

**РАЗРАБОТКА АЛГОРИТМА И СОЗДАНИЕ ПАКЕТА ПРОГРАММ ДЛЯ ИССЛЕДОВАНИЯ  
КОЛЕБАТЕЛЬНО-ВРАЩАТЕЛЬНЫХ СПЕКТРОВ МОЛЕКУЛЫ ТИПА СФЕРИЧЕСКОГО  
ВОЛЧКА: ОПРЕДЕЛЕНИЕ НЕПРИВОДИМЫХ ВРАЩАТЕЛЬНЫХ ОПЕРАТОРОВ**

Чан СюаньХао

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

Национальный исследовательский Томский политехнический университет,

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

E-mail: [574969181@qq.com](mailto:574969181@qq.com)

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

Chang Xuanhao

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

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

E-mail: [574969181@qq.com](mailto:574969181@qq.com)

***Abstract.** Theoretical analysis of high-resolution spectra of spherical top molecules needs in knowledge of high order and rank rotational operators. Set of high rank ( $K \leq 8$ ) rotational operators of the  $SO(3)$  symmetry group were developed on the basis of the irreducible tensorial sets theory and of the analytical programming package "Mathematica". Obtained operators were reduced to the  $T_d$  group for the effective Hamiltonian implementation.*

**Введение.** Одной из актуальных задач современной молекулярной спектроскопии является исследование фундаментальных свойств многоатомных молекул, обладающих высокой степенью симметрии ( $\text{CH}_4$ ,  $\text{SiH}_4$ ,  $\text{GeH}_4$ ) [11, 12], т.к. такие молекулы имеют многочисленные приложения в различных как чисто академических, так и прикладных задачах астрофизики, планетологии, атмосферной оптики, термохимии, производства полупроводников, астрофизики, планетологии и др. При этом важным является не только экспериментальное исследование спектров, но также и их теоретический анализ, позволяющий извлекать из спектров физическую информацию. Исследование экспериментальных спектров молекул высокой симметрии невозможно без соответствующих математических моделей, поскольку эти молекулы обладают рядом особенностей, в силу которых обычные методы анализа становятся не применимы.

Структура колебательно-вращательных спектров молекулы прямо зависит от ее симметрии, поэтому становится очевидной важность изучения свойств симметрии молекулы [1, 3, 4, 6]. С теоретической точки зрения, молекулы высокой симметрии занимают особое место, так как высокая симметрия, с одной стороны, сильно упрощает процедуру теоретического анализа. Наличие высокой симметрии позволяет легко исследовать спектры в первом приближении. С другой стороны, высокая симметрия приводит к сложным проблемам при интерпретации спектров, основной сложностью является неприменимость метода комбинационных разностей. Для получения высокоточной информации возникает необходимость в рассмотрении так называемых тетраэдрических расщеплений, которые

тривиальными формулами не описываются [10, 11]. Наиболее важная задача, при этом, заключается в решении уравнения Шредингера и построении необходимого для этого эффективного гамильтониана [14]. Причём, эффективный гамильтониан может содержать большие степени  $\Omega$  вращательных операторов  $J_\alpha$ , которые до сих пор пока еще не до конца изучены. Для решения этих проблем оказывается необходимо знание теории углового момента [2, 5, 7, 8], а также формализма неприводимых тензорных операторов (НТО), развитого Вигнером в 1958 году [6]. Более того, для определения приведения группы  $SO(3)$  на точечную группу, оказывается необходимо так называемая  $G$ -матрица редукции, которые впервые даётся в аналитическом виде для точечной группы  $T_d$  автором [9, 13] в 1995 году.

**Метод исследования.** В данной работе использована теория неприводимых тензорных операторов, были впервые построены в аналитическом виде вращательные операторы высокого ранга  $K=\Omega=8$ , а также необходимые для решения вращательных задач приведённые вращательные операторы симметрии  $T_d$ . Для реализации задачи была использована квантовая алгебра в виде пакетов программ "Wolfram Mathematica" и блок "quantum".

**Результат.** Полученный в итоге результат имеет довольно громоздкий вид, поэтому здесь мы в качестве иллюстрации приводим лишь пару из полученных неприводимых тензорных операторов на группе  $SO(3)$  и точечной группе  $T_d$ .

$$R_1^{8(8)} = \frac{1}{4\sqrt{1430}} (372[J_0, J_+]_+ + 854J^2[J_0, J_+]_+ - 315J^4[J_0, J_+]_+ + 35J^6[J_0, J_+]_+ - 2696[J_0^3, J_+]_+ + 1925J^2[J_0^3, J_+]_+ - 385J^4[J_0^3, J_+]_+ - 2002[J_0^5, J_+]_+ + 1001J^2[J_0^5, J_+]_+ - 715[J_0^7, J_+]_+)$$

$$R_y^{8(8,8F_{1y})} = -\frac{93}{64}J_0 \cdot J_- - \frac{427}{128}J^2J_0 \cdot J_- + \frac{315}{256}J^4J_0 \cdot J_- - \frac{35}{256}J^6J_0 \cdot J_- + \frac{2695}{256}J_0^3 \cdot J_- - \frac{1925}{256}J^2J_0^3 \cdot J_- + \frac{385}{256}J^4J_0^3 \cdot J_- + \frac{1001}{128}J_0^5 \cdot J_- - \frac{1001}{256}J^2J_0^5 \cdot J_- + \frac{715}{256}J_0^7 \cdot J_- - \frac{399}{2}J_0 \cdot J_-^3 - 7J^2J_0 \cdot J_-^3 - \frac{21}{128}J^4J_0 \cdot J_-^3 + \frac{4641}{128}J_0^3 \cdot J_-^3 + \frac{91}{64}J^2J_0^3 \cdot J_-^3 - \frac{273}{128}J_0^5 \cdot J_-^3 - \frac{581}{64}J_0 \cdot J_-^5 - \frac{7}{64}J^2J_0 \cdot J_-^5 + \frac{35}{64}J_0^3 \cdot J_-^5 - \frac{1}{32}J_0 \cdot J_-^7 - \frac{93J_0 \cdot J_+}{64} - \frac{427}{128}J^2J_0 \cdot J_+ + \frac{315}{256}J^4J_0 \cdot J_+ - \frac{35}{256}J^6J_0 \cdot J_+ + \frac{2695}{256}J_0^3 \cdot J_+ - \frac{1925}{256}J^2J_0^3 \cdot J_+ + \frac{385}{256}J^4J_0^3 \cdot J_+ + \frac{1001}{128}J_0^5 \cdot J_+ - \frac{1001}{256}J^2J_0^5 \cdot J_+ + \frac{715}{256}J_0^7 \cdot J_+ - \frac{399}{2}J_0 \cdot J_+^3 - 7J^2J_0 \cdot J_+^3 - \frac{21}{128}J^4J_0 \cdot J_+^3 + \frac{4641}{128}J_0^3 \cdot J_+^3 + \frac{91}{64}J^2J_0^3 \cdot J_+^3 - \frac{273}{128}J_0^5 \cdot J_+^3 - \frac{581}{64}J_0 \cdot J_+^5 - \frac{7}{64}J^2J_0 \cdot J_+^5 + \frac{35}{64}J_0^3 \cdot J_+^5 - \frac{1}{32}J_0 \cdot J_+^7 - \frac{93J_- \cdot J_0}{64} - \frac{427}{128}J^2J_- \cdot J_0 + \frac{315}{256}J^4J_- \cdot J_0 - \frac{35}{256}J^6J_- \cdot J_0 - \frac{399}{2}J_+^3 \cdot J_0 - 7J^2J_+^3 \cdot J_0 - \frac{21}{128}J^4J_+^3 \cdot J_0 - \frac{581}{64}J_-^5 \cdot J_0 - \frac{7}{64}J^2J_-^5 \cdot J_0 - \frac{1}{32}J_-^7 \cdot J_0 - \frac{93J_+ \cdot J_0}{64} - \frac{427}{128}J^2J_+ \cdot J_0 + \frac{315}{256}J^4J_+ \cdot J_0 - \frac{35}{256}J^6J_+ \cdot J_0 - \frac{399}{2}J_+^3 \cdot J_0 - 7J^2J_+^3 \cdot J_0 - \frac{21}{128}J^4J_+^3 \cdot J_0 - \frac{581}{64}J_+^5 \cdot J_0 - \frac{7}{64}J^2J_+^5 \cdot J_0 + \frac{2695}{256}J_- \cdot J_0^3 - \frac{1925}{256}J^2J_- \cdot J_0^3 + \frac{385}{256}J^4J_- \cdot J_0^3 + \frac{4641}{128}J_-^3 \cdot J_0^3 + \frac{91}{64}J^2J_-^3 \cdot J_0^3 + \frac{35}{64}J_+^5 \cdot J_0^3 + \frac{2695}{256}J_+ \cdot J_0^3 - \frac{1925}{256}J^2J_+ \cdot J_0^3 + \frac{385}{256}J^4J_+ \cdot J_0^3 + \frac{4641}{128}J_+^3 \cdot J_0^3 + \frac{91}{64}J^2J_+^3 \cdot J_0^3 + \frac{35}{64}J_+^5 \cdot J_0^3 + \frac{1001}{128}J_- \cdot J_0^5 - \frac{1001}{256}J^2J_- \cdot J_0^5 - \frac{273}{128}J_+^3 \cdot J_0^5 + \frac{1001}{128}J_+ \cdot J_0^5 - \frac{1001}{256}J^2J_+ \cdot J_0^5 - \frac{273}{128}J_+^3 \cdot J_0^5 + \frac{715}{256}J_- \cdot J_0^7 + \frac{715}{256}J_+ \cdot J_0^7$$

Полученные результаты используются при разработке программы SPHETOM реализуемой на языке FORTRAN, с помощью которой будет выполняться анализ спектров высокого разрешения молекул типа сферического волчка.

#### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Макушкин Ю. С., Улеников О. Н., Чеглоков А. Е. Симметрия и её применения к задачам колебательно-вращательной спектроскопии молекул. – Томск: Изд-во Том. ун-та, 1990. – 221с.
2. Варшалович Д. А., Москалев А. Н., Херсонский В. К. Квантовая теория углового момента. Изд-во наука, Ленингр. отд., Л., 1975, 1–439.
3. Любарский Г. Я. Теория групп и ее применение в физике. Уч.-изд. Л., 1958, – 355с.
4. Bunker P. R. Molecular Symmetry and Spectroscopy. Academic Press, New York, 1979.
5. Wigner E.P. Quantum Theory of Angular Momentum. Academic Press, New York, 1965.
6. Wigner E.P. Group theory and its application to the quantum mechanics of atomic spectra. Academic press, New York, 1959, pages 443.
7. Edmonds A. D. Angular Momentum in Quantum Mechanics. Princeton: Princeton University Press, 1957. Ch. 4, pages 53-62.
8. Ка X.L. Advanced Quantum Mechanics. Higher Education Press, Beijing, 2001, pages 523. (In Chinese)
9. Cheglov A. E., Ulenikov O. N. On Determination of the Analytical Formulas for Reduction Matrices of Tetrahedral-Symmetry Molecules. // J. Mol. Spectrosc. – 1985. – V.110. – Pages 53-64.
10. Ulenikov O. N., Malikova A. B., Alanko S., Koivusaari M., Anttila R.. High-Resolution Study of the 2v<sub>5</sub> Hybrid Band of the CHD<sub>3</sub> Molecule. // J. Mol. Spectrosc. – 1996. – V.179. – Pages 175-194.
11. Ulenikov O. N., Bekhtereva E. S., Albert S., Bauerecker S., Niederer H. M., Quack M.. Survey of the high-resolution infrared spectrum of methane (<sup>12</sup>CH<sub>4</sub> and <sup>13</sup>CH<sub>4</sub>): Partial vibrational assignment extended towards 12000 cm<sup>-1</sup>.//Journal of Chemical Physics. –2014. Vol. 141, – 234302\_1 - 234302\_33.
12. Ulenikov O.N.,Gromova O.V.,Bekhtereva E.S.,Raspopov N.I.,Sennikov P.G., Koshelev M.A.,Velmuzhova I.A., Velmuzhov A.P.,Bulanov A.D. High resolution study of <sup>M</sup>GeH<sub>4</sub> (M=76.74) in the dyad region. // Journal of Quantitative Spectroscopy & Radiative Transfer. –2014. Vol.144, –Pages 11-26.
13. Cheglov A. E., Saveliev V. N., Ulenikov O. N.. Analytical representation of the values describing the spectra of Td symmetry molecules and crystals// J. Phys B: At, Mol. Phys. –1986. 19, –Pages 3687-3693.
14. Makushkin Yu. S., Ulenikov O. N.. On the Transformation of the Complete Electron-Nuclear Hamiltonian of a Polyatomic Molecule to the Intramolecular Coordinates// Journal of molecular spectroscopy. –1977. 68, – Pages 1-20.
15. Y. Y. Kwan. The Interacting States of An Asymmetric Top Molecule XY<sub>2</sub> of the Group C<sub>2v</sub>, Application to Five Interacting States (101), (021), (120), (200), and (002) of H<sub>2</sub><sup>18</sup>O // J. Mol. Spectrosc. –1978. 71, -Pages 260-280.