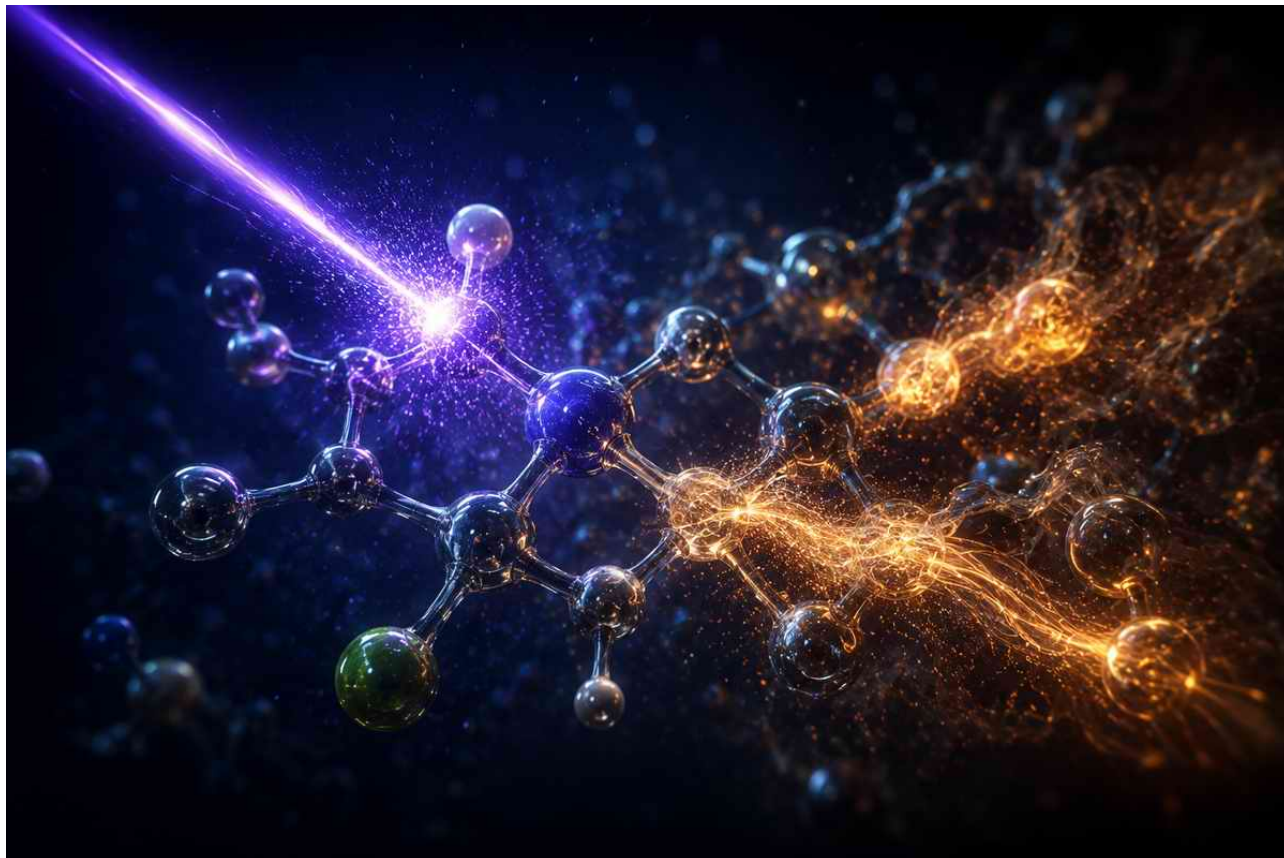


Ученые впервые увидели, как отдельные атомы по-разному реагируют на свет в течение триллионных долей секунды



Дата публикации: 14.07.2026

Что происходит с молекулой сразу после того, как она поглощает квант света? На первый взгляд этот процесс кажется мгновенным, однако в действительности за несколько триллионных и даже квадриллионных долей секунды внутри молекулы разворачивается чрезвычайно сложная последовательность событий. Электроны начинают перераспределяться, атомные ядра смещаются, химические связи изменяют свои свойства, а накопленная энергия превращается в колебательное движение. До недавнего времени наблюдать эти процессы непосредственно было практически невозможно, однако современные рентгеновские лазеры открывают перед наукой совершенно новые возможности.

Международная группа исследователей впервые смогла проследить, как различные атомы внутри одной молекулы по-разному реагируют на воздействие света и несут уникальную информацию о происходящих химических превращениях. Работа, выполненная с использованием Европейского

рентгеновского лазера на свободных электронах European XFEL, опубликована в журнале, посвященном исследованиям сверхбыстрых процессов, и уже рассматривается как важный шаг в развитии современной фотохимии и молекулярной спектроскопии.

В центре внимания ученых оказалась небольшая органическая молекула 3-фторпиридина. Несмотря на простое строение, она представляет собой удобную модель для изучения фундаментальных процессов, происходящих практически во всех светочувствительных веществах — от биологических молекул до компонентов солнечных батарей.

Когда молекула поглощает короткий импульс ультрафиолетового света, один из ее электронов получает дополнительную энергию и переходит в возбужденное состояние. Однако это лишь начало сложной цепочки событий. Практически сразу после возбуждения изменяется распределение электронной плотности, вслед за чем начинают смещаться атомные ядра, меняется геометрия молекулы и нарушается первоначальная симметрия ее структуры.

Исследователи установили, что уже через чрезвычайно короткое время молекула перестает быть плоской и начинает деформироваться. Далее система проходит через особое состояние, известное как коническое пересечение. Именно этот момент многие специалисты называют своеобразным «перекрестком» квантовой химии.

Коническое пересечение представляет собой область, где два различных электронных состояния становятся практически неразличимыми по энергии. В этот момент движение электронов и атомных ядер оказывается настолько тесно взаимосвязанным, что классическое разделение между электронной и атомной динамикой перестает работать. Именно через подобные состояния проходят многие фотохимические реакции в живой природе.

После прохождения этой критической точки молекула возвращается в основное энергетическое состояние. Однако избыточная энергия не исчезает бесследно. Она преобразуется в сложные колебания атомов, которые продолжаются еще некоторое время после завершения электронного возбуждения.

Главной неожиданностью нового исследования стало обнаружение того, что разные атомы внутри одной молекулы фактически «рассказывают» различные истории о происходящем процессе.

Оказалось, что атом фтора преимущественно отражает распространение колебательной энергии по всей молекуле. Его спектральные характеристики становятся своеобразным индикатором того, как молекула расслабляется после

возбуждения и перераспределяет накопленную энергию между своими химическими связями.

Совершенно иначе ведет себя атом азота. Поскольку именно он принимает более непосредственное участие в электронном возбуждении, его сигналы в значительно большей степени отражают изменения электронной структуры и перераспределение заряда внутри молекулы.

Фактически исследователи получили возможность одновременно наблюдать два взаимосвязанных процесса. Один атом позволяет отслеживать электронную динамику, тогда как другой демонстрирует механическое движение всей молекулярной структуры. Такой уровень детализации ранее был недоступен даже самым современным экспериментальным методам.

Для проведения эксперимента ученые использовали метод времязрешенной рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии. Его принцип основан на последовательном воздействии на молекулу двумя сверхкороткими световыми импульсами.

Сначала ультрафиолетовый лазер возбуждает молекулу и запускает химические изменения. Затем спустя строго контролируемый промежуток времени в работу вступает второй импульс — мягкое рентгеновское излучение. Оно выбивает глубоко связанные электроны из определенных атомов молекулы.

Измеряя энергию этих электронов при различных временных задержках между двумя импульсами, исследователи фактически создают своеобразный фильм, показывающий эволюцию молекулы кадр за кадром. Каждое измерение отражает состояние вещества в определенный момент времени, а объединение тысяч подобных снимков позволяет восстановить всю последовательность событий.

Особую роль в этом эксперименте сыграл Европейский рентгеновский лазер на свободных электронах. В отличие от традиционных источников рентгеновского излучения, он способен генерировать исключительно яркие и чрезвычайно короткие импульсы длительностью всего несколько десятков фемтосекунд. Для сравнения, одна фемтосекунда относится к одной секунде примерно так же, как одна секунда относится к десяткам миллионов лет.

Подобное временное разрешение позволяет наблюдать процессы, происходящие практически одновременно с движением электронов и атомов. Именно поэтому такие установки нередко называют своеобразными сверхскоростными кинокамерами для молекулярного мира.

Однако одних экспериментальных измерений оказалось недостаточно. Для

интерпретации огромного объема данных ученые разработали сложные квантово-химические модели и высокоточные компьютерные симуляции, позволившие сопоставить наблюдаемые изменения спектров с конкретными движениями отдельных атомов и электронов.

Полученные результаты имеют значение далеко за пределами фундаментальной химии. Практически все процессы, связанные с взаимодействием света и вещества, начинаются именно с подобных сверхбыстрых преобразований.

Одной из наиболее важных областей применения нового подхода является изучение фотостабильности ДНК. Несмотря на постоянное воздействие ультрафиолетового излучения Солнца, молекулы ДНК способны чрезвычайно быстро избавляться от избыточной энергии, предотвращая разрушение генетического материала. Понимание этих механизмов может способствовать разработке новых методов защиты клеток от повреждений и снижению риска возникновения мутаций.

Не менее перспективным направлением является исследование процессов переноса энергии в фотосинтетических системах растений и светособирающих комплексах бактерий. Природа научилась чрезвычайно эффективно преобразовывать энергию солнечного света в химическую, и понимание этих механизмов может помочь при создании более эффективных солнечных элементов нового поколения.

Кроме того, разработанная методика открывает новые возможности для исследования органической электроники, фотокатализаторов, светочувствительных полимеров, молекулярных сенсоров и материалов, предназначенных для хранения энергии.

Авторы подчеркивают, что продемонстрированный подход не ограничивается исследованием одной небольшой молекулы. В дальнейшем аналогичные эксперименты могут быть проведены для значительно более сложных органических соединений, биомолекул и функциональных материалов, где одновременно взаимодействуют десятки или даже сотни атомов.

Особенно важно, что новый метод позволяет наблюдать не усредненное поведение всей молекулы, а вклад отдельных атомных центров. Это открывает принципиально новый уровень понимания химических процессов, позволяя буквально проследить путь энергии внутри вещества после поглощения света.

Работа демонстрирует стремительное развитие современной молекулярной физики, где сверхяркие рентгеновские лазеры, квантово-химическое моделирование и вычислительные технологии объединяются для исследования

процессов, еще недавно считавшихся недоступными для прямого наблюдения. Возможность видеть химические превращения практически в режиме реального времени открывает новую эпоху в изучении фотохимии и создает основу для разработки материалов и технологий будущего — от высокоэффективных солнечных элементов до новых лекарственных препаратов и интеллектуальных фоточувствительных систем.

Ссылка: «Фотоиндуцированное усиление чувствительности химического сдвига к локальным колебаниям» DOI: [10.1021/jacs.6c06538](https://doi.org/10.1021/jacs.6c06538).