

SNAPSHOT OF THE CHEMICAL REACTION

V. V. ERYOMIN,
I. M. UMANSKII

The main ideas involved in the studies of transition state structure and dynamics of elementary chemical reactions are discussed. The control of chemical reactions using the sequences of ultrashort laser pulses is considered.

Изложены идеи основных методов исследования структуры переходного состояния и динамики элементарных химических реакций. Рассмотрены возможности управления химическими реакциями с помощью последовательности сверхкоротких лазерных импульсов.

"ФОТОГРАФИЯ" ХИМИЧЕСКОЙ РЕАКЦИИ

В. В. ЕРЕМИН

Московский государственный университет
им. М.В. Ломоносова

И. М. УМАНСКИЙ

Саратовский государственный аграрный университет

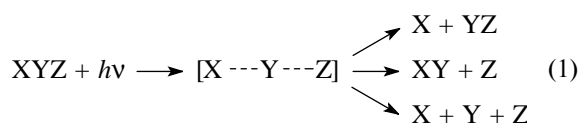
ВВЕДЕНИЕ

Химические реакции очень редко бывают простыми. Большинство из них включают сложную последовательность отдельных стадий, так называемых элементарных реакций. Что представляют собой элементарные реакции? На простейшем уровне можно сказать, что реакция, которую нельзя разбить на более простые, называется элементарной. Существует и другое определение, имеющее более ясный химический смысл: *элементарная химическая реакция — это единичный акт разрыва и/или образования химических связей*. Строго говоря, такой процесс не является по-настоящему элементарным. Многие реакции начинаются с термического или фотохимического возбуждения молекул, при котором связи ослабляются, но не разрываются, поэтому элементарным в этих случаях можно считать не разрыв связей, а возбуждение молекулы. Однако если исследовать процесс возбуждения более детально, то и он может оказаться многостадийным [1].

Таким образом, абсолютно строгого определения элементарной реакции нет. Одна и та же реакция может оказаться элементарной или составной в зависимости от глубины ее исследования. В любом случае абсолютно все химические реакции включают процессы образования и разрыва отдельных химических связей, поэтому будем придерживаться выделенного выше определения. Изучением элементарных процессов занимается специальный раздел химии — химическая динамика. Мы расскажем о некоторых последних теоретических и экспериментальных достижениях фемтосекундной спектроскопии, одного из разделов химической динамики, который основан на использовании сверхкоротких лазерных импульсов для исследования и инициирования химических реакций, протекающих в газовой или жидкой фазе.

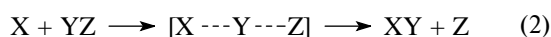
ПЕРЕХОДНОЕ СОСТОЯНИЕ

Элементарные реакции образования и разрыва связей бывают двух основных типов: мономолекулярные (один реагент)



Реагент Переходное состояние Продукты

и бимолекулярные (два реагента):



Реагенты Переходное состояние Продукты

В первом случае происходит разрыв связей X–Y или Y–Z или их обоих одновременно под действием света, во втором случае разрывается связь Y–Z и образуется новая связь X–Y. Бимолекулярные реакции иногда называют столкновением, мономолекулярные – полустолкновением.

Ни одна химическая реакция не протекает мгновенно. Во всех реакциях между реагентами и продуктами существует некое промежуточное образование – так называемое *переходное состояние или переходный (активированный) комплекс*, в котором некоторые связи ослаблены (а некоторые могут быть усилены) по сравнению с реагентами. Строгого определения этого понятия нет. В одних теориях переходное состояние имеет четкую структуру и характеризуется точными значениями межъядерных расстояний, в других оно имеет расплывчатую структуру и описывается широким диапазоном расстояний. Для наших целей вполне можно использовать простое определение: *переходное состояние – это непрерывная совокупность всех конфигураций ядер, соответствующих переходу от реагентов к продуктам*. То же самое можно сформулировать еще проще: *переходное состояние – это уже не реагенты, но еще не продукты*.

В простейшей модели химической реакции атомы представляют собой твердые шарики, которые движутся по законам классической механики (например, законам Ньютона) по поверхности потенциальной энергии. Последнее понятие является ключевым для квантовой химии, и в частности для химической динамики [2]. Поверхность потенциальной энергии – это зависимость общей энергии взаимодействия всех ядер и электронов химической системы от всех межъядерных расстояний. Минимумы этой поверхности соответствуют устойчивым конфигурациям ядер – реагентам и продуктам, максимумы – переходным состояниям.

Для системы трех атомов XYZ поверхность потенциальной энергии четырехмерна (три межъядерных расстояния и само значение энергии). При описании бимолекулярной реакции (2) обычно рассматривают зависимость потенциальной энергии не от трех, а от двух межъядерных расстояний: X–Y (r_1) и Y–Z (r_2). При этом угол, под которым атом X подлетает к молекуле YZ, считается фиксирован-

ным. В координатах (r_1, r_2) потенциальная энергия в реакции (2) обычно имеет вид, показанный на рис. 1. Эту энергетическую поверхность можно представить в более наглядном виде, если построить ее сечение вдоль некоторой кривой, которую иногда называют координатой химической реакции (рис. 2).

При таком описании переходное состояние соответствует области вблизи максимума энергетической кривой. Для мономолекулярной реакции (1) зависимость потенциальной энергии от расстояний между ядрами вообще может не иметь максимума, и тогда для переходного состояния трудно выбрать какую-либо однозначную конфигурацию.

Основная задача химической динамики – определить структуру переходного состояния и проследить динамику его образования и распада в реальном масштабе времени. Это все равно что снять химическую реакцию на пленку. Каждый кадр – это определенная конфигурация ядер. Некоторые из этих кадров могут быть наиболее интересны, если они содержат информацию о существующих очень короткое время конфигурациях ядер, например о переходном комплексе. Вместе с тем для полного описания химической реакции важна вся пленка,

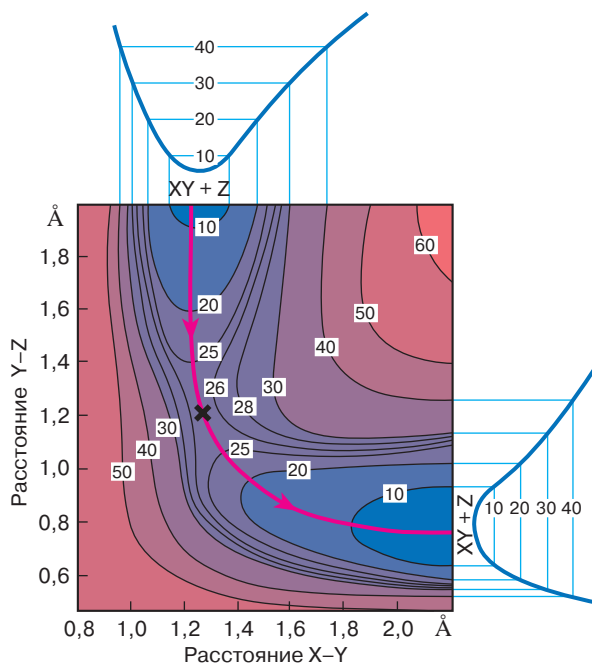


Рис. 1. Типичная поверхность потенциальной энергии для элементарной реакции взаимодействия атома с двухатомной молекулой. Цифрами отмечены уровни равной энергии. Сверху и справа приведены одномерные проекции этой поверхности, которые показывают зависимость потенциальной энергии двухатомных молекул XY и YZ от межъядерных расстояний. Красная линия отображает изменение координаты реакции

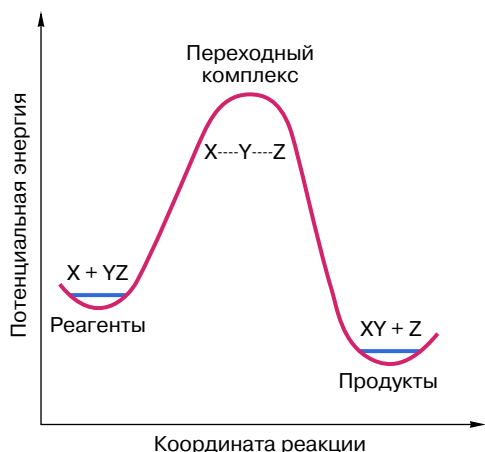
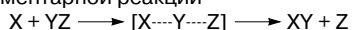


Рис. 2. Энергетическая диаграмма бимолекулярной элементарной реакции



то есть весь процесс перехода от реагентов к продуктам.

КОСВЕННЫЕ МЕТОДЫ ИЗУЧЕНИЯ ДИНАМИКИ РЕАКЦИЙ

Проблема описания элементарных химических реакций в реальном масштабе времени заключается в том, что они чрезвычайно быстры. Реакции происходят главным образом за счет колебаний ядер, а частота колебаний очень велика. Например, молекула иода I_2 колеблется 10^{13} (то есть десять тысяч миллиардов) раз в секунду. Самые быстрые реакции, для которых требуется только одно колебание, могут происходить за время 10^{-14} с. В некоторых случаях бывает так, что возбуждается одно колебание, а реакция происходит за счет другого колебания. При этом требуется определенное время для внутримолекулярного перераспределения энергии. Такие элементарные реакции могут продолжаться довольно долго: $\sim 10^{-11}$ с. Для измерения столь малых промежутков времени используют специальную единицу времени — фемтосекунду (фс): $1 \text{ фс} = 10^{-15}$ с. В этом масштабе время протекания элементарных реакций составляет $10\text{--}10^4$ фс. Реакции в нижней части этого диапазона считают быстрыми, в верхней — медленными.

Теперь вернемся к фотографической аналогии. Что нужно для того, чтобы сфотографировать быстро движущийся объект? Время экспозиции должно быть очень малым, чтобы объект казался неподвижным, иначе изображение будет размазанным, причем тем сильнее, чем больше время экспозиции (вспомните фотографии ночной Москвы, на которых фары движущихся машин оставляют следы в виде сплошных ярких линий). То же самое справедливо для химической реакции: время измерения ядерной конфигурации должно быть настолько ма-

лым, чтобы движение ядер было практически замороженным.

Попробуем хотя бы грубо оценить это время, найдя верхнюю границу для скорости относительного движения ядер в молекуле. Рассмотрим в качестве примера молекулу F_2 . Энергия связи ядер в этой молекуле равна 150 кДж/моль . Относительное движение ядер можно рассматривать как движение одной частицы с эффективной массой $m = m_1 \times m_2 / (m_1 + m_2) = 19 \cdot 19 / 38 = 9,5 \text{ г/моль}$. Максимально возможная скорость этой частицы определяется тем условием, что кинетическая энергия не должна превышать энергию связи: $mv^2/2 < E_{\text{св}}$, откуда следует, что

$$v_{\text{max}} < \sqrt{\frac{2E_{\text{св}}}{m}} = \sqrt{\frac{2 \cdot 1,5 \cdot 10^5 \text{ Дж/моль}}{0,0095 \text{ кг/моль}}} \sim 5600 \text{ м/с.}$$

Будем считать, что ядра практически неподвижны, если за время эксперимента они проходят расстояние не более $0,01 \text{ \AA}$ ($0,001 \text{ нм} = 10^{-12} \text{ м}$), тогда минимальное время составляет

$$t_{\text{min}} = \frac{10^{-12} \text{ м}}{5600 \text{ м/с}} = 1,8 \cdot 10^{-16} \text{ с} \sim 0,2 \text{ фс.}$$

Это очень грубая оценка. В действительности ядра практически неподвижны в течение нескольких фемтосекунд.

Возможность осуществлять эксперименты с фемтосекундным разрешением появилась только в конце 1980-х годов, когда был изобретен способ сжатия лазерных световых импульсов до длительности 6 фс, а до этого времени структуру переходных состояний и динамику элементарных реакций определяли с помощью косвенных методов: теоретических и экспериментальных.

Теоретически основную задачу химической динамики можно решить (принципиально) следующим образом. Методами квантовой химии можно рассчитать поверхность потенциальной энергии для заданной системы ядер, а затем решить квантово-механические или классические уравнения движения и определить динамику движения ядер по этой поверхности. В качестве примера такого решения на рис. 3 приведены рассчитанные траектории движения ядер для быстрой реакции $A + BC \longrightarrow AB + C$ и медленной реакции $KCl + NaBr \longrightarrow KBr + NaCl$ [3, 4]. В первой реакции время жизни переходного состояния около 10 фс, во второй около 5 пс = 5000 фс.

Экспериментальные косвенные измерения основаны на следующей идее: пусть известно состояние молекул или атомов до реакции и известно также их состояние после реакции. Сравнивая одно с другим, иногда можно сделать выводы о времени жизни и структуре переходного состояния. Например, если создать пучок молекул CH_3I , ориентированных в одном направлении, и подействовать на

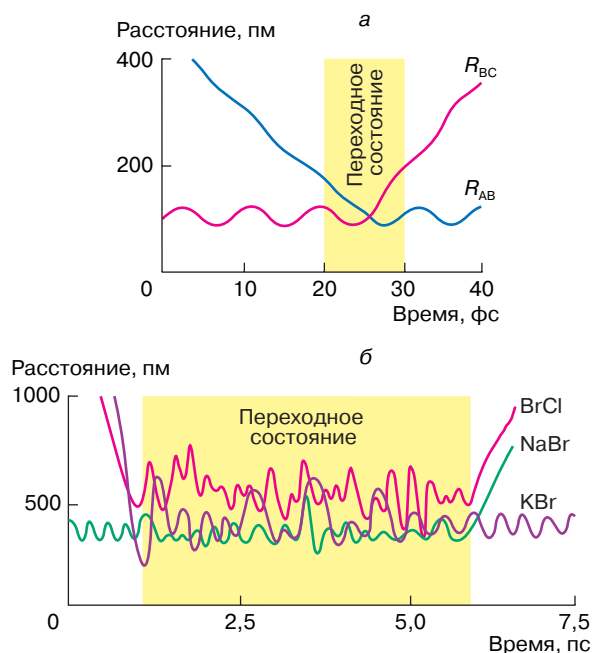
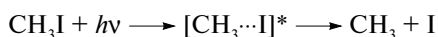


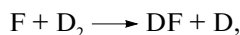
Рис. 3. Классические траектории движения ядер. Примерные области существования переходного комплекса выделены желтым цветом; а – модельная реакция $A + BC \rightarrow AB + C$. Атом А сталкивается с колеблющейся молекулой BC; при этом образуются колеблющаяся молекула АВ и атом С. Переходное состояние в этой реакции короткоживущее; б – реальная реакция $KCl + NaBr \rightarrow KBr + NaCl$. Реакция характеризуется долгоживущим переходным состоянием

них поляризованным лазерным излучением, то произойдет реакция мономолекулярного распада:



(звездочка обозначает возбужденное электронное состояние). Оказывается, что все атомы иода, образующиеся в этой реакции, движутся примерно в одном направлении. Это означает, что распад возбужденной молекулы происходит намного быстрее, чем ее вращение, то есть время жизни переходного состояния не превышает 1000 фс.

Более сложный пример. В одном из экспериментов изучали реакцию



происходящую при лобовом столкновении пучков атомов фтора и молекул дейтерия. Измеряли угловое распределение молекул DF, находящихся в разных колебательных состояниях, по скоростям при разных энергиях столкновения. Оказалось, что при низкой энергии столкновения (рис. 4, а) образующиеся молекулы DF разлетаются преимущественно в том направлении, откуда прилетел атом фтора, что свидетельствует об образовании короткоживущего переходного состояния. При более высокой энергии

столкновения колебательно возбужденные молекулы DF (колебательное квантовое число $\nu = 4$) разлетаются равномерно во всех направлениях (рис. 4, б), откуда следует, что в этом случае среднее время жизни переходного комплекса DDF превосходит время вращения.

Такого рода эксперименты требуют чрезвычайно изощренных методов анализа состояния реагентов и продуктов реакции. Для того чтобы приготовить исходные вещества в необходимом энергетическом состоянии и с заданной пространственной ориентацией, используют метод молекулярных пучков. Пространственное распределение продуктов реакции и их энергетические состояния определяют методами масс-спектрометрии и лазерной спектроскопии. Эти экспериментальные методы к концу прошлого десятилетия достигли высокой степени

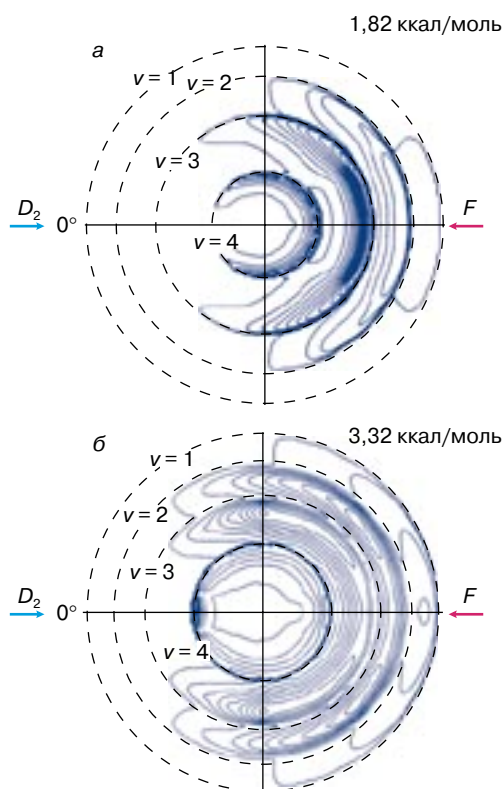


Рис. 4. Угловое распределение молекул DF, образующихся в реакции $F + D_2 \rightarrow DF + D$, по скоростям; а – энергия столкновения 1,82 ккал/моль. Молекулы во всех колебательных состояниях ($\nu = 1-4$) разлетаются преимущественно в направлении атома фтора; б – энергия столкновения 3,32 ккал/моль. Колебательно-возбужденные молекулы ($\nu = 4$) разлетаются во всех направлениях, что свидетельствует о долгоживущем переходном состоянии. Пунктирные линии – максимальные значения скорости в данном колебательном состоянии (из ст.: Neumark D.M. et al. // J. Chem. Phys. 1985. Vol. 82. P. 3067)

развития, и можно утверждать, что уже тогда существовали достаточно точные косвенные методы определения структуры и времени жизни переходных комплексов многих элементарных реакций.

Тем не менее для детального изучения динамики элементарных реакций даже такой современной экспериментальной техники оказалось недостаточно. В этой технике (пучки, лазеры, масс-спектрометры) не было главного – временного разрешения. Ситуацию можно сравнить с отчетом о футбольном матче. Если нам сказали, что Франция выиграла у Бразилии со счетом 3 : 0, то мы можем догадаться, что Франция играла лучше, имела преимущество и, наверное, создала больше голевых моментов. Можно сказать, что счет 0 : 0 – аналог “исходных вещей”, 3 : 0 – аналог “продуктов реакции”, а слова о том, что “Франция играла лучше”, – аналог выводов о строении переходного комплекса. И все же такой куцей информации мало для того, чтобы хорошо представлять ход игры (или элементарной реакции). Желательно знать, на каких минутах (и кто) забивал голы, сколько и когда было ударов по воротам и т.д. В переводе на язык химической динамики это означает, что нужно получить информацию об изменениях в строении переходного комплекса в каждый момент времени.

ДИНАМИКА ЭЛЕМЕНТАРНЫХ РЕАКЦИЙ В РЕАЛЬНОМ МАСШТАБЕ ВРЕМЕНИ

Ключом к изучению динамики образования и распада переходного комплекса в реальном времени стало использование сверхкоротких световых импульсов длительностью от нескольких фемтосекунд до нескольких десятков [5]. В простейшей схеме фемтосекундного анализа применяются два световых импульса: первый импульс (импульс накачки) инициирует элементарную реакцию, а второй (зондирующий) импульс, который стартует с некоторой задержкой относительно первого, считывает информацию о строении переходного комплекса в момент воздействия на него. Второй импульс как бы фотографирует переходный комплекс с очень короткой экспозицией. Используя различные времена задержки между двумя импульсами, можно получить подробную покадровую информацию о протекании химической реакции.

Поясним эту схему на примере реакции фотодиссоциации иодциана (рис. 5):



Первый световой импульс с длиной волны λ_1 возбуждает молекулу, то есть переводит ее в электронное состояние с потенциальной энергией $V_1(R)$, где R – расстояние между атомом иода и центром масс фрагмента CN. В этом состоянии молекула неустойчива и начинает распадаться на части: I и CN, которые удаляются друг от друга. Зондирующий импульс с длиной волны λ_2^* может перевести фраг-

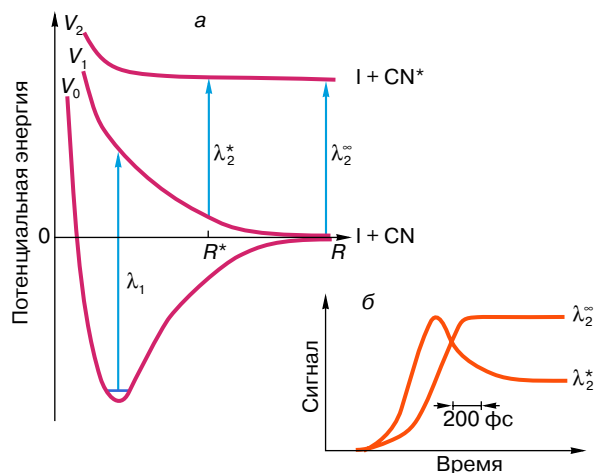


Рис. 5. *a* – диаграмма потенциальной энергии для молекулы ICN. R – расстояние между атомом I и центром масс фрагмента CN. $V_0(R)$ – основное электронное состояние, $V_1(R)$ и $V_2(R)$ – возбужденные состояния. λ_1 – длина волны возбуждающего лазерного импульса. Зондирующий импульс с длиной волны λ_2^* возбуждает (“фотографирует”) только переходное состояние $[\text{I}\cdots\text{CN}]^*$, в котором межъядерное расстояние равно R^* . Зондирующий импульс с длиной волны λ_2^∞ возбуждает только продукты реакции. *б* – зависимость экспериментального сигнала от времени при разных длинах волн зондирующего импульса (из ст.: Bernstein R.B., Zewail A.H. // J. Chem. Phys. 1989. Vol. 90. P. 829)

мент CN в возбужденное состояние CN^* (с потенциальной энергией $V_2(R)$), которое самопроизвольно излучает свет (флуоресцирует). Интенсивность флуоресценции CN и есть экспериментально измеряемый сигнал.

Самое главное заключается в том, что импульс λ_2^* с наибольшей вероятностью возбуждает фрагмент CN в тот момент, когда расстояние R таково, что разность энергий $V_2(R) - V_1(R)$ равна частоте, соответствующей длине волны λ_2^* :

$$V_2(R^*) - V_1(R^*) = \frac{hc}{\lambda_2^*},$$

где h – постоянная Планка, c – скорость света. Это одно из проявлений принципа Франка–Кондона. Таким образом, максимум сигнала при длине волны зондирующего импульса λ_2^* показывает, в какой момент времени длина переходного комплекса равна R^* . Если зондирующий импульс имеет длину волны λ_2^∞ , которая соответствует разности между предельными (асимптотическими) значениями потенциалов V_1 и V_2 :

$$\lambda_2^\infty = \frac{hc}{V_2(\infty) - V_1(\infty)},$$

то такой импульс может возбудить молекулу CN только после окончания реакции распада, то есть он

зондирует только продукт реакции и таким образом фиксирует момент окончания реакции. Изменение длины волны зондирующего импульса от λ_2^* до λ_2^∞ позволит пройти аналогичным образом всю шкалу изменения R от R^* до $R \rightarrow \infty$ и найти зависимость $R(t)$ в процессе реакции, то есть определить динамику реакции распада.

Впервые такой эксперимент с фемтосекундным временным разрешением был проведен в 1987 году в Калифорнийском технологическом институте группой профессора А. Зивейла (A. Zewail). В дальнейшем двухимпульсная схема накачка–зондирование и различные ее модификации были применены к исследованию многих других реакций – сначала элементарных, а затем и составных. Для иллюстрации возможностей фемтосекундной импульсной спектроскопии в исследовании химической динамики перечислим некоторые основные типы таких реакций:

- реакции фотодиссоциации (HgI_2 , CH_3I , NaI),
- бимолекулярные реакции ($\text{Br} + \text{I}_2 \rightarrow \text{BrI} + \text{I}$),
- реакции изомеризации (*цис*- $\text{C}_6\text{H}_5\text{CH}=\text{CHC}_6\text{H}_5 \rightarrow$
 \rightarrow *транс*- $\text{C}_6\text{H}_5\text{CH}=\text{CHC}_6\text{H}_5$),
- реакции элиминирования ($\text{CF}_2\text{ICF}_2\text{I} \rightarrow \text{C}_2\text{F}_4 +$
 $+ \text{I}_2$),
- реакции Дильса–Альдера,
- реакции с переносом заряда,
- реакции внутри- и межмолекулярного переноса протона (кислотно-основные реакции),
- реакции таутомеризации.

Во всех этих случаях удалось полностью описать динамику образования и распада переходного комплекса в реальном масштабе времени.

ОТ ИССЛЕДОВАНИЯ ДИНАМИКИ К УПРАВЛЕНИЮ

Химия отличается от других естественных наук тем, что не только изучает окружающий мир, но и активно вмешивается в него и видоизменяет его, создавая новые материалы, процессы и реакции. В этом смысле химическая динамика делает только первые шаги.

После того как были достигнуты первые успехи в изучении динамики реакций в реальном времени, исследователи задались вопросом: как можно управлять динамикой, то есть в идеале пускать химическую реакцию по заранее запланированному пути и с заданной скоростью? Перефразируя это на языке аналогий, можно сказать, что после того, как люди научились фотографировать реакции, они решили конструировать свои собственные фотографии и даже снимать “химические” фильмы.

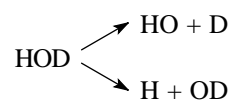
Эта простая по постановке задача на самом деле является невообразимо сложной. Во-первых, для ее решения надо знать различные пути реакции, то есть иметь в своем распоряжении всю информацию

о многомерной поверхности потенциальной энергии. Во-вторых, надо научиться помещать атомные ядра в заданные участки этой поверхности. Первую задачу квантовые химики научились решать довольно точно [2]. Для обсуждения второй задачи надо сперва понять, какими средствами воздействия на химическую реакцию в газовой фазе мы располагаем. Универсальное и мощное средство – лазерное излучение. Каждый лазерный импульс характеризуется по меньшей мере тремя параметрами: длительностью, интенсивностью и частотой колебаний электрического поля. Изменяя любой из параметров импульса накачки, который инициирует элементарную реакцию, можно изменять течение самой реакции.

В настоящее время для некоторых двухатомных молекул теоретически и экспериментально решена следующая задача: каким должно быть электрическое поле импульса накачки, чтобы к моменту времени t после этого импульса ядра подошли друг к другу на расстояние r с относительной скоростью v ? Для расчета таких полей используют теорию оптимального управления. При этом оказывается, что частота электрического поля в импульсе должна зависеть от времени. Это означает, что разные участки молекулы должны возбуждаться импульсом в разные моменты времени и тогда к моменту времени t сумма этих возбуждений даст желаемый результат.

Для трехатомных молекул $\text{X}-\text{Y}-\text{Z}$ аналогичную задачу можно поставить следующим образом: каким должно быть электрическое поле импульса накачки, чтобы селективно возбудить локальное колебание $\text{X}-\text{Y}$, а колебание $\text{Y}-\text{Z}$ оставить невозбужденным? Эта задача довольно сложна, так как между двумя колебаниями существует взаимодействие и часть энергии, вложенной в одно из колебаний, в конце концов обязательно перетечет на второе колебание. Проблему удалось решить пользуясь тем, что перераспределение энергии между колебаниями (другое название этого явления – релаксация) занимает некоторое, иногда довольно продолжительное время, а селективное возбуждение инфракрасным лазерным импульсом можно осуществить достаточно быстро, за сотни фемтосекунд.

Используя это обстоятельство, химики смогли осуществить полностью контролируемую фотодиссоциацию молекулы HOD по любому из двух направлений:



Это сделали с помощью двухимпульсной схемы: первый (инфракрасный) импульс раскачивал молекулу по одному из двух выбранных колебаний, а второй (ультрафиолетовый) импульс, запущенный с некоторой задержкой относительно первого, разрушал молекулу по этому колебанию, переводя ее в

неустойчивое возбужденное электронное состояние. В такой схеме появляется новый управляющий параметр — время задержки между импульсами.

Этот экспериментальный результат выглядит очень простым, однако он обозначает начало развития нового направления в химической динамике — химии отдельных связей (*bond-specific chemistry*). Наверное, пройдет много времени, прежде чем такая техника селективного разрыва или образования отдельных связей найдет применение в практическом химическом синтезе. Братья Люмьер в прошлом веке вряд ли смогли бы снять коммерческий фильм вроде “Титаника”, однако без их примитивного аппарата “Титаника” не было бы. Поэтому можно надеяться, что лазерное управление химической динамикой со временем станет общедоступной синтетической техникой, с помощью которой можно будет вытворять химические чудеса, недоступные обычным методам.

Использование последовательности нескольких лазерных импульсов с управляемыми параметрами позволяет приводить ядра атомов в нужные участки потенциальной поверхности. В химической динамике такое управление называют пассивным, поскольку заселенность возбужденных состояний молекул определяется принципом Франка—Кондона, согласно которому электронные переходы происходят преимущественно при тех межъядерных расстояниях, при которых разность потенциальных энергий равна частоте поглощаемого или испускаемого света.

В схемах активного управления используют принцип квантовой интерференции. Молекулу возбуждают не одним, а двумя одинаковыми импульсами с небольшой задержкой между ними. В зависимости от времени задержки второй импульс может увеличивать или уменьшать заселенность возбужденного состояния, созданную первым импульсом. Это похоже на то, как при интерференции двух световых лучей с постоянной разностью фаз суммарная интенсивность света в одних местах увеличивается, а в других уменьшается. Использование интерференции заселенностей позволяет обойти принцип Франка—Кондона и дает еще один управляющий параметр, а именно разность фаз между двумя импульсами.

Таким образом, мы видим, что управление химической динамикой, несмотря на очень короткую историю (около десятилетия), довольно богато идеями и активно развивается в разных направлениях.

ВЫВОДЫ

1. Современная фемтосекундная лазерная спектроскопия позволяет наблюдать элементарные химические реакции в реальном масштабе времени шаг за шагом. Время действия фемтосекундных лазерных импульсов намного меньше времени протекания даже самых быстрых реакций. В течение импульса ядра практически заморожены. Они не

изменяют своего положения, поэтому можно определить строение переходного комплекса в разные моменты времени и проследить динамику его образования из исходных веществ и распада на продукты реакции.

2. Развитие теоретических методов квантовой динамики и совершенствование лазерных методов возбуждения молекул позволяют конструировать химические реакции, а именно создавать такие схемы воздействия световых импульсов на молекулу, что селективно разрываются или образуются заданные химические связи. Управление элементарными реакциями — самая молодая область химической динамики. Пока удалось осуществить селективный разрыв связей только в некоторых простейших многоатомных молекулах.

3. Современные достижения в области исследования динамики элементарных химических реакций и управления этой динамикой имеют фундаментальный характер и пока не нашли практических приложений. Новые экспериментальные импульсные методы изучения динамики демонстрируют тесное взаимодействие между химией и физикой, а теоретические методы описания динамики используют новейшие достижения математики. Известно, что самые интересные события происходят на границах раздела наук, поэтому можно надеяться, что химическая динамика будет бурно развиваться и ближайшие годы принесут много новых интересных идей и результатов.

ЛИТЕРАТУРА

1. Семиохин И.А., Страхов В.В., Осипов А.И. Химическая кинетика. М.: Изд-во МГУ, 1995. С. 7.
2. Степанов Н.Ф. Потенциальные поверхности и химические реакции // Соросовский Образовательный Журнал. 1996. № 10. С. 33—41.
3. Эткинс П. Физическая химия. М.: Мир, 1980. Т. 2. С. 487.
4. Atkins P. Physical Chemistry. 5th ed. Oxford: Oxford Univ. Press, 1994. P. 956.
5. Gruebele M., Zewail A. Ultrafast Reaction Dynamics // Phys. Today. 1990. № 5. P. 24.

* * *

Вадим Владимирович Еремин, кандидат физико-математических наук, доцент химического факультета МГУ. Область научных интересов — квантовая динамика молекул, теория внутримолекулярных процессов. Автор и соавтор более 20 учебных пособий по химии, соавтор 40 научных работ.

Игорь Маркович Уманский, доктор физико-математических наук, профессор кафедры инженерной физики Саратовского государственного аграрного университета. Область научных интересов — молекулярная спектроскопия, теория сверхбыстрых процессов, квантовая динамика. Автор и соавтор более 90 научных работ.