

# **Квантовая динамика и химическая кинетика в фемтохимии**

**В. В. ЕРЕМИН**

Московский государственный университет им. М.В.Ломоносова

**Н. Е. КУЗЬМЕНКО**

Московский государственный университет им. М.В.Ломоносова

В основе теоретического описания фемтосекундных экспериментов по исследованию химических реакций в реальном времени лежит метод квантовой динамики волновых пакетов. В последнее время активно развиваются альтернативные подходы к анализу ядерной динамики. Одним из них является кинетическое моделирование. В рамках этого подхода движение волнового пакета по электронному терму представляется системой последовательных реакций, а в области вырождения термов – параллельными реакциями первого порядка. Рассмотрены возможности использования кинетических методов в фемтохимии и описаны кинетические модели реакций с участием простых молекул в газовой фазе и сложных молекул хромофоров в составе белков.

## **Введение**

Фемтохимия – одна из самых молодых областей химической науки, она изучает динамику сверхбыстрых процессов, которые происходят в атомах, молекулах и ионах во временном диапазоне от 1 до 1000 фс ( $1 \text{ фс} = 10^{-15} \text{ с}$ ). В этот диапазон попадают очень многие химические реакции в газовой фазе, в растворах, на поверхности и в объеме твердых тел, а также в живых организмах [1]. Для того, чтобы исследовать эти реакции в реальном времени, необходимы измерительные приборы с фемтосекундным временным разрешением. Такие приборы появились около 20 лет назад, когда физики научились сжимать во времени световые лазерные импульсы и довели их длительность до нескольких фемтосекунд.

Обычно в фемтосекундных экспериментах используют два лазерных импульса. Первый импульс (его называют импульсом накачки) возбуждает изучаемую систему и инициирует динамический процесс: это может быть химическая реакция, перенос электрона или переход из одного электронного состояния в другое. Временную эволюцию (динамику) процесса измеряют с помощью второго – пробного, или зондирующего, импульса, который действует через точно измеренное время задержки относительно первого и приводит к появлению измеряемого сигнала – спектра поглощения, спектра излучения или тока электронов ионизации. Амплитуда сигнала зависит от свойств системы в момент действия второго импульса, поэтому по зависимости величины сигнала от времени задержки можно сделать вы-

воды о том, как изменяются эти свойства в течение исследуемого процесса, то есть получить подробную информацию о протекании химической реакции [2].

В основе теоретического описания фемтосекундных экспериментов лежит квантовая механика, точнее – ее раздел квантовая динамика, который рассматривает зависящие от времени процессы. Взаимодействие лазерных импульсов с веществом и движение электронов и ядер в процессе химических реакций описываются разными модификациями одного и того же уравнения – временного уравнения Шредингера. Для его решения разработаны самые разнообразные подходы: численные, аналитические, квантовые и квазиклассические. Кроме того, в последние годы развиваются некоторые методы описания динамики, не связанные с квантовой теорией. Один из таких методов мы рассмотрим в данной статье и сравним его со стандартным квантоводинамическим подходом. Основные черты обоих методов описания динамики мы обсудим на примере нескольких простых химических реакций.

### Квантовая динамика химических реакций

В простейшей модели химической реакции атомы представляют собой твердые шарики, которые движутся по законам классической механики (например, законам Ньютона) по поверхности потенциальной энергии (рис. 1). Последнее понятие является ключевым для химической динамики. Поверхность потенциальной энергии – это зависимость общей энергии взаимодействия ядер и электронов химической системы от межъядерных расстояний. Минимумы этой поверхности соответствуют устойчивым конфигурациям ядер – реагентам и продуктам, максимумы – переходным состояниям от реагентов к продуктам.

В квантовой динамике состояние системы в процессе химической реакции описывается волновой функцией  $\Psi(x,t)$ , зависящей от координат ядер атомов  $x$  и времени  $t$ . Эта функция удовлетворяет временному уравнению Шредингера, а ее квадрат модуля  $|\Psi(x,t)|^2$  задает функцию распределения по координатам ядер. Свойства зависящей от времени волновой функции определяются видом поверхности потенциальной энергии и начальным состоянием  $\Psi(x,0)$ .

Сверхкороткие световые импульсы, инициирующие фотохимические реакции, создают в молекулах возбужденные состояния особого вида, которые описываются так называемыми колебательными *волновыми пакетами* [3]. Особенность фемтосекундных лазерных импульсов состоит в том, что они могут возбуждать несколько (или даже много) колебательных состояний изучаемой системы одновременно. Длительность импульса  $\Delta t$  и его энергетическая ширина  $\Delta E$  связаны соотношением неопределенности «энергия-время»:

$$\Delta E \cdot \Delta t \sim \hbar. \quad (1)$$

Чем короче импульс, тем больший диапазон энергий возбужденного состояния он может охватить. Так, импульс длительностью 50 фс имеет ширину  $2 \times 10^{-21}$  Дж, или в обычных спектроскопических единицах  $700 \text{ см}^{-1}$ . Такой импульс может возбудить 5-6 колебательных со-

стояний молекулы  $I_2$  (разница в энергии между соседними состояниями равна  $125 \text{ см}^{-1}$ ) или 10-11 колебательных состояний молекулы  $Na_2$  (разница в энергии  $69 \text{ см}^{-1}$ ) [4].

После действия светового импульса система может с разной вероятностью находиться в любом из состояний, попадающих в энергетический интервал  $\Delta E$ . В соответствии с квантовым принципом суперпозиции ее волновая функция в начальный момент времени  $t = 0$ , имеет вид:

$$\Psi(x,0) = \sum_n c_n \Psi_n(x), \quad (2)$$

где  $n$  – набор квантовых чисел, определяющих энергетический спектр системы, а весовой коэффициент  $c_n$  представляет собой амплитуду вероятности возбуждения  $n$ -го состояния и отражает вклад этого состояния в волновой пакет. Волновую функцию системы, в которой когерентно возбуждены одновременно несколько стационарных состояний, называют волновым пакетом.

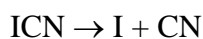
Главное свойство волнового пакета состоит в том, что он описывает *нестационарное состояние* молекулы и, следовательно, зависит от времени. Эта зависимость определяется энергиями состояний  $E_n$ , входящих в волновой пакет:

$$\Psi(x,t) = \sum_n c_n \exp(-iE_n t) \Psi_n(x). \quad (3)$$

Это общее выражение описывает все многообразие колебательных волновых пакетов, возбуждаемых в молекулах. Уровни энергии  $E_n$  и волновые функции  $\Psi_n(x)$  определяются только строением молекулы, а весовые коэффициенты  $c_n$  зависят еще и от параметров светового импульса – его длительности и длины волны. Последнее обстоятельство, а именно зависимость волнового пакета от свойств импульса, т.е. от условий эксперимента, позволяет *управлять динамикой* молекулярных систем.

Исходные колебательные волновые пакеты, образующиеся в молекулах под действием фемтосекундных импульсов, обычно сильно локализованы в пространстве, т.к. расстояние между ядрами в молекуле при оптическом возбуждении практически не изменяется. После того, как возбуждающий световой импульс закончился, в молекуле формируется нестационарное состояние и волновой пакет начинает движение в силовом поле молекулы, то есть по поверхности потенциальной энергии.

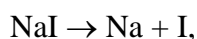
Что происходит с волновым пакетом при химической реакции? Это зависит от вида поверхности потенциальной энергии данной реакции. Если энергия пакета превышает значение потенциальной энергии при больших расстояниях, то волновой пакет уходит на бесконечность и молекула распадается на части – происходит фотодиссоциация, например:



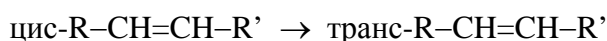
(рис. 2а). Такое движение называют инфинитным, то есть неограниченным.

Если в процессе движения волновой пакет достигает области, где потенциальная энергия молекулы превышает его энергию, то направление его движения меняется на противоположное – пакет как бы отражается от стенки потенциальной поверхности (рис. 2б). Такое движение называют колебательным; оно может продолжаться достаточно долго – до тех пор, пока не произойдет самопроизвольное испускание света или не подействует пробный лазерный импульс, который переведет молекулу в другие электронные состояния.

Самые разнообразные химические превращения могут происходить в тех областях, где потенциальные поверхности разных электронных состояний пересекаются (рис. 2в, 5а). Эти области в квантовой динамике называют коническими пересечениями. Достигая конических пересечений, волновой пакет расщепляется: одна его часть продолжает движение в том же самом состоянии, а вторая переходит в другое состояние, что может в дальнейшем приводить к различным процессам: диссоциации



изомеризации



или безызлучательным переходам, при которых энергия возбуждения рассеивается по другим степеням свободы. Вероятность электронного перехода в области конического пересечения зависит от вида потенциальных поверхностей и скорости волнового пакета.

Зная зависимость волнового пакета от времени,  $\Psi(x,t)$ , можно определить вероятность отдельных каналов химической реакции – то есть, выход продуктов, а также время протекания реакции. Для экспериментального измерения этих величин используют серию пробных лазерных импульсов, действующих на реагирующую молекулу в различные моменты времени. Если пробный импульс включен через время  $t$  после импульса накачки и переводит молекулу в состояние с волновой функцией  $G(x)$ , то интенсивность экспериментально измеряемого сигнала пропорциональна квадрату интеграла перекрывания волнового пакета и этой функции:

$$I(t) \sim \left| \int \Psi(x,t) \cdot G(x) dx \right|^2. \quad (4)$$

Анализируя зависимость сигнала от времени задержки  $t$  можно сделать выводы о динамике реакции и определить ее характеристики.

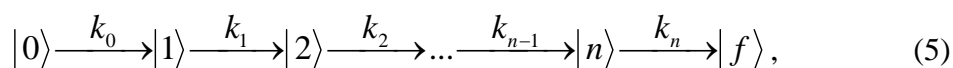
Если волновой пакет сильно локализован в пространстве, то в течение некоторого времени его эволюция напоминает классическое движение обычной частицы с той разницей, что волновой пакет при движении изменяет свою форму, а частица – нет. В связи с этим для приближенного описания динамики химической реакции можно использовать уравнения классической механики, которые решить намного легче, чем квантовые уравнения движения. Однако, классическое описание, как и квантовое, требует точного знания поверхности по-

тенциальной энергии. Такая информация о возбужденных электронных состояниях доступна только для довольно простых молекул. Поскольку интересы исследователей квантовой динамики в последнее время смещаются в сторону сложных биологических молекул, полезными оказываются те методы описания движения ядер, в которых не фигурируют потенциальные поверхности. Одним из таких методов является кинетическое моделирование.

### Кинетический подход к описанию химической динамики

Идея кинетического подхода состоит в том, чтобы представить движение ядер по поверхностям потенциальной энергии как сложную химическую реакцию, в которой каждый реагент соответствует определенному положению ядер, а любая элементарная стадия представляет собой переход от одного межъядерного расстояния к другому, соседнему.

Впервые кинетическая модель была построена для реакций прямой диссоциации малых молекул. Эти реакции – одни из самых простых (и соответственно, наиболее изученных), поскольку вся динамика, приводящая к разрыву единственной связи, происходит на одной поверхности потенциальной энергии, чисто отталкивательной по своей природе (рис. 2а). Инфинитное движение волнового пакета по этой поверхности описывается набором последовательных реакций первого порядка [5]:



где  $|0\rangle$  соответствует начальному состоянию с межъядерным расстоянием  $R = R_0$ , а конечное состояние  $|f\rangle$  представляет продукты распада с  $R > R_f$ . Остальные состояния  $|j\rangle$ ,  $j = 1, 2, \dots, n$ , определяют промежуточные конфигурации с  $R = R_j$  причем  $R_0 < R_1 < \dots < R_f$ .

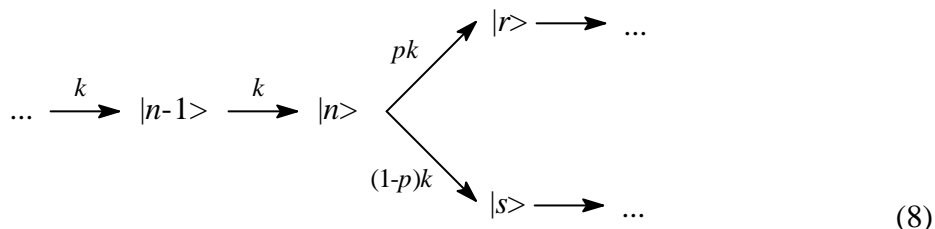
Положения координат  $R_i$  и число промежуточных (переходных) состояний  $n$  выбирают произвольным образом: это – варьируемые параметры кинетической модели. Значения констант скорости обратно пропорциональны времени классического движения между соседними состояниями:

$$k_i = \frac{1}{\tau_i}, \quad (6)$$

Численные эксперименты на разных моделях показали, что результаты моделирования мало чувствительны к распределению констант скорости, поэтому обычно промежуточные состояния на поверхности потенциальной энергии выбирают так, чтобы все константы скорости были одинаковыми. В этом случае их значение определяется только числом состояний  $n$  и общим временем движения  $\tau$  в данном электронном состоянии:

$$k = \frac{n+1}{\tau} \quad (7)$$

В области конического пересечения волновой пакет находится одновременно в двух электронных состояниях (другое название – термах) и после прохождения этой области он расщепляется на две части, движущиеся каждая по своему электронному терму. Расщепление волнового пакета моделируется параллельными реакциями, причем соответствующие константы скорости определяются вероятностью электронного перехода  $p$ :



Последующее движение каждой части волнового пакета снова описывается последовательными реакциями первого порядка. Таким образом, комбинация последовательных и параллельных элементарных реакций позволяет моделировать все основные виды движения волнового пакета в процессе химических реакций.

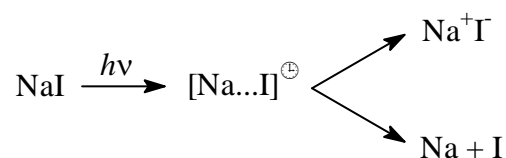
Во многих фемтосекундных экспериментах амплитуда наблюдаемого сигнала пропорциональна заселенности, то есть доле молекул, находящихся в конечном или промежуточных состояниях. В кинетических моделях заселенности находят путем решения системы кинетических уравнений. В моделях прямой диссоциации это решение можно найти аналитическим путем, а в более сложных моделях используют численные методы.

Для того, чтобы продемонстрировать возможности кинетического подхода, рассмотрим модели двух различных реакций – фотодиссоциации простой молекулы в газовой фазе и фотоизомеризации сложной органической молекулы в составе биологического пигмента.

### Фотодиссоциация иодида натрия

Фотодиссоциация NaI происходит под действием света длиной волны около 300 нм. В отличие от реакций прямой диссоциации (рис. 2а), распад NaI на атомы происходит более сложным образом.

Основное электронное состояние молекулы NaI имеет ионный, а первое возбужденное – ковалентный характер. При больших межъядерных расстояниях энергия ионного состояния уже превышает энергию ковалентного, поэтому при  $R_x = 6.93 \text{ \AA}$  происходит пересечение двух электронных состояний (рис. 3). Фемтосекундный импульс накачки, действуя на основное состояние NaI, создает волновой пакет в ковалентном состоянии, который начинает движение на верхнем терме (ветвь 1). При прохождении через точку пересечения термов волновой пакет может остаться в ковалентном состоянии и тогда молекула распадется на нейтральные атомы, а может перейти в ионное состояние, в котором энергии для распада на ионы уже не хватает:



В ионном состоянии волновой пакет, отразившись от потенциального барьера движется в обратном направлении и снова проходит точку пересечения термов. Такой процесс повторяется несколько раз до тех пор, пока все молекулы NaI не окажутся в ковалентном состоянии и не распадутся на атомы. При каждом проходе точки пересечения вероятность образования продуктов Na + I составляет 0.12, а доля молекул, «запертых» в ионном состоянии Na<sup>+</sup>I<sup>-</sup>, равна 0.88.

Кинетическая модель диссоциации NaI включает четыре ветви и одно разветвление в точке пересечения (рис. 4, одна из ветвей не показана) [6]. Первая ветвь описывает движение волнового пакета в возбужденном электронном состоянии до точки пересечения ковалентной и ионной кривых и состоит из 500 последовательных реакций ( $n$  – параметр модели) с одинаковыми константами скорости. В точке пересечения ( $R_x = 6.93 \text{ \AA}$ ) возникает «разветвление»: ветвь 2 описывает динамику ионного состояния и включает 500 последовательных реакций, а ветвь 3 отражает динамику образованию атомных продуктов диссоциации.

В экспериментах по схеме «накачка-зондирование» детектируют как заселенности переходных состояний, так и динамику накопления продукта диссоциации – атома натрия. После начального возбуждения с некоторой задержкой на систему действует зондирующий импульс, который настроен либо в резонанс с атомом натрия ( $\lambda_2^\infty = 549 \text{ нм}$ ), либо на длину волны  $\lambda_2$ , несколько большую, чем  $\lambda_2^\infty$ . В первом случае зависимость сигнала флуоресценции от времени задержки имеет ступенчатый вид: ступеньки отвечают появлению новых атомов натрия в результате каждого прохода через область пересечения. Если второй импульс имеет большую длину волны, то он зондирует заселенность переходных состояний  $[\text{Na}\dots\text{I}]^\ddagger$ , и зависимость сигнала от времени задержки представляет собой периодическую последовательность пиков с затухающей интенсивностью (рис. 4а).

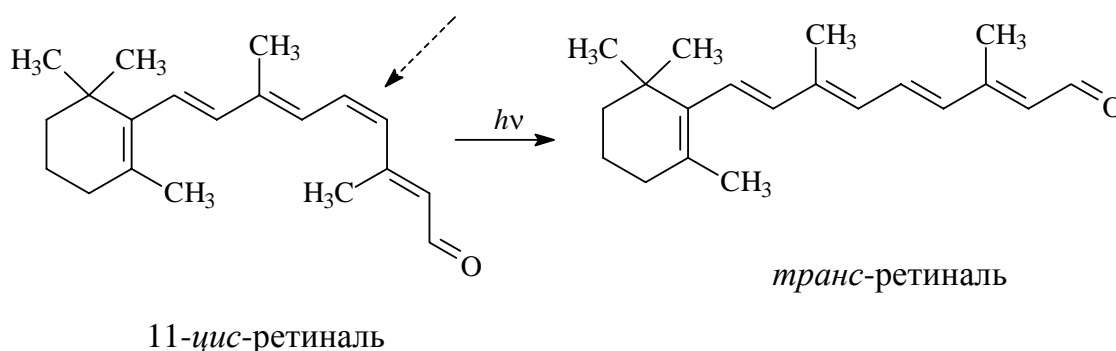
В рамках нашей модели переходные состояния  $[\text{Na}\dots\text{I}]^\ddagger$  находятся на ветви 2, а продукты реакции на ветви 3. На рис. 4б приведены результаты расчета заселенности этих ветвей как функции времени. Сравнение полученных кинетических кривых с экспериментальными данными показывает, что кинетическая модель позволяет достаточно точно описать динамику диссоциации NaI и достичь очень хорошего согласия с экспериментом.

### Фотоизомеризации ретиналя

Кинетический подход оказывается полезным и при анализе механизмов некоторых биохимических превращений. Химические реакции в живых организмах отличаются от обычных реакций двумя особенностями: сложностью механизмов и высокой эффективностью. Белковое окружение часто приводит к более быстрому и специфичному превращению функциональных групп по сравнению с обычными молекулами.

В силу большого размера биологически активных молекул расчет полных поверхностей потенциальной энергии и точное решение задач квантовой динамики ядер для этих молекул невозможны, поэтому актуальной является задача разработки моделей внутримолекулярной динамики. Эти модели должны быть достаточно простыми для того, чтобы допускать разумное численное решение, но в то же время достаточно развитыми для того, чтобы отражать основные аспекты биохимических превращений.

Рассмотрим в качестве примера модель *цис-транс*-изомеризации ретиналя, которая протекает под действием видимого света. Эта реакция является первой стадией в каскаде реакций, составляющих механизм зрения. Хромофор ретиналь входит в состав родопсина – белкового комплекса, являющегося компонентом мембраны фоторецепторов. Поглощение видимого света ретином приводит к конформационному *цис-транс*-переходу, вызванному вращением вокруг двойной связи  $C_{11}=C_{12}$ :



В белке эта реакция протекает за время порядка 200 фс с высоким выходом – 67%. В растворе ретиаль изомеризуется гораздо медленнее и с меньшим выходом, поэтому высокая скорость и эффективность реакции в родопсине вызваны исключительно влиянием белкового окружения.

С точки зрения квантовой динамики изомеризацию ретиналя можно описать как результат эволюции волнового пакета, образующегося под действием лазерного импульса в возбужденном состоянии *цис*-ретиналя и движущегося по электронному терму. В области конического пересечения часть волнового пакета переходит на другой терм с образованием *транс*-ретиналя в основном или возбужденном электронном состоянии (рис. 5а). Главная координата реакции – угол поворота вокруг двойной связи.

Для кинетического описания этой системы была предложена схема, состоящая из четырех ветвей, описывающих движение в основном и возбужденном состояниях *цис*- и *транс*-изомеров, и разветвления в области конического пересечения (рис. 5б). Заселенность каждого электронного состояния находится суммированием концентраций всех переходных состояний данной кинетической ветви. На рис. 6 представлены результаты квантового и кинетического расчета динамики образования продукта изомеризации ретиналя. На обеих кривых видно, что положение главного пика находится вблизи 200 фс, а его амплитуда составляет больше 60%, что полностью соответствует экспериментальным данным. Сравнение кривых



показывает, что на небольших временах, до 600 фс кинетическая модель дает качественно правильное описание динамики этой химической реакции.

Приведенные примеры позволяют утверждать, что кинетический подход к химической динамике обладает значительной гибкостью и на его основе можно строить модели различных классов реакций, протекающих в фемтосекундном диапазоне, – от элементарных процессов в газовой фазе до химических превращений в сложных биологических молекулах.

### **Заключение**

Мы рассмотрели два качественно разных подхода к описанию фемтосекундной динамики химических реакций: квантовый и кинетический. У каждого из них есть свои преимущества. Квантовый подход, основанный на анализе динамики волновых пакетов, дает строгое количественное описание фемтосекундных экспериментов и позволяет учесть тонкие интерференционные эффекты, наблюдаемые в некоторых реакциях. В то же время, этот подход требует точной информации о строении поверхностей потенциальной энергии, которая не всегда доступна.

Замечательная особенность кинетического описания фемтосекундных экспериментов состоит в том, что для моделирования ядерной динамики достаточно знать только времена движения по различным участкам электронных термов, а знание поверхности потенциальной энергии вообще не требуется. Последнее крайне важно при моделировании процессов, происходящих в сложных биологических системах. Недостаток кинетического подхода заключается в том, что часть информации о динамике в нем теряется. Кроме того, при больших временах появляются значительные расхождения между результатами кинетических и квантовомеханических вычислений. Это связано с тем, что в рамках кинетического подхода невозможно учесть эффект расплывания волнового пакета при движении по электронным термам. К тому же, кинетическое описание не делает различия между движением по одномерным и многомерным потенциальным поверхностям, в то время как дополнительные колебательные степени свободы могут оказывать существенное влияние на динамику реакции.

В любом случае, каждый из этих методов имеет свою область применимости. Выбор того или иного метода для конкретной химической реакции диктуется точностью создаваемой модели, которая зависит от качества имеющихся экспериментальных данных и точности квантовохимических данных о строении молекул. Не исключено, что в недалеком будущем появится и гибридный, квантово-кинетический метод, который позволит сочетать лучшие черты обоих подходов к описанию химической динамики.

## ЛИТЕРАТУРА

1. Zewail A.H. Femtochemistry: recent progress in studies of dynamics and control of reactions and their transition states // *J. Phys. Chem.* 1996. V. 100. N. 31. P. 12701-12724.
2. Еремин В.В., Уманский И.М., Кузьменко Н.Е. Фотография химической реакции // *Вестник РФФИ.* 2000. Т. 20. № 2. С. 42-50.
3. Саркисов О.М., Уманский С.Я. Фемтохимия // *Усп. химии.* 2001. Т. 70, № 6. С. 515-538.
4. Еремин В.В., Уманский И.М., Кузьменко Н.Е. Как разделить электрон на несколько частей, или дробные возрождения волновых пакетов // В кн.: *Российская наука на заре нового века.* – М.: Научный мир; Природа. 2001. С. 176-189.
5. Møller K.B., Zewail A.H. Kinetics modeling of dynamics: the case of femtosecond-activated direct reactions // *Chem. Phys. Lett.* 2002. V. 351. P. 281-288.
6. Еремин В.В., Пахомова Ю.Ю., Кузьменко Н.Е. Кинетическое моделирование фемтосекундной динамики ядер в системах с квазипересечением электронных термов // *Ж. физ. химии.* 2004. Т. 78. № 5. – С. 735-740.
7. Rose T.S., Rosker M.J., Zewail A.H. Femtosecond real-time observation of wave packet oscillations (resonance) in dissociation reactions // *J. Chem. Phys.* 1988. V. 88. N. 10. P. 6672-6673.
8. Hahn S., Stock G. Quantum-mechanical modeling of the femtosecond isomerization in rhodopsin // *J. Phys. Chem. B.* 2000. V. 104. P. 1146-1149.

## Рисунки

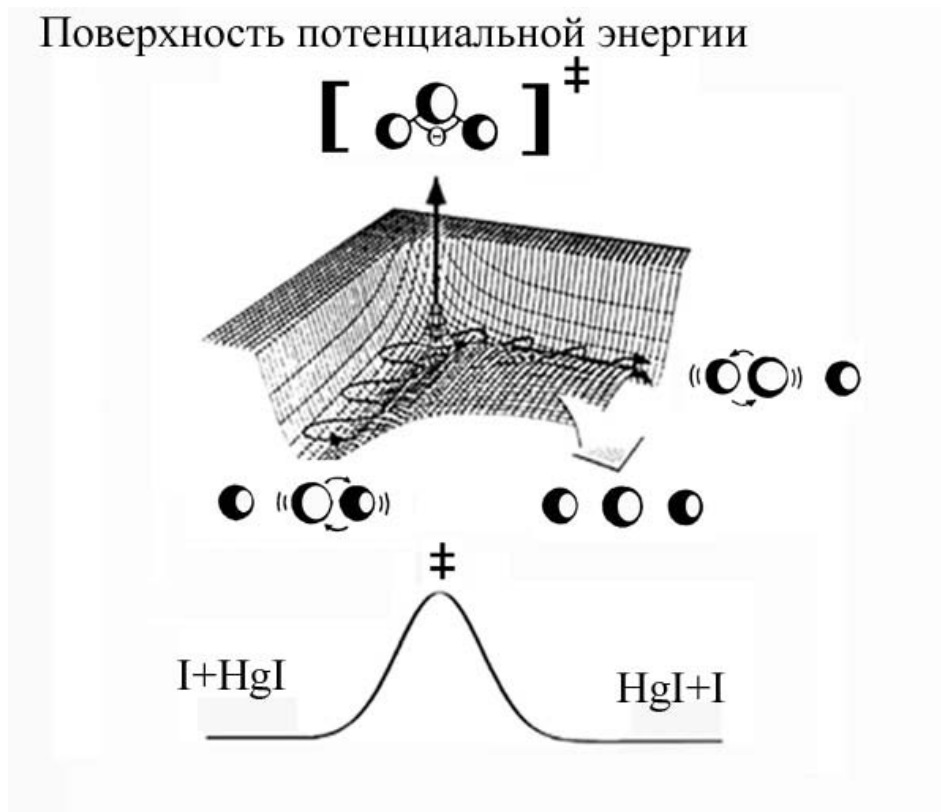
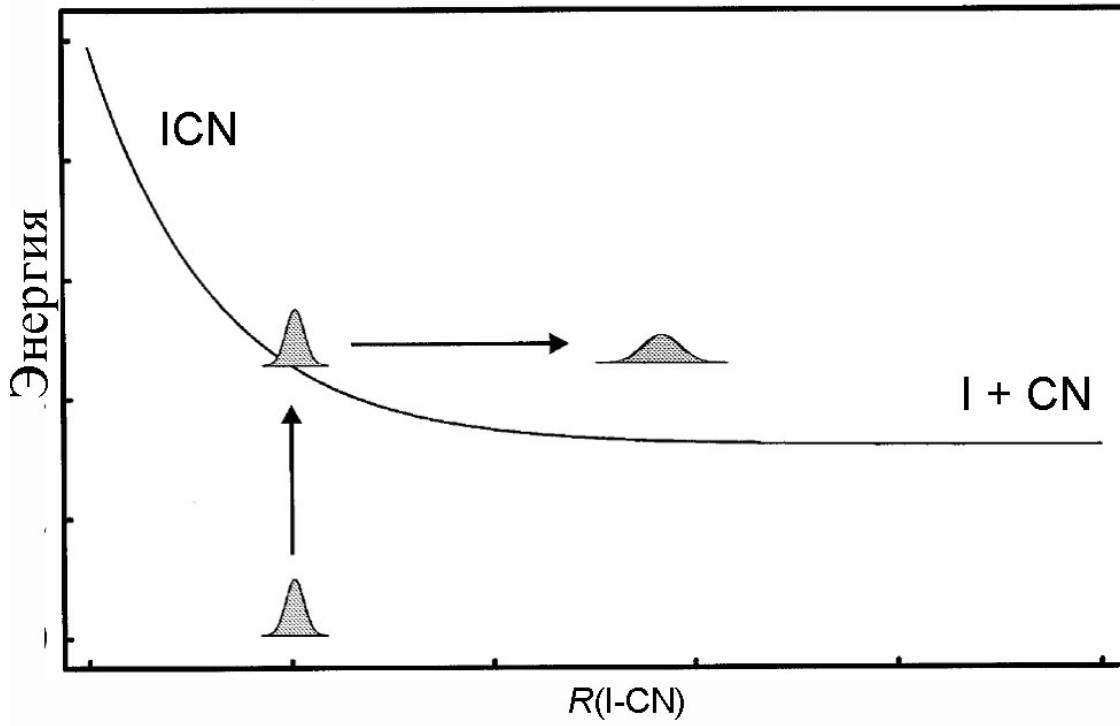
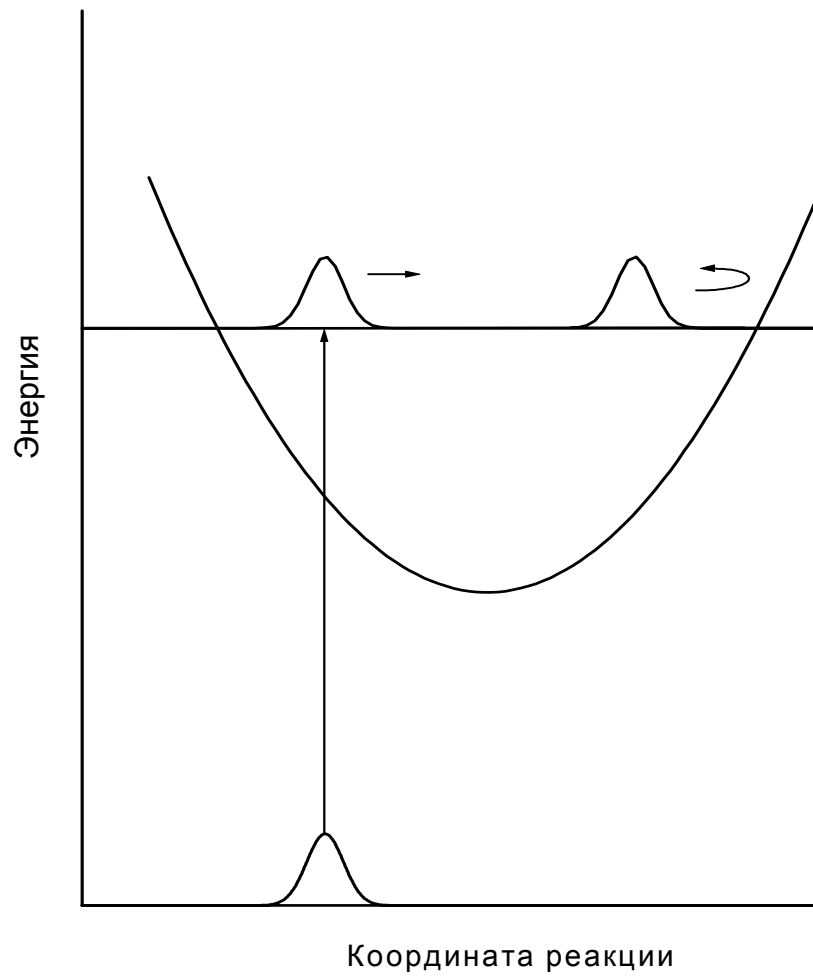


Рис. 1. Движение ядер по поверхности потенциальной энергии в процессе химической реакции  $\text{HgI}_2 \rightarrow \text{HgI} + \text{I}$ .

a)



б)



в)

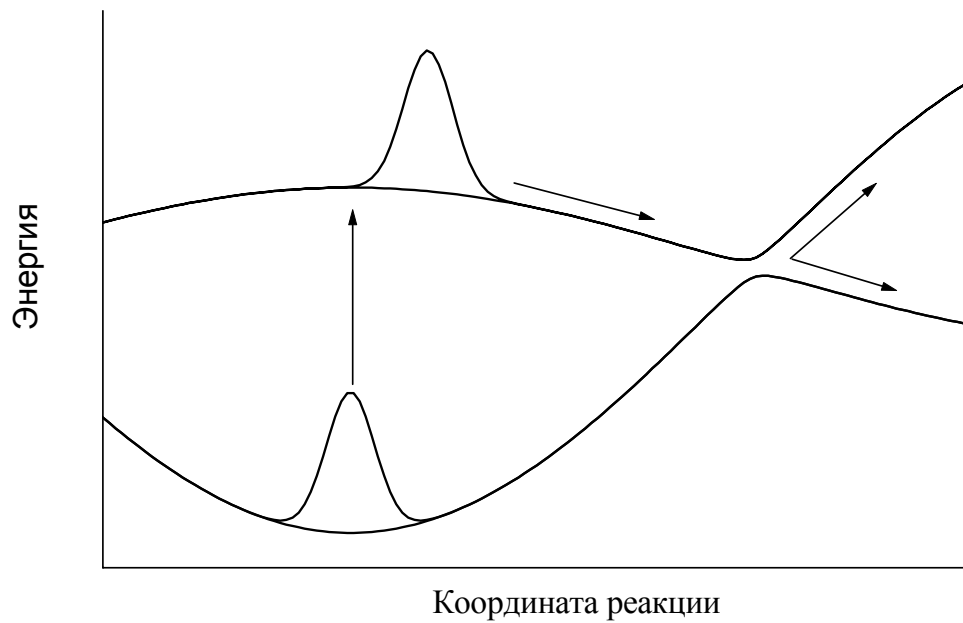


Рис. 2. Основные виды движения волновых пакетов по поверхностям потенциальной энергии. а) Инфинитное движение приводит к диссоциации. б) Колебательное движение в связанном состоянии. в) Расщепление в области пересечения поверхностей потенциальной энергии.

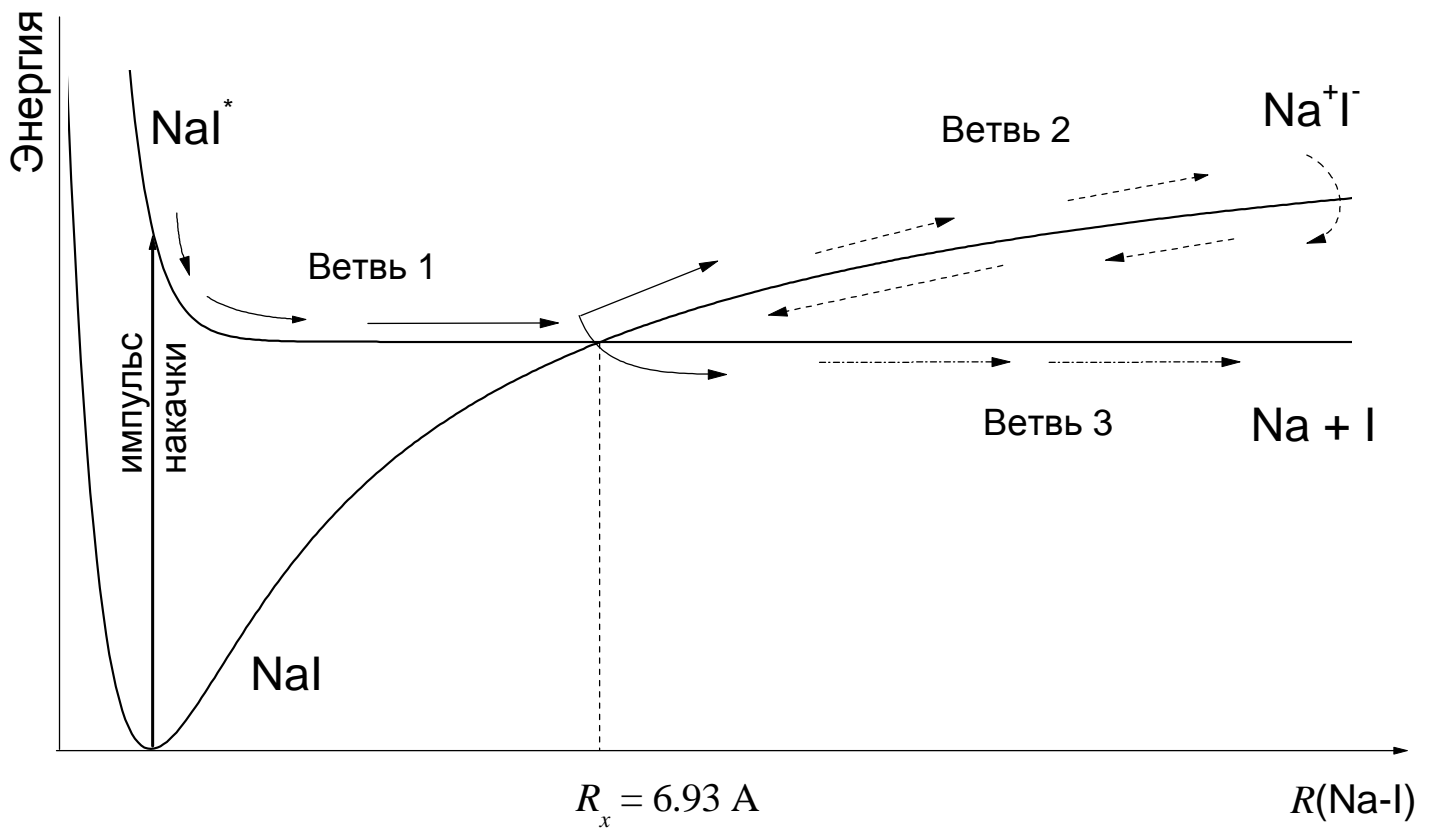
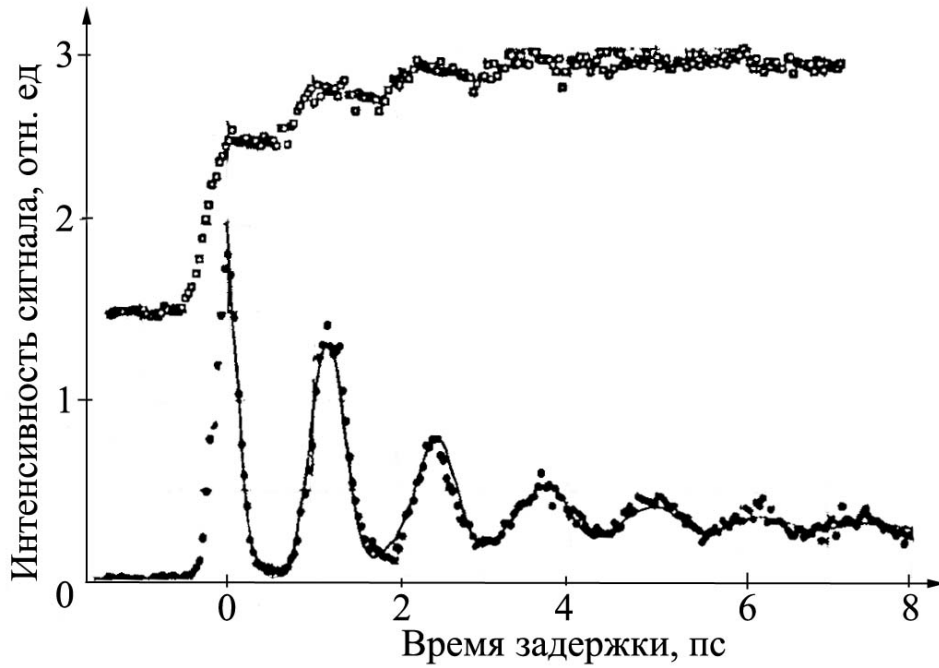
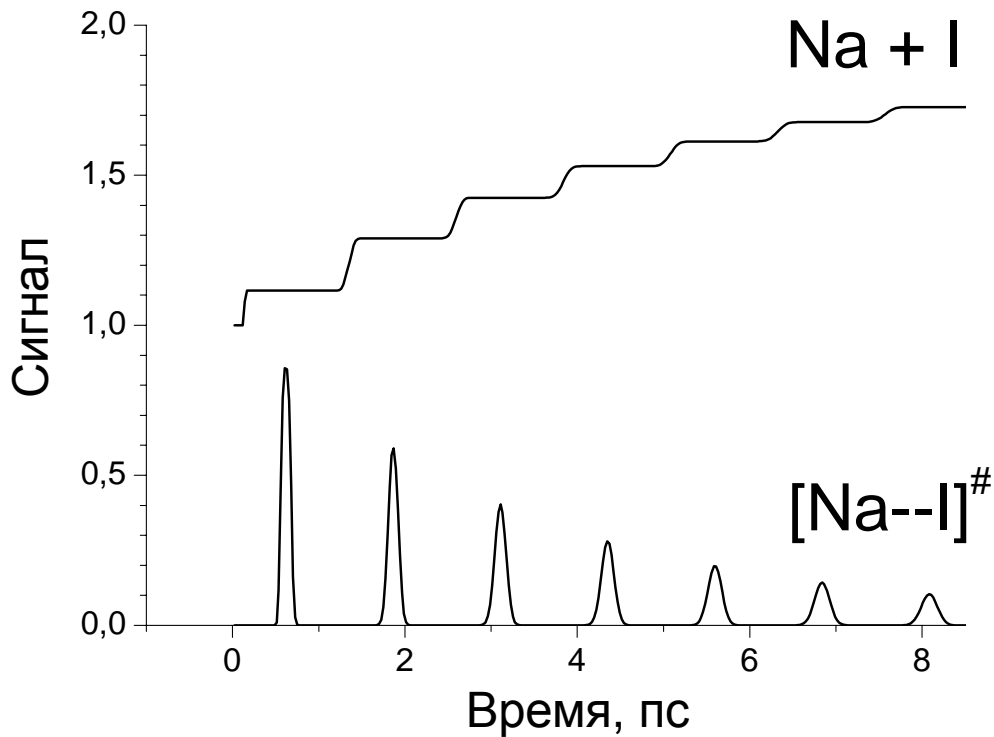


Рис. 3. Электронные состояния молекулы NaI и кинетическая модель диссоциации этой молекулы. Ветвь 1 соответствует движению волнового пакета по ковалентному терму, ветвь 2 – по ионному терму. Движение по ковалентному терму за точкой пересечения (ветвь 3) приводит к образованию продуктов реакции – атомов натрия и иода.

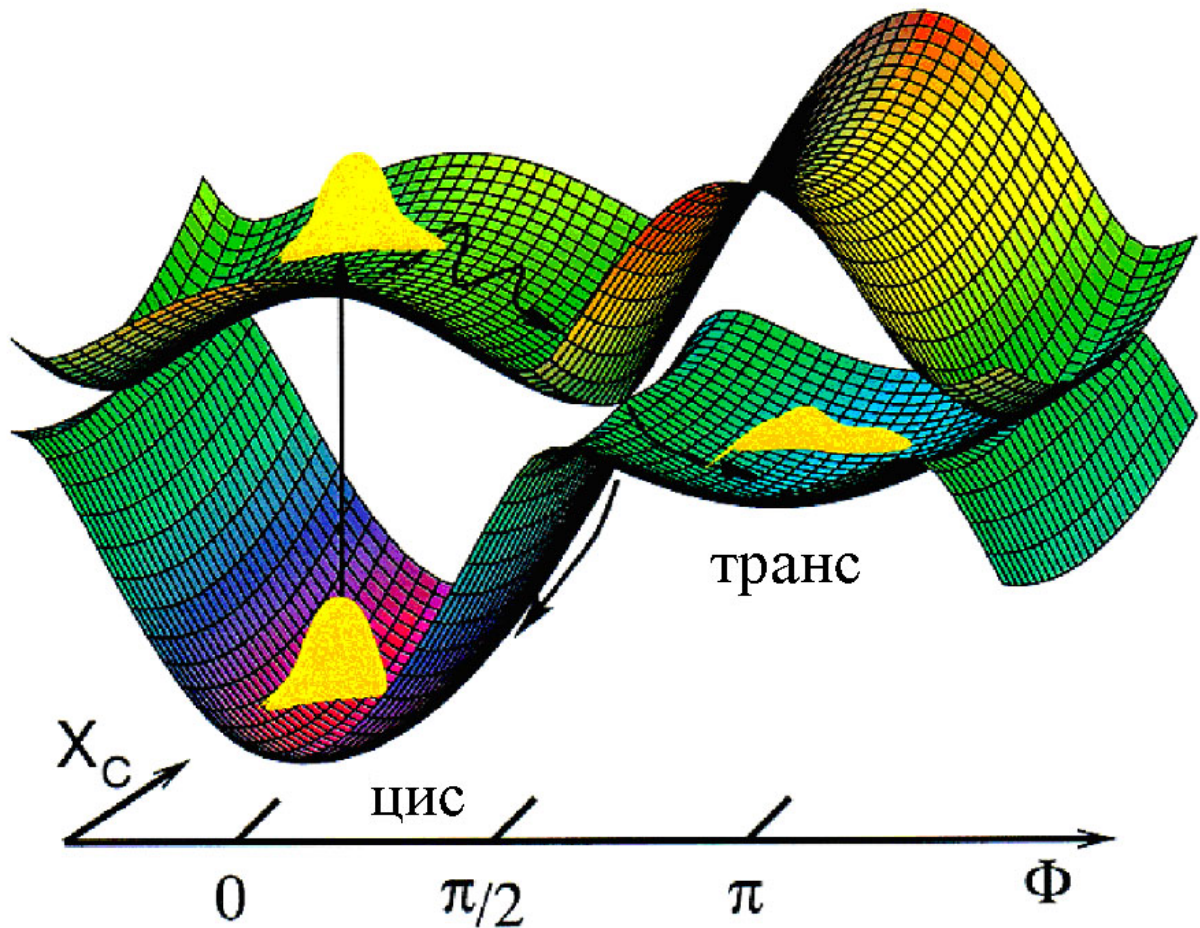


а)

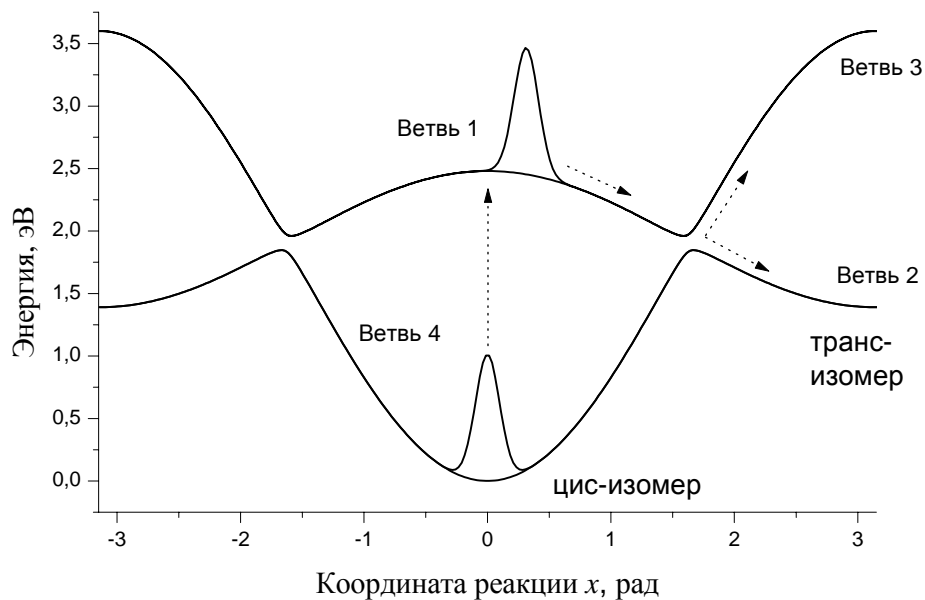


б)

Рис. 4. Зависимость концентрации переходных состояний  $[\text{Na}\dots\text{I}]^\ddagger$  и продукта реакции – атомарного натрия – от времени. а) Экспериментальные данные, полученные по схеме "накачка-зондирование" [7]. б) Расчет в рамках кинетической модели.



а)



б)

Рис. 5. а) Поверхности потенциальной энергии цис- и транс-ретиная как функции угла поворота вокруг двойной связи и длины этой связи [8]. Показано движение волнового пакета в возбужденном состоянии цис-ретиная и образование продукта изомеризации – транс-ретиная – при прохождении области конического пересечения. б) Кинетическая модель изомеризации ретиная. Ветвь 2 характеризует динамику образования продукта реакции.



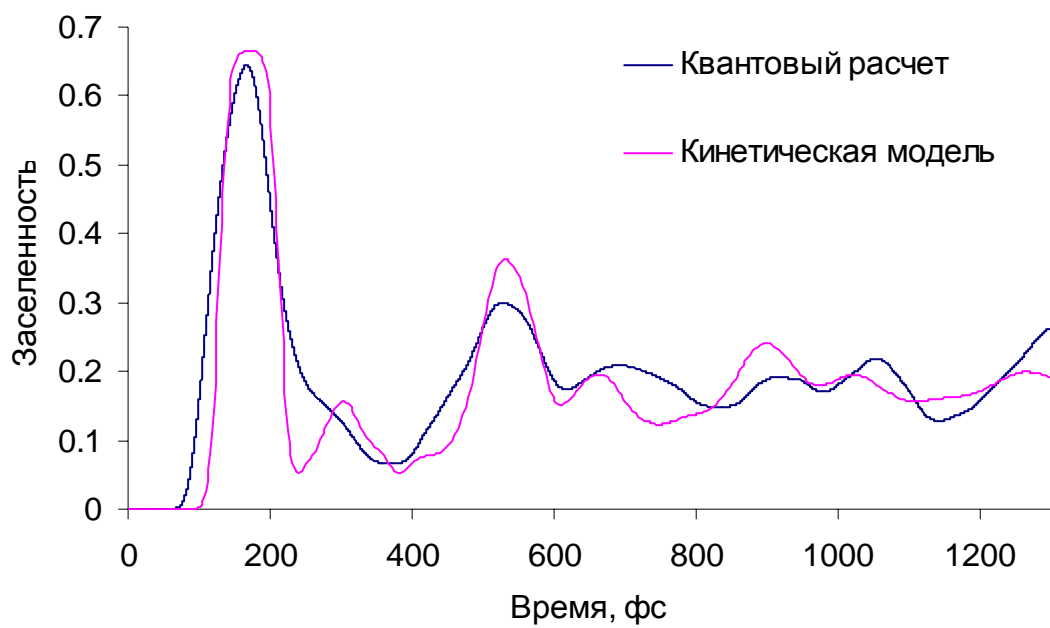


Рис. 6. Результаты квантового и кинетического расчета динамики образования продукта изомеризации – транс-ретинала в основном электронном состоянии.

Сведения об авторах:

Вадим Владимирович Еремин, доцент химического факультета Московского государственного университета им. М.В.Ломоносова, кандидат физико-математических наук, лауреат Премии Президента РФ в области образования. Автор и соавтор 57 научных работ. Область научных интересов: фемтохимия, квантовая динамика молекул, теория внутримолекулярных процессов. Исполнитель гранта РФФИ 03-03-32521.

Кузьменко Николай Егорович, зам. декана химического факультета Московского государственного университета им. М.В.Ломоносова, профессор, доктор физико-математических наук, лауреат Премии Президента РФ в области образования. Автор и соавтор более 130 научных работ. Область научных интересов: молекулярная спектроскопия, теория внутримолекулярных процессов. Руководитель гранта РФФИ 03-03-32521.