

# ELEMI REAKCIÓK – MOLEKULÁRIS MODELLEK

## Potenciálfelületek

A kémiai reakciók lejátszódása értelmezésének legfontosabb eszköze a potenciális energia felületek megszerkesztése, kiszámítása.

Mi is a potenciális energia felület?

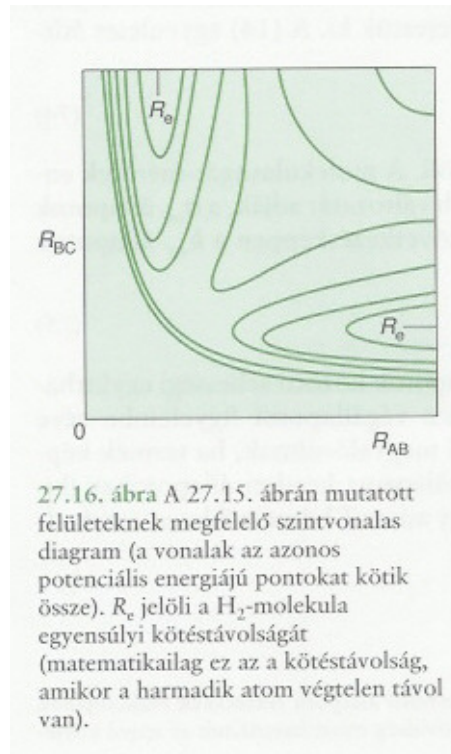
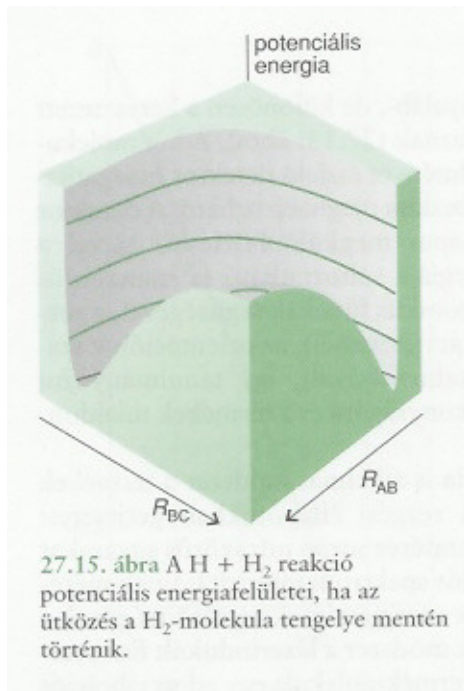
- Kvantummechanika segítségével számítható. Az elektronikus Schrödinger egyenlet megoldásai adott mag-elrendeződés (konfiguráció) mellett adják a potenciális energia felület egy pontját.
- Különböző konfigurációk mellett megoldott Schrödinger egyenlet megoldásai feszítik ki a potenciálfelületeket.
- Implicit feltevés: az elektronok mozgása sokkal gyorsabb a magokénál, így szétválasztható a kezelésük.
- A potenciálfelület tehát a nukleáris konfiguráció függvénye.
- $N$  db atomnál,  $3N-6$  változó írja le a rendszer belső mozgását.
- Ha két molekula ütközik, az egymástól való távolság és relatív orientáció függvényében számítható ki a potenciálfelület.
- Szemléltetése csak 2 szabadsági foknál lehetséges egyszerűen, térbeli koordináta-rendszerben!

Egyszerű példa:  $A + BC \rightarrow AB + C$  reakció potenciálfelülete kollineáris ütközésnél.

- Két szabadsági fok:  $r_{AB}$ ,  $r_{BC}$ .
- Adott  $r_{AB}$ ,  $r_{BC}$  értéknél (lineáris elrendeződés mellett) megoldjuk a Schrödinger-egyenletet.
- Az adott  $r_{AB}$ ,  $r_{BC}$  értékhez a harmadik dimenzióban ábrázoljuk az energia értékét. Ez a reakció potenciálfelülete. A potenciálfelület két dimenzióban is ábrázolható szintvonalas ábraként.

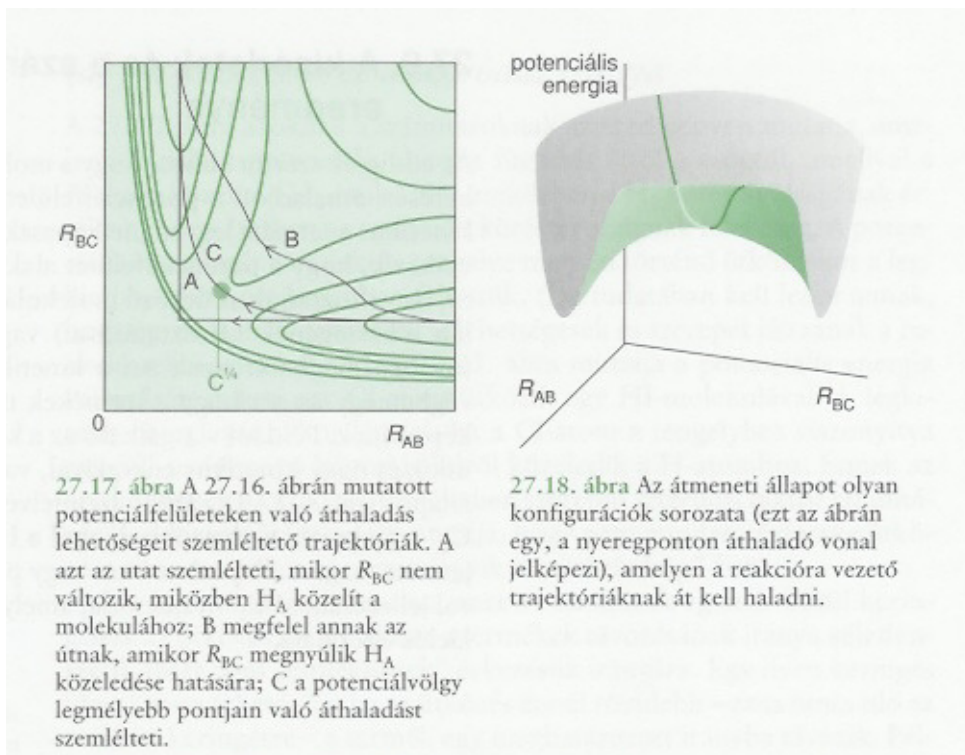
- A rendszer aktuális állapotát egyetlen pont jelzi az ábrán.

ÁBRA: Atkins 27.15, 27.16



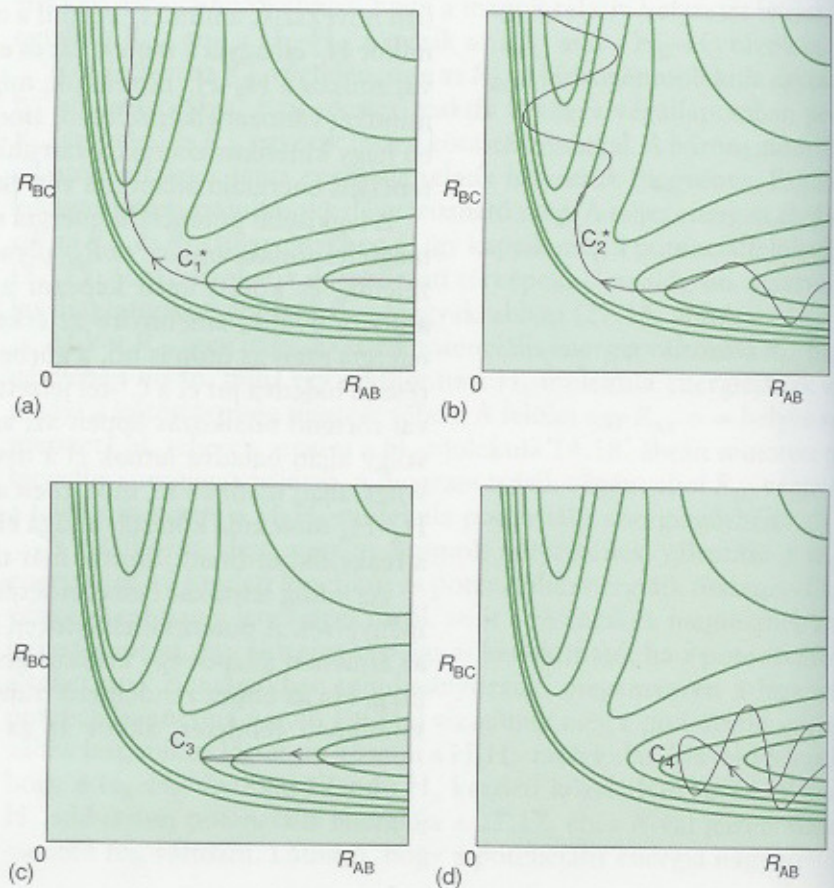
- A potenciálfelület jellemzői: reaktánsok völgye, termékek völgye, átmeneti állapot.
- Átmeneti állapot: nyeregpont. A felület minden irányból konvex, kivéve egyet!

ÁBRA: Atkins 27.17, 27.18



- A rendszerben lezajló ütközést a rendszer által az ütközés során felvett állapotokat összekötő görbe, a trajektória, reprezentálja a potenciálfelületen. Ezt jelenti a potenciál felületen történő „haladás”.
- A potenciálfelületeken klasszikus vagy kvantummechanika segítségével kiszámíthatók a rendszer trajektóriái, amelyek összessége magát az ütközést reprezentálja. Ehhez ismerni kell a reaktánsok kiindulási tulajdonságait.
- Néhány klasszikus trajektória: reakcióra vezető és nem vezető ütközések.

ÁBRA: Atkins 27.19



27.19. ábra Reakcióra vezető (\*) és nem vezető ütközések. (a)  $C_1^*$  a potenciálvölgy legmélyebb pontjain való haladást szemlélteti; (b)  $C_2^*$  megfelel egy olyan reakciónak, amikor a  $H_A$ -atom egy rezgő  $H_{BC}$ -molekulát közelít meg és a képződő  $H_{AB}$ -molekula szintén rezeg, amint  $H_C$  eltávolodik; (c)  $C_3$  olyan reakcióutat mutat, amelyben  $H_A$  egy nem rezgő  $H_{BC}$ -molekulával ütközik úgy, hogy a translációs mozgásának kinetikus energiája nem elegendő a reakció végbemeneteléhez; (d)  $C_4$  azt az ütközést illusztrálja, amikor  $H_A$  és  $H_{BC}$  találkozásakor sem az energia, sem a rezgés fázisa nem megfelelő.

- A reakciókoordináta a reaktáns völgyet a termékvölgyel összekötő mozgás koordinátája. Általában két dimenzióban, egyszerűsítve ábrázoljuk.
- A potenciálfelületek lehetőséget nyújtanak az átmeneti állapot elmélet egyszerűbb formájához és a változatos továbbfejlesztésekhez szükséges mennyiségek kiszámításához.