

**ПОЛУЧЕНИЕ ПАРАМЕТРОВ ЭФФЕКТИВНОГО ДИПОЛЬНОГО МОМЕНТА  
В АНАЛИТИЧЕСКОМ ВИДЕ ДЛЯ МОЛЕКУЛЫ ТИПА SO<sub>2</sub>**

Люй Цзюньлинь, А.Г. Зяткова

Научные руководители: д.ф.-м.н., профессор Е.С. Бехтерева

Национальный исследовательский Томский политехнический университет,

Россия, г. Томск, пр. Ленина, 30, 634050

e-mail: [recharllenlv@gmail.com](mailto:recharllenlv@gmail.com)

**ANALYTICAL COMPUTER CALCULATIONS FOR HIGH RESOLUTION STUDY OF SPHERICAL  
TOP MOLECULES SPECTRA**

Lyu Junlin, A.G. Ziatkova

Scientific Supervisors: Prof. E.S. Bekhtereva, Prof. O.N. Ulenikov

Tomsk Polytechnic University, Russia, Tomsk, Lenin av., 30, 634050

e-mail: [recharllenlv@gmail.com](mailto:recharllenlv@gmail.com)

**Abstract.** *The purpose of this experiment was to obtain the parameters of the expansion of effective dipole moment operator of the SO<sub>2</sub> molecule. To realize to the research, method of effective Hamiltonians, theory of symmetry have been used. In result, the analytical view of rotation parameters and first three parameters of effective dipole moment operator have been obtained.*

**Введение.** Важность исследования колебательно-вращательных спектров заключается в нахождение физико-химических свойств молекул с очень высокой точностью. Анализ спектров позволяет определить уровни энергии молекул, найти спектроскопические постоянные, из которых впоследствии могут быть определены структурные параметры и параметры потенциальной функция молекулы.

**Актуальность и постановка задачи:** Сказанное ранее позволяет сделать вывод, что колебательно-вращательный спектр является уникальным источником высокоточных данных о важных параметрах молекулы. Однако, для получения такого рода информации необходимо иметь «правильную» теоретическую модель, которая бы хорошо описывала экспериментальные данные. Как показывает практика, для многоатомных молекул это является сложной задачей. В этом случае единственным способом решения проблемы станет использование различных приближений (приближение

Борна-Оппенгеймера, метод эффективных гамильтонианов, учет свойств симметрии). С другой стороны, кроме энергетической структуры, которую позволяет с высокой точностью определить анализ спектра, является важным знание интенсивностей спектральных линий. С прикладной точки зрения это определяется тем, что позволяет на основе экспериментальных данных об интенсивностях получать количественные характеристики среды такие, например, как температура, давление, концентрация. Знание такой зависимости, например, позволит дистанционно исследовать атмосферу планет Солнечной системы на предмет присутствия в них различных молекул, кроме того, определить давление и температуру. Известно, что интенсивность, в квантовой механике пропорциональна квадрату матричного элемента дипольного момента. В литературе существует большое число работ по определению матричного элемента дипольного момента, однако, метод, который используется на данный момент (вариационный) требует много экспериментальной информации, времени, а также необходимость применения различного рода приближений (например, переход от дипольного момента молекулы к эффективному дипольному моменту). С другой стороны, имея аналитический вид параметров эффективного дипольного момента, можно не зная экспериментальной информации о молекуле предсказать значения параметров в разложении эффективного дипольного момента, и таким образом получить значения интенсивности спектральных линий пропуская этап варьирования.

**Исходя из вышесказанного, была сформулирована следующая цель:** Определение параметров в разложение эффективного дипольного момента в аналитическом виде на примере молекулы  $\text{SO}_2$ .

**Методы исследования.** Точное решение уравнения Шредингера, как известно, возможно только для наиболее простых молекулярных систем (например, молекулярного иона водорода  $\text{H}_2^+$ ). Для решения задачи для более сложных молекул, необходимо использовать теорию возмущения. Гамильтониан системы при этом обычно выбирается в следующем виде [1]:  $H(a) = H_0(a) + h(a, b)$ , где  $H_0(a)$  – оператор, решение уравнения Шредингера с которым известно;  $h(a, b)$  – малая добавка к оператору (возмущение)  $H_0$ ;  $a, b$  – набор переменных, от которых зависит гамильтониан. Для решения уравнения Шредингера с таким гамильтонианом используют унитарное преобразование, после которого собственные колебательно-вращательные волновые функции гамильтониана меняют на волновые функции эффективного гамильтониана. Задача разбивается на два этапа, что упрощает и делает возможным решение уравнения Шредингера для многоатомных молекул [2]. Подобного рода практика (использования унитарного преобразования для упрощения решения уравнения Шредингера) применима и для успешной реализации цели исследования.

**Результаты.** В качестве первого шага был построен гамильтониан молекулы типа  $XY_2$ , который без учета гармонического приближения имеет вид:  $h = \frac{1}{2} \sum_{\alpha\beta} \mu_{\alpha\beta} (J_\alpha - G_\alpha)(J_\beta - G_\beta)$ . Вторым шагом стало использование математического аппарата операторной теории возмущений. Для упрощения решения были использованы свойства симметрии молекулы  $SO_2$ , а также написана специальная программа расчета вращательных параметров гамильтониана.

Таблица 1

Аналитический вид вращательных параметров молекулы типа  $XY_2$ 

		$\lambda$		
		1	2	3
$\sum_{\lambda} \sum_{\alpha\beta} \mu_{\alpha\beta}^{\lambda}$	$\alpha = \beta$ $= x$	$4\sqrt{2} \frac{(B_x^e)^{3/2}}{\omega_1^{1/2}} \cos\gamma$	$4\sqrt{2} \frac{(B_x^e)^{3/2}}{\omega_2^{1/2}} \sin\gamma$	0
	$\alpha = \beta$ $= y$	$4\sqrt{2} \frac{(B_y^e)^2}{\omega_1^{1/2}} \left( \frac{\cos\gamma}{(B_x^e)^{1/2}} + \frac{\sin\gamma}{(B_z^e)^{1/2}} \right)$	$4\sqrt{2} \frac{(B_y^e)^2}{\omega_2^{1/2}} \left( -\frac{\sin\gamma}{(B_x^e)^{1/2}} - \frac{\cos\gamma}{(B_z^e)^{1/2}} \right)$	0
	$\alpha = \beta$ $= z$	$4\sqrt{2} \frac{(B_z^e)^{3/2}}{\omega_1^{1/2}} \sin\gamma$	$-4\sqrt{2} \frac{(B_z^e)^{3/2}}{\omega_2^{1/2}} \cos\gamma$	0
	$\alpha = z,$ $\beta = x$	0	0	$-4\sqrt{2} \frac{(B_z^e)^{1/2} (B_x^e)^{1/2} (B_y^e)^{1/2}}{\omega_3^{1/2}}$

## СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Соколов А. А., Тернов И. М., Жуковский В. Ч. : Квантовая механика. – Издательство. Наука, 1979. – 647 с.
2. Макушкин Ю. С., Улеников О. Н., Чеглоков А. Е.: Симметрия и ее применение к задачам колебательно-вращательной спектроскопии молекул. Часть 1. – Томск: Издательство ТГУ, 1990. – 248 с.