

# BEVEZETÉS

## Mi a reakciódinamika?

Elemi fizikai és kémiai sebességi folyamatok molekuláris mechanizmusának tanulmányozása.

Széles területek:

Ütközések, intramolekuláris mozgások, különböző fázisokban, fázishatárokon lejátszódó reakciók, események létrehozása és vizsgálata ...

## Kémiai reaktivitás:

a reakciódinamika végső, makroszkopikus célja, a makroszkopikus kinetika molekuláris magyarázata.

## Vizsgálandó területek (minimális program!):

- dinamika tanulmányozásának szükségessége
- reaktív és nem-reaktív dinamika alapjai, pl.: molekuláris ütközések elmélete; reakció hatáskeresztmetszet, reakció valószínűség fogalmának bevezetése; szórási elmélet (klasszikus + kvantummechanikai tárgyalás)
- molekuláris reakciódinamika gyakorlata (kísérleti módszerek)
- kémiai dinamika, kémiai reaktivitás alapjai: kémiai reakciók sebességének elméleti, számítási módszerei (TST, VTST); adiabatikus és nem-adiabatikus reakciódinamika
- nem-reaktív dinamika: folyadék relaxáció, gerjesztett állapotok megszűnésének módjai
- töltéstranszfer reakciók
- nem-adiabatikus reakciók

## Egy példa – információ és kérdésfeltevések



Energetika: exoergikus reakció

### Kérdések:

A spécieszek ütközésének energiája hogyan adódik át e termékekre?

A reakcióban felszabaduló energia hogyan oszlik el a termék molekulákban?

Figyelem! Még elektronikus alapállapon zajló reakció esetén is maradt 3 energia leadási módus!

### Potenciális energiagörbék:

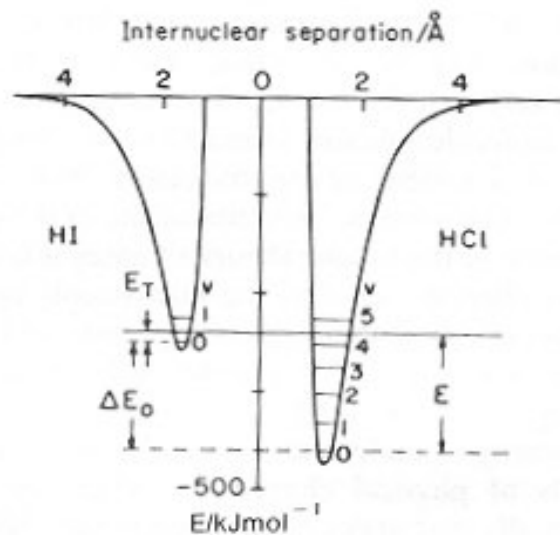


Fig. 1.1. Schematic illustration of the energetics of the reaction  $\text{Cl} + \text{HI} \rightarrow \text{I} + \text{HCl}$ . Starting from ground state HI with translational energy  $E_T$ , we can form HCl in any vibrational-rotational state with an energy less than the total available energy  $E$ . The  $\Delta E_0$  for the reaction is the difference in bond dissociation energies:  $\Delta E_0 = D_0(\text{HI}) - D_0(\text{HCl}) = -133 \text{ kJ mol}^{-1}$ .

## További érdekességek, szempontok:

Reakció „bulk” gázfázisban, normál körülmények között

- gyakori ütközések → translációs energia → hő

Reakció alacsony nyomáson (mikroszkopikus kimenet)

- nincs ütközés → relaxáció sugárzás által → ez mérhető:  
infravörös kemilumineszcencia ⇒ állapotok relatív populációja

- alternatíva: spontán emisszió helyett indukált emisszió vagy fény abszorpció létrehozása.

## Energiaeloszlás

→ elsődleges ütközések → elsődleges eloszlás

(→ nemreaktív rugalmatlan ütközések → termális eloszlás)

Tipikus jelenség a populáció inverzió: gerjesztett állapot (pl. vibráció) populációja sokkal nagyobb mint az alapállapoté – eltérés a termikus Boltzmann-eloszlástól.

### Boltzmann-eloszlás

$$p_i = \frac{n_i}{N} = \frac{g_i \cdot \exp\left(-\frac{E_i}{kT}\right)}{\sum_i g_i \exp\left(-\frac{E_i}{kT}\right)} = \frac{g_i \cdot \exp\left(-\frac{E_i}{kT}\right)}{Q}$$

következmény ⇒ egy rezonátorban lézerhatást válthat ki  
(light amplification by stimulated emission of radiation)

Példa:  $F + H_2 \rightarrow HF + H$

a)  $CF_3I$  *in situ* fotolízise → F atomok

b)  $F + H_2 \rightarrow$  gerjesztett vibrációs állapotú HF atomok ⇒ IR  
laser → kémiai lézer

## Mit tanulhatunk molekuláris dinamikából?

- *gyakorlati közelítés* pl. lézerek → működés
  - *elméleti közelítés*: molekuláris történések megértése alapján a kémiai reakciók makroszkopikusan észlelhető tulajdonságainak megjóslása.
- 
- elemi ütközések
  - elemi reakciók
  - összetett reakciók
  - kondenzált fázisú reakciók
  - biológiailag fontos reakciók...
- 
- nyilván ez is maga után von egy csomó gyakorlati következményt.