

ВПЛИВ КОМП'ЮТЕРНОЇ ХІМІЇ НА СТВОРЕННЯ ЗЕЛЕНИХ ТЕХНОЛОГІЙ ТА ВИРОБНИЦТВО ВІДНОВЛЮВАЛЬНИХ ДЖЕРЕЛ ЕНЕРГІЇ

Кравченко Дар'я Володимирівна,
здобувач вищої освіти VI курсу, your_chemist@ukr.net
Житомирський державний університет імені Івана Франка, Україна

Віленський Володимир Олексійович
доктор хімічних наук, старший науковий співробітник, volodymyr-vilensky@ukr.net
Житомирський державний університет імені Івана Франка, Україна

Зелені технології та відновлювальні джерела енергії стали важливими компонентами сучасного світу, що шукає шляхи зменшення впливу на навколишнє середовище та споживання природних ресурсів. Однак досягнення цих цілей вимагає великих зусиль у галузі досліджень та розробок. Саме тут комп'ютерна хімія грає важливу роль, допомагаючи розробляти нові матеріали, процеси та технології, спрямовані на збереження природи та ресурсів. У цьому контексті, комп'ютерна хімія грає надзвичайно важливу роль у розвитку зелених технологій та виробництві відновлювальних джерел енергії, допомагаючи вирішувати складні завдання та прискорюючи наукові дослідження.

Однією з основних областей застосування комп'ютерної хімії є моделювання та дизайн нових матеріалів. Сучасні комп'ютерні програми та обчислювальні методи дозволяють вченим відобразити молекулярну структуру матеріалів та вивчити їх фізичні та хімічні властивості. Це спрощує пошук матеріалів, що відповідають вимогам стійкості та відновлюваності. Наприклад, комп'ютерна хімія допомагає розробити нові сонячні панелі, акумулятори та каталізатори, що підвищують ефективність використання відновлювальних джерел енергії.

Однією з ключових сфер, де комп'ютерна хімія вносить найбільший вклад, є розробка нових матеріалів для відновлювальної енергетики. Сучасні обчислювальні методи дозволяють вченим аналізувати молекулярну структуру матеріалів та прогнозувати їхні фізичні властивості. Це допомагає створити більш ефективні компоненти відновлювальних систем. Наприклад, завдяки обчислювальним методам, було розроблено нові сонячні елементи з підвищеною конверсією сонячної енергії, що дозволяє збільшити їхню ефективність.

Крім того, важливою галуззю є моделювання хімічних процесів у виробництві енергії. Наприклад, комп'ютерна хімія допомагає оптимізувати процеси горіння біопалив, що дозволяє зменшити викиди шкідливих речовин. Також вона використовується для розробки нових каталізаторів для водневої енергетики та багатьох інших аспектів відновлювальних джерел енергії.

Можливість передбачати та аналізувати взаємодію хімічних сполук на молекулярному рівні дозволяє створювати більш стійкі та продуктивні технології для відновлювальних джерел енергії. Крім того, комп'ютерна хімія допомагає зменшити кількість відходів та споживання ресурсів у виробництві, що сприяє збереженню навколишнього середовища. Обчислювальні методи дозволяють планувати процеси виробництва так, щоб мінімізувати витрати та негативний вплив на довкілля. Наприклад, комп'ютерні моделі допомагають визначити оптимальні умови для виробництва вітрових турбін, що зменшує витрати на виробництво та монтаж.

Не можна недооцінювати роль комп'ютерної хімії у розвитку зелених технологій та виробництві відновлювальних джерел енергії. Вона відкриває нові можливості для досягнення екологічної стійкості та забезпечення енергетичних потреб суспільства. За допомогою комп'ютерної хімії можна прискорити процеси розробки та впровадження нових технологій, сприяючи тим самим створенню більш здорового та екологічно чистого

майбутнього. Крім того, комп'ютерна хімія сприяє впровадженню машинного навчання та штучного інтелекту у дослідження в галузі зелених технологій. Аналіз великих обсягів даних дозволяє вдосконалити процеси виробництва, виявити нові зв'язки та прогнозувати результати досліджень.

Заключаючи, комп'ютерна хімія відіграє важливу роль у створенні зелених технологій та виробництві відновлювальних джерел енергії. Вона допомагає розв'язувати складні завдання, спрямовані на збереження навколишнього середовища та раціональне використання ресурсів, і сприяє розвитку сучасних технологій, які допомагають нам рухатися до більш сталого та екологічно чистого майбутнього.

1. Chemical History. Edited C.A Russel; G.K Roberts. The Royal Society of Chemistry, 2005
2. HyperChem™, Release 8.0.8, Serial N 12-800159179999; Dealer: Vilensky
3. Lewars E.G. Computational Chemistry: Introduction to the Theory and Applications of Molecular and Quantum Mechanics. – Springer Science + Business Media B.V., 2011.
4. Chemical and Process-Design Handbook, James G. Speight. McGRAW-HILL. 2002