

Hogyan mozognak az atomok kémiai reakciók során?

Lendvai György

A kémiának, mint a vegyületek tulajdonságaival és reakcióival foglalkozó diszciplinának az egyik legfontosabb kérdése, hogy a kémiai reakciók miért játszódnak le, és miért úgy, ahogy. A válasz abban rejlik, hogy milyen kölcsönhatás érvényesül, milyen erők hatnak az atomok közt, miközben a reakcióban reaktáns-elrendezésből termék-elrendezésbe mennek át. Ezeket az erőket adja meg a potenciális energia felület, a kölcsönhatásnak megfelelő potenciális energia mint az atomok koordinátáinak függvénye.

A potenciális energia felület kísérletileg nem mérhető, ezért az, hogy milyenek a tulajdonságai és azok hogyan jelennek meg a makroszkopikusan megfigyelhető paraméterekben, a kísérlet és az elmélet szoros együttműködésével deríthető fel. A reakciók elméleti dinamikai vizsgálatában az atomok mozgását követjük nyomon. A kapott eredmények alapján számítjuk ki a kísérletileg mérhető paramétereket, amilyen például a reakció-hatáskeresztmetszet, a termékek rezgési gerjesztettségének mértéke, vagy a sebességi együttható. Számítógépes modellezéssel láthatóvá is tehető az atomok mozgása a reakció során. A mozgás tanulmányozásával magyarázatot kaphatunk például arra, hogy miért nem azonos a sebességi együttható hőmérsékletfüggését jellemző Arrhenius-féle aktiválási energia a reaktánsokat a termékektől elválasztó potenciálgát magasságával, vagy megjósolhatjuk, hogy a reaktánsok mely szabadsági fokainak gerjesztése segíti elő a reakció lejátszódását.

Az előadásban az MTA TTK-ban folyó reakciódinamikai kutatások eredményei közül mutatok be néhányat.