХУНКОВИХ МЕТОДИК

*Ромашко Т.П. (м. Полтава, Україна)*

Можливості квантово-хімічних методів розрахунку є досить широкими. Їх застосування включає завдання визначення як властивостей квантових систем, так і структурної будови різних об'єктів, їх спектральних характеристик, що дає змогу теоретично передбачити властивості матеріалів та умови протікання хімічних процесів.

Як неемпіричні *ab initio*, так і напівемпіричні методи квантово-хімічних розрахунків використовуються зараз в межах декількох підходів. *Ab initio* CIS – теорія (від англ. Configuration Interaction Based on Singly Exited Configurations) є загалом спроможною для визначення молекулярних рівнів енергії, але не надто точною. Похибка сягає за 1eV [1]. Неемпіричні методи направлені на розрахунки інтегралів міжелектронної взаємодії. Проте по мірі збільшення розмірів молекул число інтегралів міжелектронної взаємодії зростає приблизно пропорційно  $N^4$  [2], де  $N$  – розмір базису АО, й, відповідно до цього, росте і час затрачений для розрахунків. Тому одержав розвиток й продовжує розвиватися напівемпіричний підхід, заснований на заміні більшої частини інтегралів параметрами, взятими з експерименту. Застосовуються різні методи квантово-хімічних напівемпіричних розрахунків для дослідження електронної будови молекулярних систем.

В рамках CNDO підходу існує [2] дві головних параметризації: CNDO/2 для розрахунків основних і CNDO/S (S – спектроскопічна параметризація) для розрахунків збуджених електронних станів. Метод CNDO/2 дає найбільш надійні результати у випадку розрахунків електронного розподілу і властивостей, що визначаються останнім (дипольні моменти, реакції протонування гетероароматичних сполук тощо). Існують і специфічні параметризації метода CNDO, спрямовані на коректне описання лише певних властивостей молекул. В області свого застосування CNDO метод дає результати, що відповідають експериментальним даним не гірше, ніж результати розрахунків *ab initio*

Метод INDO та його модифікація має переваги перед CNDO при розрахунках електронної структури молекул з відкритими електронними оболонками. Він застосовується для аналізу спектрів поглинання гетероароматичних молекул та їх протонуваних форм [3] електронегативності, індуктивного і мезомерних параметрів органічних молекул, теоретичного з'ясування впливу середовища.

Більш вживаними зараз є методи, що засновані на NDDO наближенні. Так, методи AM1 та PM3 застосовуються для вивчення спектральних характеристик різних органічних молекул, зміна яких може бути пов'язана з різними структурними, конформаційними факторами та впливом розчинника. Використовуючи метод AM1 можливо не тільки оптимізувати геометрію, а й проводити розрахунки просторової будови молекул циклічної структури. Метод AM1 заснований на наближенні NDDO, де вводиться модифікована функція, яка описує відштовхування остовів, і відповідно введено нові параметри, що дозволяють відтворювати водневі зв'язки і давати кращі результати для активаційних параметрів.

Серед напівемпіричних квантово-хімічних методів, що задовільно відтворюють енергію молекул і їх структуру, PM3 добре описує міжмолекулярний водневий зв'язок нейтральних молекул, коректно моделює довжини зв'язків і енергію взаємодії для малих кластерів води ( $n=2-5$ ) та гідратованого іону гідроксонію [4], тому цей метод може застосовуватися на рівні *ab initio*. Так при дослідженні структури та конформації пара-метилбензолсульфотриду(броміду) точність розрахунків ключових параметрів методом PM3 [5] близька до точності *ab initio* розрахунків, тоді як для інших методів, що використовують наближення NDDO (MNDO, AM1), характерна наявність більших систематичних похибок – в першу чергу довжини зв'язків C-S і S-O і валентного кута  $O=S=O$ . Детальний аналіз отриманих результатів дає змогу передбачити (пояснити) зміну величини квантового виходу випромінювання для серії сполук в різних розчинниках.

#### Література

1. Nooijen M., Bartien R. J. A new method for excited states: Similarity transformed equation of motion theory (STEOM)//Chem. Phys. – 1997. – Vol.106. – P. 6441-6448.
2. Voityuk A. A., Zerner M. C., Rosch N. Extension of the neglect of diatomic differential overlap method to spectroscopy. NDDO-G Parametrization and results for organic molecules//J. Phys. Chem. A. – 1999. – Vol.103, №23. – P.4553-4559.
3. Kosevish M.V., Pashinskaya V.A., Stepanian S.G., Shelkovsky V.S., Orlov V.V. et. al. Quantum chemical study of decamethoxinum and related dicatios// Біофізичн. вісник ХДУ. – 1999. – Вип.3, №434. – С. 31-38.
4. Манько Л. Ю., Манюров И. Р., Вяселева Г. Я., Барабанов В. П. Квантово-химическое изучение гидратации гетерозамещенных катионов пиридиния//Журн. физ. химии. – 2000. – Т.74, №9. – С.1620-1623.
5. Uchiyama S., Santa T., Okiyama N., Azuma K., Imai K. Semi-empirical PM3 calculations predict the fluorescence quantum yields ( $\Phi$ ) of monosubstituted benzofurazan compounds// J. Chem. Soc., Perkin Trans. – 2000. – Vol 2. – P. 1199-1207.