

## Глава 3. Разглядывая колебания молекулярной модели, можно многое понять

В главе 2 мы получили полную картину колебаний тестовой модели молекулы аллена. Это чисто расчетная картина, содержащаяся в числах. А хотелось бы эти колебания увидеть. С этой целью в папку Programs системы LevInfinite включена утилита MolView. Это отдельно стоящая программа, которую надо запускать средствами операционной системы, а не MatLab, поскольку она написана в среде Delphi с использованием графической библиотеки OpenGL. Такое исключение из правил данной книги сделано ради получения выразительных картинок. В среде MatLab я не научился строить объемные анимационные изображения.

### 3.1. Молекулярная модель в окне утилиты MolView

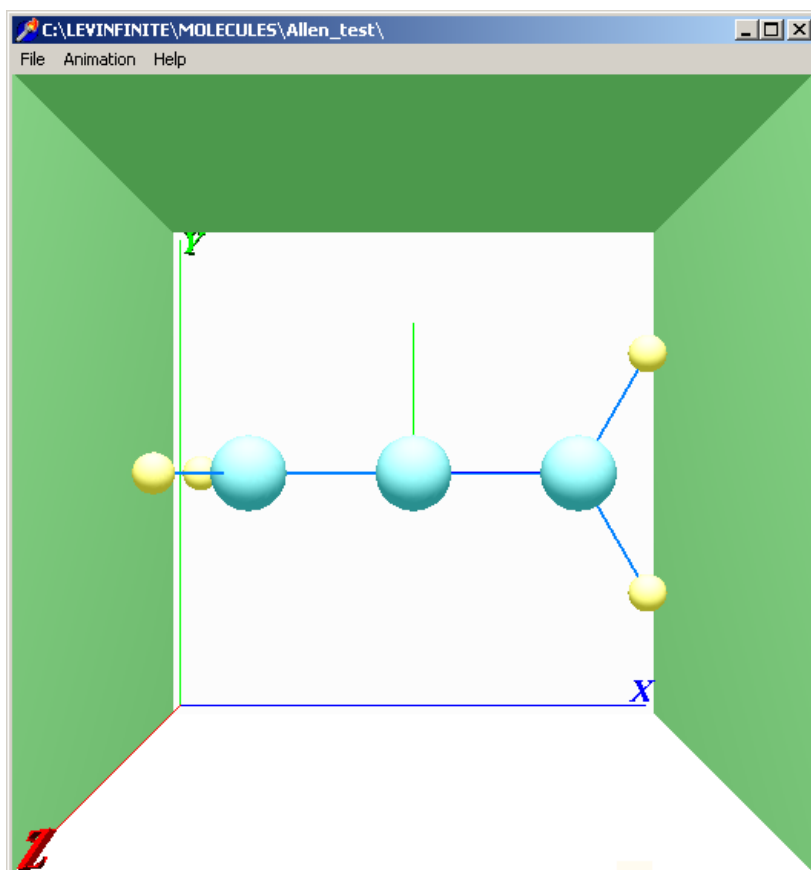
Запустим на счет программу MolView.

#### File -> Open

В обычном для Windows диалоговом окне найдем папку Allen\_test и откроем файл InfTable.txt. Программа облегчает нам поиск, заранее настраивая диалог на общую папку Molecules с моделями и на открытие файла InfTable.txt.

Если программа будет выдавать ошибку чтения одного из файлов модели с диагностикой “0.00000 is not a valid floating-point value...”, значит на вашей машине не настроены региональные стандарты, как было рекомендовано в главе 1.

Если всё в порядке, то получим следующую картину.



Здесь мало что надо пояснять. Разве что раскраску осей декартовых координат. Неподвижная система осей связана со стенами «лаборатории». Модель имеет свою собственную систему декартовых координат. Этой системой мы пользовались, создавая модель в главе 2. Оси этой системы раскрашены так же, как и оси лабораторной системы. Сейчас системы координат ориентированы параллельно. Если вращать модель в пространстве лаборатории, то собственная система координат модели будет вращаться вместе с моделью. Тогда по цвету оси можно будет понять, куда какая ось смотрит в пространстве лаборатории. В данный момент мы видим только ось *y* модели. Ось *x* слилась с синей линией валентной связи. Ось *z* смотрит прямо на нас из центра масс модели, поэтому она не видна. При различных поворотах модели она станет видна.

Поворотами модели и другими аспектами ее изображения можно управлять с помощью клавиатуры. На щелчки мыши клиентская область окна программы не реагирует. Мышью можно только управлять положением и размерами самого окна программы.

В меню Help есть раздел Key ShortCuts, где перечислены все клавиши управления видом модели. Программа написана на английском языке, чтобы не возникали известные всем пользователям гримасы русификации. Здесь я на всякий случай привожу расшифровку этого раздела меню Help по-русски.

Key ShortCuts – клавишные сокращения команд управления видом модели

Initial View – вернуть исходный вид	<b>i</b> (doesn't work in animations)
Rotate of X CounterClockWise – вращать вокруг X против часовой стрелки	<b>Right arrow</b>
Rotate of X antiCounterClockWise – вращать вокруг X по часовой стрелке	<b>Shift+Right arrow</b>
Rotate of Y CounterClockWise – вращать вокруг Y против часовой стрелки	<b>Up arrow</b>
Rotate of Y antiCounterClockWise – вращать вокруг Y по часовой стрелке	<b>Shift+Up arrow</b>
Rotate of Z CounterClockWise – вращать вокруг Z против часовой стрелки	<b>Down arrow</b>
Rotate of Z antiCounterClockWise – вращать вокруг Z по часовой стрелке	<b>Shift+Down arrow</b>
Shift along X positive – сдвинуть вдоль + X	<b>x</b>
Shift along X negaitive – сдвинуть вдоль - X	<b>Shift+x</b>
Shift along Y positive – сдвинуть вдоль + Y	<b>y</b>
Shift along Y negaitive – сдвинуть вдоль - Y	<b>Shift+y</b>
Shift along Z positive – сдвинуть вдоль + Z	<b>z</b>
Shift along Z negaitive – сдвинуть вдоль - Z	<b>Shift+z</b>
Scale positive – увеличить изображение	<b>Left arrow</b>
Scale negaitive – уменьшить изображение	<b>Shift+Left arrow</b>
Walls Draw toggle – убрать-вернуть стены лаборатории	<b>w</b>
Light position to left – сдвинуть свет влево	<b>L</b> (dosn't work in animations)
Light position to right – сдвинуть свет вправо	<b>r</b> (dosn't work in animations)

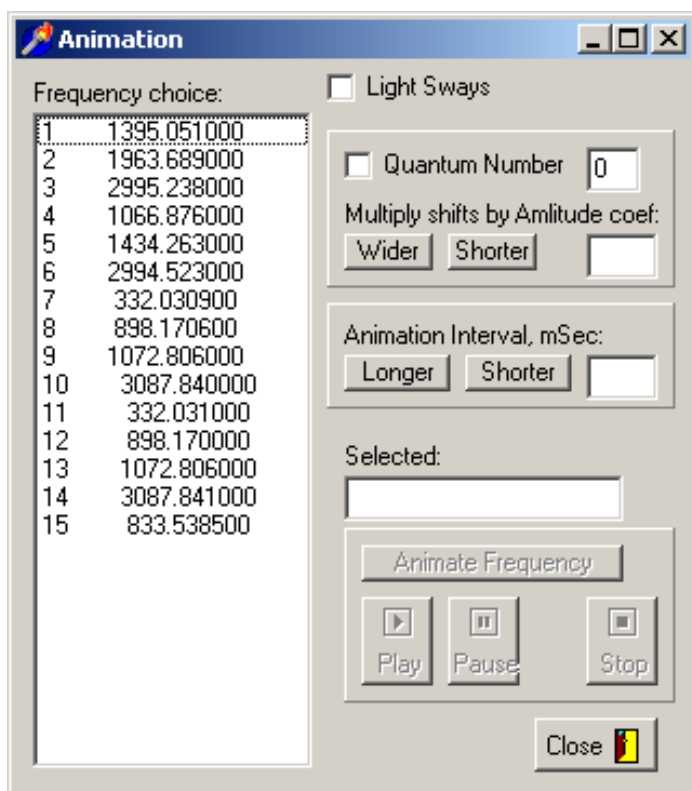
Atom Hides toggle – убрать-вернуть «шкуры» атомов	<b>h</b>
Hides Solid – «шкуры» атомов сплошные	<b>s</b>
Grid – сетчатые	<b>g</b>
Dots – точечные	<b>d</b>
Atom Numbers toggle – показать-убрать номера атомов	<b>n</b>

Опробуйте все эти органы управления видом модели. Возможно, для публикаций такие картинки подходят лучше, чем скопированные из графических окон MatLab.

### 3.2. Наблюдение отдельных нормальных колебаний модели

#### Animation -> Normal Vibrations

Появляется панель управления анимацией нормальных колебаний.



В списке *Frequency choice* приведены частоты всех нормальных колебаний модели в порядке следования блоков симметрии. Заглянув в файлы *Symmetry.txt* и *Ms.txt*, мы узнаем, что первые три частоты ( $m_s = 3$ ) относятся к первому, полносимметричному блоку (тип колебаний *a* относительно зеркально-поворотной оси *s*, *sim* относительно оси *c2x*, *sim* относительно центра симметрии *inv*). Следующие две частоты ( $m_s = 3$ ) относятся ко второму блоку симметрии (*b asim asim*). И так далее.

Щелкнув мышкой по какой-то строке списка, например, по строке 1, мы переносим значение частоты в окошко *Selected*. Теперь программа знает, какое нормальное колебание мы хотим оживить. Активируется кнопка *Animate Frequency*. Естественно щелкнуть по этой кнопке.

#### Animate Frequency

Активируются три кнопки управления «проигрывателем». Естественно нажать мышкой на кнопку

### **Play.**

Модель станет ритмично двигаться. Убедимся, что симметрия смещений всех атомов соответствует типу симметрии данного блока. Убедимся, что действует почти вся совокупность клавиш управления видом модели. Обратим внимание на кнопки и окошки управления режимом анимации. Некоторые из них доступны в режиме наблюдения колебаний, а некоторые доступны либо в режиме Pause, либо в состоянии Stop. Некоторую подготовку режима анимации можно выполнить еще до выбора частоты. Например, отметив галочкой окошко Quantum Number, можно задавать численное значение колебательного квантового числа  $\nu$ . Тогда амплитуды колебаний на экране будут соответствовать квантовым средним квадратичным амплитудам

нормальных колебаний модели  $Q_\nu = Q_0 \sqrt{2\nu+1} = \frac{4}{\sqrt{\nu}} \sqrt{2\nu+1} \text{ \AA}$ . Здесь частота колебаний  $\nu$  дается в  $\text{см}^{-1}$ .

Переход к анимации другого нормального колебания делается после нажатия кнопок Pause и Stop. Возврат к первоначальному виду модели возможен только после закрытия модального окна управления анимацией кнопкой Close.

Наблюдать анимационные картины нормальных колебаний не только забавно, но и поучительно. Роль наблюдений в науке чрезвычайно велика – наука начинается именно с наблюдений. На это обращал внимание еще мудрый Козьма Прутков, советуя, – «Бросая в воду камешки, следи круги, ими образуемые. Иначе сие занятие будет совершенно бесполезным». Правда, регистрация лишь качественных результатов наблюдений без их количественного анализа еще не делает науки. Можно, например, вывести заключение, что как бы криворук ни был бросающий, он всегда попадает точно в геометрический центр круга на воде. И даже статистическая обработка качественных наблюдений мало помогает. Известно, что в одном средневековом университете благочестивый монах публично защитил тезис на степень доктора богословия – «Создатель, в Своей премудрости, повелел рекам протекать обязательно близ крупных городов».

Итак, будем накапливать количественные результаты наблюдений. Будем также осторожны в наших интерпретациях получаемых результатов.

Зададим  $\nu = 0$ . Это позволит наблюдать движения с нулевыми амплитудами, соответствующими состоянию вещества при температуре  $T = 0 \text{ К}$ . Обратим внимание на изменения расстояний между атомами модели в колебаниях с номерами 2, 3 и 7. Высокочастотное колебание 3 характеризуется самыми малыми амплитудами. Но даже в этом, валентном колебании изменения расстояний между некоторыми атомами модели вполне сопоставимы с самими расстояниями. В деформационных колебаниях 2 и 7 некоторые дистанции между атомами изменяются значительно. А мы договорились в предисловии, что физический механизм структурных превращений в молекулах состоит в возможности какому-то ядру приблизиться к окрестности нового центра и провалиться в новую потенциальную яму. При закреплении ядра в новой яме молекула выделяет в пространство квант энергии и переходит в состояние с новой пространственной конфигурацией. Легкая система валентных электронов тут же подстраивается под новую геометрию молекулы. Тем самым, состоялась химическая реакция.

Таким образом, даже при  $T = 0 \text{ К}$ , колебания молекулы придают ей склонность к структурным превращениям. При увеличении температуры амплитуды колебаний медленно, но увеличиваются, создавая все более благоприятные, более вероятные условия для перехода к новым

пространственным формам, либо к новым химическим взаимоотношениям с соседями. Осмелев, мы можем предсказать что-то вроде закона Аррениуса.

Однако не будем торопиться. Возможно, мы чего-то еще не разглядели.

Обратим внимание на общие размеры модели аллена. Это маленькая молекула. По сравнению, скажем, с жизненно важными биомолекулами, с олигомерами и полимерами. В дальнейшем мы будем наблюдать колебания в таких крупных молекулярных системах, замечая их особые свойства. А сейчас попробуем порассуждать, опираясь на простые физические законы. Пусть мы имеем дело с длинной полимерной цепью, в которой мономеры типа аллена соединены одинарными связями С-С. Связи СН в мономерах очень похожи по своим физическим свойствам на связи СН в аллене. Это дает нам право предсказать, что в полимере будет наблюдаться нормальное колебание с частотой и формой, как у колебания 3 в аллене. Это колебание будет охватывать все многочисленные связи СН полимера. Теория колебаний утверждает, что как в аллене, так и в нашем гипотетическом полимере энергия систем связей СН будет в таком нормальном колебании одинаковой, равной  $E_{\text{СН}} = \nu(\nu + 1 / 2)$ , где  $\nu \approx 2990 \text{ см}^{-1}$ . В аллене эта энергия равномерно распределена между четырьмя связями СН. В полимере – между множеством таких одинаковых связей. Следовательно, в полимере на каждую связь приходится лишь малая часть полной колебательной энергии данного нормального колебания. Поэтому амплитуда колебаний каждой связи СН в полимере будет ничтожно мала. Следовательно, такое нормальное движение не может быть фактором реакционной активности полимера. Полимер сам себя защищает от структурных превращений, связанных с колебаниями его протонной шубы.

Однако не будем торопиться с выводами. Возможно, мы всё же чего-то еще не разглядели.

**Close**

Панель управления анимацией отдельных нормальных колебаний закрывается. Можно вернуть модели первоначальный вид командой

i.

### 3.3. Наблюдение суммы нормальных колебаний модели

Наблюдая в предыдущем разделе отдельные нормальные колебания модели аллена, мы не разглядели неприятный факт, что это занятие принципиально неадекватно природе молекул. Молекула совершенно неспособна так колебаться. Ядра атомов в молекуле неспособны быть так размазаны в пространстве.

Природе адекватна иная картина внутримолекулярного движения. Все ядра атомов одновременно участвуют во всех нормальных колебаниях. Одно колебательное состояние отличается от другого только тем, каковы наборы колебательных квантовых чисел  $\nu$  в этих состояниях. Самое простое состояние это когда все  $\nu = 0$ . Тогда формула для полной колебательной энергии молекулы имеет

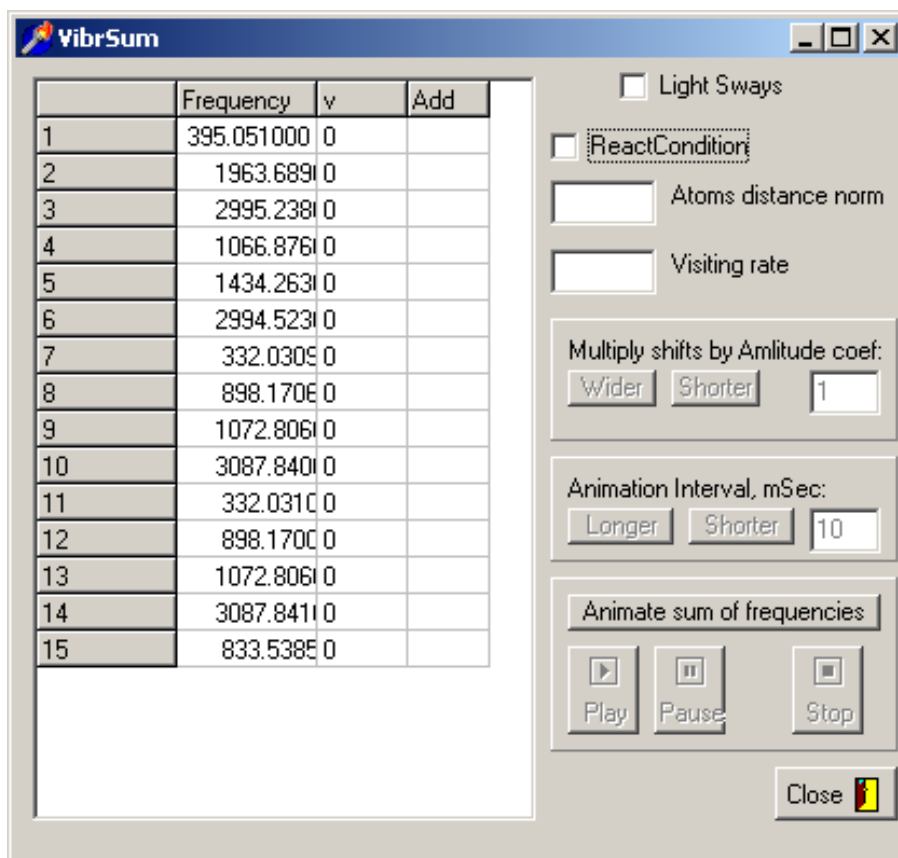
самый простой вид  $E = \frac{1}{2} \sum_i \nu_i \text{ см}^{-1}$ . Сумма берется по всем нормальным колебаниям. Что же

касается картины внутримолекулярных движений, то её не назовешь простой. Сейчас мы ее увидим.

В программе MolView открыта модель Allen\_test.

**Animation -> Sum of Vibrations**

Возникает панель управления анимацией сумм нормальных колебаний



Здесь список частот нормальных колебаний устроен несколько иначе. Для каждой частоты указано индивидуальное колебательное квантовое число и можно указать признак, что данное нормальное колебание добавлено в наблюдаемую сумму колебаний. Признаком является буква у как сокращение от Yes.

Оставим все  $v = 0$ , а весь столбец *Add* заполним признаками у.

### Animate sum of frequencies

#### Play

Понаблюдаем достаточно долго за причудливой картиной колебаний модели при  $T = 0$  К. Можно заметить нечто весьма интересное в поведении каждой из групп  $\text{CH}_2$ . В течение длительного времени беспорядочные размахи протонов остаются малыми. И вдруг на короткое время они резко увеличиваются. Как в направлении связей  $\text{CH}$ , так и в плане изменения угла  $\text{HCH}$ . Что бы это значило? ??На этот вопрос я постараюсь ответить позже. Когда мы будем рассматривать динамику распространения механических возмущений в длинных молекулярных цепях??

#### Pause

#### Stop

Оставим включенными все нормальные колебания при  $v = 0$ , а частоту  $1395 \text{ cm}^{-1}$  включим с  $v = 5$ .

### Animate sum of frequencies

#### Play

Мы увидим, что в общем движении выделяются деформационные колебания групп  $\text{CH}_2$ . Фон нулевых колебаний (с  $v = 0$ ) несколько затемняет картину сильно возбужденных деформационных колебаний групп  $\text{CH}_2$ , но не может ее испортить радикально. Тем самым проясняется смысл наблюдения отдельных нормальных колебаний модели. Мы просто отсекаем фон нулевых

колебаний для удобства наблюдения за формами чистых нормальных колебаний. Так принято в физике – разделяй сложные движения и властвуй над ними. Однако при интерпретации ряда физических и химических явлений пренебрегать длинной суммой мелких нулевых колебаний совершенно недопустимо. Программа MolView является удобным средством исследования сложных колебательных состояний при включенном и выключенном фоне нулевых колебаний.

### **Pause**

### **Stop**

### **Close**

Панель управления анимацией закрылась, и мы получили полный доступ к командам управления видом модели.

h

Убрали «шкурки» атомов.

n

Вывели на экран номера атомов модели.

Теперь займемся исследованием возможностей реакции изомеризации аллен-метилацетилен. Мы видели в предыдущем разделе, что имеется ряд нормальных колебаний, способствующих сближению протона Н6 с атомом углерода С3, а также протонов Н7 и Н5 с атомом углерода С2. Наиболее подходящим здесь является низкочастотное колебание 7 с частотой  $332\text{ см}^{-1}$ . В какой-то мере могут такому сближению способствовать колебания 4 и 5. Проверьте, наблюдая эти отдельные нормальные колебания.

Идея состоит в следующем. Если возбудить эти три колебания до сравнительно высоких значений квантовых чисел, то в сумме эти колебания могут иногда так совпасть в своих фазах, что указанные три расстояния между тремя указанными парами атомов могут одновременно уменьшиться до значений, сравнимых с «равновесными» длинами химических связей.

Следовательно, три протона могут провалиться в новые потенциальные ямы, образованные притяжением новых хозяев, атомов углерода. У этих новых хозяев поменяется гибридизация, и может закрепиться новая конфигурация молекулы. Атом С3 захватит один протон Н6, атом С2 захватит протоны Н5 и Н7, связь С1-С2 станет одинарной с длиной  $1.543\text{ \AA}$ . В итоге получится молекула метилацетилена.

Для выяснения условий возможности этой реакции изомеризации проведем компьютерный эксперимент. Заготовим в папке модели Allen\_test файл ReactAtoms.txt с такими данными:

7

2

5

2

6

3

Это номера в парах атомов, участвующих в реакции. Подсчитаем норму трех расстояний между атомами в каждой паре. Она в аллене составляет  $5.7\text{ \AA}$ . Откроем модель Allen\_test в программе MolView.

**Animation -> Sum of Vibrations**

В панели управления анимацией отметим галочкой окно *ReactCondition*. Это заставит программу все время в процессе колебаний подсчитывать норму расстояний в парах атомов, указанных в файле *ReactAtoms.txt*.

Выберем для суммирования и снабдим значениями  $\nu$  колебания

4	1066	3	$\nu$
5	1434	2	$\nu$
7	332	10	$\nu$

### **Animate sum of frequencies**

**Play**

**Pause**

**Play**

В режиме *Pause* программа выводит в окошко *Atoms distance norm* значение минимальной на данный момент нормы трех расстояний между парами интересующих нас атомов. При первой остановке анимации мы увидим *Atoms distance norm* = 5.6. Через некоторое время здесь установится значение 5.4. На одну дистанцию придется норма 1.8 Å. Это уже похоже на условия одновременного приближения трех протонов к новым потенциальным ямам. Реакция изомеризации может состояться. Наш вывод согласуется с известным химическим фактом – аллен способен изомеризоваться в метилацетилен.

**Pause**

**Stop**

**Close**

**File -> Exit**

Что мы проглядели или не учли здесь?

Известно, что колебания групп СН, особенно деформационные, проявляют весьма заметный ангармонизм. Поэтому количественные оценки характера движений протонов при высоких степенях возбуждения получаются весьма неточными. Как это скажется на нашей диагностике условий изомеризации молекулы?

Вспомним предисловие, где приведены результаты расчета картины поведения ангармонического одномерного квантового осциллятора. Ангармонизм ведет к расширению потенциальной ямы, а также к снижению уровней энергии колебательных состояний молекулы. Следовательно, если мы нащупали подходящие условия для переброса нужных протонов в нужные места в процессе гармонических колебаний молекулы, то тем более эти условия будут выполняться при учете ангармонизма колебаний.

Таким образом, мы получаем весьма простую технику для полуколичественной диагностики условий протекания химических реакций. Она годится для любых типов реакций – разложения, присоединения, изомеризации. Молекула перед распадом на две части представляет собой компактный коллектив атомов. Распад начинается с перескока двух, максимум трех атомов в новые положения. Это приводит к перераспределению электронной плотности в молекулярном пространстве. Одна связь настолько ослабляется, что рвется под воздействием сил Ван-дер-Ваальса. Но перед разбеганием двух новых химических частиц они составляют некий другой компактный коллектив атомов. Этот другой коллектив можно считать изомером первой атомной конфигурации. Мы можем на уровне физического рассмотрения считать описанный процесс



изомеризацией. Такие же доводы можно привести и в случае столкновения двух химических частиц, которые могут соединиться в одно целое из-за перескока двух-трех атомов в этом компактном коллективе.

Конечно, такая упрощенная диагностика не дает достаточных условий протекания реакций. Достаточные условия определяются интегралом перекрытия колебательных волновых функций двух форм компактного атомного коллектива на общем резонансном энергетическом вибронном уровне энергии системы. Требуется достаточно сложный расчет. Однако в организации плана этого расчета нам могут помочь только что сделанные наблюдения и рассуждения о роли ангармонизма. Будем проводить весь расчет в гармоническом приближении, поскольку это проще. Если расчет покажет, что реакция имеет сравнительно большую вероятность, то можно быть уверенным – учет ангармонизма способен лишь улучшить оценку вероятности. К уширению потенциальной ямы и к снижению вибронного резонансного уровня добавится лишь факт, что форма волновой функции вблизи поворотной точки ангармонической ямы почти буквально совпадает с хорошо известной формой гармонической волновой функции.

Вот насколько полезным оказывается разглядывание картины колебаний молекул и размышление о роли колебаний в физическом механизме химических реакций.

### 3.4. Несколько слов в оправдание программы MolView

В предыдущем разделе мы получили результат, который может показаться недостаточно сильным. Действительно, даже при сравнительно высоком возбуждении одновременно трех нормальных колебаний аллена, сокращение нормы расстояний между тремя парами атомов с 5.6 до 5.4 Å как-то не впечатляет. Программа как-то не дотягивает атомы до такой близости, когда их перескоки в новые потенциальные ямы осуществляют реакцию изомеризации аллен-метилацетилен.

На самом деле, это впечатление ошибочно. Дело не в программе MolView, а в нашем незнании, как она устроена и настроена. Мы – люди 21-го века – следуем нравам и обычаям этого века, что вполне естественно. Мы берем новый гаджет, прибор, программу, не очень задумываемся, как они устроены, и включаем их в работу. Лишь бы они действовали и не доставляли лишних хлопот. Люди науки 19-го века, во всяком случае, физики, действовали не так. В многотомном курсе физики Хвольсона, по которому учились даже гении 20-го века, например, И.Е. Тамм, толстый том № 5 целиком посвящен теме – как правильно измерить температуру.

Затратим несколько минут на знакомство с настройкой программы MolView, чтобы более правильно интерпретировать ее диагностику возможности протекания данной реакции.

В программу заложено свойство рассчитывать и показывать динамику изменений расположения атомов молекулы во времени, пользуясь среднеквадратичными амплитудами нормальных колебаний. А это не совсем адекватно для упрощенной диагностики реакций. Что это значит, поясним с помощью знакомой по предисловию квантовой картины колебаний молекулы водорода.

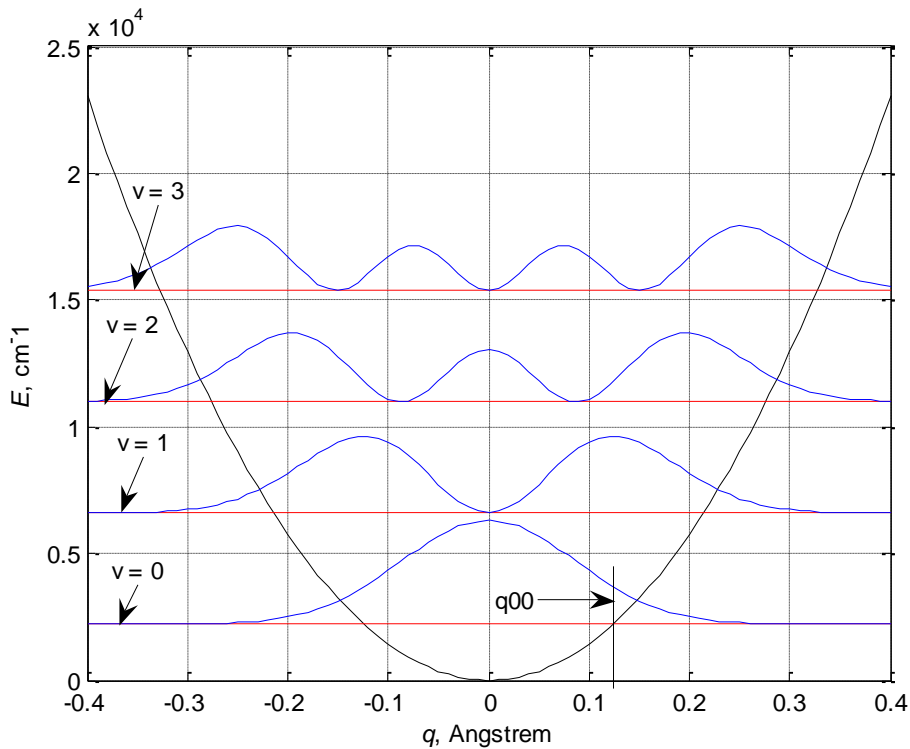


Рис. 1. Уровни колебательной энергии молекулы водорода и соответствующие плотности вероятности колебательной координаты  $q$ .

Напомним, что показанное на рисунке 1 расстояние  $q_{00}$  есть классическая амплитуда нормальной координаты  $q$  в колебательном состоянии с  $v = 0$ . При всей важности этого параметра для вывода различных формул, квантовая физика не очень интересуется этой классической амплитудой колебаний, да и всеми классическими амплитудами при других значениях  $v$ . И она, эта физика, совершенно права. Мы видим из рисунка 1, что значения координаты  $q$  могут быть самыми разными с различными вероятностями. В физических явлениях проявляются скорее усредненные значения параметров микромира. Поэтому движения атомов в молекулах на квантовом языке принято характеризовать среднеквадратичными амплитудами нормальных колебаний

$$Q_v = Q_0 \sqrt{2v + 1}, \quad (1)$$

где

$$Q_0 = \frac{1}{\sqrt{2}} q_{00} = \frac{1}{\sqrt{2}} 8.2 \sqrt{\frac{1}{2M\nu}} \text{ \AA}. \quad (2)$$

Здесь  $M$  есть приведенная масса двухатомной молекулы в А.Е.М;  $\nu$  – частота колебаний в  $\text{см}^{-1}$ . Вывод этих формул можно найти в книге М.А. Ельяшевича [??], стр. 576-577. Учтем, что для двухатомной молекулы нормальная координата  $Q$  просто совпадает с естественной колебательной координатой  $q$  растяжения связи.

И мы видим из (2) и рисунка 1, что среднеквадратичные размахи координаты  $q$  лежат в более узкой области пространства, чем классические размахи. В классической картине колебаний точка доходит до стенки потенциальной ямы, затем устремляется к противоположной стенке. Если же поручить программе ограничить области движения

частицы среднеквадратичной амплитудой, то частица будет поворачивать назад, далеко не доходя до стенки. Тем самым, эти размахи не дадут адекватного представления о возможности приближения колеблющегося атома к заданной точке пространства. А в упрощенной диагностике реакций нас интересует именно этот факт. Следовательно, нам надо подправить показания программы MolView, когда она выдает норму расстояний между заданными парами атомов. Надо перейти от среднеквадратичных квантовых амплитуд колебаний к классическим, как минимум. Увеличение размахов атомов в  $\sqrt{2}$  раз даст уменьшение рассчитанной нормы в  $\sqrt{2}$  раз.

Начальную норму, которую программа показывает при первом нажатии Play и при мгновенной остановке с помощью Pause, уменьшать не надо. Это норма расстояний в «равновесном» расположении атомов. А вот конечную минимальную норму 5.4 Å разделим на  $\sqrt{2}$ . Получим 3.83 Å. Это более адекватное представление об одновременном сближении атомов в трех их парах, ответственных за реакцию. На одно расстояние в этой норме придется 1.27 Å. Совершенно другая, более приятная картина. Как минимум.

А как максимум станет еще приятнее, если мы внимательнее всмотримся в рисунок 1. Кривые законов распределения вероятности значений  $q$  координаты растяжения связи Н-Н при различных  $\nu$  с упорством показывают, что  $q(\nu)$  может заметно превосходить значение  $q_0(\nu)$ . Насколько? При  $\nu = 0$  – разительно. Пусть мы хотим учитывать даже очень маленькую вероятность какой-то реакции, которая состоит в перескоке периферийного протона в новую потенциальную яму. Из рисунка 1 видно, что с малой, но ненулевой вероятностью координата  $q$  может принять значение 0.25 Å. Это в 2.5 раза больше, чем  $q_{00}$ . Вот как далеко могут добираться протоны, входящие в периферию колеблющейся молекулы. Для более высоких квантовых состояний двухатомной молекулы отношение максимальной амплитуды  $q$  (при такой же произвольно назначенной вероятности) к классической амплитуде будет уменьшаться с ростом  $\nu$ . При желании можно вывести эмпирическую формулу для такого отношения и использовать его в упрощенной диагностике реакций. Надо, конечно учесть, что для реальных периферийных связей типа Х-Н следует учесть зависимость классических амплитуд от приведенных масс таких связей. Это даст поправочный коэффициент, не превышающий  $\sqrt{2}$ . Мы не будем сейчас этого делать. Достаточно понять, что данные о минимальной норме расстояний, получаемые от программы MolView, имеет смысл разделить на величину, большую, чем  $\sqrt{2}$ . Это даст более реалистические представления о возможности протекания предполагаемой химической реакции.

Доброжелательный пользователь программ может спросить меня, разработчика – почему бы не сделать настройку программы MolView более подходящей для диагностика реакций? Заставить ее воспроизводить не среднеквадратичные, а классические амплитуды, да еще преувеличенные в соответствии с квантовыми представлениями о возможности выхода частиц за пределы своих потенциальных ям.

Программа MolView разработана в качестве универсального инструмента для анализа картины колебаний, а не как специализированная программа для диагностики реакций. В других приложениях, например при моделировании рассеяния электронов на молекуле, могут понадобиться картины движений атомов именно со среднеквадратичными амплитудами. Недаром этим амплитудам посвящена обширная литература. Мне показалось, что проще снабдить одну универсальную программу хорошей инструкцией и физическими комментариями, подобными

приведенным выше, чем создавать множество специализированных программ для исследования частных проблем. Конечно, я понимаю, что создаю современному пользователю дополнительные трудности в виде необходимости знакомства с инструкциями и физическими рассуждениями при работе с программой-визуализатором колебаний, где всё буквально очевидно. Но такова внутренняя логика научной жизни. Наверное, наука должна хоть немного отставать от нынешней быстротекущей жизни, задумываясь над фундаментальными законами Природы.