

Школа Инженерная школа ядерных технологий

Направление подготовки 03.03.02 «Физика»

Отделение школы (НОЦ) Отделение экспериментальной физики

**БАКАЛАВРСКАЯ РАБОТА**

Тема работы
Расчет параметров эффективного колебательного дипольного момента состояния (001) на примере молекул $^{32}\text{S}^{16}\text{O}_2$ и $^{34}\text{S}^{16}\text{O}_2$

УДК 539.194:535.338.3.001.5

Студент

Группа	ФИО	Подпись	Дата
150Б51	Сюй Тунгэ		

Руководитель ВКР

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Профессор	Бехтерева Елена Сергеевна	д.ф.-м.н., доцент		

**КОНСУЛЬТАНТЫ ПО РАЗДЕЛАМ:**

По разделу «Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение»

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Доцент ИСГТ	Конотопский Владимир Юрьевич	к. э. н.		

По разделу «Социальная ответственность»

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Старший преподаватель ООД ШБИП	Скачкова Лариса Александровна			

**ДОПУСТИТЬ К ЗАЩИТЕ:**

Руководитель ООП	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Руководитель ОЭФ	Лидер Андрей Маркович	д.т.н., доцент		

**Запланированные результаты обучения по программе**

<b>Код результата</b>	<b>Результат обучения (выпускник способен)</b>	<b>Требования ФГОС, критериев и/или заинтересованных сторон</b>
<i>Общекультурные компетенции</i>		
<b>P1</b>	Использовать основные этапы и закономерности исторического развития общества, основы философских, экономических, правовых знаний для формирования мировоззренческой, гражданской позиций и использования в различных сферах жизнедеятельности	Требования ФГОСЗ+ (ОК-1, ОК-2, ОК-3, ОК-4)
<b>P2</b>	К самоорганизации и самообразованию, работать в коллективе, к коммуникации в устной и письменной формах, в том числе на иностранном языке, толерантно воспринимать социальные, этические и культурные различия, использовать методы и средства физической культуры, приёмы первой помощи и методы защиты в условиях ЧС.	Требования ФГОСЗ+ (ОК-5, ОК-6, ОК-7, ОК-8, ОК-9)
<i>Общепрофессиональные компетенции</i>		
<b>P3</b>	Использовать в профессиональной деятельности базовые естественнонаучные знания, современные концепции и ограничения естественных наук, использовать фундаментальные знания разделов общей и теоретической физики, математики для создания моделей и решения типовых профессиональных задач, в том числе с использованием знаний профессионального иностранного языка.	Требования ФГОСЗ+ (ОПК-1, ОПК-2, ОПК-3, ОПК-7)
<b>P4</b>	Понимать сущность и значение информации, соблюдать основные требования информационной безопасности, использовать методы, способы, средства получения и хранения информации, решать стандартные задачи на основе информационной и библиографической культуры.	Требования ФГОСЗ+ (ОПК-4, ОПК-5, ОПК-6)
<b>P5</b>	Получить организационно-управленческие навыки при работе в научных группах, критически переосмысливать накопленный опыт, изменять при необходимости профиль своей профессиональной деятельности, нести ответственность за последствия своей инженерной деятельности.	Требования ФГОСЗ+ (ОПК-8, ОПК-9)
<i>Профессиональные компетенции</i>		
<b>P6</b>	<u>Научно-исследовательская деятельность</u> Проводить научные теоретические и экспериментальные исследования в областях: материаловедения, атомной и ядерной физики, водородной энергетики, физики плазмы с помощью современной приборной базы с использованием специализированных знаний физики и освоенных профильных дисциплин.	Требования ФГОСЗ+ (ПК-1, ПК-2)

<p><b>P7</b></p>	<p><u>Научно-инновационная деятельность</u>  Применять на практике профессиональные знания теории и методов физических исследований, а также профессиональные знания и умения в результате освоения профильных дисциплин для проведения физических исследований в инновационных областях науки, используя современные методы обработки, анализа и синтеза информации.</p>	<p>Требования  ФГОСЗ+  (ПК-3, ПК-4,  ПК-5)</p>
<p><b>P8</b></p>	<p><u>Организационно-управленческая</u>  Использовать на практике теоретические основы организации и планирования физических исследований, участвовать в подготовке и составлении научной документации по установленной форме, понимать и применять на практике методы управления в сфере природопользования</p>	<p>Требования  ФГОСЗ+  (ПК-6, ПК-7,  ПК-8)</p>
<p><b>P9</b></p>	<p><u>Педагогически-просветительская</u>  Проектировать, организовывать, анализировать педагогическую деятельность, владеть последовательностью изложения материала с использованием междисциплинарных связей физики с другими дисциплинами, участвовать в информационно-образовательных мероприятиях по пропаганде и распространению научных знаний</p>	<p>Требования  ФГОСЗ+  (ПК-9)</p>

Министерство науки и высшего образования Российской Федерации  
 федеральное государственное автономное  
 образовательное учреждение высшего образования  
 «Национальный исследовательский Томский политехнический университет» (ТПУ)

Школа Инженерная школа ядерных технологий  
 Направление подготовки 03.03.02 «Физика»  
 Отделение школы (НОЦ) Отделение экспериментальной физики

УТВЕРЖДАЮ:  
 Руководитель ООП  
 \_\_\_\_\_ Лидер А.М.  
 (Подпись) (Дата) (Ф.И.О.)

### ЗАДАНИЕ

#### на выполнение выпускной квалификационной работы

В форме:

**бакалаврской работы**

(бакалаврской работы, дипломного проекта/работы, магистерской диссертации)

Студенту:

Группа	ФИО
150Б51	Сюй Тунгэ

Тема работы:

<b>Расчет параметров эффективного колебательного дипольного момента          состояния (001) на примере молекул <math>^{32}\text{S}^{16}\text{O}_2</math> и <math>^{34}\text{S}^{16}\text{O}_2</math></b>
Утверждена приказом директора (дата, номер)

Срок сдачи студентом выполненной работы:	
--	--

#### ТЕХНИЧЕСКОЕ ЗАДАНИЕ:

<b>Исходные данные к работе</b> <i>(наименование объекта исследования или проектирования; производительность или нагрузка; режим работы (непрерывный, периодический, циклический и т. д.); вид сырья или материал изделия; требования к продукту, изделию или процессу; особые требования к особенностям функционирования (эксплуатации) объекта или изделия в плане безопасности эксплуатации, влияния на окружающую среду, энергозатратам; экономический анализ и т. д.).</i>	<b>Объект исследования: ангармонические постоянные многоатомных молекул</b>

<p><b>Перечень подлежащих исследованию, проектированию и разработке вопросов</b></p> <p><i>(аналитический обзор по литературным источникам с целью выяснения достижений мировой науки техники в рассматриваемой области; постановка задачи исследования, проектирования, конструирования; содержание процедуры исследования, проектирования, конструирования; обсуждение результатов выполненной работы; наименование дополнительных разделов, подлежащих разработке; заключение по работе).</i></p>	<ul style="list-style-type: none"> <li>- Обзор литературы;</li> <li>- Исследование чисто колебание многоатомных молекул;</li> <li>- Раздел «Финансовый менеджмент ресурсоэффективность и ресурсосбережение»;</li> <li>- Раздел «Социальная ответственность».</li> </ul>
--	---

**Консультанты по разделам выпускной квалификационной работы**

*(с указанием разделов)*

Раздел	Консультант
Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение	Конотопский Владимир Юрьевич, доцент МЕН ИСГТ
Социальная ответственность	Скачкова Лариса Александровна, Старший преподаватель ООД ШБИП

**Названия разделов, которые должны быть написаны на русском и иностранном языках:**

Расчет параметров эффективного колебательного дипольного момента состояния (001) на примере молекул  $^{32}\text{S}^{16}\text{O}_2$  и  $^{34}\text{S}^{16}\text{O}_2$

Планирование научно-исследовательских работ

Теоретические исследования (моделирование, расчеты) свойств веществ или материалов

Calculation of parameters of an effective vibrational dipole moment of state (001) on the type of  $^{32}\text{S}^{16}\text{O}_2$  and  $^{34}\text{S}^{16}\text{O}_2$  molecules

Research Planning

Theoretical studies (modeling, calculations) of the properties of substances or materials

**Дата выдачи задания на выполнение выпускной квалификационной работы по линейному графику**

**Задание выдал руководитель:**

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Профессор	Бехтерева Елена Сергеевна	д.ф.-м.н., доцент		

**Задание принял к исполнению студент:**

Группа	ФИО	Подпись	Дата
150Б51	Сюй Тунгэ		

**ЗАДАНИЕ ДЛЯ РАЗДЕЛА  
«ФИНАНСОВЫЙ МЕНЕДЖМЕНТ, РЕСУРСОЭФФЕКТИВНОСТЬ И  
РЕСУРСОСБЕРЕЖЕНИЕ»**

Студенту:

Группа	ФИО
150Б51	Сюй Тунгэ

Школа	Ниженерная школа ядерных технологий	Отделение (НОЦ)	Отделение экспериментальной физики
Уровень образования	Бакалавр	Направление/специальность	03.03.02 Физика

**Исходные данные к разделу «Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение»:**

1. <i>Стоимость ресурсов научного исследования (НИ): материально-технических, энергетических, финансовых, информационных и человеческих</i>	
2. <i>Нормы и нормативы расходования ресурсов</i>	
3. <i>Используемая система налогообложения, ставки налогов, отчислений, дисконтирования и кредитования</i>	

**Перечень вопросов, подлежащих исследованию, проектированию и разработке:**

1. <i>Оценка коммерческого потенциала, перспективности и альтернатив проведения НИ с позиции ресурсоэффективности и ресурсосбережения</i>	
2. <i>Планирование и формирование бюджета научных исследований</i>	
3. <i>Определение ресурсной (ресурсосберегающей), финансовой, бюджетной, социальной и экономической эффективности исследования</i>	

**Перечень графического материала (с точным указанием обязательных чертежей):**

1. <i>Оценка конкурентоспособности технических решений</i>	
2. <i>Альтернативы проведения НИ</i>	
3. <i>График проведения и бюджет НИ</i>	
4. <i>Оценка ресурсной, финансовой и экономической эффективности НИ</i>	

**Дата выдачи задания для раздела по линейному графику**

**Задание выдал консультант:**

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Доцент	Конотопский Владимир Юрьевич	К. Э. Н.		

**Задание принял к исполнению студент:**

Группа	ФИО	Подпись	Дата
150Б51	Сюй Тунгэ		

**ЗАДАНИЕ ДЛЯ РАЗДЕЛА  
«СОЦИАЛЬНАЯ ОТВЕТСТВЕННОСТЬ»**

Студенту:

<b>Группа</b>		<b>ФИО</b>	
150Б51		Сюй Тунгэ	
<b>Школа</b>	ИЯТШ	<b>Отделение (НОЦ)</b>	Отделение экспериментальной физики
<b>Уровень образования</b>	бакалавр	<b>Направление/специальность</b>	03.03.02. Физика

Тема ВКР:

Расчет параметров эффективного колебательного дипольного момента состояния (001) на примере молекул $^{32}\text{S}^{16}\text{O}_2$ и $^{34}\text{S}^{16}\text{O}_2$	
<b>Исходные данные к разделу «Социальная ответственность»:</b>	
1. Характеристика объекта исследования (вещество, материал, прибор, алгоритм, методика, рабочая зона) и области его применения	Теоретический расчёт параметров эффективного колебательного дипольного момента молекул $\text{SO}_2$ .
Перечень вопросов, подлежащих исследованию, проектированию и разработке:	
<b>1. Правовые и организационные вопросы обеспечения безопасности:</b> <ul style="list-style-type: none"> <li>- специальные (характерные при эксплуатации объекта исследования, проектируемой рабочей зоны) правовые нормы трудового законодательства;</li> <li>- организационные мероприятия при компоновке рабочей зоны.</li> </ul>	<ol style="list-style-type: none"> <li>1. Гигиенические требования к микроклимату производственных помещений СанПиН 2.2.4-548-96;</li> <li>2. Нормы естественного и искусственного освещения предприятий, СНиП 23-05-95;</li> <li>3. Допустимые уровни шумов в производственных помещениях. ГОСТ 12.1.003-83. ССБТ.</li> </ol>
<b>2. Производственная безопасность:</b> <ol style="list-style-type: none"> <li>2.1. Анализ выявленных вредных и опасных факторов</li> <li>2.2. Обоснование мероприятий по снижению воздействия</li> </ol>	<ol style="list-style-type: none"> <li>1. Микроклимат;</li> <li>2. Повышенная напряженность зрения;</li> <li>3. Повышенная напряженность труда в течение смены;</li> <li>4. Освещенность;</li> <li>5. Электромагнитные излучения;</li> <li>6. Шум.</li> </ol>
<b>3. Экологическая безопасность:</b>	<ol style="list-style-type: none"> <li>1. Анализ воздействия объекта ВКР и области его использования на ОС;</li> <li>2. Разработка решений по обеспечению экологической безопасности.</li> </ol>

<b>4. Безопасность в чрезвычайных ситуациях:</b>	Выбор и описание возможных ЧС; типичная ЧС – пожар. 1. разработка превентивных мер по предупреждению ЧС; 2. разработка действий в результате возникшей ЧС и мер по ликвидации её последствий.
--	--

<b>Дата выдачи задания для раздела по линейному графику</b>	
---	--

**Задание выдал консультант:**

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Старший преподаватель ООД ШБИП	Скачкова Лариса Александровна			

**Задание принял к исполнению студент:**

Группа	ФИО	Подпись	Дата
150Б51	Сюй Тунгэ		



Министерство науки и высшего образования Российской Федерации  
 федеральное государственное автономное  
 образовательное учреждение высшего образования  
 «Национальный исследовательский Томский политехнический университет» (ТПУ)

Уровень образования бакалавриат

Школа Инженерная школа ядерных технологий

Направление подготовки 03.03.02 «Физика»

Отделение школы (НОЦ) Отделение экспериментальной физики

Период выполнения \_\_\_\_\_

Форма представления работы:

бакалаврская работа

(бакалаврская работа, дипломный проект/работа, магистерская диссертация)

### КАЛЕНДАРНЫЙ РЕЙТИНГ-ПЛАН

#### выполнения выпускной квалификационной работы

Срок сдачи студентом выполненной работы:	
--	--

Дата контроля	Название раздела (модуля) / вид работы (исследования)	Максимальный балл раздела (модуля)
28.02.2018	Аналитический обзор литературы	15
19.09.2018	Исследование эффективных гамильтонианов молекул типа XY <sub>2</sub>	15
19.12.2018	Расчет параметров эффективного колебательного дипольного момента состояния (001) на примере молекул <sup>32</sup> S <sup>16</sup> O <sub>2</sub> и <sup>34</sup> S <sup>16</sup> O <sub>2</sub>	20
01.04.2019	Анализ результатов	15
25.05.2019	Социальная ответственность	15
25.05.2019	Финансовый менеджмент, ресурсэффективность и ресурсосбережение	15
25.05.2019	Заключение	5

Составил преподаватель:

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Профессор	Бехтерева Елена Сергеевна	д.ф.-м.н., доцент		

**СОГЛАСОВАНО:**

Руководитель ООП	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Руководитель ОЭФ	Лидер Андрей Маркович	д.т.н., доцент		

## РЕФЕРАТ

Выпускная квалификационная работа содержит 81 страницы, 8 рисунков, 24 таблицы, 18 литературный источник, 0 приложений.

Ключевые слова: теория симметрии, эффективный гамильтониан, интенсивность линий, эффективный дипольный момент, изотопологи диоксида серы.

**Объектом** данного исследования являются молекулы типа  $XY_2$  типа ( $C_{2v}$  симметрии). **Предметом** исследования являются параметры эффективного колебательного дипольного момента молекул.

**Целью** работы является определение параметров эффективного дипольного момента состояния (001) на примере молекул  $^{32}S^{16}O_2$  и  $^{34}S^{16}O_2$ .

В процессе исследования использованы теория симметрии и метод эффективных гамильтонианов. Для расчёта поставленных задач были использованы антикоммутаторы и унитарное преобразование.

В результате исследования были определены собственные функции эффективного гамильтониана  $h$ , представлены в явном виде элементы матрицы моментов инерции и параметры эффективного колебательного дипольного момента состояния (001) на примере молекул  $^{32}S^{16}O_2$  и  $^{34}S^{16}O_2$ .

Полученные результаты также могут использоваться для анализа спектра высокого разрешения молекул  $SO_2$  и для получения высокоточной количественной информации об интенсивностях колебательных состояний (001) молекул типа  $XY_2$  ( $C_{2v}$  симметрии). Результаты проведенного исследования важны для решения задач астрофизики, планетологии, атмосферной оптики и т.д.

## Оглавление

<b>РЕФЕРАТ.....</b>	<b>10</b>
<b>Введение .....</b>	<b>14</b>
<b>Глава 1. Теория групп.....</b>	<b>16</b>
1.1 Общие понятия теории групп и симметрии молекулы .....	16
1.1.1 Операция симметрии и определение группы.....	16
1.1.2 Группа в матричной виде .....	18
1.1.3 Точечные группы первого рода.....	18
1.1.4 Точечные группы второго рода.....	19
1.2 Применение симметрии в молекуле.....	21
1.2.1 Применения группы перестановок и инверсий .....	21
1.2.2 Пример: Представление группы в молекуле SO <sub>2</sub> .....	22
<b>Глава 2. Построение гамильтониана .....</b>	<b>25</b>
2.1 Построение классических функций Лагранжа и Гамильтона многоатомной молекулы.....	25
2.1.1 Выбор системы координат .....	25
2.1.2 Колебательно-вращательная кинетическая энергия.....	26
2.1.3 Преобразование оператора Лагранжа в оператор Гамильтона.....	28
2.2 Квантово-механический гамильтониан .....	32
2.2.1 Описание ориентации молекулы .....	32
2.2.2 Теорема Подольского .....	34
2.2.3 Квантовый гамильтониан по теореме Подольского .....	35
<b>Глава 3. Подготовка к исследованию интенсивности линии .....</b>	<b>37</b>
3.1 Стационарная теория возмущений и гамильтониан нелинейных молекул .....	37

3.1.1	Общее понятие стационарной теории возмущений .....	37
3.1.2	Метод эффективных гамильтонианов .....	39
3.1.3	Гамильтониан нелинейных молекул типа XY <sub>2</sub> .....	40
3.2	Интенсивность линии и параметры дипольного момента .....	43
<b>Глава 4.</b>	<b>Численная оценка параметров эффективного дипольного момента молекулы типа XY<sub>2</sub>.</b> .....	<b>45</b>
4.1	Расчёт элементов матрицы обратных моментов инерции .....	45
4.2	Расчет параметров эффективного дипольного момента состояния (001) на примере молекул <sup>32</sup> S <sup>16</sup> O <sub>2</sub> и <sup>34</sup> S <sup>16</sup> O <sub>2</sub> .....	48
<b>Глава 5.</b>	<b>Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение.</b> .....	<b>51</b>
5.1	Структура работ в рамках научного исследования .....	51
5.2	Определение трудоемкости выполнения работ .....	53
5.3	Разработка графика проведения научного исследования .....	55
5.4	Бюджет научно-технического исследования (НТИ) .....	58
5.4.1	Расчет материальных затрат НТИ .....	58
5.4.2	Расчет заработной платы .....	60
5.4.3	Расчет затрат на социальный налог .....	60
5.4.4	Расчет затрат на электроэнергию .....	61
5.4.5	Расчет амортизационных расходов .....	62
5.4.6	Непосредственно учитываемые расходы .....	63
5.4.7	Стоимость всего проекта .....	63
<b>Глава 6.</b>	<b>Социальная ответственность.</b> .....	<b>64</b>
6.1	Правовые и организационные вопросы обеспечения безопасности .....	64

6.1.1	Специальные правовые нормы трудового законодательства .....	64
6.1.2	Организационные мероприятия при компоновке рабочей зоны исследователя .....	65
6.2	Производственная безопасность .....	68
6.2.1	Анализ вредных и опасных факторов, которые может создать объект исследования .....	68
6.2.2	Анализ вредных и опасных факторов, которые могут возникнуть на рабочем месте при проведении исследований .....	69
6.2.3	Обоснование мероприятий по защите исследователя от действия опасных и вредных факторов.....	70
6.3	Экологическая безопасность.....	71
6.3.1	Анализ влияния объекта исследования на окружающую среду ...	71
6.3.2	Анализ влияния процесса исследования на окружающую среду .	72
6.3.3	Обоснование мероприятий по защите окружающей среды .....	73
6.4	Безопасность в чрезвычайных ситуациях .....	74
6.4.1	Анализ вероятных ЧС, которые может инициировать объект исследований .....	74
6.4.2	Обоснование мероприятий по предотвращению ЧС и разработка порядка действия в случае возникновения ЧС .....	75
	<b>Выводы по разделу.....</b>	<b>78</b>
	<b>Заключение.....</b>	<b>79</b>
	<b>Список литературы.....</b>	<b>80</b>

## Введение

В середине 20-го века, благодаря появлению квантовой механики, компьютерных технологий, лазеров, оборудования для спектроскопии и электронных технологий, молекулярная спектроскопия стала удивительно развита. Молекулярная спектроскопия продолжает развиваться и сегодня.

В последние годы молекулярная спектроскопия с высоким разрешением все больше занимается изучением интенсивностей колебательно-вращательных линий. Это связано с необходимостью иметь наилучшие значения интенсивностей линий, чтобы извлечь максимум информации из экспериментов по дистанционному зондированию в области физики атмосферы и для интерпретации астрофизических данных и данных горения. Для получения надежных интенсивностей существуют два подхода, которые в некотором смысле дополняют друг друга. Первый подход заключается в экспериментальном измерении интенсивности, в котором используются все более и более сложные методы, такие как спектрометры с Фурье-преобразованием и диодными лазерами. Второй подход заключается в теоретическом расчете интенсивностей. В этом случае единственным способом решения проблемы станет использование различных приближений (приближение Борна-Оппенгеймера, метод эффективных гамильтонианов, учет свойств симметрии).

Взятые отдельно, каждый подход редко может дать обширные и надежные результаты. Точное экспериментальное определение интенсивностей линий — это долгая и довольно трудная задача, которая дает точные результаты при правильном выполнении, хотя обычно ограничивается конечным числом

линий. Напротив, из-за наличия компьютеров с большой мощностью, относительно легко генерировать расширенные наборы интенсивностей линий при наличии хорошей теоретической модели. Тем не менее, некоторые параметры модели, как правило, должны быть скорректированы, и в большинстве случаев это возможно только при наличии хороших и надёжно-подобранных экспериментальных данных. Интенсивности линий требуют расчета колебательно-вращательных матричных элементов оператора дипольного момента [1].

Перечисленные выше моменты позволяют говорить о **важности и актуальности** анализа спектров высокого разрешения. В качестве **объектов исследования** были выбраны молекулы  $^{32}\text{S}^{16}\text{O}_2$  и  $^{34}\text{S}^{16}\text{O}_2$ .

**Целью работы** является определение параметров эффективного дипольного момента колебательного состояния (001) на примере молекул  $^{32}\text{S}^{16}\text{O}_2$  и  $^{34}\text{S}^{16}\text{O}_2$ .

Для достижения поставленной цели были сформулированы следующие задачи:

1. Найти собственные функции эффективного гамильтониана  $H^{\text{эфф}}$  для молекул типа  $\text{XY}_2$  ( $\text{C}_{2v}$  симметрии) с помощью метода эффективных гамильтонианов и теории симметрии;
2. Определить в аналитическом виде параметры эффективного дипольного момента колебательного состояния (001) для молекул типа  $\text{XY}_2$  ( $\text{C}_{2v}$  симметрии).
3. Провести численный расчет параметров эффективного дипольного момента фундаментальной полосы  $\nu_3$  для реальных молекул  $^{32}\text{S}^{16}\text{O}_2$  и  $^{34}\text{S}^{16}\text{O}_2$ .

## Глава 1. Теория групп

### 1.1 Общие понятия теории групп и симметрии молекулы

#### 1.1.1 Операция симметрии и определение группы

Много структур молекул обладают высокой симметрией. Симметрия означает неизменность объекта по отношению к неким преобразованиям, совершаемым над этим объектом. Такие преобразования называются операциями симметрии. Молекула может обладать одним или несколькими элементами симметрии, например, плоскость симметрии, ось симметрии и центр симметрии. Каждому элементу соответствует одна операция симметрии. Таблица 1.1 и рисунок 1.1 представляют собой различные симметричные операции.

Таблица 1.1 Операции и соответственные элементы симметрии

Элемент симметрии	Символ	Операция симметрии	Символ
единичный элемент	$E$	молекула не изменяться	$E$
плоскость отражения	$\sigma$	операция отражения в плоскости	$\sigma$
центр симметрии	$i$	инверсия к центру симметрии	$i$
поворотная ось	$C_n$	при повороте на угол $2\pi k/n$ вокруг оси. ( $k=1,2,3\dots n$ )	$C_n^k$
Зеркальная поворотная ось	$S_n$	при повороте на угол $2\pi k/n$ вокруг оси, и отражение в плоскости, которая перпендикулярна к этой оси	$S_n^k$



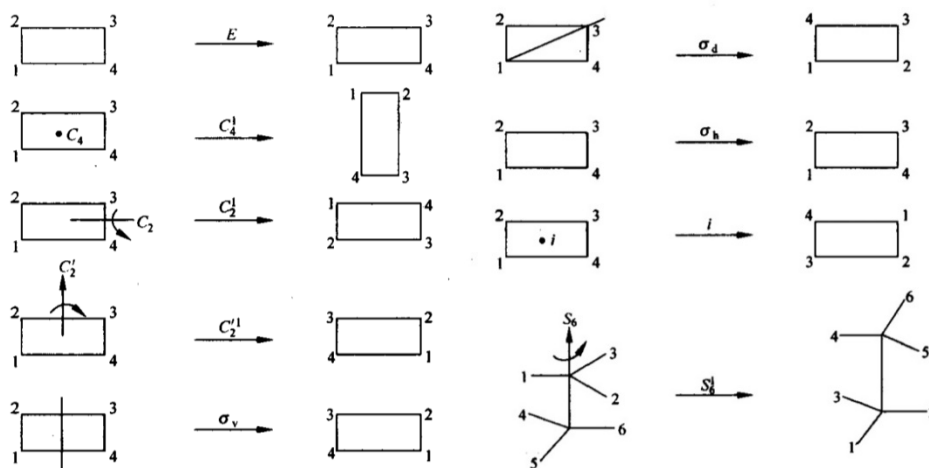


Рисунок 1.1 Операции и соответственные им элементы симметрии

Из вышеизложенного можно понять:

(1) Если молекула имеет операции  $g_1$  и  $g_2$ , то  $g_1g_2$  является операцией,  $g_1g_2$  образует то, что сначала проводить операцию  $g_2$ , потом  $g_1$ ;

(2) Если существует операцию  $g$ , то обязательно существует  $g^{-1}$ , определяться так, что  $gg^{-1}=E$ ; (молекула не изменяться)

(3) Если операции симметрии  $g_1, g_2, g_3$  в порядке  $g_1g_2g_3$ , то  $(g_1g_2)g_3=g_1(g_2g_3)$ ;

(4) Все операции обязательно содержат  $E$ ,  $gE= Eg=g$ . [2]

Операция симметрии является одним видом группы, сейчас мы можем дать определение группы:

Группой называется всякое множество  $G$  элементов или операций, в котором выполняются условия:

(1) Замкнутость:  $\forall g_1 \in G$  и  $g_2 \in G$ , то  $g_1g_2 \in G$ ;

(2) Обратный элемент:  $\forall g \in G$ , то  $g^{-1}$  существует и  $g^{-1} \in G$ ;

(3) Ассоциативность:  $\forall g_1, g_2, g_3 \in G$ , то  $(g_1g_2)g_3=g_1(g_2g_3)$ ;

(4) Наличие единичного элемента:  $\forall g \in G$ , то  $gE= Eg=g$ .

### 1.1.2 Группа в матричной виде

В предыдущем разделе мы дали определение группы  $G$ . Существует совокупность  $n$ -мерных квадратных матриц  $D_1, D_2, D_3, \dots, D_g$ . Если группа  $G$  изоморфна группе  $D$ , можно сказать, что элемент группы  $G$  представим в виде матрицы  $D$ . Среди них,  $D_1$  — это единичная матрица,  $D_1=I$ . Инвариантные элементы в  $G$  соответствуют единичной матрице в группе, обратный элемент в  $G$  соответствует обратной матрице в группе.

Таким образом, матричная группа  $D$  может представлять природу группы  $G$ . Выражение группы не является уникальным. Если существуют матрицы  $D'$  и  $S$ , и они имеют преобразование  $D' = S^{-1} D S$ , то группа  $G$  тоже представлена в виде матрицы  $D'$ . преобразование  $D' = S^{-1} D S$  называется преобразованием подобия. [3]

Матричная форма группы имеет большое значение. Группа вращения, группа симметрии, группа инверсии и перестановок и т.д. используют матричное знание. Матрица тесно связана с симметрией.

### 1.1.3 Точечные группы первого рода

Всякая подгруппа полной ортогональной группы называется точечной группой. Точечные группы, не содержащие зеркальных поворотов, называются группами первого рода. Все остальные точечные группы, называются группами первого рода. Группы первого рода:

- (1)  $C_n$ —это наиболее простая группа;
- (2)  $D_n$  -она состоит из всех поворотов, совмещающих правильную -угольную призму саму с собой;
- (3)  $T$ -группа, состоящая из всех поворотов, совмещающих тетраэдр сам

с собой;

(4)  $O$ -группа, состоящая из всех поворотов, совмещающих куб сам с собой;

(5)  $Y$ -группа, состоящая из всех поворотов, совмещающих самого с собой додекаэдр, т.е. двенадцатигранник с правильными пятиугольными гранями. [4]

Таблица 1.2 Точечные группы первого рода

	Число элементов	Число классов	Число осей разного порядка					
			2-го	3-го	4-го	5-го	6-го	n-го
$C_n$	n	n						1
$D_n$	2n	$(n/2) + 3$ при $n=2k$ $(n+3)/2$ при $n=2k+1$	n					1
$T$	12	4	3	4				
$O$	24	5	6	4	3			
$Y$	60	5	15	10		6		

### 1.1.4 Точечные группы второго рода

(1)  $S_{2n}$  -группа, состоящая из степеней зеркального поворота  $S_{2n} = S(\pi/n)$ .

У неё  $2n$  элементов:  $e, S_{2n}, S_{2n}^2, S_{2n}^3, \dots, S_{2n}^{2n-1}$ ;  $S_{2n}$  является циклической группой;

(2)  $C_{nh}$  -группа, состоящая из операции симметрии  $C_n$  и операции симметрии  $\sigma_h$ ,  $\sigma_h$  означает отражение в горизонтальной плоскости перпендикулярно к оси  $C_n$ ;

(3)  $C_{nv}$  -группа, состоящая из операции симметрии  $C_n$  и операции

симметрии  $\sigma_v$ , группа  $C_{nv}$  изоморфна группе  $D_n$ ;

(4)  $D_{nh}$  -группа, состоящая из операции симметрии  $D_n$  и операции симметрии  $\sigma_h$ ;

(5)  $D_{nd}$  -группа, состоящая из операции симметрии  $D_n$  и операции симметрии  $\sigma_d$ ;

(6)  $T_d$ ,  $T_h$ ,  $O_h$ ,  $O_d$  -эти группы обычно используются для анализа кристаллов, они имеют высокую симметрию, и более симметричные элементы [5].

Таблица 1.3 Точечные группы второго рода

Группа	Число элементов	Число классов
$S_{2n}$	2n	2n
$C_{nh}$	2n	2n
$C_{nv}$	2n	$n/2 + 3$ при $n=2k$ $(n+3) / 2$ при $n=2k+1$
$D_{nh}$	4n	$n+10$ при $n=2k$ $n+5$ при $n=2k+1$
$D_{nd}$	4n	n+3
$T_d$	24	5
$T_h$	24	8
$O_h$	48	12
$O_d$	120	10

Таким образом, все операции симметрии могут быть представлены точечными группами, поэтому симметрию исследуемых молекул нельзя отделить от теории групп.

## 1.2 Применение симметрии в молекуле

В первой части мы ввели понятие симметричных операций и, таким образом, распространили на понятие групп, а также на матричную форму группы. Позже мы узнали, что точечные группы являются одним видом группы и что симметричная операция молекулярных структур может быть выражена точечными группами. Таким образом, мы тесно связываем симметрию с теорией групп.

Дальше я расскажу о применении симметрии в молекуле.

### 1.2.1 Применения группы перестановок и инверсий

Перестановка относится к функции переменных для обмена. Например, если (12) относится к обмену переменными  $x_1, x_2$ , то

$$(12)f(x_1, x_2, \dots, x_n) = f(x_2, x_1, \dots, x_n), \quad (1.1)$$

и если (123) относится к циклическому обмену переменными  $x_1, x_2, x_3$ , то

$$(123)f(x_1, x_2, x_3, \dots, x_n) = f(x_2, x_3, x_1, \dots, x_n). \quad (1.2)$$

Известно, что для  $n$  переменных могут быть  $n!$  операций перестановок, и эти перестановки могут образовывать группу  $S_n$ , которая становится группой перестановок. Каждая операция перестановки может быть выражена произведением различных обменов. Операции, которые имеют одинаковую структуру, являются одним типом. Например, (12), (23), (13) являются одним типом, (123), (132) являются другим типом. [6]

Инверсия: предполагая, что координаты частицы в ортогональном пространстве  $(x, y, z)$ , то операция инверсии  $E^*$  относится к преобразованию:

$$E^*(x, y, z) = (-x, -y, -z). \quad (1.3)$$

Например, молекула  $\text{NH}_3$ , группа перестановок и инверсий:  $\{E, (12), (23),$

(31), (123), (132),  $E^*$ , (12)\*, (23)\*, (31)\*, (123)\*, (132)\*}, 1,2,3 образуют 3 атома водорода в молекуле  $\text{NH}_3$ , (12)\*=  $E^*\cdot(12)$ , и так далее. Эта группа изоморфна точечной группе  $D_{3h}$ . Изоморфизм устанавливается соотношениями:

$$E \Leftrightarrow E, (123) \Leftrightarrow C_3, (132) \Leftrightarrow C_3^2, (12) \Leftrightarrow C_2^3, (13) \Leftrightarrow C_2^2, (23) \Leftrightarrow C_2^1, E^* \Leftrightarrow \sigma_h, (123)^* \Leftrightarrow S_3, (132) \Leftrightarrow S_3^2, (12)^* \Leftrightarrow \sigma_{v3}, (13)^* \Leftrightarrow \sigma_{v2}, (23)^* \Leftrightarrow \sigma_{v1}. [7]$$

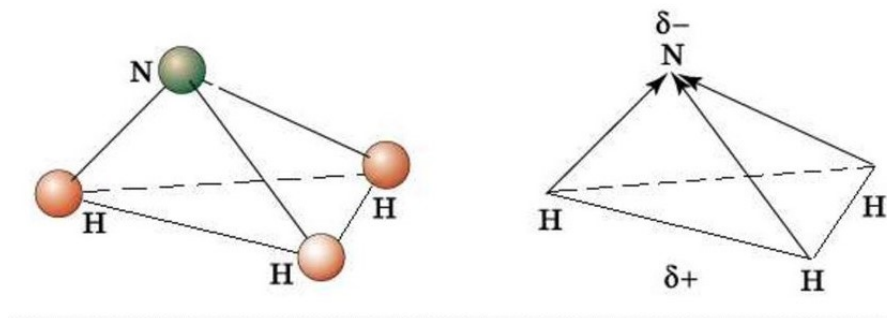


Рисунок 1.2 Молекула  $\text{NH}_3$

Другой пример, молекула  $\text{HN}_3$ , группа перестановок и инверсий:  $\{E, (12), (23), (31), (123), (132), E^*, (12)^*, (23)^*, (31)^*, (123)^*, (132)^*\}$ , одинаковый с молекулой  $\text{NH}_3$ . Но кроме  $E$  и  $E^*$ , другие элементы не воспроизводят точное движение молекулы, так как структура  $\text{HN}_3$  не имеет симметрию. Поэтому её группа перестановок и инверсий— $\{E, E^*\}$ . Эта группа изоморфна точечной группе  $C_s$ . [8]

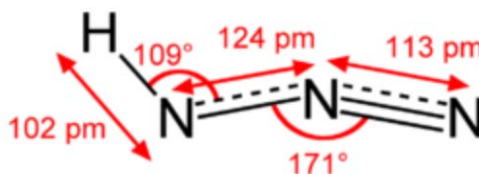


Рисунок 1.3 Молекула  $\text{HN}_3$

### 1.2.2 Пример: Представление группы в молекуле $\text{SO}_2$

Для исследования молекулы, нам нужно определить к какой точечной группе она относится. Для обычных молекул:

- (1) сначала определим, принадлежит ли молекула специфической

точечной группе, такой как  $T_d$ ,  $T_h$ ,  $O_d$ ,  $O_h$  и т.д.;

(2) если нет, сначала определим ось вращения. Если оси вращения нет, тогда найдем центр симметрии или плоскость отражения.

(3) если ось вращения существует, сначала определим положение основной оси, потом определим, что существует ли  $S_n$ ;

(4) найдем множество  $n$ -осей в плоскостях, которые перпендикулярны к оси  $C_n$ ;

(5) определим, какой тип молекул содержится в плоскости отражения, чтобы определить точечную группу молекулы.

Для молекулы  $SO_2$  ясно, что у неё одна ось  $C_2$ , две плоскости отражения  $\sigma_v$ , поэтому она принадлежит точечной группе  $C_{2v}$ . Элементы симметрии:  $E$ ,  $C_2(z)$ ,  $\sigma_v(xz)$ ,  $\sigma_v(yz)$ .

Известно, что трёхатомные молекулы  $XY_2$  имеют три колебательные моды  $Q_1, Q_2, Q_3$ :

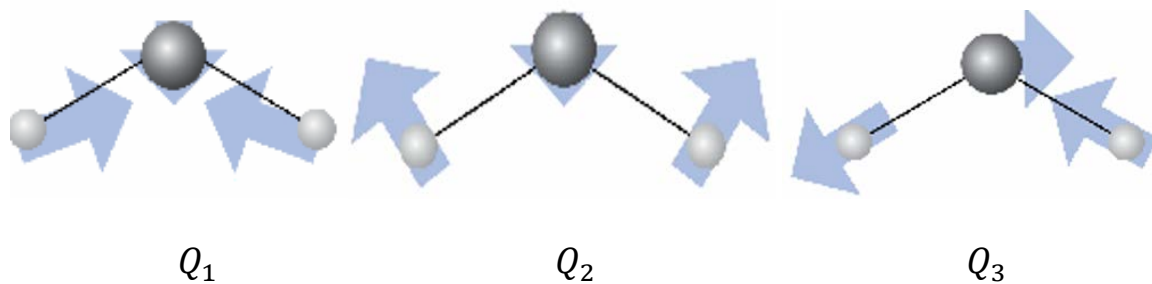


Рисунок 1.4 Три колебательные моды молекулы  $XY_2$ .

Таблица 1.4 Характеры для точечной группы  $C_{2v}$

	$E$	$C_2(z)$	$\sigma_v(xz)$	$\sigma_v(yz)$
$A_1$	1	1	1	1
$A_2$	1	1	-1	-1
$B_1$	1	-1	1	-1
$B_2$	1	-1	-1	1

Фактически, в этом примере мы вступили в контакт с теорией представлений групп, и мы обнаружили, что очень просто и гибко исследовать симметрию молекул. Теория представлений - теория описания групп с конкретными линейными группами (матричные группы) является одним из самых мощных инструментов для изучения молекул.



## Глава 2. Построение гамильтониана

### 2.1 Построение классических функций Лагранжа и Гамильтона многоатомной молекулы

По классической механике, функция Гамильтона может делиться на кинетическую энергию и потенциальную энергию. Представление кинетической энергии имеет большой произвол, поскольку оно зависит от выбора системы координат. В данной главе рассмотрим процесс построения классической функции Гамильтона при конкретном условии.

#### 2.1.1 Выбор системы координат

Рассмотрим систему  $N$  материальных точек ( $N \geq 3$ ), расстояние между каждыми двумя точками  $r_{ij}$  не является постоянным. Поскольку молекула одновременно вращается и колеблется, в классической механике для описания движения молекулы обычно выбирают две системы координат: одна система представляет собой пространственно-фиксированную систему координат (ПФС), а другая – внутренняя система координат, связанная с молекулой (ВС). ПФС является системой координат поступательного движения, а ВС является системой координат вращательного движения, которые представлены на рисунке 1.

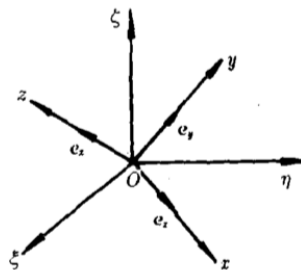


Рисунок 2.1 пространственно-фиксированная система координат (O- $\xi\eta\zeta$ ) и внутренняя система координат (O-xyz)

Для многоатомных молекулярных систем мы можем установить начало координат ПФС и ВС в центре масс молекул. В ПФС мы можем выбрать набор координат  $\vec{r}_i^e$  ( $i = 1, \dots, N$ ), где  $e$  представляет собой положение равновесия каждого атома,  $N$  нумерует атомы в молекуле. А в ВС можно выбрать набор координат  $\vec{r}_i$  ( $i = 1, \dots, N$ ), который может представлять мгновенное положение. Тогда относительное положение до и после движения частицы может выражаться как:

$$\vec{\Delta}_i = \vec{r}_i - \vec{r}_i^e \quad (2.1)$$

### 2.1.2 Колебательно-вращательная кинетическая энергия

Известно, что если скорость  $i$ -ого атома ( $i = 1, \dots, N$ ) равна  $\vec{v}_i$  в системе ВС, тогда в ПРС скорость  $i$ -ого атома будет:

$$\dot{\vec{r}}_i = \vec{v}_i + \vec{\omega} \times \vec{r}_i \quad (2.2)$$

где  $\vec{\omega}$  - угловая скорость молекулы. Поскольку кинетическая энергия может выражаться как  $T = \sum_i^N \frac{1}{2} m_i \dot{\vec{r}}_i^2$ , тогда:

$$\begin{aligned} 2T &= \sum_i^N m_i \dot{\vec{r}}_i^2 \\ &= \sum_i^N m_i (\vec{v}_i + \vec{\omega} \times \vec{r}_i) (\vec{v}_i + \vec{\omega} \times \vec{r}_i) \\ &= \sum_i^N m_i \vec{v}_i^2 + \sum_i^N m_i (\vec{\omega} \times \vec{r}_i) (\vec{\omega} \times \vec{r}_i) + \sum_i^N m_i (\vec{\omega} \times \vec{r}_i \cdot \vec{v}_i + \vec{v}_i \cdot \vec{\omega} \times \vec{r}_i) \\ &= \sum_i^N m_i \vec{v}_i^2 + \sum_i^N m_i (\vec{\omega} \times \vec{r}_i) (\vec{\omega} \times \vec{r}_i) + 2 \sum_i^N m_i \vec{\omega} \cdot (\vec{r}_i \times \vec{v}_i), \end{aligned} \quad (2.3)$$

видно, что первое слагаемое  $\sum_i m_i \vec{v}_i^2$  описывает кинетическую энергию во внутренней системе координат, т.е. чисто колебательная энергия. Второе

слагаемое  $\sum_i m_i (\vec{\omega} \times \vec{r}_i)(\vec{\omega} \times \vec{r}_i)$  представляет собой чисто вращательную энергию. Последнее слагаемое  $2 \sum_i m_i \vec{\omega} \cdot (\vec{r}_i \times \vec{v}_i)$  описывает эффект Кориолиса.

Проанализируем первую часть. По формуле (2.1) возьмем производную по времени с двух сторон, тогда можно получить, что  $\dot{\vec{\Delta}}_i = \vec{v}_i$ .

Затем проанализируем вторую часть. Угловой момент и положение можно разложить в виде  $\vec{\omega} = (\omega_x, \omega_y, \omega_z)$ ,  $\vec{r}_i = (r_x, r_y, r_z)$ , и как известно, из основ векторного анализа, можно записать:  $(\vec{A} \times \vec{B}) \cdot (\vec{C} \times \vec{D}) = (\vec{A} \cdot \vec{C})(\vec{B} \cdot \vec{D}) - (\vec{A} \cdot \vec{D})(\vec{B} \cdot \vec{C})$ , поэтому вторая часть переходит  $\sum_i m_i \left( (\omega_x^2 + \omega_y^2 + \omega_z^2)(r_x^2 + r_y^2 + r_z^2) - (\omega_x r_x + \omega_y r_y + \omega_z r_z)^2 \right)$ .

В механике твердого тела существует понятие – тензор инерции, который определяется как

$$\mathbb{I}_{\sigma, \tau} = \begin{pmatrix} I_{XX} & -I_{XY} & -I_{XZ} \\ -I_{XY} & I_{YY} & -I_{YZ} \\ -I_{XZ} & -I_{YZ} & I_{ZZ} \end{pmatrix}. \quad (2.4)$$

Где  $I_{\sigma\sigma} = \sum_{i=1}^N m_i (r_i^2 - \sigma_i^2)$ ;  $I_{\sigma, \tau} = \sum_{i=1}^N m_i \sigma_i \tau_i$ . Поэтому вторую часть можно выразить в следующем виде:

$$\begin{aligned} & \sum_i m_i \left( (\omega_x^2 + \omega_y^2 + \omega_z^2)(r_x^2 + r_y^2 + r_z^2) - (\omega_x r_x + \omega_y r_y + \omega_z r_z)^2 \right) \\ & = \sum_{\sigma, \tau} \omega_\sigma \mathbb{I}_{\sigma, \tau} \omega_\tau = \vec{\omega}^T \mathbb{I} \vec{\omega}. \end{aligned} \quad (2.5)$$

Таким образом, на данном этапе мы представляем классическую кинетическую энергию в виде:

$$T = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N m_i \dot{\vec{\Delta}}_i^2 + \frac{1}{2} \sum_{\sigma, \tau} \omega_\sigma \mathbb{I}_{\sigma, \tau} \omega_\tau + \sum_{i=1}^N m_i \vec{\omega} \cdot (\vec{\Delta}_i \times \vec{v}_i). \quad (2.6)$$

### 2.1.3 Преобразование оператора Лагранжа в оператор Гамильтона

Для того, чтобы выразить классическую кинетическую энергию в гамильтоновом формализме, нам нужно использовать функцию Лагранжа в классической механике и понятие нормальных координат. Оказывается, по теории малых колебаний, удобнее использовать гармоническое приближение и нормальные координаты, чтобы колебательная кинетическая энергия перешла к канонической квадратичной форме по производным нормальных координат. Тогда кинетическая энергия выразится через нормальные координаты, то можно ввести канонический импульс, чтобы выразить гамильтонову форму классической кинетической энергии с помощью канонических импульсов и нормальных координат.

В предыдущем разделе мы разделили выражение классической кинетической энергии на три части:

$$A = \sum_i m_i \dot{\vec{\Delta}}_i^2, B = \sum_{\sigma, \tau} \omega_\sigma \mathbb{I}_{\sigma, \tau} \omega_\tau, C = 2 \sum_i m_i \vec{\omega} \cdot (\vec{r}_i \times \vec{v}_i). \quad (2.7)$$

Для многоатомной молекулы существует  $(3N-6)$  колебательных степеней свободы. Поскольку в замкнутой системе всегда работают закон сохранения импульса и закон сохранения углового момента в равновесном положении (условие Экарта), то для многоатомных молекул существуют дополнительных 6 связей. Поэтому мы выбираем набор обобщенных координат:  $\tilde{Q}_L$  ( $L=1, 2, \dots, 3N-6$ ). Запишем линейное преобразование между нормальными координатами и координатами смещения:

$$\vec{\Delta}_i = L^i \vec{Q} \quad \text{или} \quad \begin{pmatrix} \Delta_{ix} \\ \Delta_{iy} \\ \Delta_{iz} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} L_{ix}^1 & L_{ix}^2 & \dots & L_{ix}^{3N-6} \\ L_{iy}^1 & L_{iy}^2 & \dots & L_{iy}^{3N-6} \\ L_{iz}^1 & L_{iz}^2 & \dots & L_{iz}^{3N-6} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} Q_1 \\ Q_2 \\ \vdots \\ Q_{3N-6} \end{pmatrix}, \quad (2.8)$$

отсюда  $\dot{\vec{\Delta}}_i = L^i \dot{\vec{Q}}$ .

Таким образом получим:

$$A = \sum_{i=1}^N m_i \dot{\vec{\Delta}}_i^2 = \sum_{i=1}^N m_i \dot{\vec{\Delta}}_i^T \dot{\vec{\Delta}}_i = \sum_{i=1}^N m_i \dot{\vec{Q}}^T (L^i)^T L^i \dot{\vec{Q}} = \sum_{i=1}^{3N-6} \dot{Q}^2. \quad (2.9)$$

Далее мы используем понятие свертки тензора для анализа С: известно, что

$\vec{\Delta}_i = L^i \vec{Q}$  и  $\vec{v}_i = \dot{\vec{\Delta}}_i$ , поэтому

$$C = 2 \sum_i m_i \vec{\omega} \cdot (\vec{r}_i \times \vec{v}_i) = 2\vec{\omega} \sum_{i=1}^N m_i \cdot (\vec{\Delta}_i \times \dot{\vec{\Delta}}_i). \quad (2.10)$$

Согласно знанию векторного анализа, существует такая связь:

$$m_i \cdot (\vec{\Delta}_i \times \dot{\vec{\Delta}}_i) = m_i \begin{vmatrix} \vec{i} & \vec{j} & \vec{k} \\ \Delta_{ix} & \Delta_{iy} & \Delta_{iz} \\ \dot{\Delta}_{ix} & \dot{\Delta}_{iy} & \dot{\Delta}_{iz} \end{vmatrix}. \quad (2.11)$$

Введём 3 матрицы  $M_i^\sigma$  ( $\sigma = x, y, z$ ):

$$M_i^x = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & m_i \\ 0 & -m_i & 0 \end{pmatrix}; \quad M_i^y = \begin{pmatrix} 0 & 0 & -m_i \\ 0 & 0 & 0 \\ m_i & 0 & 0 \end{pmatrix}; \quad M_i^z = \begin{pmatrix} 0 & m_i & 0 \\ -m_i & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}. \quad (2.12)$$

Подставив данную форму в С, получим:

$$\begin{aligned} C &= 2 \sum_i m_i \vec{\omega} \cdot (\vec{r}_i \times \vec{v}_i) = 2\vec{\omega} \sum_{i=1}^N m_i \cdot (\vec{\Delta}_i \times \dot{\vec{\Delta}}_i) = 2\vec{\omega} \sum_{i=1}^N m_i \begin{vmatrix} \vec{i} & \vec{j} & \vec{k} \\ \Delta_{ix} & \Delta_{iy} & \Delta_{iz} \\ \dot{\Delta}_{ix} & \dot{\Delta}_{iy} & \dot{\Delta}_{iz} \end{vmatrix} \\ &= \vec{\omega} \left( \sum_{i,\sigma} \vec{e}_\sigma \vec{Q}^T (L^i)^T M_i^\sigma L^i \dot{\vec{Q}} \right), \end{aligned} \quad (2.13)$$

используя понятия свертки тензора, пусть  $\xi^{\sigma i} = (L^i)^T M_i^\sigma L^i$ , можем получить:

$$\sum_{i=1}^N m_i \vec{\omega} \cdot (\vec{\Delta}_i \times \dot{\vec{\Delta}}_i) = \sum_{\sigma} \omega_{\sigma} \sum_{LK} Q_L \xi_{LK}^{\sigma} \dot{Q}_K. \quad (2.14)$$

Итак, классическая кинетическая энергия в Лагранжевой форме имеет

вид:

$$\begin{aligned} T &= \frac{1}{2} \sum_{L=1}^{3N-6} \dot{Q}_L^2 + \frac{1}{2} \sum_{\sigma, \tau} \omega_{\sigma} \mathbb{I}_{\sigma, \tau} \omega_{\tau} + \sum_{\sigma} \omega_{\sigma} \sum_{L, K} Q_L \xi_{LK}^{\sigma} \dot{Q}_K \\ &= \frac{1}{2} \sum_{K=1}^{3N-6} \left( \dot{Q} + \sum_{\sigma, L} \omega_{\sigma} Q_L \xi_{LK}^{\sigma} \right)^2 - \frac{1}{2} \sum_{K=1}^{3N-6} \left( \sum_{\sigma, L} \omega_{\sigma} Q_L \xi_{LK}^{\sigma} \right) \left( \sum_{\tau, m} \omega_{\tau} Q_m \xi_{mK}^{\tau} \right) + \frac{1}{2} \sum_{\sigma, \tau} I_{\sigma\tau} \omega_{\sigma} \omega_{\tau} \\ &= \frac{1}{2} \sum_{K=1}^{3N-6} \left( \dot{Q} + \sum_{\sigma, L} \omega_{\sigma} Q_L \xi_{LK}^{\sigma} \right)^2 + \frac{1}{2} \sum_{\sigma, \tau} I'_{\sigma\tau} \omega_{\sigma} \omega_{\tau}, \end{aligned} \quad (2.15)$$

где  $I'_{\sigma\tau} = I_{\sigma\tau} - \sum_{KLM} \xi_{LK}^{\sigma} \xi_{mK}^{\tau} Q_L Q_m$ .

Далее преобразуем лагранжиан к виду гамильтониана. Для достижения этой цели мы введем канонические импульсы:

$$P_L = \frac{\partial T}{\partial \dot{Q}_L}; \quad J_{\sigma} = \frac{\partial T}{\partial \omega_{\sigma}}. \quad (2.16)$$

В соответствии с классической лагранжевой кинетической энергией получаем:

$$P_a = \frac{\partial T}{\partial \dot{Q}_a} = \dot{Q}_a + \sum_{\sigma, L} \omega_{\sigma} Q_L \xi_{La}^{\sigma} \Rightarrow \dot{Q}_a = P_a - \sum_{\sigma, L} \omega_{\sigma} Q_L \xi_{La}^{\sigma}, \quad (2.17)$$

$$\begin{aligned} J_{\sigma} &= \frac{\partial T}{\partial \omega_{\sigma}} = \sum_{\tau} I'_{\sigma\tau} \omega_{\tau} + \sum_K^{3N-6} \dot{Q}_K + \sum_{\sigma, L} \omega_{\sigma} Q_L \xi_{LK}^{\sigma} \sum_m Q_m \xi_{mK}^{\sigma} \\ &= \sum_{\tau} I'_{\sigma\tau} \omega_{\tau} + \sum_K P_K \sum_m \xi_{Km}^{\sigma} Q_m \\ &= \sum_{\tau} I'_{\sigma\tau} \omega_{\tau} + \sum_{Km} P_K \xi_{Km}^{\sigma} Q_m \\ &= \sum_{\tau} I'_{\sigma\tau} \omega_{\tau} + \pi_{\sigma}, \quad [9] \end{aligned} \quad (2.18)$$

где  $\pi_{\sigma} = \sum_{Km} P_K \xi_{Km}^{\sigma} Q_m$  – это колебательно-вращательный момент импульса.

Далее мы проведем обратное преобразование  $J_\sigma$ , откуда легко получить

$$\omega_\sigma = \sum_{\tau} \mu_{\sigma\tau} (J_\sigma - \pi_\sigma), \quad (2.19)$$

где  $\mu_{\sigma\tau} = (I'_{\sigma\tau})^{-1}$ .

Итак, мы получили классическую кинетическую энергию в Гамильтоновой форме:

$$T = \frac{1}{2} \sum_{K=1}^{3N-6} P_K^2 + \frac{1}{2} \sum_{\sigma,\tau} (J_\sigma - \pi_\sigma) \mu_{\sigma\tau} (J_\tau - \pi_\tau). \quad (2.20)$$

Известно, что гамильтониан  $H = T + V$ . Рассмотрим потенциальную функцию отдельно. Обычно потенциальную функцию раскладывают в ряд Тейлора:

$$V(x) = V_0 + \sum_i \left( \frac{\partial V}{\partial x^i} \right)_{x_i=0} x^i + \sum_{i,j} \left( \frac{\partial^2 V}{\partial x^i \partial x^j} \right)_{x_i=0} x^i x^j + \dots \quad (2.21)$$

В виде обобщенных координат, можно получить

$$V(Q) = \sum_{\kappa} \omega_{\kappa}^2 Q_{\kappa}^2 + \sum_{\lambda\mu\nu} K_{\lambda\mu\nu} Q_{\lambda} Q_{\mu} Q_{\nu} + \sum_{\lambda\mu\nu\sigma} K_{\lambda\mu\nu\sigma} Q_{\lambda} Q_{\mu} Q_{\nu} Q_{\sigma}, \quad (2.22)$$

где  $K_{\lambda\mu\nu} = \frac{\partial^3 V}{\partial Q_{\lambda} \partial Q_{\mu} \partial Q_{\nu}}$ ,  $K_{\lambda\mu\nu\sigma} = \frac{\partial^4 V}{\partial Q_{\lambda} \partial Q_{\mu} \partial Q_{\nu} \partial Q_{\sigma}}$ .

Таким образом мы можем получить классический гамильтониан:

$$\begin{aligned} H = T + V = & \frac{1}{2} \sum_{K=1}^{3N-6} P_K^2 + \frac{1}{2} \sum_{\sigma,\tau} (J_\sigma - \pi_\sigma) \mu_{\sigma\tau} (J_\tau - \pi_\tau) \\ & + \sum_{\kappa} \omega_{\kappa}^2 Q_{\kappa}^2 + \sum_{\lambda\mu\nu} K_{\lambda\mu\nu} Q_{\lambda} Q_{\mu} Q_{\nu} + \sum_{\lambda\mu\nu\sigma} K_{\lambda\mu\nu\sigma} Q_{\lambda} Q_{\mu} Q_{\nu} Q_{\sigma}. \end{aligned} \quad (2.23)$$

Заметим, что данная формула предназначена для гармонического приближения, а для более сложных молекул данный гамильтониан не справедлив.

## 2.2 Квантово-механический гамильтониан

В первой главе мы построили классический гамильтониан многоатомной молекулы. Молекулы имеют квантованные состояния в микроскопическом мире, поэтому нам также нужно квантовать классический гамильтониан, чтобы решить уравнение Шредингера. Вообще говоря, для описания колебательно-вращательных состояний молекулы нам нужно заменить классические физические величины соответствующими квантовыми операторами.

### 2.2.1 Описание ориентации молекулы

В параграфе 1.1 мы обсудили две разные системы координат, которые связаны углами Эйлера. Переход от одной системы координат к другой имеет вид:

$$\begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} = \vec{A} \cdot \begin{pmatrix} X \\ Y \\ Z \end{pmatrix}. \quad (2.24)$$

Где  $\vec{A}$  - матрица углов Эйлера,

$$\vec{A} = \begin{pmatrix} \cos\alpha\cos\beta\cos\gamma - \sin\alpha\sin\gamma & \sin\alpha\cos\beta\cos\gamma + \cos\alpha\cos\gamma & -\sin\beta\cos\gamma \\ -\cos\alpha\cos\beta\sin\gamma - \sin\alpha\cos\gamma & -\sin\alpha\cos\beta\sin\gamma + \cos\alpha\cos\gamma & \sin\beta\sin\gamma \\ \cos\alpha\sin\beta & \sin\alpha\sin\beta & \cos\beta \end{pmatrix}.$$

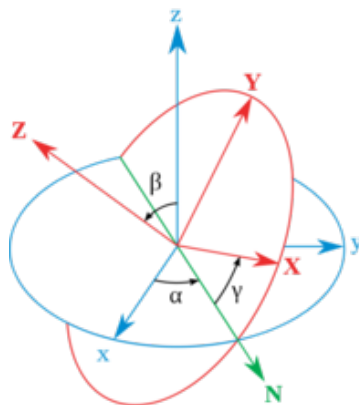


Рисунок 2.2 Угол Эйлера



Известно, что  $\vec{\omega} = (\omega_x \vec{i} + \omega_y \vec{j} + \omega_z \vec{k}) = \dot{\alpha} + \dot{\beta} + \dot{\gamma}$ . В классической механике мы можем получить уравнение динамики Эйлера путем преобразования углов Эйлера двух систем координат:

$$\begin{pmatrix} \dot{\alpha} \\ \dot{\beta} \\ \dot{\gamma} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\csc \beta \cos \gamma & \csc \beta \sin \gamma & 0 \\ \sin \gamma & \cos \gamma & 0 \\ \cot \beta \cos \gamma & -\cot \beta \sin \gamma & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \omega_x \\ \omega_y \\ \omega_z \end{pmatrix}. \quad (2.25)$$

Через уравнение динамики Эйлера мы можем получить компоненты момента по осям  $x$ ,  $y$  и  $z$ :

$$\begin{aligned} J_x &= \frac{\partial T}{\partial \dot{\alpha}} \frac{\partial \dot{\alpha}}{\partial \omega_x} + \frac{\partial T}{\partial \dot{\beta}} \frac{\partial \dot{\beta}}{\partial \omega_x} + \frac{\partial T}{\partial \dot{\gamma}} \frac{\partial \dot{\gamma}}{\partial \omega_x} \\ &= P_\alpha (-\csc \beta * \cos \gamma) + P_\beta (\sin \gamma) + P_\gamma (\cot \beta * \cos \gamma) \\ J_y &= P_\alpha (\csc \beta * \sin \gamma) + P_\beta (\cos \gamma) + P_\gamma (-\cot \beta * \sin \gamma) \\ J_z &= P_\gamma \end{aligned} \quad (2.26)$$

В разделе 2.1. мы определили колебательный момент импульса  $\pi^\sigma = \sum_k C_k^\sigma P_k$  и классическую кинетическую энергию

$$\begin{aligned} 2T &= \sum_{k=1}^{3N-6} p_k^2 + \sum_{\tau, \sigma} \mu_{\tau\sigma} (J_\tau - \pi_\tau)(J_\sigma - \pi_\sigma) \\ J_x - \pi_x &= P_\alpha (-\csc \beta \cos \gamma) + P_\beta (\sin \gamma) + P_\gamma (\cot \beta \cos \gamma) - \sum_k C_k^x P_k; \\ J_y - \pi_y &= P_\alpha (\csc \beta \sin \gamma) + P_\beta (\cos \gamma) + P_\gamma (-\cot \beta \sin \gamma) - \sum_k C_k^y P_k; \\ J_z - \pi_z &= P_\gamma - \sum_k C_k^z P_k. \end{aligned} \quad (2.27)$$

Запишем последние три формулы в виде матрицы:

$$\begin{pmatrix} J_x - \pi_x \\ J_y - \pi_y \\ J_z - \pi_z \\ P_1 \\ P_2 \\ \vdots \\ P_{3N-6} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\csc \beta \cos \gamma & \sin \gamma & \cot \beta \cos \gamma & -C_1^x & \dots & -C_{3N-6}^x \\ \csc \beta \sin \gamma & \cos \gamma & -\cot \beta \sin \gamma & -C_1^y & \dots & -C_{3N-6}^y \\ 0 & 0 & 1 & -C_1^z & \dots & -C_{3N-6}^z \\ 0 & \dots & 0 & 1 & \dots & 0 \\ \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & \dots & 0 & 0 & \dots & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} P_\alpha \\ P_\beta \\ P_\gamma \\ P_1 \\ P_2 \\ \vdots \\ P_{3N-6} \end{pmatrix}. \quad (2.28)$$

Считаем, что так как  $\vec{M} = B\vec{P}$ . Поэтому кинетическая энергия

$$2T = \sum_{k=1}^{3N-6} p_k^2 + \sum_{\tau,\sigma} \mu_{\tau\sigma} (J_\tau - \pi_\tau)(J_\sigma - \pi_\sigma) \\ = \vec{M}^T(\vec{\mu})\vec{M} = \vec{P}^T B^T(\vec{\mu})B\vec{P} = \vec{P}^T \vec{\mu}' \vec{P}, \quad (2.29)$$

где  $\vec{\mu}' = B^T(\vec{\mu})B$ ,  $\vec{\mu} = \begin{pmatrix} & & & 0 & 0 & 0 \\ & \mu_{\tau\sigma} & & 0 & 0 & 0 \\ & & & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \dots & 0 & 1 & \dots & 0 \\ \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & \dots & 0 & 0 & \dots & 1 \end{pmatrix}$ .

Таким образом, классическую кинетическую энергию мы описываем квадратичную форму в матричном виде.

### 2.2.2 Теорема Подольского

Пусть  $\vec{x}$  представляет собой набор декартовых систем, а  $\vec{q}$  представляет собой набор криволинейных координат. Связь между ними выражается через матрицу частных производных. Пусть два вектора:

$$\vec{x} = (x^1, x^2, \dots, x^n), \\ \vec{q} = (q^1, q^2, \dots, q^n), \quad (2.30)$$

где  $x^i = x^i(q^1, \dots, q^n)$ ,  $q^i = q^i(x^1, \dots, x^n)$ , то  $dx^i = \sum_{j=1}^n \frac{\partial x^i}{\partial q^j} dq^j$ . В этом случае вторая производная будет иметь вид:

$$dx^2 = \sum_{i=1}^n (dx^i)^2 = \sum_i \frac{\partial x^i}{\partial q^j} \frac{\partial x^i}{\partial q^k} dq^j dq^k. \quad (2.31)$$

Для элемента объема  $d\tau$ , имеем:

$$d\tau = dx^1 \dots dx^n = J dq^1 \dots dq^n, \quad (2.32)$$

где  $J = \det \left( \frac{\partial x^i}{\partial q^j} \right)$ .

$\sum_i \frac{\partial x^i}{\partial q^j} \frac{\partial x^i}{\partial q^k}$  называется метрикой (метрическим тензором), который обозначается как  $g_{jk} = \sum_i \frac{\partial x^i}{\partial q^j} \frac{\partial x^i}{\partial q^k}$ .

Используем метрический тензор для представления классической кинетической энергии: пусть  $X_i = \sqrt{m_i} x_i$ , то

$$T = \frac{1}{2} \sum_i m_i \dot{x}_i^2 = \frac{1}{2} \sum_i \dot{X}_i^2 = \frac{1}{2} \sum_i \frac{\partial x^i}{\partial q^j} \frac{\partial x^i}{\partial q^k} \dot{q}^j \dot{q}^k = \frac{1}{2} g_{jk} \dot{q}^j \dot{q}^k. \quad (2.33)$$

Это классическая кинетическая энергия в Лагранжевом формализме с помощью метрики. Затем перейдем в гамильтонову форму, подставляя канонический импульс. Для импульса:

$$P_i = \frac{\partial T}{\partial \dot{q}_i} = \frac{1}{2} g_{jk} \delta_i^j \dot{q}^k + \frac{1}{2} g_{jk} \delta_k^i \dot{q}^j = g_{ij} \cdot \dot{q}^j. \quad (2.34)$$

Пусть  $(g_{ij})^{-1} = g^{ij}$ , то  $g^{im} g_{jk} = \delta_k^m$ , поэтому

$$T = (g_{ij})^{-1} \cdot P_j = \frac{1}{2} \delta_k^m P_m g^{kn} P_n = \frac{1}{2} g^{mn} P_m P_n = \frac{1}{2} \vec{P}^T (g)^{-1} \vec{P}. \quad (2.35)$$

Это классическая кинетическая энергия в гамильтоновой форме с помощью метрики.

По теореме Подольского можно квантовать кинетическую энергию:

$$T = \frac{1}{2} g^{mn} P_m P_n \Rightarrow \hat{T} = \frac{1}{2} \sum_{m,n} g^{\frac{1}{4}} \hat{P}_m \left( g^{-\frac{1}{2}} g^{mn} \hat{P}_n \right) g^{\frac{1}{4}}, \quad (2.36)$$

где  $g = \det g^{nm}$ , [10].

### 2.2.3 Квантовый гамильтониан по теореме Подольского

Мы получили 3 типа классической энергии в виде Гамильтона:

(1) Матричная квадратичная форма:

$$T = \frac{1}{2} \vec{M}^T(\vec{\mu}) \vec{M}; \quad (2.37)$$

(2) Обычная форма:

$$T = \frac{1}{2} \sum_{k=1}^{3N-6} P_k^2 + \frac{1}{2} \sum_{\alpha, \beta} \mu_{\alpha\beta} (J_\alpha - \pi_\alpha)(J_\beta - \pi_\beta) \quad (2.38)$$

Эти две формы эквивалентны. Мы можем квантовать их отдельно по теореме Подольского:

$$(1) \hat{T} = \frac{1}{2} \sum_{m,n} \hat{\mu}^{\frac{-1}{4}} \hat{M}_m \left( \hat{\mu}^{-\frac{1}{2}} \hat{\mu}_{mn} \hat{M}_n \right) \hat{\mu}^{\frac{-1}{4}}, \quad (2.39)$$

$$(2) \hat{T} = \frac{1}{2} \sum_{k=1}^{3N-6} \hat{\mu}^{\frac{-1}{4}} \hat{P}_k \hat{\mu}^{-\frac{1}{2}} \hat{P}_k \hat{\mu}^{\frac{-1}{4}} + \frac{1}{2} \sum_{\alpha, \beta} \hat{\mu}^{\frac{-1}{4}} \left( \hat{J}_\alpha - \hat{\pi}_\alpha \right) \hat{\mu}^{-\frac{1}{2}} \mu_{\alpha\beta} \left( \hat{J}_\beta - \hat{\pi}_\beta \right) \hat{\mu}^{\frac{-1}{4}} \quad (2.40)$$

где  $Q_m$ -обобщенные координаты,  $\hat{P}_m = -i\hbar \frac{\partial}{\partial Q_m}$  – обобщенный импульс.

Согласно потенциальной функции в разделе 2.1.3, мы можем получить полный квантованный гамильтониан:

$$\begin{aligned} \hat{H} = & \frac{1}{2} \sum_{k=1}^{3N-6} \hat{\mu}^{\frac{-1}{4}} \hat{P}_k \hat{\mu}^{-\frac{1}{2}} \hat{P}_k \hat{\mu}^{\frac{-1}{4}} + \frac{1}{2} \sum_{\alpha, \beta} \hat{\mu}^{\frac{-1}{4}} \left( \hat{J}_\alpha - \hat{\pi}_\alpha \right) \hat{\mu}^{-\frac{1}{2}} \mu_{\alpha\beta} \left( \hat{J}_\beta - \hat{\pi}_\beta \right) \hat{\mu}^{\frac{-1}{4}} \\ & + \sum_k \omega_k \hat{Q}_k^2 + \sum_{\lambda\mu\nu} K_{\lambda\mu\nu} \hat{Q}_\lambda \hat{Q}_\mu \hat{Q}_\nu + \sum_{\lambda\mu\nu\sigma} K_{\lambda\mu\nu\sigma} \hat{Q}_\lambda \hat{Q}_\mu \hat{Q}_\nu \hat{Q}_\sigma. \end{aligned} \quad (2.41)$$

Фактически, потенциальная функция здесь пригодна только для нормальных молекул. Чтобы получить потенциальную энергетическую функцию сложных молекул, необходимо использовать экспериментальные инструменты. Поэтому экспериментальная работа и теоретическая работа являются взаимодополняющими процессами.

## Глава 3. Подготовка к исследованию интенсивности линии

### 3.1 Стационарная теория возмущений и гамильтониан нелинейных молекул

При интерпретации каждой спектральной линии на основе метода молекулярной спектроскопии нам необходимо получить точные энергетические уровни. Для оптимизации энергетической структуры нам необходимо использовать стационарную теорию возмущений Релея-Шредингера.

#### 3.1.1 Общее понятие стационарной теории возмущений

Стационарная теория возмущений в квантовой механике — теория возмущений, где гамильтониан не зависит от времени. Теория применима для достаточно слабых возмущений:  $H = H_0 + \lambda H_1$ , при этом параметр  $\lambda$  должен быть настолько малым, чтобы возмущение не слишком искажало невозмущённый спектр, описываемый оператором гармонического приближения,  $H^0$ .

В теории возмущений решение уравнения Шредингера представляется в виде разложения по  $\lambda$ :

$$\begin{aligned} |n\rangle &= |n^0\rangle + \lambda |n^1\rangle + \lambda^2 |n^2\rangle + \dots, \\ E_n &= E_n^0 + \lambda E_n^1 + \lambda^2 E_n^2 + \dots, \end{aligned} \quad (3.1)$$

где  $|n\rangle$  — решение уравнения Шредингера:

$$H|n\rangle = E_n|n\rangle. \quad (3.2)$$

Подставляя разложение в это уравнение, получим

$$\begin{aligned} (H_0 + \lambda H_1)(|n^0\rangle + \lambda |n^1\rangle + \lambda^2 |n^2\rangle + \dots) = \\ (E_n^0 + \lambda E_n^1 + \lambda^2 E_n^2 + \dots)(|n^0\rangle + \lambda |n^1\rangle + \lambda^2 |n^2\rangle + \dots). \end{aligned} \quad (3.3)$$

Собирая слагаемые одинакового порядка по  $\lambda$ , получим систему уравнений:

$$\begin{aligned}
H_0|n^0\rangle &= E_n^0|n^0\rangle, \\
H_0|n^1\rangle + H_1|n^0\rangle &= E_n^0|n^1\rangle + E_n^1|n^0\rangle, \\
H_0|n^2\rangle + H_1|n^1\rangle &= E_n^0|n^2\rangle + E_n^1|n^1\rangle + E_n^2|n^0\rangle
\end{aligned} \tag{3.4}$$

и т. д. Эти уравнения должны решаться последовательно для получения  $E_n^k$  и  $n^k$ . Слагаемое с индексом  $k = 0$  — это решение для невозмущённого уравнения Шредингера, поэтому говорят также о «приближении нулевого порядка». Аналогично говорят о «приближении  $k$ -го порядка», если рассчитывают решение до слагаемых  $E_n^k$  и  $n^k$ .

Из второго уравнения получаем, что можно определять однозначно решения для  $n^1$  только с дополнительными условиями, так как каждая линейная комбинация  $n^1$  и  $n^0$  является решением. Возникает вопрос о нормализации. Мы можем предположить, что  $\langle n^0|n^0\rangle = 1$ , но в то же время из нормировки точного решения следует  $\langle n|n\rangle = 1$ . Тогда в первом порядке (по параметру  $\lambda$ ) для условия нормировки нужно положить  $\langle n^0|n^1\rangle + \langle n^1|n^0\rangle = 0$ . Поскольку выбор фазы в квантовой механике произволен, можно без потери общности сказать, что число  $\langle n^0|n^1\rangle$  действительно. Поэтому  $\langle n^0|n^1\rangle = -\langle n^1|n^0\rangle$ , и, как следствие, учитывая дополнительное условие, примет вид:  $\langle n^0|n^1\rangle = 0$ .

Так как невозмущённое состояние  $n^0$  должно быть нормируемо, сразу следует, что

$$\lambda\langle n^0|n^1\rangle + \lambda^2\langle n^0|n^2\rangle + \lambda^3\langle n^0|n^3\rangle + \dots = 0 \tag{3.5}$$

и из этого  $\langle n^0|n^k\rangle = \delta_{0k}$ .

Получаем поправку к первому порядку

$$E_n^1 = \langle n^0|H_1|n^0\rangle,$$

$$|n^1\rangle = \sum_{m \neq n} \frac{\langle m^0 | H_1 | n^0 \rangle}{E_n^0 - E_m^0} |m^0\rangle, \quad (3.6)$$

и для поправки энергии во втором порядке

$$E_n^2 = \sum_{m \neq n} \frac{|\langle m^0 | H_1 | n^0 \rangle|^2}{E_n^0 - E_m^0}. \quad (3.7)$$

### 3.1.2 Метод эффективных гамильтонианов

Гамильтониан системы по теории возмущения обычно выбирается в следующем виде [11]:

$$H = H_0 + h, \quad (3.8)$$

где  $H_0$  – оператор, решение уравнения Шредингера с которым известно;  $h$  – малая добавка к оператору (возмущение)  $H_0$ . Однако эта форма гамильтониана является бесконечномерной матрицей, поэтому, чтобы решить уравнение Шредингера с таким гамильтонианом, мы должны ввести унитарный оператор  $G$ , чтобы преобразовать гамильтониан и разделить его матрицу. С учетом этого, зададим оператор  $G$  следующим образом

$$G = \exp \left\{ i \sum_n g_n \right\} = 1 + (ig_1 + ig_2 + \dots + ig_n) + \frac{1}{2} (ig_1 + ig_2 + \dots + ig_n)^2 + \dots \quad (3.9)$$

После унитарного преобразования гамильтоновой матрицы собственные колебательно-вращательные волновые функции гамильтониана меняют на волновые функции эффективного гамильтониана [12], она приобретает следующий вид:

$$H^{eff} = G^\dagger H G = \begin{pmatrix} \Omega_0 & \Omega_1 \\ \Omega_1 & X \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} H & 0 & 0 & \dots \\ 0 & x & x & \dots \\ 0 & x & x & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots \end{pmatrix}, \quad (3.10)$$

таким образом, гамильтонова матрица разделена на четыре подматрицы, где  $\Omega_0$  - конечная матрица,  $\Omega_1$  - нулевые матрицы, а  $X$  - бесконечная матрица. Чтобы вычислить элементы матрицы унитарного оператора, введем два состояния:  $|i\rangle \in \Omega_0$ ,  $|\alpha\rangle \in \Omega_1$ . Наложим два условия:

$$\begin{aligned} \langle i | G^\dagger H G | \alpha \rangle &= 0, \\ \langle \alpha | G^\dagger H G | i \rangle &= 0. \end{aligned} \quad (3.11)$$

После анализа элемента  $ig_n$  с помощью этих условий с учетом порядков малости, можно получить:

$$\langle i | ig_1 | \alpha \rangle = \frac{\langle i | h | \alpha \rangle}{E_\alpha^{(0)} - E_i^{(0)}}, \quad (3.12)$$

$$\langle \alpha | ig_1 | i \rangle = \frac{\langle \alpha | h | i \rangle}{E_i^{(0)} - E_\alpha^{(0)}}, \quad (3.13)$$

$$\langle i | ig_2 | \alpha \rangle = \frac{1}{E_\alpha^{(0)} - E_i^{(0)}} \left( \sum_{\beta \in \Omega_0} \frac{\langle i | h | \beta \rangle \langle \beta | h | \alpha \rangle}{E_\alpha^{(0)} - E_\beta^{(0)}} - \sum_{\beta \in \Omega_1} \frac{\langle i | h | \beta \rangle \langle \beta | h | \alpha \rangle}{E_\beta^{(0)} - E_i^{(0)}} \right), \quad (3.14)$$

$$\langle \alpha | ig_2 | i \rangle = \frac{1}{E_i^{(0)} - E_\alpha^{(0)}} \left( \sum_{\beta \in \Omega_1} \frac{\langle \alpha | h | \beta \rangle \langle \beta | h | i \rangle}{E_i^{(0)} - E_\beta^{(0)}} - \sum_{\beta \in \Omega_0} \frac{\langle \alpha | h | \beta \rangle \langle \beta | h | i \rangle}{E_\beta^{(0)} - E_\alpha^{(0)}} \right). \quad (3.15)$$

### 3.1.3 Гамильтониан нелинейных молекул типа XY<sub>2</sub>

Посредством анализа в предыдущих главах для нелинейных молекул типа XY<sub>2</sub> гамильтониан может быть выражен как



$$H = H_0 + h = \frac{1}{2} \sum_{\lambda=1}^{3N-6} \omega_{\lambda} (p_{\lambda}^2 + q_{\lambda}^2) + \frac{1}{2} \sum_{\alpha, \beta} \mu_{\alpha\beta} (J_{\alpha} - G_{\alpha})(J_{\beta} - G_{\beta}) +$$

$$\sum_{\lambda \leq \mu \leq \nu} k_{\lambda\mu\nu} q_{\lambda} q_{\mu} q_{\nu} + \sum_{\lambda \leq \mu \leq \nu \leq \sigma} k_{\lambda\mu\nu\sigma} q_{\lambda} q_{\mu} q_{\nu} q_{\sigma} + \dots \quad (3.16)$$

Гамильтониан  $H$  принадлежит симметрии  $A_1$ , поэтому каждое слагаемое должно быть симметрии  $A_1$ . Известно, что [13]

$$\sum_{\alpha\beta} \mu_{\alpha\beta} = \mu_{\alpha\beta}^e + \sum_{\alpha\beta\lambda} \mu_{\alpha\beta}^{\lambda} q_{\lambda} + \sum_{\alpha\beta\lambda\mu} \mu_{\alpha\beta}^{\lambda\mu} q_{\lambda} q_{\mu} + \dots$$

$$= 2B_{\alpha}^e \delta_{\alpha\beta} - 2\sqrt{2} \sum_{\lambda} \left( \frac{B_{\alpha}^e B_{\beta}^e}{\omega_x^{1/2}} \right) \left( \frac{8\pi^2 c}{h} \right)^{1/2} a_{\lambda}^{\alpha\beta} q_{\lambda}$$

$$+ 3 \sum_{\gamma\lambda\mu} \left( \frac{B_{\alpha}^e B_{\beta}^e B_{\gamma}^e}{\omega_{\lambda}^{1/2} \omega_{\mu}^{1/2}} \right) \left( \frac{8\pi^2 c}{h} \right) a_{\lambda}^{\alpha\gamma} a_{\mu}^{\gamma\beta} q_{\lambda} q_{\mu} + \dots, \quad (3.17)$$

ПОЭТОМУ

$$h = \frac{1}{2} \left( \mu_{\alpha\beta}^e + \sum_{\alpha\beta\lambda} \mu_{\alpha\beta}^{\lambda} q_{\lambda} + \sum_{\alpha\beta\lambda\mu} \mu_{\alpha\beta}^{\lambda\mu} q_{\lambda} q_{\mu} + \dots \right) (J_{\alpha} - G_{\alpha})(J_{\beta} - G_{\beta})$$

$$+ \sum_{\lambda \leq \mu \leq \nu} k_{\lambda\mu\nu} q_{\lambda} q_{\mu} q_{\nu} + \sum_{\lambda \leq \mu \leq \nu \leq \sigma} k_{\lambda\mu\nu\sigma} q_{\lambda} q_{\mu} q_{\nu} q_{\sigma} + \dots \quad (3.18)$$

С учётом порядков малости, оператор  $h$  имеет вид:

$$\kappa^1: \sum_{\lambda \leq \mu \leq \nu} k_{\lambda\mu\nu} q_{\lambda} q_{\mu} q_{\nu};$$

$$\kappa^2: \sum_{\alpha\beta} \mu_{\alpha\beta}^e (J_{\alpha} - G_{\alpha})(J_{\beta} - G_{\beta}) + \sum_{\lambda \leq \mu \leq \nu \leq \sigma} k_{\lambda\mu\nu\sigma} q_{\lambda} q_{\mu} q_{\nu} q_{\sigma};$$

$$\kappa^3: \sum_{\alpha\beta\lambda} \mu_{\alpha\beta}^{\lambda} q_{\lambda} (J_{\alpha} - G_{\alpha})(J_{\beta} - G_{\beta}) + \sum_{\lambda \leq \mu \leq \nu \leq \sigma \leq \eta} k_{\lambda\mu\nu\sigma\eta} q_{\lambda} q_{\mu} q_{\nu} q_{\sigma} q_{\eta}. \quad (3.19)$$

Как показано в таблице 3.1 и 3.2, нам нужно выбрать симметрию операторов, входящих в  $h$  таким образом, чтобы свертка их симметрий давала  $A_1$ . Результаты разделены по порядку для последующих вычислений (таблица 3.3). [14]

Таблица 3.1 Характер симметрии

	$A_1$	$A_2$	$B_1$	$B_2$
$A_1$	$A_1$	$A_2$	$B_1$	$B_2$
$A_2$	$A_2$	$A_1$	$B_2$	$B_1$
$B_1$	$B_1$	$B_2$	$A_1$	$A_2$
$B_2$	$B_2$	$B_1$	$A_2$	$A_1$

Таблица 3.2 Симметрия оператора

Оператор	$q_1$	$q_2$	$q_3$	$J_x$	$J_y$	$J_z$
Симметрия	$A_1$	$A_1$	$B_1$	$A_2$	$B_1$	$B_2$

Учитывая рассуждения выше, можно показать, что с учетом симметричных свойств оператор  $h$  для молекул типа  $XY_2$  имеет вид, в соответствии с Таблице 3.3.

Таблица 3.3 Вид оператора  $h$  для молекул типа  $XY_2$  ( $C_{2v}$  симметрии)

Порядок	$h$
$\kappa^2$	$\frac{1}{2} \left[ \sum_{\alpha=x,y,z} \mu_{\alpha\alpha}^e J_\alpha^2 - 2\mu_{yy}^e J_y G_y + \mu_{yy}^e G_y^2 \right]$
$\kappa^3$	$\frac{1}{2} \left[ \sum_{\alpha=x,y,z} \sum_{\lambda=1,2} \mu_{\alpha\alpha}^\lambda q_\lambda J_\alpha^2 - \sum_{\lambda=1,2} \mu_{yy}^\lambda q_\lambda (2J_y G_y + G_y^2) + \mu_{xz}^3 q_3 (J_x J_z + J_z J_x) \right]$
$\kappa^4$	$\frac{1}{2} \left[ \sum_{\alpha=x,y,z} \sum_{\lambda\mu} \mu_{\alpha\alpha}^{\lambda\mu} q_\lambda q_\mu J_\alpha^2 - \sum_{\lambda\mu} \mu_{yy}^{\lambda\mu} q_\lambda q_\mu (2J_y G_y + G_y^2) + \sum_{\lambda\mu} \mu_{xz}^{\lambda\mu} q_\lambda q_\mu (J_x J_z + J_z J_x) \right]$

### 3.2 Интенсивность линии и параметры дипольного момента

Исследование интенсивностей линий играет важную роль в молекулярной спектроскопии высокого разрешения. Это связано с необходимостью иметь корректные значения интенсивностей линий для того, чтобы извлечь максимум информации из экспериментов по дистанционному зондированию в области физики атмосферы и для интерпретации астрофизических данных и данных горения.

Известно, что интенсивность колебательно-вращательной линии определяется из соотношения:

$$S_v = \frac{8\pi^3\nu}{4\pi\epsilon_0 3hc} \left[ 1 - e^{-\frac{h\nu}{kT}} \right] N \frac{g_A}{Z(T)} e^{-\frac{E_A}{kT}} R_A^B, \quad (3.20)$$

где,  $\nu = (E_B - E_A)/hc$  - волновое число перехода,  $E_A$  и  $E_B$  - колебательно-вращательные энергии нижнего и верхнего состояний;  $g_A$  - статистический вес;  $Z(T)$ - статистическая сумма. Значение  $R_A^B = |\langle A | \mu'_z | B \rangle|^2$ - квадрат матричного элемента преобразованного дипольного момента  $\mu'_z$ .

Как и в предыдущем методе эффективных гамильтонианов, нам также необходимо выполнить унитарное преобразование для электрического дипольного момента молекулы нелинейного типа  $XY_2$ . Известно, что преобразованный дипольный момент определяется из соотношения:

$$\mu'_z = G^+ \mu_z G = G^+ \left[ \sum_{\alpha} k_{z\alpha} \left( \mu_{\alpha}^e + \sum_{\lambda} \mu_{\alpha}^{\lambda} q_{\lambda} + \sum_{\lambda, \nu \geq \lambda} \mu_{\alpha}^{\lambda\nu} q_{\lambda} q_{\nu} + \dots \right) \right] G, \quad (3.21)$$

где  $\mu_z$  — это z-компонента реального дипольного момента в пространственно-фиксированной системе координат.  $G$  – унитарный оператор;  $k_{z\alpha}$  - элемент матрицы направляющих косинусов;  $\mu_{\alpha}^e$ ,  $\mu_{\alpha}^{\lambda}$ ,  $\mu_{\alpha}^{\lambda\nu}$  - параметры дипольного момента,  $q_{\lambda}$ ,  $q_{\nu}$ - нормальные координаты.

Матричный элемент от преобразованного дипольного момента есть эффективный дипольный момент:

$$\langle A|\mu'_z|B\rangle = \nu\mu'_z, \quad (3.22)$$

в свою очередь,  $\nu\mu'_z$  может быть выражено как:

$$\nu\mu'_z = A_1 k_{zz} + A_2 \{k_{zz}, J^2\} + \dots + A_8 \{k_{zz}, J_{xz}^2\}, \quad (3.23)$$

поэтому оператор эффективного дипольного момента может быть представлен 8 параметрами. Для исследования интенсивностей линий, как было сказано, необходимо знание параметров  $(A_1, A_2, A_3, \dots)$ . Расчет данных параметров обсуждается в главе 4.

## Глава 4. Численная оценка параметров эффективного дипольного момента молекулы типа XY<sub>2</sub>.

### 4.1 Расчёт элементов матрицы обратных моментов инерции

В главе 3 мы проанализировали оператор «возмущения»  $h$  с помощью теории симметрии, и записали его вид в таблицу 3.3. Вычислим элемент матрицы обратных моментов инерции молекулы типа XY<sub>2</sub> необходимых для использования выражений из таблицы 3.3. Запишем явный вид колебательного углового момента (см. формулу (3.16)):

$$G_{\alpha} = \sum_{\lambda\mu} \zeta_{\lambda\mu}^{\alpha} \left[ \left( \frac{\omega_{\mu}}{\omega_{\lambda}} \right)^{1/2} q_{\lambda} p_{\mu} - \left( \frac{\omega_{\lambda}}{\omega_{\mu}} \right)^{1/2} q_{\mu} p_{\lambda} \right], \quad (4.1)$$

где  $\zeta_{\lambda\mu}^{\alpha}$  — это параметр Кориолиса. Поскольку  $\zeta_{\lambda\mu}^x = 0, \zeta_{\lambda\mu}^y = 0,$

$$G_{\alpha} = G_y = \sum_{\lambda\mu} \zeta_{\lambda\mu}^y \left[ \left( \frac{\omega_{\mu}}{\omega_{\lambda}} \right)^{1/2} q_{\lambda} p_{\mu} - \left( \frac{\omega_{\lambda}}{\omega_{\mu}} \right)^{1/2} q_{\mu} p_{\lambda} \right], \quad (4.2)$$

ненулевые параметры Кориолиса представимы следующими формулами:

$$\zeta_{13} = \zeta_{13}^y = -\zeta_{31}^y = - \left( \frac{I_{xx}^e}{I_{yy}^e} \right)^{1/2} \sin \gamma + \left( \frac{I_{zz}^e}{I_{yy}^e} \right)^{1/2} \cos \gamma, \quad (4.3)$$

$$\zeta_{23} = \zeta_{23}^y = -\zeta_{32}^y = \left( \frac{I_{xx}^e}{I_{yy}^e} \right)^{1/2} \cos \gamma + \left( \frac{I_{zz}^e}{I_{yy}^e} \right)^{1/2} \sin \gamma. \quad (4.4)$$

Из формулы (3.17) параметры  $a_{\lambda}^{\alpha\beta}$  и  $I_{\alpha\alpha}^e$  могут быть преобразованы в виде,

[15]

$$\begin{aligned} a_1^{xx} &= 2(I_{xx}^e)^{1/2} \cos \gamma, \quad a_1^{zz} = 2(I_{zz}^e)^{1/2} \sin \gamma, \\ a_2^{xx} &= 2(I_{xx}^e)^{1/2} \sin \gamma, \quad a_2^{zz} = -2(I_{zz}^e)^{1/2} \cos \gamma, \\ a_1^{yy} &= 2(I_{yy}^e)^{1/2} \zeta_{23}, \quad a_1^{yy} = -2(I_{yy}^e)^{1/2} \zeta_{13}, \end{aligned}$$

$$a_3^{xz} = a_3^{zx} = -2 \left( \frac{I_{xx}^e I_{zz}^e}{I_{yy}^e} \right)^{\frac{1}{2}}. \quad (4.5)$$

В сочетании с формулами (3.17) и (4.1)-(4.5) можно вычислить аналитический вид элементов матрицы обратных моментов инерции молекулы типа XY<sub>2</sub>, как показано в таблице 4.1 и 4.2:

Таблица 4.1 Аналитический вид элементов матрицы обратных моментов

инерции  $\mu_{\alpha\beta}^\lambda$

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

Таблица 4.2 Аналитический вид элементов матрицы обратных моментов

инерции  $\mu_{\alpha\beta}^{\lambda\mu}$

		$\alpha = \beta = x$	$\alpha = \beta = y$	$\alpha = \beta = z$	$\alpha = x(z),$ $\beta = z(x)$
$\mu_{\alpha\beta}^{\lambda\mu}$	$\lambda = \mu = 1$	$12 \frac{(B_x^e)^2}{\omega_1} \cos^2 \gamma$	$12 \frac{(B_y^e)^3}{\omega_1} \left( \frac{\cos \gamma}{(B_x^e)^{1/2}} + \frac{\sin \gamma}{(B_y^e)^{1/2}} \right)^2$	$12 \frac{(B_x^e)^2}{\omega_2} \sin^2 \gamma$	0
	$\lambda = \mu = 2$	$12 \frac{(B_x^e)^3}{\omega_2} \sin^2 \gamma$	$12 \frac{(B_y^e)^3}{\omega_2} \left( \frac{\cos \gamma}{(B_z^e)^{1/2}} - \frac{\sin \gamma}{(B_x^e)^{1/2}} \right)^2$	$12 \frac{(B_x^e)^3}{\omega_2} \cos^2 \gamma$	0
	$\lambda = \mu = 3$	$12 \frac{B_x^e B_y^e}{\omega_3}$	0	$12 \frac{B_z^e B_y^e}{\omega_3}$	0
	$\lambda = 1(2),$ $\mu = 2(1)$	$12 \frac{(B_x^e)^2}{\omega_1^{1/2} \omega_2^{1/2}} \sin \gamma \cos \gamma$	$12 \frac{(B_y^e)^3}{\omega_1^{1/2} \omega_2^{1/2}} \left( \sin \gamma \cos \gamma \left( \frac{1}{B_x^e} - \frac{1}{B_z^e} \right) - \cos 2\gamma \frac{1}{(B_x^e B_z^e)^{1/2}} \right)$	$-12 \frac{(B_z^e)^2}{\omega_1^{1/2} \omega_2^{1/2}} \sin \gamma \cos \gamma$	0
	$\lambda = 1(3),$ $\mu = 3(1)$	0	0	0	$-12 \frac{B_x^e (B_y^e B_z^e)^{1/2}}{\omega_1^{1/2} \omega_3^{1/2}} \cos \gamma$
	$\lambda = 3(1),$ $\mu = 1(3)$	0	0	0	$-12 \frac{B_z^e (B_y^e B_x^e)^{1/2}}{\omega_1^{1/2} \omega_3^{1/2}} \sin \gamma$
	$\lambda = 2(3),$ $\mu = 3(2)$	0	0	0	$-12 \frac{B_x^e (B_y^e B_z^e)^{1/2}}{\omega_2^{1/2} \omega_3^{1/2}} \sin \gamma$
	$\lambda = 3(2),$ $\mu = 2(3)$	0	0	0	$12 \frac{B_z^e (B_y^e B_x^e)^{1/2}}{\omega_2^{1/2} \omega_3^{1/2}} \cos \gamma$

## 4.2 Расчет параметров эффективного дипольного момента состояния (001) на примере молекул $^{32}\text{S}^{16}\text{O}_2$ и $^{34}\text{S}^{16}\text{O}_2$

Формула (3.21) показывает оператор эффективного дипольного момента может быть представлен 8 параметрами, в таблице 4.3 приведены выражения для этих 8 параметров [16]:

Таблица 4.3 Операторы, входящие в эффективный дипольный момент состояния (001)

Параметры	Операторы
$A_1$	$K_{zz}$
$A_2$	$\{K_{zz}, J^2\}$
$A_3$	$\{K_{zz}, J_z^2\}$
$A_4$	$\frac{1}{2}[\{k_{zx}, iJ_y\} - \{ik_{zy}, J_x\}]$
$A_5$	$\frac{1}{2}[\{K_{zx}, J_x J_z + J_z J_x\} - \{ik_{zy}, i(J_y J_z + J_z J_y)\}]$
$A_6$	$\frac{1}{2}[\{k_{zx}, iJ_y\} - \{ik_{zy}, J_x\}]$
$A_7$	$\frac{1}{2}[\{K_{zx}, J_x J_z + J_z J_x\} + \{ik_{zy}, i(J_y J_z + J_z J_y)\}]$
$A_8$	$\{k_{zz}, J_{xy}^2\}$

В данной работе мы выбрали нелинейные молекулы типа  $\text{XY}_2$  ( $^{32}\text{S}^{16}\text{O}_2$  и  $^{34}\text{S}^{16}\text{O}_2$ ) и рассчитали их эффективные параметры электрического дипольного момента при переходе из состояния (000) в (001). Поскольку другие операции с параметрами являются сложными и требуют приближения более высокого



порядка, в этой работе вычисляются первый, четвертый и шестой параметры. В дополнение к этому, параметры  $A_1$ ,  $A_4$  и  $A_6$  описывают главный вклад в интенсивность колебательно-вращательной линии.

После получения результатов в таблицах 4.1 и 4.2, можем получить конкретную форму унитарного оператора  $G$ , а затем можем обобщить параметры эффективного колебательного дипольного момента состояния (001) молекул типа  $\text{XY}_2$ . Результаты расчетов приведены в таблице 4.4:

Таблица 4.4 Параметры эффективного дипольного момента состояния (001) молекул типа  $\text{XY}_2$  ( $C_{2v}$  симметрии)

Параметр	Оператор	Теоретическое выражение
$A_1$	$k_{zz}$	$\frac{1}{\sqrt{2}}\mu_z^3$
$A_4$	$\frac{1}{2}[\{k_{zx}, iJ_y\} - \{ik_{zy}, J_x\}]$	$\frac{\sqrt{2}}{2} B_y^e \left( \xi_{23}^y \frac{(\omega_2 \omega_3)^{\frac{1}{2}}}{\omega_3^2 - \omega_2^2} \mu_x^2 + \xi_{13}^y \frac{(\omega_1 \omega_3)^{\frac{1}{2}}}{\omega_3^2 - \omega_1^2} \mu_x^1 \right) + \left( \frac{B_x^e B_y^e B_z^e}{\omega_3^3} \right)^{\frac{1}{2}} \mu_x^e$
$A_6$	$\frac{1}{2}[\{k_{zx}, iJ_y\} + \{ik_{zy}, J_x\}]$	$\frac{\sqrt{2}}{2} B_y^e \left( \xi_{23}^y \frac{(\omega_2 \omega_3)^{\frac{1}{2}}}{\omega_3^2 - \omega_2^2} \mu_x^2 + \xi_{13}^y \frac{(\omega_1 \omega_3)^{\frac{1}{2}}}{\omega_3^2 - \omega_1^2} \mu_x^1 \right) - \left( \frac{B_x^e B_y^e B_z^e}{\omega_3^3} \right)^{\frac{1}{2}} \mu_x^e$

Для проверки полученных соотношений, выполнен сравнительный анализ рассчитанных по формулам из таблицы 4.4. и экспериментально определенных параметров эффективного дипольного момента ( $A_1$ ,  $A_4$  и  $A_6$ ) для молекул  $^{32}\text{S}^{16}\text{O}_2$  и  $^{34}\text{S}^{16}\text{O}_2$ .

Таблица 4.5 Численная оценка параметров эффективного дипольного момента состояния (001) молекулы  $^{32}\text{S}^{16}\text{O}_2$  и  $^{34}\text{S}^{16}\text{O}_2$ , дебай

Параметр	$^{32}\text{S}^{16}\text{O}_2$		$^{34}\text{S}^{16}\text{O}_2$	
	Работа [17]	Расчёт	Работа [18]	Расчёт
$A_I$	-0,226667	-0,233	-0,22508	-0,230
$A_4$	$-0,182 \times 10^{-3}$	$-0,181 \times 10^{-3}$	$0,979 \times 10^{-4}$	$0,131 \times 10^{-3}$
$A_6$	$0,742 \times 10^{-4}$	$0,733 \times 10^{-4}$	$0,700 \times 10^{-4}$	$0,738 \times 10^{-4}$

Относительная погрешность расчёта и эксперимента равна 6%.

## Глава 5. Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение

### 5.1 Структура работ в рамках научного исследования

В процессе научных исследований четкое разделение труда требуется для каждой отдельной ситуации. Это позволяет проекту эффективно работать. Разделение труда должно основываться на индивидуальном уровне и сложности проекта. В следующей таблице 5.1 перечислены люди и имена, вовлеченные в работу.

Таблица 5.1 Участники проекта

№ раб.	Исполнители	Имя
1	Научный руководитель (НР)	Бехтерева Елена Сергеевна
2	Исполнитель (И)	Сюй Тунгэ

При проведении исследований в выпускной работе необходимо строить рабочие группы для того, что достигнуть и выполнить конкретную цель. Для разных видов работ установите соответствующую должность исполнителя.

Таблица 5.2 Перечень работ и продолжительность их выполнения

Этапы работы	Исполнители	Загрузка исполнителей
Постановка целей и задач, получение исходных данных	НР	НР – 100%
Составление и утверждение ТЗ	НР	НР – 100%
Определите тему и обсудите фактическое применение, связанное с темой.	НР, И	НР – 25% И – 100%
Разработать экспериментальный план и график	НР, И	НР – 100% И – 15%
Обсуждение литературы	НР, И	НР – 30% И – 100%
Выбор структурной схемы	НР, И	НР – 100%

устройства		И – 50%
Демонстрационная процедура осуществимости	НР, И	НР – 100% И – 80%
Построение модели для выполнения численных расчетов	НР	НР – 20% И – 80%
Теоретическая проверка	НР, И	НР – 40% И – 80%
Сводный теоретический расчет	НР, И	НР – 40% И – 80%
Анализ результатов	НР, И	НР – 100% И – 80%
Подведение итогов	НР, И	НР – 60% И – 100%

## 5.2 Определение трудоемкости выполнения работ

Трудовые затраты в большинстве случаев образуют основную часть стоимости разработки, поэтому важным моментом является определение трудоемкости работ каждого из участников научного исследования.

Трудоемкость выполнения научного исследования оценивается экспертным путем в человеко-днях и носит вероятностный характер, т.к. зависит от множества трудно учитываемых факторов. Для определения ожидаемого (среднего) значения  $t_{ожі}$  трудоемкости используется следующая формула:

$$t_{ожі} = \frac{3t_{\min i} + 2t_{\max i}}{5} \quad (5.1)$$

где  $t_{ожі}$  – ожидаемая трудоемкость выполнения  $i$ -ой работы чел.-дн.;

$t_{\min i}$  – минимально возможная трудоемкость выполнения заданной  $i$ -ой работы (оптимистическая оценка: в предположении наиболее благоприятного стечения обстоятельств), чел.-дн.;

$t_{\max i}$  – максимально возможная трудоемкость выполнения заданной  $i$ -ой работы (пессимистическая оценка: в предположении наиболее неблагоприятного стечения обстоятельств), чел.-дн.

Исходя из ожидаемой трудоемкости работ, определяется продолжительность каждой работы в рабочих днях  $T_p$ , учитывающая параллельность выполнения работ несколькими исполнителями. Такое вычисление необходимо для обоснованного расчета заработной платы, так как удельный вес зарплаты в общей сметной стоимости научных исследований составляет около 65 %.

$$T_p = \frac{t_{ожі}}{Ч_i} \quad (5.2)$$

где  $T_{pi}$  – продолжительность одной работы, раб. дн.;

$t_{ожі}$  – ожидаемая трудоемкость выполнения одной работы, чел.-дн.

$Чі$  – численность исполнителей, выполняющих одновременно одну и ту же работу на данном этапе, чел.

### 5.3 Разработка графика проведения научного исследования

При выполнении дипломных работ студенты в основном становятся участниками сравнительно небольших по объему научных тем. Поэтому наиболее удобным и наглядным является построение ленточного графика проведения научных работ в форме диаграммы Ганта.

Диаграмма Ганта – горизонтальный ленточный график, на котором работы по теме представляются протяженными во времени отрезками, характеризующимися датами начала и окончания выполнения данных работ.

Для удобства построения графика, длительность каждого из этапов работ из рабочих дней следует перевести в календарные дни. Для этого необходимо воспользоваться следующей формулой:

$$T_{ki} = T_{pi} \cdot K_{\text{кал}} \quad (5.3)$$

где  $T_{ki}$  – продолжительность выполнения этапа в календарных днях;

$K_{\text{кал}}$  – коэффициент календарности, решение по формуле:

$$K_{\text{кал}} = \frac{T_{\text{КАЛ}}}{T_{\text{КАЛ}} - T_{\text{ВД}} - T_{\text{ПД}}} = \frac{365}{365 - 52 - 14} = 1,22 \quad (5.4)$$

где  $T_{\text{КАЛ}}$  – календарные дни ( $T_{\text{КАЛ}} = 365$ );

$T_{\text{ВД}}$  – выходные дни по кадровым вопросам. Вопросы применения ст. 111 ТК РФ, ( $T_{\text{ВД}} = 52$ );

$T_{\text{ПД}}$  – праздничные дни по кадровым вопросам. Вопросы применения ст. 112 ТК РФ, ( $T_{\text{ПД}} = 14$ ).

Рассчитайте время, необходимое для работы на каждом этапе из таблицы 5.2, и сделайте следующие выводы:

Таблицы 5.3 Трудозатраты на выполнение проекта

Название работы	Трудоёмкость работ						И сп ол ни те ли	Длительность работ в рабочих днях $T_{pi}$		Длительность работ в календарных днях $T_{ki}$	
	$t_{min}$ , чел-дни		$t_{max}$ , чел-дни		$t_{ож}$ , чел-дни			НР	И	НР	И
	НР	И	НР	И	НР	И					
Постановка целей и задач	2	/	3	/	2.4	/	1	2.4	/	2.928	/
Составление и утверждение ТЗ	3	/	4	/	3.4	/	1	3.4	/	4.148	/
Определите тему и обсудите фактическое применение, связанное с темой.	6	6	10	10	7.6	7.6	2	1.9	7.6	2.318	9.272
Разработать экспериментальный план и график	3	3	5	5	3.8	3.8	2	3.8	0.57	4.636	0.6954
Обсуждение литературы	2	2	3	3	2.4	2.4	2	0.72	2.4	0.8784	2.928
Выбор структурной схемы устройства	6	6	10	10	7.6	7.6	2	7.6	3.8	9.272	4.636
Демонстрационная процедура осуществимости	5	5	8	8	6.2	6.2	2	6.2	4.96	7.564	6.0512
Построение модели для выполнения численных расчетов	30	30	45	45	36	36	2	7.2	28.8	8.784	35.136
Теоретическая проверка	10	10	17	17	12.8	12.8	2	5.12	10.24	6.2464	12.493
Сводный теоретический расчет	7	7	10	10	8.2	8.2	2	3.28	6.56	4.0016	8.0032
Анализ результатов	5	5	8	8	6.2	6.2	2	6.2	4.96	7.564	6.0512
Одведение итогов	3	3	6	6	4.2	4.2	/	2.52	4.2	3.0744	5.124
<b>Итого:</b>	82	77	129	122	100.8	95	/	47.94	74.09	58.487	90.39

Таблицы 5.4 Календарный план-график



№ раб.	НР	И	Март			Апрель			Май			Июнь				
			10	20	30	40	50	60	70	80	90	100	110	120		
1	2.928	/														
2	4.148	/														
3	2.318	9.272														
4	4.636	0.6954														
5	0.8784	2.928														
6	9.272	4.636														
7	7.564	6.0512														
8	8.784	35.136														
9	6.2464	12.493														
10	4.0016	8.0032														
11	7.564	6.0512														
12	3.0744	5.124														



## **5.4 Бюджет научно-технического исследования (НТИ)**

При планировании бюджета НТИ должно быть обеспечено полное и достоверное отражение всех видов расходов, связанных с его выполнением. В процессе формирования бюджета НТИ используется следующая группировка затрат по статьям:

- материальные затраты НТИ;
- затраты на специальное оборудование для научных (экспериментальных) работ;
- основная заработная плата исполнителей темы;
- дополнительная заработная плата исполнителей темы;
- отчисления во внебюджетные фонды (страховые отчисления);
- затраты научные и производственные командировки;
- контрагентные расходы;
- накладные расходы.

### **5.4.1 Расчет материальных затрат НТИ**

Во-первых, расходы включают материальные затраты, приобретенные продукты, полуфабрикаты и другие материальные ценности, которые непосредственно потребляются при работе объекта проектирования. Поскольку эта работа является теоретическим расчетом, она не предполагает закупку конкретных материалов. Однако это необходимо для расчета вспомогательных материалов. Например, черновая бумага, ручки, программное обеспечение и мобильные устройства хранения данных требуются в процессе расчета. Необходимые материалы, их количество и цены указаны в таблице 5.5.

Таблице 5.5. Материальные затраты

Наименование материалов	Единица измерения	Цена за ед., руб.	Количество	Сумма, руб.
Бумага	Лис.	150	1	150
Ручка	Шт.	50	3	150
Тетрадь	Шт.	100	1	100
USB диск "TOSHIBA"	Шт.	1500	1	1500
Программное обеспечение "Matlab"	Шт.	3545	0.1	354.5
<b>Итого:</b>				2254.5

Расчет материальных затрат осуществляется по следующей формуле:

$$Z_m = (1 + k_T) \sum_{i=1}^m C_i N, \quad (5.5)$$

где  $N_{расхи}$  – количество материальных ресурсов  $i$ -го вида, планируемых к использованию при выполнении научного исследования (шт., кг, м, м<sup>2</sup> и т.д.);

$C_i$  – цена приобретения единицы  $i$ -го вида потребляемых материальных ресурсов (руб./шт., руб./кг, руб./м, руб./м<sup>2</sup> и т.д.);

$k_T$  – коэффициент, учитывающий транспортно-заготовительные расходы.

Значения цен на материальные ресурсы могут быть установлены по данным, размещенным на соответствующих сайтах в интернете предприятиями-изготовителями (либо организациями-поставщиками).

Величина коэффициента ( $k_T$ ), отражающего соотношение затрат по доставке материальных ресурсов и цен на их приобретение, зависит от условий договоров поставки, видов материальных ресурсов, территориальной удаленности поставщиков и т.д. Транспортные расходы принимаются в пределах 10-25% от стоимости материалов.

Расчет стоимости материала приведен ниже:

$$S_m = (1 + 0.1) * (150 + 150 + 100 + 1500 + 354,5) = 2479,95$$

#### 5.4.2 Расчет заработной платы

Среднедневная тарифная заработная плата ( $ЗП_{дн-т}$ ) рассчитывается по формуле:

$$ЗП_{дн-т} = \frac{МО}{\frac{298}{12}} = \frac{МО}{24,83} \quad (5.6)$$

Для учета в ее составе премий, дополнительной зарплаты и районной надбавки используется следующий ряд коэффициентов:

$$К_{ПР} = 1,1; К_{доп.ЗП} = 1,188; К_r = 1,3 \quad (5.7)$$

Поэтому необходимо добавить тарифы к базовой зарплате и оценить соответствующий коэффициент. Формула для расчета коэффициента выглядит следующим образом

$$К_{и} = К_{ПР} * К_{доп.ЗП} * К_r = 1,1 * 1,188 * 1,3 = 1,699 \quad (5.8)$$

Таблицы 5.7 Затраты на заработную плату

Исполнитель	Оклад, руб./мес.	Среднедневная ставка, руб./раб.день	Затраты времени, раб.дни	Коэффициент	Фонд з/платы, руб.
НР	33664	1343	76	1.699	173413.5 3
И	15470	617	75	1.62	74965.5
<b>Итого:</b>					248379.53

#### 5.4.3 Расчет затрат на социальный налог

Затраты на единый социальный налог (ЕСН), включающий в себя отчисления в пенсионный фонд, на социальное и медицинское страхование, составляют 30 % от полной заработной платы по проекту.

$$S_t = S_{wage} * 0.3 = 248379.53 * 0.3 = 74513.7 \quad (5.9)$$

#### 5.4.4 Расчет затрат на электроэнергию

Рассчитайте счет за электроэнергию, необходимый для теста. Вам нужно знать местную цену на электроэнергию, мощность устройства и сколько времени использовать, рассчитываемые по формуле:

$$\text{Сэл. об.} = P_{\text{об}} \times t_{\text{об}} \times \text{ЦЭ} \quad (5.10)$$

где  $P_{\text{об}}$  – мощность кВт;

$t_{\text{об}}$  – время работы оборудования, час.

$\text{ЦЭ}$  – цена на 1 кВт·час;  $\text{ЦЭ} = 5,748$  руб./кВт.час (в ТПУ).

Поскольку спектральные данные были записаны, экспериментальное оборудование работало 24 часа, и данные были получены в режиме реального времени с помощью удаленного компьютера. Поскольку экспериментальный метод имеет излучение частиц высокой энергии, он минимизирует контакт между людьми и оборудованием. Эта операция приведет к тому, что рабочее время экспериментального оборудования будет больше рабочего времени человека.

В таких случаях  $t_{\text{об}}$  определяется путем прямого учета, особенно если использование соответствующего оборудования ограничено.

Мощность, потребляемая оборудованием, определяется по формуле:

$$P_{\text{об}} = P_{\text{ном.}} * K_C \quad (5.11)$$

где  $P_{\text{ном.}}$  – номинальная мощность оборудования, кВт;

$K_C = 1$  (оборудование малой мощности).

Результаты расчета стоимости электроэнергии, следующие таблице

Таблице 5.8 Результаты расчета стоимости электроэнергии

Наименование оборудования	Время работы $t_{об}$ (ч)	Потребляемая Мощность $P_{об}$ (кВт)	Цена единицы оборудования, $C_э$ (кВт/ч);	Затраты на электроэнергию, руб.
Компьютер New Surface pro	474.4	0.2	5.748	545,4
Монитор Samsung	474.4	0.09		245,4
Итого				790,8

#### 5.4.5 Расчет амортизационных расходов

В учете затрат учитывается не только счет за электроэнергию оборудования, но и амортизация оборудования. Используется формула.

$$C_{AM} = \frac{N_A * C_{ОБ} * t_{рф} * n}{F_D}, \quad (5.12)$$

где  $N_A$  – годовая норма амортизации; ( $N_A=12,5\%$ )

$C_{ОБ}$  – балансовая стоимость единицы оборудования с учетом ТЗР.

$F_D$  – действительный годовой фонд времени работы соответствующего оборудования ( $301*8=2408$  ч).

$t_{рф}$  – фактическое время работы оборудования в ходе выполнения проекта, задается исполнителем проекта;

$n$  – число задействованных однотипных единиц оборудования.

Таблицы 5.9 Результаты расчета нормы амортизации

Наименование оборудования	Количество (n).	Цена единицы оборудования, руб ( $C_{ОБ}$ )	Общая стоимость оборудования, руб.	Время работы $t_{рф}$ (ч)	Амортизация руб
New Surface Pro	1	99999	99999	474,4	2462,6
Монитор Samsung	1	13000	13000	474,4	320,1
USB диск "TOSHIBA"	1	1500	1500	50	3,9
Итого					2786,6

#### 5.4.6 Непосредственно учитываемые расходы

Регистрационный взнос для участия в ПРФН 2019 составляет 1000 рублей.

#### 5.4.7 Стоимость всего проекта

Консолидировать и суммировать расходы по вышеуказанным разделам. Все затраты на этот эксперимент представлены в таблице 5.10 ниже.

Таблицы 5.10 Смета затрат на разработку проекта

Наименование	Затрат, руб
материальные затраты НИИ	2479.95
заработные платы	248379.53
затрат на социальный налог	74513.7
затрат на электроэнергию	790.8
Расчет амортизационных расходов	2786.6
Непосредственно учитываемые расходы	1000
Итого	329950.58

#### Расчёт прибыли

$$329950.58 * 0.2 = 65990.116 \text{ руб.}$$

#### Расчёт НДС

$$(329950.58 + 65990.116) * 0.2 = 79188.1392 \text{ руб.}$$

#### Цена разработки НИР

$$329950.58 + 65990.116 + 79188.1392 = 475128.8352 \text{ руб.}$$

#### Оценка экономической эффективности

Поскольку это теоретическая работа, то её экономическая эффективность не может быть определена.

## **Глава 6. Социальная ответственность**

### **6.1 Правовые и организационные вопросы обеспечения безопасности**

#### **6.1.1 Специальные правовые нормы трудового законодательства**

Специальные нормы трудового права отражают начало дифференциации правового регулирования трудовых отношений. Критериями дифференциации могут служить объективные и субъективные обстоятельства, например такие как:

- отрасль деятельности работодателя (сфера перевозок, педагогическая или научная деятельность, профессиональный спорт, религиозная деятельность);
- организационно-правовая форма работодателя (ряд изъятий предусмотрен для субъектов малого предпринимательства, работодателей – физических лиц);
- природные (климатические) условия, в которых осуществляется трудовая деятельность (речь идет в первую очередь о работниках, осуществляющих трудовую деятельность в районах Крайнего Севера);
- вид, условия и характер труда (дистанционная, надомная, вахтовая, сезонная работа, работа по совместительству);
- занимаемая работником должность (речь идет о руководителях организации, членах коллегиального исполнительного органа, главном бухгалтере);
- возраст или пол работника; семейное положение работника;
- состояние здоровья работника;
- гражданство работника.

Специальные нормы трудового права, как правило, содержат не только изъятия из общих правовых норм, но и дополнительные гарантии для



работников (например, повышенная оплата труда во вредных условиях, предоставление дополнительного времени отдыха). Основная масса специальных норм трудового права расположена в разделе XII ТК, посвященном особенностям регулирования труда отдельных категорий работников.

### **6.1.2 Организационные мероприятия при компоновке рабочей зоны исследователя**

Конструкция рабочего стола обеспечивает оптимальное размещение на рабочей поверхности используемого оборудования. Высота рабочей поверхности стола составляет 725 мм. Модульными размерами рабочей поверхности стола для ПЭВМ, на основании которых должны рассчитываться конструктивные размеры, следует считать: ширину 800, 1000, 1200 и 1400 мм, глубину 800 и 1000 мм при нерегулируемой его высоте. Рабочий стол должен иметь пространство для ног высотой не менее 600 мм, шириной – не менее 500 мм, глубиной на уровне колен – не менее 450 мм и на уровне вытянутых ног – не менее 650 мм. Конструкция рабочего стола поддерживает рациональную рабочую позу при работе с ПЭВМ, позволяет изменить позу с целью снижения статистического направления мышц шейно-плечевой области и спины для предупреждения утомления. Конструкция рабочего стула должна обеспечивать:

- ширину и глубину поверхности сиденья не менее 400 мм;
- поверхность сиденья с закруглённым передним краем;
- регулировку высоты поверхности сиденья в пределах 400-550 мм и углов наклона вперёд до 15° и назад до 5°;
- высоту опорной поверхности спинки  $30\pm 20$  мм, ширину – не менее

380 мм и радиус кривизны горизонтальной плоскости – 400 мм;

- угол наклона спинки в вертикальной плоскости в пределах  $\pm 30^\circ$ ;
- стационарные или съёмные подлокотники длиной не менее 250 мм и шириной – 45-70 мм;
- регулировку подлокотников по высоте над сиденьем в пределах  $230 \pm 30$  мм и внутреннего расстояния между подлокотниками в пределах 350-500 мм.

Рабочее место пользователя ПЭВМ следует оборудовать подставкой для ног, имеющей ширину не менее 300 мм, глубину не менее 400 мм, регулировку по высоте в пределах до 150 мм и по углу наклона опорной поверхности подставки до  $20^\circ$ . Поверхность подставки должна быть рифлёной и иметь по переднему краю бортик высотой 10 мм.



Рисунок 6.1 Основные требования к организации рабочего места

Клавиатуру следует располагать на поверхности стола на расстоянии 100-300 мм от края, обращённого к пользователю, или на специальной, регулируемой по высоте рабочей поверхности, отделённой от основной столешницы.

К работе с ПЭВМ допускаются лица, прошедшие предварительный и

периодический медицинский осмотр, проверку знаний на третью группу допуска по электробезопасности, изучившие инструкцию и расписавшиеся в «Журнале инструктажа по правилам охраны труда на рабочем месте». Для обеспечения оптимальной работоспособности, сохранения здоровья пользователей ЭВМ на протяжении смены устанавливается следующий регламент работ: для преподавателей, сотрудников, студентов (старших курсов) непосредственная работа не более двух часов с обязательным перерывом не менее 20 минут, общая продолжительность работы – не более 4-х часов в день.

## 6.2 Производственная безопасность

### 6.2.1 Анализ вредных и опасных факторов, которые может создать объект исследования

Для идентификации опасных и вредных производственных факторов определим работы и операции, связанные с выполнением ВКР. Основная работа велась на рабочем месте с использованием ПК и периферийного оборудования. Работа на ПЭВМ относится к категории работ, связанных с опасными и вредными условиями труда. Выделим опасные и вредные производственные факторы, в соответствии с и приведенными работами.

Для приведенных работ вредными являются следующие факторы:

Таблица 6.1 Возможные опасные и вредные факторы

Факторы (ГОСТ 12.0.003-2015)	Этапы работ			Нормативные документы
	Разработка планов и поиск литературы.	Алгорит м записи	Обсуждени е результатов	
Повышенная напряженность зрения;	+	+	+	1. Гигиенические требования к микроклимату производственных помещений СанПиН 2.2.4-548-96; 2. Нормы естественного и искусственного освещения предприятий, СНиП 23-05-95; 3. Допустимые уровни шумов в производственных помещениях. ГОСТ 12.1.003-83. ССБТ; 4. Гигиенические требования к персональным электронно-вычислительным машинам и организации работы, СанПиН 2.2.2/2.4.1340-03.
шум	+	+	+	
Освещенность;	+	+	+	
Электромагнитные излучения	+	+		
Повышенная напряженность труда в течение смены	+	+	+	

## **6.2.2 Анализ вредных и опасных факторов, которые могут возникнуть на рабочем месте при проведении исследований**

При работе на ПК, опасными производственными факторами являются:

- повышенная нагрузка на зрение, которая может привести к снижению остроты зрения и заболеваниям глаз;
- возможность поражения электрическим током;
- электромагнитное и ультрафиолетовое излучение монитора;
- напряжение внимания и интеллектуальные нагрузки;
- длительная статическая нагрузка и монотонность труда.

Влияние опасных факторов приводит к ухудшению здоровья, появлению профессиональных заболеваний.

Электромагнитные излучения приводят к развитию функциональных расстройств (пагубное воздействие на нервную систему) и патологических состояний (головной боли, снижение работоспособности к концентрации внимания, снижение артериального давления, функциональные нарушения зрения, развитие катаракты, кожные заболевания).

Дополнительными факторами риска для работающих за компьютером являются напряжение опорно-двигательной системы, это создает большую статическую нагрузку на позвоночник и некоторые группы мышц, а также приводит к нарушениям нормального кровообращения в конечностях и области таза.

Ведущими компонентами трудового процесса при работе на компьютере служат однообразные многократно повторяющиеся нагрузки на верхние конечности и постоянное зрительное напряжение, особенно при необходимости

моторно—зрительной координации, а также нервно—эмоциональное напряжение, стрессы, связанные с ответственностью за решение выполняемых задач.

### **6.2.3 Обоснование мероприятий по защите исследователя от действия опасных и вредных факторов**

Общие требования к организации режима труда и отдыха при работе с ПЭВМ прописаны в СанПиН 2.2.2.542-96. Защита от электромагнитного излучения компьютера:

1. Расположение монитора и системного блока на максимальном расстоянии от человека.
2. Выключение компьютера при длительном неиспользовании.
3. Рекомендуемое расположение монитора в углу, так чтобы излучение поглощалось стенами.
4. Желательны частые перерывы во время работы.

Для защиты от попадания высокого напряжения на корпус оборудования используется заземление — преднамеренное электрическое соединение с землей металлических нетоковедущих частей, которые могут оказаться под напряжением.

## 6.3 Экологическая безопасность

### 6.3.1 Анализ влияния объекта исследования на окружающую среду

Объектом исследования данной работы являются молекулы  $\text{SO}_2$ . Из-за образования в больших количествах в качестве отходов диоксид серы считается одним из основных газов, загрязняющих атмосферу.

Наибольшую угрозу представляет собой загрязнение соединениями серы, которые выбрасываются в атмосферу при сжигании угольного топлива, нефти и природного газа, а также при выплавке металлов и производстве серной кислоты.

$\text{SO}_2$ (Д.с.), бесцветный газ с резким запахом, один из главных загрязнителей атмосферы. Д.с. образуется при сжигании ископаемого топлива на предприятиях топливно-энергетического комплекса и в двигателях внутреннего сгорания, а также на предприятиях нефтехимического комплекса. Д.с. пагубно влияет на растения, так как проникает в лист и вступает в реакцию с железом, входящим в состав хлорофилла, вызывает распад хлорофилла и гибель растения. Загрязнение атмосферы Д.с. — главная причина кислотных дождей. Во всем мире идет поиск возможностей уменьшения выбросов Д.с. в атмосферу.

Ниже приведена таблица ПДК некоторых вредных веществ в атмосферном воздухе, установленной в Российской Федерации:

Таблица 6.2 ПДК некоторых вредных веществ в атмосферном воздухе

Вещество	Класс опасности	ПДК <sub>МР</sub> , мг/м <sup>3</sup>	ПДК <sub>СС</sub> , мг/м <sup>3</sup>
Оксид углерода (СО)	4	5	3
Аммиак (NH <sub>3</sub> )	4	0,2	0,04

Ксилол (C <sub>8</sub> H <sub>10</sub> )	3	0,2	-
Оксид азота (NO)	3	0,4	0,06
Диоксид серы (SO <sub>2</sub> )	3	0,5	0,05
Толуол (C <sub>7</sub> H <sub>8</sub> )	3	0,6	-
Сероводород (H <sub>2</sub> S)	2	0,008	-
Хлор (Cl <sub>2</sub> )	2	0,1	0,03
Диоксид азота (NO <sub>2</sub> )	2	0,085	0,04
Фенол (C <sub>6</sub> H <sub>6</sub> O)	2	0,01	0,003
Бензол (C <sub>6</sub> H <sub>6</sub> )	2	0,3	0,1
Озон (O <sub>3</sub> )	1	0,16	0,03
Свинец (Pb)	1	0,001	0,0003

### 6.3.2 Анализ влияния процесса исследования на окружающую среду

В процессе трудовой деятельности в вычислительных центрах, также, как и обычной жизнедеятельности, человек является источником твёрдых бытовых отходов. Эти отходы, как пищевые, так и промышленные, сильно загрязняют окружающую среду.

Как правило, в качестве промышленных отходов выступают бумага, диски, строительные отходы, коробки и т.п. Этот мусор с другими отходами вывозится на территории, выделенные под складирование бытовых отходов.

Другие факторы, влияющие на окружающую природную среду, в процессе создания НИР отсутствуют.



### **6.3.3 Обоснование мероприятий по защите окружающей среды**

С каждым годом экологическое состояние в нашей стране становится все хуже. Именно поэтому государством предпринимаются все возможные меры для решения данной проблемы. Одной из самых эффективных мер на сегодняшний день принято считать такой вид деятельности, как охрана окружающей среды.

Охрана окружающей среды является по-настоящему важным и значимым процессом. Именно поэтому этим вопросам уделяют достаточно много времени и внимания. Охраной окружающей среды называется комплекс мер, направленных на предупреждение отрицательного влияния человеческой деятельности на природу, обеспечение благоприятных и безопасных условий жизнедеятельности человека.

В условиях научно-технического прогресса важнейшей задачей человечества является охрана важнейших элементов окружающей среды (воздух, вода, почва), которые из-за вредных промышленных выбросов и отходов подвергаются сильнейшему загрязнению. Результатом чего является закисление почвы и воды, изменение климата и разрушение озонового слоя. В последние годы, в связи с необратимыми процессами и изменениями окружающей среды, вопросы охраны среды выросли в общемировую проблему. Поэтому разработка долгосрочной экологической политики по созданию благоприятных условий (пдв) стала необходима.

## **6.4 Безопасность в чрезвычайных ситуациях**

### **6.4.1 Анализ вероятных ЧС, которые может инициировать объект исследований**

В принципе, перечень возможных ЧС, которые может вызвать объект исследования может быть достаточно широк. Если ограничиться местоположением и условиями эксплуатации объекта, его можно представить следующим (ориентировочным) вариантом:

- пожар на объекте;
- взрыв;
- атмосферные перенапряжения.

В этом разделе наиболее актуальным будет рассмотрение вида ЧС – пожар, определение категории помещения по пожар взрывобезопасности, регламентирование мер противопожарной безопасности, в котором происходит исследование, а также место эксплуатации объекта исследования, то есть лаборатории и нефтедобывающих объектах.

Все помещения лаборатории должны соответствовать требованиям пожарной безопасности по ГОСТ 12.1.004-91 и иметь средства пожаротушения по ГОСТ 12.4.009-83. По пожарной, взрывной, взрывопожарной опасности лаборатория, в которой производились испытания относится к категории Д – наличие твердых сгораемых веществ.

Основным поражающим фактором пожара в лаборатории является наличие открытого огня и отравление ядовитыми продуктами сгорания оборудования.

#### **6.4.2 Обоснование мероприятий по предотвращению ЧС и разработка порядка действия в случае возникновения ЧС**

Пожарная безопасность объекта должна обеспечиваться системами предотвращения пожара и противопожарной защиты, в том числе организационно-техническими мероприятиями.

Для снижения рисков возникновения пожаров и аварийных ситуаций на объектах нефтяной промышленности необходимо придерживаться правил проектирования зданий, сооружений, оборудования.

Также обучить рабочий персонал и ответственных лиц правилам пожарной безопасности, осуществлять своевременный контроль по исполнению обязанностей.

Также должны присутствовать системы сигнализации, зачастую не связанные с другими системами, газоанализаторы, сеть пожарных водопроводов, насосы и станции. При любых изменениях в работе такого оборудования уполномоченные лица обязаны уведомить органы Государственного пожарного надзора.

На этих предприятиях необходимо вести документацию по пожарной безопасности. Зачастую возле таких объектов располагается отделение пожарной охраны, чтобы в минимальные сроки ликвидировать возгорание. Возможна организация добровольной пожарной дружины на конкретном предприятии.

В лаборатории, пожарная защита должна обеспечиваться применением средств пожаротушения, а также применением автоматических установок пожарной сигнализации.

Должны быть приняты следующие меры противопожарной безопасности:

- обеспечение эффективного удаления дыма, т.к. в помещениях, имеющих оргтехнику, содержится большое количество пластиковых веществ, выделяющих при горении летучие ядовитые вещества и едкий дым;
- обеспечение правильных путей эвакуации;
- наличие огнетушителей и пожарной сигнализации;
- соблюдение всех противопожарных требований к системам отопления и кондиционирования воздуха.

Для тушения пожаров могут использоваться следующие огнетушители: углекислотные (ОУ-5 или ОУ-10) и порошковые огнетушители (например, типа ОП-10), которые обладают высокой скоростью тушения, большим временем действия, возможностью тушения электроустановок, высокой эффективностью борьбы с огнем.

Помещение, в котором производилось исследование (лаборатория), оборудовано пожарной сигнализацией, которая позволяет оповестить дежурный персонал о пожаре, а также дает сигнал об эвакуации. В качестве пожарных извещателей в помещении устанавливаются дымовые фотоэлектрические извещатели типа ИДФ-1 или ДИП-1.

Выведение людей из зоны пожара должно производиться по плану эвакуации.

План эвакуации представляет собой заранее разработанный план (схему), в которой указаны пути эвакуации, эвакуационные и аварийные выходы,

установлены правила поведения людей, порядок и последовательность действий в условиях чрезвычайной ситуации по п. 3.14 ГОСТ Р 12.2.143-2002.

Согласно Правилам пожарной безопасности, в Российской Федерации ППБ 01-2003 (п. 16) в зданиях и сооружениях (кроме жилых домов) при одновременном нахождении на этаже более 10 человек должны быть разработаны и на видных местах вывешены планы (схемы) эвакуации людей в случае пожара.

План эвакуации людей при пожаре из помещения, где расположен диспетчерский пункт (пост управления), представлен на рис. 6.1.

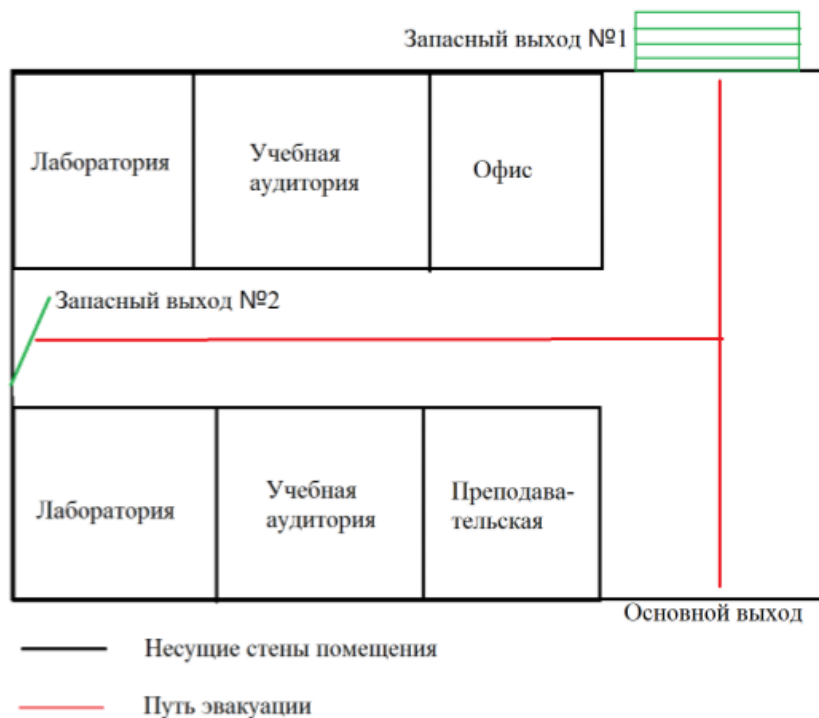


Рисунок 6.2 План эвакуации из лаборатории

### **Выводы по разделу**

Проанализировав условия труда на объекте исследования и рабочем месте, где была разработана бакалаврская работа, можно сделать вывод, что объект исследования и рабочее место удовлетворяет необходимым нормам и в случае соблюдения техники безопасности и правил пользования компьютером работа в данном помещении не приведет к ухудшению здоровья работника.

Во избежание негативного влияния на здоровье объекта исследования необходимо использовать индивидуальные средства защиты, а при работе с ЭВМ делать перерывы и проводить специальные комплексы упражнений для глаз.

## Заклучение

В данной работе:

1. проанализированы вращательные параметры гамильтониана  $h$  для молекул типа  $XY_2$  ( $C_{2v}$  симметрии).
2. использованы свойства теории симметрии для описания переходов между колебательными состояниями (000) и (001).
3. определены параметры эффективного дипольного момента состояния (001) для молекул типа  $XY_2$  ( $C_{2v}$  симметрии).
4. выполнена численная оценка параметров эффективного дипольного момента на примере молекул  $^{32}S^{16}O_2$  и  $^{34}S^{16}O_2$ .

Полученные результаты также могут использоваться для анализа спектра высокого разрешения молекул  $SO_2$  и для получения высокоточной количественной информации об интенсивностях колебательных состояний (001) молекул типа  $XY_2$  ( $C_{2v}$  симметрии). Полученные данные важны для решения задач астрофизики, планетологии, атмосферной оптики, и т.д.

## Список литературы

1. K. N. Rao (Eds.) *Molecular Spectroscopy*. Modern Research-Academic Press, 1985, Page 76.
2. Wu Guozhen. *Principles and Research of Molecular Vibration Spectroscopy*. Tsinghua University Press, 2001, Pages 67-69.
3. Xie Xide, Jiang Ping, Lu Fen. *Group Theory and Its Application in Physics*. Science Press, 2010, Pages 1-3.
4. 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. – 224с.
5. Любарский Г. Я. Теория групп и ее применение в физике. Уч.-изд. Л., 1958. – 7-10с.
6. Gerhard Herzberg. *Molecular spectra and molecular structure*. D. Van Nostrand Company, Inc, 1945, Page 55.
7. Макушкин Ю. С., Улеников О. Н., Чеглоков А. Е. Симметрия и ее применение к задачам колебательно-вращательной спектроскопии молекул. Часть 2. Томск: Издательство ТГУ, 1990. – 224с.
8. Г. Герцберг, Колебательные и вращательные спектры многоатомных молекул. Издательство иностранной литературы Москва, 1949. – 647с.
9. D. Parousek, M. R. Aliev. *Molecular Vibrational Rotational Spectra*. Academia/Prague. 1982, Page 323.
10. E. B. Wilson, J. C. Decius, P. C. Cross. *Molecular Vibrations: The Theory of Infrared and Raman Vibrational Spectra*. Courier Corporation. 1955, Page 388.
11. Соколов А. А. Тернов И.М., Жуковский В.Ч.: Квантовая механика. –



- Издательство. Наука, 1979. – 647 с.
12. 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.
  13. O. N. Ulenikov et al. “Expanded” local mode approach for  $XY_2$  ( $C_{2v}$ ) molecules. *Spectrochimica Acta Part A* 52(1996), Page 1830.
  14. J. M. Flaud and C. Camy-Peyret: Vibration-Rotation Intensities in  $H_2O$ -Type Molecules Application to the  $2\nu_2$ ,  $\nu_1$ , and  $\nu_3$  Bands of  $H_2^{16}O$ . - *JOURNAL OF MOLECULAR SPECTROSCOPY* 55, 278-310 (1975), Page 279.
  15. O. N. Ulenikov et al. “Expanded” local mode approach for  $XY_2$  ( $C_{2v}$ ) molecules. *Spectrochimica Acta Part A* 52(1996), Pages 1830-1831.
  16. J. M. Flaud and C. Camy-Peyret: Vibration-Rotation Intensities in  $H_2O$ -Type Molecules Application to the  $2\nu_2$ ,  $\nu_1$ , and  $\nu_3$  Bands of  $H_2^{16}O$ . - *JOURNAL OF MOLECULAR SPECTROSCOPY* 55, 278-310 (1975), Page 283.
  17. Chu P. M. Line Intensities for the  $8\text{-}\mu\text{m}$  Bands of  $SO_2$ /P. M. Chu [et.al]//*J. Mol. Spectrosc.* -1998. -Vol. 189. -P. 55-63.
  18. Flaud J.-M. Line Intensities for the  $\nu_1$ ,  $\nu_3$  and  $\nu_1+\nu_3$  bands of  $^{34}SO_2$ /J.-M. Flaud, W. J. Lafferty, R. L. Sams//*J. Quant. Spectrosc. & Radiat. Transer.* -2009. -Vol. 110. -P. 669-674.