

Министерство образования и науки Российской Федерации
федеральное государственное автономное образовательное учреждение
высшего образования
**«НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ
ТОМСКИЙ ПОЛИТЕХНИЧЕСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ»**

Физико-технический институт
Направление подготовки - физика
Кафедра общей физики

БАКАЛАВРСКАЯ РАБОТА

Тема работы
ОПРЕДЕЛЕНИЕ НЕПРИВОДИМЫХ ВРАЩАТЕЛЬНЫХ ОПЕРАТОРОВ НА ГРУППЕ ВРАЩЕНИЯ SO(3) И ТОЧЕЧНОЙ ГРУППЕ T_d

УДК 539.194.535.338.4:530.145.7

Студент

Группа	ФИО	Подпись	Дата
150Б30	Чан СюаньХао		

Руководитель

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

КОНСУЛЬТАНТЫ:

По разделу «Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение»

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Доцент	Меньшикова Екатерина Валентиновна	к.филос.н.		

По разделу «Социальная ответственность»

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Доцент	Волков Юрий Викторович	к.т.н.		

ДОПУСТИТЬ К ЗАЩИТЕ:

Зав. кафедрой	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Зав. кафедрой общей физики	Лидер Андрей Маркович	к.ф.-м.н.		

Томск – 2017 г.

Министерство образования и науки Российской Федерации
 федеральное государственное автономное образовательное учреждение
 высшего образования
**«НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ
 ТОМСКИЙ ПОЛИТЕХНИЧЕСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ»**

Физико-технический институт
 Направление подготовки (специальность) - физика
 Кафедра общей физики

УТВЕРЖДАЮ:
 Зав. кафедрой
 _____ 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
150Б30	Чан СюаньХао

Тема работы:

ОПРЕДЕЛЕНИЕ НЕПРИВОДИМЫХ ВРАЩАТЕЛЬНЫХ ОПЕРАТОРОВ НА ГРУППЕ ВРАЩЕНИЯ SO(3) И ТОЧЕЧНОЙ ГРУППЕ T_d
Утверждена приказом директора (дата, номер)

Срок сдачи студентом выполненной работы:	
--	--

ТЕХНИЧЕСКОЕ ЗАДАНИЕ:

<p>Исходные данные к работе <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></p>	<p>Объект исследования: неприводимые тензорные операторы</p>
<p>Перечень подлежащих исследованию, проектированию и разработке вопросов <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"> - Обзор литературы; - Исследование вращательных операторов на группе вращения и на точечной группе T_d; - Раздел «Финансовый менеджмент ресурсоэффективность и ресурсосбережение»; - Раздел «Социальная ответственность».

Консультанты по разделам выпускной квалификационной работы	
Раздел	Консультант
Социальная ответственность	Волков Юрий Викторович, доцент ЭБЖ ИНК
Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение	Меньшикова Екатерина Валентиновна, доцент МЕН ИСГТ
Иностранный язык	

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

Задание выдал руководитель:

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

Задание принял к исполнению студент:

Группа	ФИО	Подпись	Дата
150Б30	Чан СюаньХао		

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

Студенту:

Группа	ФИО
150Б30	Чан СюаньХао

Институт	Физико-технический	Кафедра	Общей физики
Уровень образования	Бакалавр	Направление/специальность	03.03.02 Физика

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

<i>1. Стоимость ресурсов научного исследования (НИ): материально-технических, энергетических, финансовых, информационных и человеческих</i>	<i>Определение стоимости ресурсов научного исследования (НИ): материально-технических, энергетических, финансовых информационных и человеческих</i>
<i>2. Нормы и нормативы расходования ресурсов</i>	<i>Знакомство и отбор норм и нормативов расходования ресурсов</i>
<i>3. Используемая система налогообложения, ставки налогов, отчислений, дисконтирования и кредитования</i>	<i>Знакомство с системой налогообложения, со ставками налогов, отчислений, дисконтирования и кредитования</i>

Перечень вопросов, подлежащих исследованию, проектированию и разработке:

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

Перечень графического материала (с точным указанием обязательных чертежей):

<ol style="list-style-type: none"> <i>1. Оценка конкурентоспособности технических решений</i> <i>2. Матрица SWOT</i> <i>3. График проведения и бюджет НИ</i> <i>4. Оценка ресурсной, финансовой и экономической эффективности НИ</i> 	
--	--

Дата выдачи задания для раздела по линейному графику	01.05.2017
---	------------

Задание выдал консультант:

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Доцент	Меньшикова Екатерина Валентиновна	к.филос.н.		

Задание принял к исполнению студент:

Группа	ФИО	Подпись	Дата
150Б30	Чан СюаньХао		

ЗАДАНИЕ ДЛЯ РАЗДЕЛА «СОЦИАЛЬНАЯ ОТВЕТСТВЕННОСТЬ»

Студенту:

Группа	ФИО
150Б30	Чан СюаньХао

Институт	Физико-технический	Кафедра	Общей физики
Уровень образования	Бакалавр	Направление/специальность	03.03.02 Физика

Исходные данные к разделу «Социальная ответственность»:

<p>1. <i>Описание рабочего места (рабочей зоны, технологического процесса, механического оборудования) на предмет возникновения:</i></p> <ul style="list-style-type: none"> – <i>вредных проявлений факторов производственной среды (метеоусловия, вредные вещества, освещение, шумы, вибрации, электромагнитные поля, ионизирующие излучения)</i> – <i>опасных проявлений факторов производственной среды (механической природы, термического характера, электрической, пожарной и взрывной природы)</i> – <i>негативного воздействия на окружающую природную среду (атмосферу, гидросферу, литосферу)</i> – <i>чрезвычайных ситуаций (техногенного, стихийного, экологического и социального характера)</i> 	<p>Данная научно-исследовательская работа выполнялась в помещении кафедры общей физики третьего корпуса Томского Политехнического университета в кабинете 126. Техническим средством является ПЭВМ</p>
<p>2. <i>Знакомство и отбор законодательных и нормативных документов по теме</i></p>	<ul style="list-style-type: none"> - СанПиН 2.2.2/2.4.1340-03. Гигиенические требования к персональным электронно-вычислительным машинам и организация работы; - СП 52.13330.2011 Естественное и искусственное освещение - ГОСТ 12.1.009 – 2009 Система стандартов безопасности труда. Электробезопасность. Термины и определения - ГОСТ 12.1.030 – 81 Электробезопасность. Защитное заземление. Зануление. - ГОСТ 12.1.038-82 Электробезопасность. Предельно допустимые значения прикосновения и токов. - СНиП 21-01-97 Пожарная безопасность зданий и сооружений.

Перечень вопросов, подлежащих исследованию, проектированию и разработке:

<p>1. <i>Анализ выявленных вредных факторов проектируемой производственной среды в следующей последовательности:</i></p> <ul style="list-style-type: none"> – <i>физико-химическая природа вредности, её связь с разрабатываемой темой;</i> – <i>действие фактора на организм человека;</i> 	<p>1. Характеристика факторов изучаемой производственной среды, описывающих процесс взаимодействия человека с окружающей производственной средой:</p> <ul style="list-style-type: none"> – Микроклимат; – Уровень электромагнитного излучения;
---	--

<ul style="list-style-type: none"> – приведение допустимых норм с необходимой размерностью (со ссылкой на соответствующий нормативно-технический документ); – предлагаемые средства защиты (сначала коллективной защиты, затем – индивидуальные защитные средства) 	– Недостаточная освещённость.
<p>2. Анализ выявленных опасных факторов проектируемой производственной среды в следующей последовательности</p> <ul style="list-style-type: none"> – механические опасности (источники, средства защиты); – термические опасности (источники, средства защиты); – электробезопасность (в т.ч. статическое электричество, молниезащита – источники, средства защиты); – пожаровзрывобезопасность (причины, профилактические мероприятия, первичные средства пожаротушения) 	<p>2. Анализ опасных факторов проектируемой производственной среды:</p> <ul style="list-style-type: none"> – электробезопасность; – Опасность возникновения пожара;
<p>3. Охрана окружающей среды:</p> <ul style="list-style-type: none"> – защита селитебной зоны – анализ воздействия объекта на атмосферу (выбросы); – анализ воздействия объекта на гидросферу (сбросы); – анализ воздействия объекта на литосферу (отходы); – разработать решения по обеспечению экологической безопасности со ссылками на НТД по охране окружающей среды. 	3. Деятельность данной научной работы не связана с производством, следовательно, влияние на окружающую среду минимально.
<p>4. Защита в чрезвычайных ситуациях:</p> <ul style="list-style-type: none"> – перечень возможных ЧС на объекте; – выбор наиболее типичной ЧС; – разработка превентивных мер по предупреждению ЧС; – разработка мер по повышению устойчивости объекта к данной ЧС; – разработка действий в результате возникшей ЧС и мер по ликвидации её последствий 	<p>4. Защита в чрезвычайных ситуациях: Возможными ЧС в офисном помещении является сильные морозы, диверсия, а также возникновение пожара Приведены способы защиты от переморозива и пожара.</p>
<p>5. Правовые и организационные вопросы обеспечения безопасности:</p> <ul style="list-style-type: none"> – специальные (характерные для проектируемой рабочей зоны) правовые нормы трудового законодательства; – организационные мероприятия при компоновке рабочей зоны 	5. Перечислена вся использованная литература
Перечень графического материала:	
При необходимости представить эскизные графические материалы к расчётному заданию (обязательно для специалистов и магистров)	1. План эвакуации из лаборатории

Дата выдачи задания для раздела по линейному графику	06.03.2017
---	------------

Задание выдал консультант:

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Доцент	Волков Юрий Викторович	к.т.н.		

Задание принял к исполнению студент:

Группа	ФИО	Подпись	Дата
150Б30	Чан СюаньХао		

РЕФЕРАТ

Выпускная квалификационная работа 89 с., 3 рисунка, 18 таблицы, 22 литературных источника, 2 приложения.

Ключевые слова: Молекулярная спектроскопия, эффективный гамильтониан, вращательные операторы, неприводимый тензорный оператор.

Объектом данного исследования являются вращательные операторы на группе $SO(3)$ и на точечной группе T_d .

Целью работы является построение в аналитическом виде вращательных операторов высокого ранга и соответствующих приведенных вращательных операторов на группу T_d .

В процессе исследования использованы теория неприводимых тензорных операторов и формализм неприводимых тензорных операторов (НТО), развитые Вигнером в 1958 году. Кроме того, были построены матрицы редукции на основе их аналитических выражений. Для расчёта поставленных задач была использована квантовая алгебра в виде пакетов программ "Wolfram Mathematica" и блок "quantum".

В результате исследования 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 .

Полученные результаты также могут использоваться для других точечных групп при различных приведениях.

Область применения: астрофизика, планетология и атмосферная оптика.

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

Содержание

Введение.....	13
1 Виды спектров: общее понятие	16
2. Эффективный гамильтониан	19
2.1 Гамильтониан многоатомной молекулы	19
2.2 Преобразование к нормальным координатам.....	21
2.3 Эффективный гамильтониан	27
3. Вращательные операторы и формализм неприводимых тензорных операторов.....	35
3.1 Эффективный гамильтониан в общем случае	35
3.2 Связывание неприводимых тензорных величин	36
3.3 Редукционная матрица G и ее аналитический вид.....	38
3.4 Приведенные вращательные операторы	41
3.5 Теорема Вигнера-Эккарта.....	44
4. Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение ...	46
4.1 Оценка коммерческого потенциала и перспективности проведения научных исследований с позиции ресурсоэффективности и ресурсосбережения	46
4.1.1 Потенциальные потребители результатов исследования	46
4.1.2 Анализ конкурентных технических решений	47

4.1.3	Технология QuaD	48
4.1.4	SWOT-анализ	49
4.2	Планирование научно-исследовательской работы	51
4.2.1	Планирование этапов работ	51
4.2.2	Определение трудоемкости выполнения НИОКР	52
4.2.3	Техническая готовность темы.....	53
4.2.4	Построение графика работ	54
4.3	Бюджет научно-технического исследования (НТИ).....	57
4.3.1	Расчет материальных затрат НТИ	58
4.3.2	Расчет затрат на специальное оборудование для научных работ	58
4.3.3	Основная заработная плата исполнителей темы.....	59
4.3.4	Отчисления во внебюджетные фонды	61
4.3.5	Накладные расходы.....	62
4.3.6	Формирование бюджет затрат НТИ.....	62
5.	Социальная ответственность	64
5.1	Производная безопасность в компьютерном помещении среды	64
5.2	Анализ вредных производных факторов окружающей работающей среды.....	65
5.2.1	Микроклимат	65
5.2.2	Уровень электромагнитного излучения.....	66

5.2.3 Недостаточная освещённость	68
5.3 Анализ опасных производных факторов окружающей работающей среды.....	69
5.3.1 Электробезопасность	70
5.3.2 Опасность возникновения пожара.....	72
5.4 Рекомендации по минимизации влияния	73
5.4.1 Рекомендации по улучшению микроклимата	73
5.4.2 Рекомендации по минимизации влияния электромагнитных излучений.....	73
5.4.3 Рекомендации по минимизации влияния освещения	74
5.4.4 Рекомендации по защите от электрического тока	74
5.4.5 Меры по обеспечению пожарной безопасности	75
5.5 Экологическая безопасность	76
5.6 Безопасность в чрезвычайных ситуациях	76
5.7 Правовые и организационные вопросы обеспечения безопасности.....	77
Заключение	79
Список литературы	80
Приложение А	83
Приложение В.....	87

Введение

Данная работа посвящена определению неприводимых вращательных операторов на группе вращения $SO(3)$ и точечной группе T_d .

Актуальность работы и постановка задачи: Одной из актуальных задач современной молекулярной спектроскопии является исследование фундаментальных свойств многоатомных молекул, обладающих высокой степенью симметрии (CH_4 , SiH_4 , GeH_4), т.к. такие молекулы имеют многочисленные приложения в различных как чисто академических, так и прикладных задачах астрофизики, планетологии, атмосферной оптики, термодинамики, 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 неприменимы.

Структура колебательно-вращательных спектров молекулы прямо зависит от ее симметрии, поэтому становится очевидной важность изучения свойств симметрии молекулы. 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. Наиболее важная задача, при этом, заключается в решении уравнения Шредингера и построении необходимого для этого эффективного гамильтониана. Причём, эффективный гамильтониан может содержать большие степени Ω вращательных операторов J_α , которые до сих пор пока еще не до конца изучены. Для решения этих проблем оказывается необходимо знание теории углового момента, а также формализма неприводимых тензорных операторов (НТО), развитого Вигнером в 1958 году. Более того, для определения приведения группы $SO(3)$ на точечную группу, оказываются необходимы так называемые G -матрицы редукции, которые впервые даются в аналитическом виде для точечной группы T_d автором в 1985 году.

Целью работы является построение в аналитическом виде вращательных операторов высокого ранга и соответствующих приведенных вращательных операторов на группу T_d .

Для достижения поставленных целей были определены следующие **задачи**:

1. Исследовать принципы построения колебательно-вращательного гамильтониана многоатомной молекулы.
2. Изучить эффективный гамильтониан многоатомной молекулы и операторную теорию возмущений.
3. Построить матрицы редукции G на группу T_d .
4. Построить вращательные для группы $SO(3)$ и соответствующие приведенные на группу T_d операторы до 8-го ранга на основе матриц редукции.

1 Виды спектров: общее понятие

Известно, что молекула, поглощая или испуская электромагнитное излучение с частотой ν , увеличивает или уменьшает энергию на величину:

$$\Delta E = h\nu$$

где h – постоянная Планка.

Это формула означает, что внутренняя энергия объектов микромира не является непрерывной, она имеет строго определенные дискретные значения, которые называются уровнями энергии. А поглощение и испускание электромагнитного излучения происходит при переходе молекулы из одного энергетического состояния в другое состояние, и соответственно, при изменении энергии на величину ΔE .

Обычно для количественного описания электромагнитного излучения используется частота излучения ν , выраженная в герцах. А в области молекулярной спектроскопии более широко используется волновое число ν , выраженное в обратных сантиметрах (см^{-1}). Частота излучения пропорциональна волновому числу, умноженному на скорость света. Если измерять энергию в единицах hc , то размерность энергии получается см^{-1} .

Различные виды излучения возникают при разном виде внутримолекулярных взаимодействий, таким образом, значение волнового числа определяется видом излучения. Например, радиочастотное излучение обусловлено изменениями энергии, которые происходят при изменениях спинов электронов и ядер, входящих в состав молекулы. Инфракрасное – колебаниями

молекулы. Видимое и ультрафиолетовое – изменениями энергии внешних электронов молекулы.

Если не учитывать внутреннюю энергию ядер и электронов, то молекулярные спектры образуются в результате изменения электронной энергии $E_{эл}$, колебательной энергии $E_{к}$ и вращательной энергии $E_{вр}$, причём

$$E_{эл} \gg E_{к} \gg E_{вр}$$

Когда изменяется электронное состояние, это всегда вызывает изменение колебательного состояния. В общем случае частоту испускаемого и поглощаемого излучений можно записать в таком виде:

$$\nu = \left(E_{эл} + E_{к} + E_{вр} \right)_{нач.} h^{-1} - \left(E_{эл} + E_{к} + E_{вр} \right)_{кон.} h^{-1}$$

В первом приближении электронная, колебательная и вращательная энергии независимы друг от друга. Поэтому частоту можно переписать в таком виде:

$$\nu = \left(E_{эл.нач.} - E_{эл.кон.} \right) h^{-1} + \left(E_{к.нач.} - E_{к.кон.} \right) h^{-1} + \left(E_{вр.нач.} - E_{вр.кон.} \right) h^{-1}$$

или

$$\nu = \nu_{эл} + \nu_{к} + \nu_{вр}$$

где $\nu_{эл}$ – частота видимого света. $\nu_{к}$ – инфракрасного излучения. $\nu_{вр}$ – микроволнового излучения.

Спектр в таком случае называется **электронно-колебательно-вращательным**. При возбуждении колебаний образуются **колебательно-вращательные** спектры молекулы. На рис.1 показана диаграмма электронно-колебательно-вращательных уровней энергии двухатомной молекулы. В

качестве примера рассмотрены только два электронных уровня, обозначенные цифрами 1 и 2. R – расстояние между ядрами.

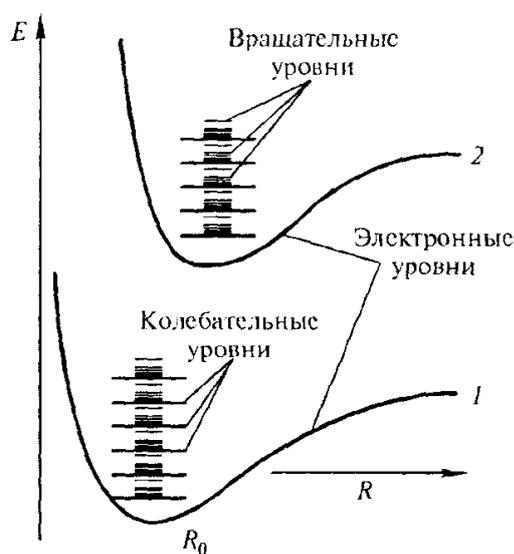


Рисунок 1.1 Электронно-колебательно-вращательные уровни энергии

На рисунке 1.2 представлен небольшой участок **колебательно-вращательного** спектра высокого разрешения многоатомной молекулы C_2D_4 .

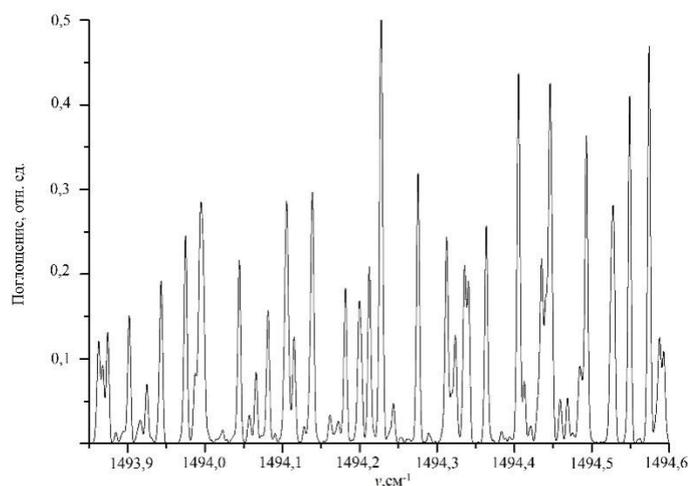


Рисунок 1.2 Часть спектра высокого разрешения молекулы C_2D_4

Каждая линия – это переход с вращательного уровня основного колебательного состояния на вращательный уровень возбужденного состояния.

2. Эффективный гамильтониан

2.1 Гамильтониан многоатомной молекулы

В нерелятивистском случае, гамильтониан многоатомной молекулы имеет следующий вид:

$$H = T_{\text{яд}} + T_{\text{эл}} + V \quad (1.1)$$

где $T_{\text{яд}}$ — оператор кинетической энергии ядер; $T_{\text{эл}}$ — оператор кинетической энергии электронов; V — потенциальная функция, включающая энергию электрического притяжения электронов к ядрам и энергию отталкивания электронов и ядер. Соответственно, они имеют следующий вид:

$$T_{\text{яд}} = \frac{-\hbar^2}{2} \sum_N \frac{1}{m_N} \left(\frac{\partial^2}{\partial x_N^2} + \frac{\partial^2}{\partial y_N^2} + \frac{\partial^2}{\partial z_N^2} \right)$$
$$T_{\text{эл}} = -\frac{\hbar^2}{2m_e} \sum_i \left(\frac{\partial^2}{\partial x_i^2} + \frac{\partial^2}{\partial y_i^2} + \frac{\partial^2}{\partial z_i^2} \right) \quad (1.2)$$

$$V = \sum_{\substack{i,j \\ i>j}} \frac{e^2}{r_{ij}} + \sum_{\substack{N,N' \\ N>N'}} \frac{z_N z_{N'}}{r_{NN'}} - \sum_{i,N} \frac{e z_N}{r_{iN}}$$

где m_N и m_e являются массой N -го ядра и электрона; z_N и e являются зарядом N -го ядра и электрона; $r_{ab} = [(x_a - x_b)^2 + (y_a - y_b)^2 + (z_a - z_b)^2]^{\frac{1}{2}}$ является расстоянием между частицами a и b в декартовой пространственно-фиксированной системе координат (ПФС).

Однако, построенный гамильтониан для решения уравнения Шредингера, очевидно, не годится. Таким образом, основная проблема теперь заключается в том, чтобы найти целесообразное координатное преобразование, с которым

станет возможным решить уравнение Шредингера.

Для того, чтобы найти удобную форму гамильтониана, построим сначала лагранжиан в классическом виде. Затем перейдем от лагранжиана к классическому гамильтониану. Далее, через использование преобразования координат и производной выполним переход от классического гамильтониана к квантовому гамильтониану.

Суть преобразования заключается в следующем. Пусть известен закон преобразования для самих координат и их производных:

$$x_n = f_n(q_1, q_2 \dots q_n, t)$$
$$\frac{\partial}{\partial x_n} = \Phi_n \left(q_1, q_2 \dots q_n, \frac{\partial}{\partial q_l} \right) \quad (1.3)$$

Если такое преобразование является неособенным, т.е. Якобиан преобразования $\frac{D(x_1, \dots, x_n)}{D(q_1, \dots, q_n)}$ не равен нулю, то всегда найдется единственное обратное преобразование. Следует отметить, что данное условие не выполняется для линейных молекул.

Таким образом, мы можем определить импульс p_{q_m} через обобщенные координаты q_m . Предположим, что координаты x_n и q_m являются некоторой функцией, зависящей от переменной t .

$$p_{q_m} = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_m}, p_{x_n} = \frac{\partial L}{\partial \dot{x}_n}$$
$$\dot{x}_n = \frac{dx_n}{dt}, \dot{q}_m = \frac{dq_m}{dt} \quad (1.4)$$

где L – Лагранжиан, в общем случае является полиномом переменных \dot{x}_n или \dot{q}_m :

$$L = \sum_{i,\dots,j} \alpha_{i\dots j}(x_n) \dot{x}_i \dots \dot{x}_j + \dots + \sum_i \alpha_i(x_n) \dot{x}_i + \alpha(x_n) \quad (1.5)$$

Таким образом, можно всегда преобразовать гамильтониан молекулы в новую систему координат с помощью вышеуказанной формулы, причём, в общем случае существует бесконечное число переходов к новым координатам. Однако, собственные значения должны быть одинаковыми при любом наборе координат. Основной вопрос заключается в том, как построить новый гамильтониан, причём такой, чтобы он был удобнее для решения уравнения Шредингера, чем старый.

2.2 Преобразование к нормальным координатам

Известно, что одним из наиболее удачных преобразований координат, описывающим различные виды движения в молекуле, является преобразование:

$$x_{N\alpha} = R_\alpha + \sum_{\beta} k_{\alpha\beta} \tilde{r}_{N\beta} \quad (1.6)$$

$$x_{i\alpha} = R_\alpha + \sum_{\beta} k_{\alpha\beta} \tilde{r}_{i\beta} \quad (1.7)$$

где $x_{N\alpha}$ и $x_{i\alpha}$ – компоненты векторов, которые описывают положения N -го ядра и i -го электрона в пространственной системе координат; R_α – компоненты вектора, описывающего положение центра масс; $k_{\alpha\beta}$ – матрицы направляющих косинусов углов при вращении молекулы, зависящие от углов Эйлера; $\tilde{r}_{i\beta}$ и $\tilde{r}_{N\beta}$ – компоненты векторов i -го электрона и N -го ядра в системе центра масс молекулы. Связь между ними определяется следующим образом:

$$\sum_N m_N \tilde{r}_{N\beta} + \sum_i m_e \tilde{r}_{i\beta} = 0 \quad (1.8)$$

где m_N и m_e являются массой N -го ядра и электрона. $\tilde{r}_{N\beta}$ в системе центра масс молекулы выражаются в виде:

$$\tilde{r}_{N\beta} = \tilde{r}_{N\beta}^0 + \sum_{\lambda} m_N^{-1/2} l_{N\beta\lambda} Q_{\lambda} \quad (1.9)$$

где $\tilde{r}_{N\beta}^0$ – это компонента N -го ядра в равновесном положении; Q_{λ} – обобщенные колебательные координаты. $\tilde{r}_{N\beta}^0$ и $l_{N\beta\lambda}$ в общем случае являются произвольными константами. Значения этих констант определяются с учетом следующих условий:

- $\tilde{r}_{N\beta}$ совпадает с $\tilde{r}_{N\beta}^0$, когда ядра находятся в положениях равновесия;
- оси молекулярной системы координат совпадают с главными осями инерции молекулы, когда ядра находятся в положениях равновесия;
- колебания являются нормальными;
- выполняются условия Экарта.

Учитывая независимость колебательных координат Q , эти требования математически могут быть записаны следующим образом:

$$\sum_{N\beta\gamma} \varepsilon_{\alpha\beta\gamma} m_N^{1/2} \tilde{r}_{N\beta}^0 l_{N\gamma\lambda} = 0 \quad (1.10)$$

$$\sum_{N\alpha} l_{N\alpha\lambda} l_{N\alpha\mu} = \delta_{\lambda\mu} \quad (1.11)$$

$$\left(\frac{\partial^2 V}{\partial Q_{\lambda} \partial Q_{\mu}} \right)_{Q=0} = 0, \lambda \neq \mu \quad (1.12)$$

$$\sum_N m_N \tilde{r}_{N\alpha}^0 \tilde{r}_{N\beta}^0 = 0, \alpha \neq \beta \quad (1.13)$$

$$\left(\frac{\partial V}{\partial Q_\lambda} \right)_{Q=0} = 0 \quad (1.14)$$

где $\varepsilon_{\alpha\beta\gamma}$ – полностью антисимметричный тензор т.е.

$$\varepsilon_{\alpha\beta\gamma} = \begin{cases} 1, & \text{если } \alpha, \beta, \gamma \text{-инклическая перестановка индексов } x, y, z; \\ 0, & \text{если } \alpha = \beta, \beta = \gamma \text{ или } \alpha = \gamma; \\ -1 & \text{в остальных случаях} \end{cases}$$

V – потенциальная функция молекулы. Нужно отметить, что V может быть разложена в ряд Тейлора, если потенциальная энергия мало изменяется при колебаниях молекулы, т.е. колебания являются малыми:

$$V(Q) = V(0) + \sum_\lambda \left(\frac{\partial V}{\partial Q_\lambda} \right)_{Q=0} Q_\lambda + \frac{1}{2} \sum_{\lambda, \mu} \left(\frac{\partial^2 V}{\partial Q_\lambda \partial Q_\mu} \right)_{Q=0} Q_\lambda Q_\mu + \dots \quad (1.15)$$

Это значит, наше условие выполняется только для **нормальных молекул**.

Подставим формулу (1.8) в условия (1.10) – (1.14) и получим

$$\sum_N m_N \tilde{r}_{N\beta}^0 + \sum_i m_e \tilde{r}_{i\beta} = 0 \quad (1.16)$$

$$\sum_N m_N^{1/2} l_{N\beta\lambda} = 0 \quad (1.17)$$

Для определения $3N$ параметров $\tilde{r}_{N\beta}^0$ используем $3N$ условий (1.13), (1.14), (1.16). А для $3N(3N-6)$ констант форм колебаний $l_{N\beta\lambda}$ используем $3N(3N-6)$ условий (1.6) – (1.12) и (1.17). Конкретный вид преобразования координат (1.6) и (1.7) задаётся при анализе исследуемой молекулы.

Однако, описание конфигурации молекулы с помощью формулы (1.8) обладает очевидным недостатком. Если мы хотим определить координаты центра масс всей молекулы в любой момент времени, необходимо знать конфигурацию ядер и расположение всех электронов. Учитывая сказанное выше, задача станет существенно более сложной.

Данная задача решается, если мы определим новые координаты так, чтобы $\tilde{r}_{N\beta}$ и $\tilde{r}_{i\beta}$ отсчитывались от центра масс не всей молекулы, а только системы ядер. В этом случае положение координатных осей зависит только от конфигурации ядер. Следовательно, они могут быть всегда легко определены. Формулы нового преобразования координат примут вид:

$$x_{N\alpha} = R_\alpha + \sum_{\beta} k_{\alpha\beta} \left(r_{N\beta}^0 + \sum_{\lambda} m_N^{-1/2} l_{N\beta\lambda} Q_\lambda - \frac{m_0}{M} \sum_i r_{i\beta} \right) \quad (1.18)$$

$$x_{i\alpha} = R_\alpha + \sum_{\beta} k_{\alpha\beta} \left(r_{i\beta} - \frac{m_e}{M} \sum_i r_{i\beta} \right) \quad (1.19)$$

где $r_{N\beta}$ и $r_{i\beta}$ – это положения ядер и электронов в системе центра масс ядер.

$$M = \sum_N m_N + \sum_i m_e \quad (1.20)$$

– полная масса молекулы. Уравнения для определения $\tilde{r}_{N\alpha}^0$ и $l_{N\alpha\lambda}$ в данном случае имеют такой же вид, как и (1.10) – (1.14) и (1.18), а условие (1.16) преобразуется так:

$$\sum_N m_N r_{N\beta}^0 = 0 \quad (1.21)$$

Зная теперь, как преобразуются координаты (1.18) (1.19), можно

определить закон преобразования операторов $P_{N\alpha} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x_{N\alpha}}$ и $P_{i\alpha} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x_{i\alpha}}$. Можно доказать, что выражения для операторов импульсов будут иметь следующий вид:

$$P_{i\alpha} = \frac{m_e}{M} P_\alpha + \sum_{\beta} k_{\alpha\beta} P_{i\beta} \quad (1.22)$$

$$P_{N\alpha} = \frac{m_N}{M} P_\alpha + \sum_{\beta} k_{\alpha\beta} \left\{ \sum_{\lambda} m_N^{\frac{1}{2}} l_{N\beta\lambda} P_\lambda - \sum_{\gamma\delta x} m_N \varepsilon_{\beta\gamma x} r_{N\gamma}^0 I''_{x\delta}{}^{-1} N_\delta - \frac{m_e}{M_N} \sum_j P_{j\beta} \right\} \quad (1.23)$$

Здесь M_N – масса всех ядер; $P_\alpha = -i\hbar \frac{\partial}{\partial R_\alpha}$, $P_\lambda = -i\hbar \frac{\partial}{\partial Q_\lambda}$; N_δ – операторы, имеющие вид:

$$N_\delta = J_\delta - G_\delta - L_\delta$$

где J_α – компоненты полного;

$$G_\delta = \sum_{\lambda\mu} \xi_{\lambda\mu}^\delta Q_\lambda P_\mu$$

$$\xi_{\lambda\mu}^\delta = \sum_{\beta\gamma} \varepsilon_{\alpha\beta\gamma} \sum_N l_{N\beta\lambda} l_{N\gamma\mu}$$

– колебательного и

$$L_\delta = \sum_{\beta\gamma} \varepsilon_{\delta\beta\gamma} \sum_i r_{i\beta} P_{i\gamma}$$

– электронного угловых моментов. А $I''_{x\delta}{}^{-1}$ — обратная матрица $I''_{\alpha\beta}$, которая определяется как

$$I''_{\alpha\beta} = I_{\alpha\beta}^0 + \frac{1}{2} \sum_{\lambda} a_{\lambda}^{\alpha\beta} Q_{\lambda}$$

где

$$I_{\alpha\beta}^0 = \delta_{\alpha\beta} \sum_N m_N \sum_{\gamma} (r_{N\gamma}^0)^2 - \sum_N m_N r_{N\alpha}^0 r_{N\beta}^0$$

– матрица равновесных моментов инерции, причём, при $\alpha \neq \beta$ выполняются соотношения $I_{\alpha\beta}^0 = 0$, если мы направим оси системы, расположенной в центре масс ядер вдоль главных осей инерции системы ядер;

$$a_{\lambda}^{\alpha\beta} = 2 \sum_{\gamma\delta x} \varepsilon_{\alpha\gamma x} \varepsilon_{\beta\delta x} \sum_N m_N^{1/2} r_{N\gamma}^0 l_{N\delta x}$$

В результате, мы получили достаточно сложное преобразование. Если все пункты выполнены довольно аккуратно, то гамильтониан в новых координатах будет выглядеть следующим образом:

$$H = \sum_{\alpha} \frac{P_{\alpha}^2}{2M} + \frac{1}{2m_e} \sum_{i\alpha} P_{i\alpha}^2 + \frac{1}{2M_N} \sum_{\alpha} \left(\sum_i P_{i\alpha} \right)^2 + \frac{1}{2} \sum_{\lambda} P_{\lambda}^2 + \frac{1}{2} \sum_{\alpha\beta} (J_{\alpha} - G_{\alpha} - L_{\alpha}) \mu_{\alpha\beta} (J_{\beta} - G_{\beta} - L_{\beta}) + V \quad (1.24)$$

здесь $\mu_{\alpha\beta}$ – элементы матрицы обратных моментов инерции, определяется через обратную матрицу

$$\mu_{\alpha\beta}^{-1} = I'_{\alpha\beta} = \sum_{\gamma\delta} I''_{\alpha\gamma} I_{\gamma\delta}^{0-1} I''_{\delta\beta} = I_{\alpha\beta}^0 + \sum_{\lambda} a_{\lambda}^{\alpha\beta} Q_{\lambda} + \frac{1}{4} \sum_{\gamma\delta} a_{\lambda}^{\alpha\beta} I_{\gamma\delta}^{0-1} a_{\mu}^{\delta\beta} Q_{\lambda} Q_{\mu}$$

Первое слагаемое в выражении (1.24) описывает поступательное движение молекулы как целого; второе является кинетической энергией электронов; третье вызвано различием центра масс ядер и всей молекулы и ответственно за массовый изотопический сдвиг; четвертое и пятое описывают

колебательное движение ядерного остова и его вращение в пространстве соответственно.

Выражение (1.24) определяет гамильтониан **многоатомной нелинейной нормальной молекулы** во “внутренних” координатах. С помощью более сложных преобразований (1.6) и (1.7), в принципе, можно получить выражение, учитывающее спиновые и магнитные эффекты

2.3 Эффективный гамильтониан

В первой главе мы построили точный гамильтониан, описывающий все виды взаимодействия. Но фактически, когда мы решаем уравнение Шредингера, чтобы определить колебательно-вращательные уровни энергии, обычно используется гамильтониан в следующем виде:

$$H_{к.в.} = \frac{1}{2} \sum_{\lambda} P_{\lambda}^2 + \frac{1}{2} \sum_{\alpha\beta} (J_{\alpha} - G_{\alpha}) \mu_{\alpha\beta} (J_{\beta} - G_{\beta}) + V(Q_{\lambda}) \quad (2.1)$$

где Q_{λ} – это обобщенные колебательные координаты, P_{λ} – это оператор импульса, зависящий от Q_{λ} , J_{α} – это оператор полного углового момента, $\mu_{\alpha\beta}$ – это матрица обратных моментов инерции, определяется в главе 1, $V(Q_{\lambda})$ – это потенциальная функция.

Если молекула является нормальной, то $V(Q_{\lambda})$ имеет следующий вид:

$$V(Q_{\lambda}) = \frac{1}{2} \sum_{\lambda} \omega_{\lambda}^2 Q_{\lambda}^2 + \frac{1}{6} \sum_{\lambda,\mu,\gamma} \left(\frac{\partial^3 V}{\partial Q_{\lambda} \partial Q_{\mu} \partial Q_{\gamma}} \right)_0 Q_{\lambda} Q_{\mu} Q_{\gamma} + \frac{1}{24} \sum_{\lambda,\mu,\gamma,\sigma} \left(\frac{\partial^4 V}{\partial Q_{\lambda} \partial Q_{\mu} \partial Q_{\gamma} \partial Q_{\sigma}} \right)_0 Q_{\lambda} Q_{\mu} Q_{\gamma} Q_{\sigma} \dots \quad (2.2)$$

Здесь первое слагаемое описывает гармоническую часть, оно с первым

слагаемым в выражении для $H_{к.в.}$ составляет гамильтониан гармонического осциллятора. Второе, третье и т.д. описывают ангармоническую часть.

Аналогично, разложим $\mu_{\alpha\beta}$ в ряд Тейлора:

$$\mu_{\alpha\beta} = \mu_{\alpha\beta}^e + \sum_{\lambda} \mu_{\alpha\beta}^{\lambda} Q_{\lambda} + \sum_{\lambda, \nu} \mu_{\alpha\beta}^{\lambda\nu} Q_{\lambda} Q_{\nu} + \dots \quad (2.3)$$

Следует заметить, что третье слагаемое в потенциальной функции имеет ту же степень малости, как и первое слагаемое $\mu_{\alpha\beta}$. Можем записать гамильтониан в следующем виде:

$$\begin{aligned} H_{к.в.} &= H_{\epsilon}(\chi^0) + h_1(\chi^1) + h_2(\chi^2) + \dots + h_n(\chi^n) \\ H_{\epsilon}(\chi^0) &= \frac{1}{2} \left(\sum_{\lambda} P_{\lambda}^2 + \sum_{\lambda} \omega_{\lambda}^2 Q_{\lambda}^2 \right) \\ h_1(\chi^1) &= \frac{1}{6} \sum_{\lambda\nu\mu} \left(\frac{\partial^3 V}{\partial Q_{\lambda} \partial Q_{\nu} \partial Q_{\mu}} \right)_0 Q_{\lambda} Q_{\nu} Q_{\mu} \\ h_2(\chi^2) &= \frac{1}{24} \sum_{\lambda\nu\mu\gamma} \left(\frac{\partial^4 V}{\partial Q_{\lambda} \partial Q_{\nu} \partial Q_{\mu} \partial Q_{\gamma}} \right)_0 Q_{\lambda} Q_{\nu} Q_{\mu} Q_{\gamma} + \frac{1}{2} \sum_{\alpha\beta} \mu_{\alpha\beta}^e (J_{\alpha} - G_{\alpha})(J_{\beta} - G_{\beta}) \end{aligned} \quad (2.4)$$

$h_n(\chi^n)$ - это порядок малости по отношению к $H_{\epsilon}(\chi^0)$. Поскольку второе и остальные слагаемые намного меньше предыдущего, мы считаем их как малую добавку, и используем теорию возмущений.

В традиционной теории возмущений искомые значения собственных энергий получаются в виде суммы различных комбинаций матричных элементов, значит, чисел. Но в данном случае, матричные элементы операторов возмущения на собственных функциях гармонических осцилляторов являются операторами. Причём, эти операторы обычно не коммутируют друг с другом, и как следствие, в гамильтониане появляются неэрмитовы вклады в оператор

энергии. По этим причинам, использование традиционной теории возмущения для исследования данной задачи невозможно.

Выход заключается в использовании метода эффективных операторов. Кратко суть этого метода можно выразить так: пусть решение уравнения Шредингера с исходным гамильтонианом невозможно (или представляет собой слишком сложную задачу). Тогда необходимо построить такой эрмитов оператор H' , который отвечал бы следующим требованиям:

- Решение уравнения Шредингера с этим оператором определяется в явном виде;
- Множество V' всех решений уравнения Шредингера с оператором H' совпадает с неким подмножеством V множества A всех решений уравнения Шредингера с исходным оператором H .

Удовлетворяющий этим требованиям оператор H' называют эффективным на подмножестве V гамильтонианом.

Для того, чтобы решить уравнение Шредингера с гамильтонианом (2.4), запишем его следующим образом:

$$H = H_0(Q) + h(Q, r) = H_0 + h_1 + h_2 + \dots \quad (2.5)$$

где Q – колебательные координаты, r – вращательные координаты.

Следует выполнить следующие пункты:

1. Взять полный ортогональный набор функций $|v\rangle$, представляющий собой собственные функции $H_0(Q)$, и полный набор функций $|r\rangle$. Таким образом,

их комбинация $|vr\rangle = |v\rangle|r\rangle$ удовлетворяет условиям полноты и ортонормированности. Далее построим матричный элемент $\langle \tilde{v}\tilde{r} | H | vr \rangle$.

2. Диагонализировать матрицу $\langle \tilde{v}\tilde{r} | H | vr \rangle$, проделав произвольное унитарное преобразование U

$$H' = U^+ H U$$

При этом, те значения, которые находятся на диагонали, являются собственными энергиями оператора H . Соответственно, волновые функции оператора H' будут задаваться соотношениями:

$$|\Psi_\alpha\rangle = \sum_{n,r} U_{nr}^\alpha |vr\rangle$$

где U_{nr}^α – элементы унитарной матрицы U .

Однако, применение описанного метода на практике оказывается невозможным, по той причине, что функции $|v\rangle$ имеют бесконечную размерность, как следствие, матрицы операторов H, H' являются бесконечномерными. Поэтому процедура диагонализации матрицы гамильтониана непосредственно в таком виде, оказывается невозможной.

Заметим, при построении и диагонализации матрицы $\langle \tilde{v}\tilde{r} | H | vr \rangle$ нужно сначала построить операторную матрицу $\langle \tilde{v} | H | v \rangle$, зависящую от вращательных координат Q . А потом построить и диагонализировать числовую матрицу $\langle \tilde{r} | \langle \tilde{v} | H | v \rangle | r \rangle$.

Существует другой путь, а именно, определить какую-нибудь унитарную матрицу G , так чтобы вместо оператора H построить оператор \tilde{H} :

$$H = G^+ \tilde{H} G$$

Поскольку матрица G произвольная, есть смысл выбрать ее в таком виде, чтобы некоторые элементы матрицы $\langle \alpha | H | \beta \rangle$ обратились в нуль. Разбиваем всё множество матричных элементов на четыре совокупности $\langle \alpha^0 | H | \beta^0 \rangle, \langle \alpha^0 | H | \beta^1 \rangle, \langle \alpha^1 | H | \beta^0 \rangle, \langle \alpha^1 | H | \beta^1 \rangle$. Берём матрицу G , так что $\langle \alpha^0 | H | \beta^1 \rangle$ и $\langle \alpha^1 | H | \beta^0 \rangle$ обратились в нуль.

$$\langle \alpha | H | \beta \rangle = \begin{pmatrix} H_{\alpha\phi\phi} & 0 & 0 & \dots \\ 0 & x & x & \dots \\ 0 & x & x & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots \end{pmatrix}$$

Т.е. удовлетворяются условия:

$$\begin{aligned} \langle \alpha^0 | H | \beta^1 \rangle &= \langle \alpha^0 | G^+ H G | \beta^1 \rangle = 0 \\ \langle \alpha^1 | H | \beta^0 \rangle &= \langle \alpha^1 | G^+ H G | \beta^0 \rangle = 0 \end{aligned} \quad (2.5)$$

Эти условия рассматриваем как систему уравнений. Для того, чтобы ее решить, выбираем оператор G в следующем виде:

$$\begin{aligned} G &= \exp\left(i \sum_n S_n(\chi^n)\right) \\ G^+ &= \exp\left(-i \sum_n S_n(\chi^n)\right) \end{aligned} \quad (2.6)$$

где $S_n(\chi^n)$ – малые Эрмитовы операторы порядка χ^n .

Разложим унитарную матрицу G в ряд Тейлора и подставим её в верхнюю формулу (2.8). Получим

$$\begin{aligned}
\langle \alpha^0 | H | \beta' \rangle &= \langle \alpha^0 | G^+ H G | \beta' \rangle \\
&= \langle \alpha^0 | \exp\left(-i \sum_n S_n(\chi^n)\right) H \exp\left(i \sum_n S_n(\chi^n)\right) | \beta' \rangle \\
&= \langle \alpha^0 | \left\{ 1 - i \sum_{n=1}^{\infty} S_n(\chi^n) + \frac{1}{2} (-i)^2 \left(\sum_{n=1}^{\infty} S_n(\chi^n) \right)^2 + \dots \right\} \{ H_0 + h_1 + h_2 + \dots \} \times (2.7) \\
&\times \left\{ 1 + i \sum_{n=1}^{\infty} S_n(\chi^n) + \frac{1}{2} (-i)^2 \left(\sum_{n=1}^{\infty} S_n(\chi^n) \right)^2 + \dots \right\} | \beta' \rangle = 0
\end{aligned}$$

Разделим по порядкам степени малости, получим систему уравнений, которым G должна удовлетворять:

$$\begin{aligned}
\langle \alpha^0 | H_0 | \beta' \rangle &= 0 \\
\langle \alpha^0 | h_1 - i S_1 H_0 + H_0 i S_1 | \beta' \rangle &= 0 \\
\langle \alpha^0 | h_2 + h_1 i S_1 - i S_1 h_1 + H_0 i S_2 - i S_2 H_0 - \frac{1}{2} S_1^2 H_0 - \frac{1}{2} H_0 S_1^2 - i S_1 H_0 i S_1 | \beta' \rangle &= 0 \\
\dots &
\end{aligned} \tag{2.8}$$

Когда $\alpha^0 = 1$ первое уравнение представляет собой тождество. Из второго следует условие, которому удовлетворяет малый оператор S_1 :

$$\langle 1 | i S_1 | \beta' \rangle = \frac{\langle 1 | h_1 | \beta' \rangle}{E_{\beta'} - E_1} \tag{2.9}$$

Из третьего:

$$\langle 1 | i S_2 | \beta' \rangle = -\frac{1}{E_{\beta'} - E_1} \left\{ \sum_{\beta' \neq 1} \frac{\langle 1 | h_1 | \beta' \rangle \langle \beta' | h_1 | \beta' \rangle}{E_{\beta'} - E_1} - \frac{\langle 1 | h_1 | 1 \rangle \langle 1 | h_1 | \beta' \rangle}{E_{\beta'} - E_1} \right\} \tag{2.10}$$

Если теперь построить числовую матрицу, то она будет иметь тот же вид, как и матрица оператора H' . Собственные значения оператора H , а, следовательно, и оператора H , можно определить за счёт диагонализации полученной матрицы H . Наиболее важно, что подматрица $\langle i | H_{эфф} | j \rangle$

представляет собой конечномерную по индексам $|\alpha\rangle$ и $|\beta\rangle$. В этом случае, если нас интересуют только вращательные уровни энергии какого-нибудь колебательного состояния, порождаемые состояниями $|\alpha_0\rangle$, нет никакой необходимости диагонализировать всю матрицу $\langle i|\langle\alpha|H|\beta\rangle|j\rangle$, достаточно ограничиться рассмотрением её подматрицы $\langle i|H_{эфф}|j\rangle$, где $H_{эфф} = \langle\alpha^0|H|\beta^0\rangle$.

Оператор $H'_{эфф}$ называют эффективным оператором системы N состояний $|\alpha_1^0\rangle, |\alpha_2^0\rangle, \dots, |\alpha_n^0\rangle$. Интересен случай, когда эффективный оператор вырождается в матрицу размера 1×1 . Такой случай является наиболее простым, оператор $H^{[1]}$ выглядит следующим образом:

$$H^{[1]} = E_1 + \langle 1|h|1\rangle + \sum_{v \neq 1} \frac{\langle 1|h|v\rangle \langle v|h|1\rangle}{E_1 - E_v} + \sum_{v \neq 1, r \neq 1} \frac{\langle 1|h|v\rangle \langle v|h|r\rangle \langle r|h|1\rangle}{(E_1 - E_v)(E_1 - E_r)} - \frac{1}{2} \sum_{v \neq 1} \frac{\langle 1|h|1\rangle \langle 1|h|v\rangle \langle v|h|1\rangle + \langle 1|h|v\rangle \langle v|h|1\rangle \langle 1|h|1\rangle}{(E_1 - E_v)^2} + \dots \quad (2.11)$$

Отметим, что оператор $H'_{эфф}$ определяется с точностью до унитарного преобразования. Можно показать, что если мы разделим оператор гамильтониана по степени оператора углового момента J , эффективный гамильтониан будет иметь следующий вид:

$$H = E + \left(A - \frac{1}{2}(B + C) \right) J_z^2 + \frac{1}{2}(B + C) J^2 + \frac{1}{2}(B + C) J_{xy}^2 - \Delta_K J_z^4 - \Delta_{JK} J_z^2 J^2 - \Delta_J J^4 + H_K J_z^6 + H_{KJ} J_z^4 J^2 + H_{JK} J_z^2 J^4 + H_J J^6 + h_k [J_{xy}^2, J_z^4] - \delta_K [J_z^2, J_{xy}^2] - 2\delta_J J^2 J_{xy}^2 + \dots + L_K J_z^8 + L_{KKJ} J_z^6 J^2 + L_{KJ} J_z^4 J^4 + \dots \quad (2.12)$$

где E – центр полосы; A, B, C – вращательные постоянные, $\Delta_K, \Delta_{JK}, \Delta_J$ – параметры центробежного искажения, и т.д. Этот оператор, называемый гамильтонианом Уотсона, широко используется до сих пор в колебательно-вращательной спектроскопии.

3. Вращательные операторы и формализм неприводимых тензорных операторов

3.1 Эффективный гамильтониан в общем случае

В предыдущей главе была рассмотрена процедура построения эффективного гамильтониана нерезонирующих состояний при помощи операторной теории возмущения. Эффективный гамильтониан в таком случае имеет простой вид:

$$H^{eff} = \sum_{v,v'} |v\rangle \langle v'| H^{v,v'} \quad (3.1)$$

Но в общем случае, именно для молекул высокой симметрии эффективный гамильтониан представляет в тензорном формализме:

$$H^{eff} = \sum_{vC_i v' C_j} \sum_{n\Gamma} \sum_{\Omega K} \left[\left(|\varphi_v^{(C_i)}\rangle \otimes \langle \varphi_{v'}^{(C_j)}| \right)^{n\Gamma} \otimes H_{vC_i v' C_j}^{\Omega(K, n\Gamma)} \right]^{A_1} \quad (3.2)$$

где $|\varphi_v^{(C_i)}\rangle$ – колебательные функции системы резонирующих состояний, а $H_{vC_i v' C_j}^{\Omega(K, n\Gamma)}$ – симметризованный вращательный оператор, он может содержать произвольно большие степени Ω вращательных операторов J_α , и в общем случае имеет вид:

$$H_{vC_i v' C_j}^{\Omega(K, n\Gamma)} = [\Gamma]^{-\frac{1}{2}} X_{vC_i v' C_j}^{\Omega(K, n\Gamma)} R^{\Omega(K, n\Gamma)} \quad (3.3)$$

где $[\Gamma]^{-1/2}$ произвольный коэффициент, а $X_{vC_i v' C_j}^{\Omega(K, n\Gamma)}$ – функции от приведенных матричных колебательных операторов V^Γ , её можно определить чисто теоретически или исходя из экспериментальных данных при интерпретации спектров. А $R^{\Omega(K, n\Gamma)}$ – приведенные вращательные операторы на точечную группу молекулы неприводимых представлений Γ .

Поставленная цель данной работы заключается в получении приведенных вращательных операторов высокого ранга. Для того, чтобы решить эту проблему, необходимая теоретическая основа формализма неприводимых тензорных операторов будет обсуждена в следующем параграфе.

3.2 Связывание неприводимых тензорных величин

Каждой паре векторов из линейных пространств $x \in A, y \in B$ сопоставим объект $x \otimes y$, называемый тензорным произведением векторов x и y , после чего рассмотрим всевозможные конечные линейные комбинации:

$$\sum_{n,m}^{p,q} C_{n,m} (x_n \otimes y_m), \quad x_n \in A, \quad y_m \in B, \quad C_{n,m} \in \mathbb{C} \quad (3.4)$$

Множество таких формальных линейных комбинаций образует линейное пространство, которое называется тензорным произведением линейных пространств A и B и обозначается $A \otimes B$.

В теории углового момента такие линейные пространства являются Гильбертовыми, которые описывают отдельно угловые моменты J_1 и J_2 двух объектов на базисах $|Jm\rangle$, преобразующихся по неприводимому представлению группы $SO(3)$, т.е.

$$R(\alpha, \beta, \gamma) |Jm\rangle = \sum_{m'} D_{m'm}^J(\alpha, \beta, \gamma) |Jm'\rangle \quad (3.5)$$

где $R(\alpha, \beta, \gamma)$ – любая операция поворота, зависящая от углов Эйлера α, β и γ . $D_{m'm}^J(\alpha, \beta, \gamma)$ – D функция Вигнера, являющиеся неприводимыми представлениями группы $SO(3)$. Они имеют вид:

$$D_{m'm}^J(\alpha, \beta, \gamma) = \sum_n (-1)^n \frac{\sqrt{(J+m)!(J-m)!(J-m')!(J+m')!}}{(J+m'-n)!(J-m+n)!n!(n+m-m')!} e^{-im'\alpha} \\ \times \left(\cos \frac{\beta}{2}\right)^{2J+m'-m-2n} \left(\sin \frac{\beta}{2}\right)^{2n+m-m'} e^{-im\gamma} \quad (3.6)$$

С другой стороны, нам удобнее описать эти два вращательных объекта через полной угловой момент $\hat{J}^2 = (\hat{J}_1 + \hat{J}_2)^2$ и \hat{J}_z в пространстве на базисах $|JmJ_1J_2\rangle$, так как они коммутируют с \hat{J}_1^2 и \hat{J}_2^2 и образуют полный набор наблюдаемых (другой ПНН $-\hat{J}_1^2, \hat{J}_2^2, \hat{J}_{1z}, \hat{J}_{2z}$).

Не трудно заметить, что пространство на базисах $|JmJ_1J_2\rangle$ является пространством тензорного произведения двух пространств на базисах $|J_1m_1\rangle$ и $|J_2m_2\rangle$. Причём, существует одно унитарное преобразование между этими базисами:

$$|JmJ_1J_2\rangle = \sum_{m_1, m_2} C_{J_1m_1J_2m_2}^{Jm} |J_1m_1\rangle \otimes |J_2m_2\rangle \quad (3.7)$$

где $C_{J_1m_1J_2m_2}^{Jm}$ называются коэффициентами Клебша-Гордана, их явный вид в форме Вигнера записывается таким образом:

$$C_{J_1m_1J_2m_2}^{Jm} \\ = \delta(m, m_1 + m_2) \sqrt{\frac{(2J+1)(J+J_1-J_2)!(J-J_1+J_2)!(J_1+J_2-J)!(J+m)!(J-m)!}{(J+J_1+J_2+1)!(J_1+m_1)!(J_1-m_1)!(J_2+m_2)!(J_2-m_2)!}} \\ \times \sum_n (-1)^{n+J_2+m_2} \frac{(J+J_2+m_1-n)!(J_1-m_1+n)!}{(J+J_2-J_1-n)!(J+m-n)!n!(J_1-J_2-m+n)!} \quad (3.8)$$

С точки зрения классической механики можем сказать, что угловые моменты J_1 и J_2 “связываются” друг с другом по коэффициенту Клебша-Гордана.

Аналогично можем ввести все эти определения над множеством операторов. По аналогии с (3.4) имеем определение тензорных операторов: тензорным оператором называется совокупность операторов, линейно преобразующихся друг через друга при линейных преобразованиях пространства, в котором действуют эти операторы. А неприводимым тензорным оператором называется тензорный оператор, преобразующийся по формуле:

$$R^{-1}(Q)T_q^{(k)}R(Q) = \sum_{q'} T_{q'}^{(k)} D_{q'q}^k(Q) \quad (3.9)$$

Соответственно, связывание двух неприводимых тензорных операторов будет выполняться по формуле:

$$R_{m+m'}^{\Omega+\Omega'(J)} = \sum_{m,m'} C_{kmk'm'}^{JM} R_m^{\Omega(K)} R_{m'}^{\Omega'(K)} \quad (3.10)$$

Полученные вращательные операторы на группе SO(3) представлены в приложении А.

3.3 Редукционная матрица G и ее аналитический вид

Неприводимые представления группы G при рассмотрении на элементах её подгруппы G' распадаются на прямую сумму неприводимых представлений подгруппы G'. Такой процесс называется редукцией или приведением группы G на её подгруппу. Наиболее важной молекулярной спектроскопической задачей является редукция группы SO(3) на точечную группу.

По теории характеров конечномерной компактной группы не трудно посчитать коэффициент разложения неприводимых представлений группы SO(3)

при фиксированном J на неприводимые представления $D(\Gamma)$ точечной группы. Для уточнения такого процесса рассмотрим унитарное преобразование:

$$|J, n\Gamma\alpha\rangle = \sum_m \langle Jm|n\Gamma\alpha\rangle |Jm\rangle$$

$${}^J G_{n\Gamma\alpha}^m = \langle Jm|n\Gamma\alpha\rangle \quad (3.11)$$

где $|J, n\Gamma\alpha\rangle$ – числовые коэффициенты линейной комбинации, которые отвечают за унитарное преобразование между набором базисов $|Jm\rangle$ и $|J, n\Gamma\alpha\rangle$. Очевидно, что число базисов $|J, n\Gamma\alpha\rangle$ должно совпадать с числом базисов $|Jm\rangle$, и равно $2J+1$. А $|J, n\Gamma\alpha\rangle$ – функции, преобразующиеся по строке α неприводимого представления точечной $D^{(\Gamma)}$ группы G , n – некоторая нумерация разных функций $|J, n\Gamma\alpha\rangle$, которые строятся из функций $|Jm\rangle$ и преобразуются по одной и той же строке α одного и того же неприводимого представления $D^{(\Gamma)}$ группы G , причём её максимальное значение должно совпадать с коэффициентом разложения n_c . $|J, n\Gamma\alpha\rangle$ называется сферическим тензором ранга J , редуцированным относительно подгруппы G' .

Очевидно, G -матрица должна удовлетворять следующим условиям:

$$\langle n\Gamma\alpha|Jm\rangle = \langle Jm|n\Gamma\alpha\rangle^*$$

$$\sum_{n\Gamma\alpha} {}^J G_{n\Gamma\alpha}^m \cdot {}^J G_{n\Gamma\alpha}^{m'} = \delta_{m,m'}$$

$$\sum_{n\Gamma\alpha} {}^J G_{n\Gamma\alpha}^m \cdot {}^J G_{n'\Gamma'\alpha'}^{m'} = \delta_{n,n'} \delta_{\Gamma,\Gamma'} \delta_{\alpha,\alpha'} \quad (3.12)$$

Более того, в некоторых случаях нам необходимо рассмотреть разложение группы $O(3)$ на точечную группу 2 рода. Тогда требуем, чтобы выполнялось:

$${}^J G_{n\Gamma\alpha}^m{}^* = (-1)^m {}^J G_{n\Gamma\alpha}^{-m} \quad (3.13)$$

Метод получения матрицы редукции в аналитическом виде на точечную группу, обладающую высокой симметрией довольно сложный, поэтому мы приводим результаты из статьи [20], в которой автор впервые представил матрицу редукции на точечную группу T_d в аналитическом виде в 1985 году.

$$\begin{aligned} {}^J G_{kF_\lambda z}^m &= \frac{\exp(i\Phi_J)}{2\sqrt{2}} \frac{[1 - (-1)^J \delta_{k,0}]^J}{(1 + \delta_{k,0})^{3/2}} [1 - (-1)^{\lambda+k/2}] [\delta_{k,m} - (-1)^J \delta_{-k,m}], \\ {}^J G_{kF_\lambda y}^m &= \frac{\exp(i\Phi_J)}{2\sqrt{2}} \frac{[1 - (-1)^J \delta_{k,0}]^J}{(1 + \delta_{k,0})^{3/2}} [1 - (-1)^{\lambda+k/2}] (-i)^m [1 - (-1)^m] d_{km}^J \left(\frac{\pi}{2}\right), \\ {}^J G_{kF_\lambda x}^m &= (-1)^{\lambda+1} \frac{\exp(i\Phi_J)}{2\sqrt{2}} \frac{[1 - (-1)^J \delta_{k,0}]^J}{(1 + \delta_{k,0})^{3/2}} [1 - (-1)^{\lambda+k/2}] [1 - (-1)^m] d_{km}^J \left(\frac{\pi}{2}\right), \\ {}^J G_{kA_\lambda}^m &= \sum_{n=L}^k \alpha_{kn}^{JA_\lambda} \frac{\exp(i\chi_J)}{2\sqrt{6}} [1 - (-1)^{\lambda+n/2}] \left\{ [1 + (-1)^m] [1 - (-1)^{\lambda+\frac{m}{2}}] d_{nm}^J \left(\frac{\pi}{2}\right) - (-1)^\lambda \delta_{n,m} - (-1)^{\lambda+J} \delta_{-n,m} \right\}, \\ {}^J G_{kE_\lambda}^m &= (-1)^{\lambda+1} \sum_{n=L}^k \alpha_{kn}^{JE} \frac{\exp(i\chi_J)}{4(1 + 2\delta_{\lambda,1})^{1/2}} [1 + (-1)^{n/2}] \left\{ [1 + (-1)^m] [1 - (-1)^{\lambda+\frac{m}{2}}] d_{nm}^J \left(\frac{\pi}{2}\right) - 2\delta_{\lambda,1} [\delta_{n,m} + (-1)^{\lambda+J} \delta_{-n,m}] \right\} \\ d_{km}^J \left(\frac{\pi}{2}\right) &= (-1)^{k+m} \frac{\sqrt{(J+k)!(J-k)!}}{2^J} \sum_r (-1)^r \frac{\sqrt{(J+m)!(J-m)!}}{r!(J+m-r)!(r+k-m)!(J-r-k)!}; \\ \alpha_{kk}^{J\Gamma} &= \left\{ 1 + \delta_{k,0} (-1)^J + [4(-1)^\Gamma - 6\delta_{\Gamma,E}] d_{kk}^J \left(\frac{\pi}{2}\right) - \sum_{l=L}^{k-4} \sum_{\substack{i \leq l \\ j \leq l}} \alpha_{li}^{J\Gamma} \alpha_{lj}^{J\Gamma} [4(-1)^\Gamma - 6\delta_{\Gamma,E}] d_{ki}^J \left(\frac{\pi}{2}\right) d_{kj}^J \left(\frac{\pi}{2}\right) \right\}^{-1/2}, \\ \alpha_{kn}^{J\Gamma} &= -\alpha_{kk}^{J\Gamma} \sum_{i \geq n} \sum_{j \leq i}^{k-4} \alpha_{ij}^{J\Gamma} \alpha_{in}^{J\Gamma} [4(-1)^\Gamma - 6\delta_{\Gamma,E}] d_{kj}^J \left(\frac{\pi}{2}\right); \end{aligned} \quad (3.14)$$

Где $\lambda=1, 2$, фазовые множители $\exp(i\Phi_J)$ и $\exp(i\chi_J)$ в общем случае произвольные, мы их выбираем так, чтобы выполнялось $\exp(i\Phi_J) = -i \exp(i\chi_J) = 1$ для нечетных J и $\exp(i\Phi_J) = i \exp(i\chi_J) = i$ для четных J ; $k=0, 2, 4, \dots, J$ или $J-1$; $L=0$ для $\Gamma=A_1$ или E , $L=2$ для $\Gamma=A_2$; $n=L, L+4, L+8, \dots, k$; В последних 2 уравнениях все числа k, n, i, j, l кратны 4, когда $\Gamma=A_1$ или E , и не кратны 4, но четные, когда $\Gamma=A_2$.

Вышесказанное обсуждение для базисных функций тоже работает, в том числе, когда считаем операторы, как базисы пространства. В этом случае имеем:

$$R_{\sigma}^{\Omega(K,n\Gamma)} = \sum_m^{(K)} G_{n\Gamma\alpha}^m R_m^{\Omega(K)} \quad (3.15)$$

На основе этой формулы можем рассчитать в принципе все приведенные операторы на группу T_d . Часть полученных результатов представлена в следующем параграфе.

3.4 Приведенные вращательные операторы

Преимущество использования сферических тензорных операторов заключается в том, что в отличие от декартовых тензорных операторов, сферические тензорные операторы всегда могут разделяться по своему рангу. Приводим декартовый тензор второго ранга как пример, который имеет 9 компонентов. Мы можем считать, что эти 9 компонентов образует девятимерное пространство представления и всегда можем найти такое унитарное преобразование, так чтобы разделить их как прямую сумму тензоров 0, 1, 2 ранга, которые отдельно преобразуются по неприводимому представлению $D^{(0)}$, $D^{(1)}$ и $D^{(2)}$ группы $SO(3)$.

Когда степень тензорных операторов Ω не равна K , не трудно посчитать операторы по формуле:

$$R_m^{\Omega(K)} = \left(-\frac{1}{\sqrt{3}} \sum_{\alpha} J_{\alpha}^2 \right)^{\frac{\Omega-K}{2}} R_m^{K(K)}, \text{ для } \Omega-K > 0 \text{ (четных)}$$

$$R_m^{\Omega(K)} = -\frac{1}{\sqrt{2}} \left(-\frac{1}{\sqrt{3}} \sum_{\alpha} J_{\alpha}^2 \right)^{\frac{\Omega-K-1}{2}} R_m^{K(K)}, \text{ для } \Omega-K > 0 \text{ (нечетных)} \quad (3.16)$$

Таким образом, все сложности заключаются в расчете операторов для $\Omega=K$.

Так как приведенные вращательные операторы имеют довольно громоздкий вид, в данной работе мы лишь приводим часть полученных вращательных операторов низкого ранга, остальные представлены в приложении В.

$$R_x^{1(1,F1)} = -\frac{J_-}{\sqrt{2}} - \frac{J_+}{\sqrt{2}}$$

$$R_y^{1(1,F1)} = -\frac{iJ_-}{\sqrt{2}} + \frac{iJ_+}{\sqrt{2}}$$

$$R_z^{1(1,F1)} = J_0$$

$$R_1^{2(2,0E)} = \frac{J^2 - 3J_0^2}{\sqrt{6}}$$

$$R_2^{2(2,0E)} = -\frac{J_-^2}{\sqrt{2}} - \frac{J_+^2}{\sqrt{2}}$$

$$R_x^{2(2,2F2)} = iJ_-J_0 - iJ_+J_0$$

$$R_y^{2(2,2F2)} = J_-J_0 + J_+J_0$$

$$R_z^{2(2,2F2)} = -\frac{iJ_-^2}{\sqrt{2}} + \frac{iJ_+^2}{\sqrt{2}}$$

$$R_x^{3(3,0F1)} = -\frac{3J_-}{16\sqrt{5}} - \frac{3J_-^2J_0}{8\sqrt{5}} - \frac{1}{4}\sqrt{5}J_-^3 - \frac{3J_+}{16\sqrt{5}} - \frac{3J_+^2J_0}{8\sqrt{5}} - \frac{1}{4}\sqrt{5}J_+^3 + \frac{3}{8}\sqrt{5}J_-J_0^2 + \frac{3}{8}\sqrt{5}J_+J_0^2$$

$$R_y^{3(3,0F1)} = -\frac{3iJ_-}{16\sqrt{5}} - \frac{3iJ_-^2}{8\sqrt{5}} + \frac{1}{4}i\sqrt{5}J_-^3 + \frac{3iJ_+}{16\sqrt{5}} + \frac{3iJ_+^2}{8\sqrt{5}} - \frac{1}{4}i\sqrt{5}J_+^3 + \frac{3}{8}i\sqrt{5}J_-J_0^2 - \frac{3}{8}i\sqrt{5}J_+J_0^2$$

$$R_z^{3(3,0F1)} = \frac{J_0}{\sqrt{10}} - \frac{3J_0^2}{\sqrt{10}} + \sqrt{\frac{5}{2}}J_0^3$$

$$R^{3(3,2A2)} = i\sqrt{\frac{3}{2}}J_-^2J_0 - i\sqrt{\frac{3}{2}}J_+^2J_0$$

$$R_x^{3(3,2F2)} = -\frac{1}{16}\sqrt{3}J_- - \frac{1}{8}\sqrt{3}J_-^2J_0 + \frac{1}{4}\sqrt{3}J_-^3 - \frac{\sqrt{3}J_+}{16} - \frac{1}{8}\sqrt{3}J_+^2J_0 + \frac{1}{4}\sqrt{3}J_+^3 + \frac{5}{8}\sqrt{3}J_-J_0^2 + \frac{5}{8}\sqrt{3}J_+J_0^2$$

$$R_y^{3(3,2F2)} = \frac{1}{16}i\sqrt{3}J_- + \frac{1}{8}i\sqrt{3}J_-^2J_0 + \frac{1}{4}i\sqrt{3}J_-^3 - \frac{1}{16}i\sqrt{3}J_+ - \frac{1}{8}i\sqrt{3}J_+^2J_0 - \frac{1}{4}i\sqrt{3}J_+^3 - \frac{5}{8}i\sqrt{3}J_-J_0^2 + \frac{5}{8}i\sqrt{3}J_+J_0^2$$

$$R_z^{3(3,2F2)} = \sqrt{\frac{3}{2}}J_-^2J_0 + \sqrt{\frac{3}{2}}J_+^2J_0$$

$$R^{4(4,0A1)} = -\frac{1}{2}\sqrt{\frac{3}{10}}J^2 + \frac{1}{4}\sqrt{\frac{3}{10}}J^4 + \frac{1}{2}\sqrt{\frac{5}{6}}J_-^4 + \frac{1}{2}\sqrt{\frac{5}{6}}J_+^4 + \frac{5}{4}\sqrt{\frac{5}{6}}J_0^2 - \frac{1}{2}\sqrt{\frac{15}{2}}J^2J_0^2 + \frac{7}{4}\sqrt{\frac{5}{6}}J_0^4$$

$$\begin{aligned}
R_1^{4(4,0E)} &= \frac{1}{2} \sqrt{\frac{3}{14}} J^2 - \frac{1}{4} \sqrt{\frac{3}{14}} J^4 + \frac{1}{2} \sqrt{\frac{7}{6}} J_-^4 + \frac{1}{2} \sqrt{\frac{7}{6}} J_+^4 - \frac{25J_0^2}{4\sqrt{42}} + \frac{5}{2} \sqrt{\frac{3}{14}} J^2 J_0^2 \\
&\quad - \frac{5}{4} \sqrt{\frac{7}{6}} J_0^4 \\
R_2^{4(4,0E)} &= -\frac{5J_-^2}{\sqrt{14}} - \frac{J^2 J_-^2}{\sqrt{14}} - \frac{5J_+^2}{\sqrt{14}} - \frac{J^2 J_+^2}{\sqrt{14}} + \sqrt{\frac{7}{2}} J_-^2 J_0^2 + \sqrt{\frac{7}{2}} J_+^2 J_0^2 \\
R_x^{4(4,2F2)} &= \frac{ij_- J_0}{4\sqrt{7}} + \frac{3ij_-^2 J_- J_0}{4\sqrt{7}} + \frac{1}{2} i\sqrt{7} J_-^3 J_0 - \frac{ij_+ J_0}{4\sqrt{7}} - \frac{3ij_+^2 J_+ J_0}{4\sqrt{7}} - \frac{1}{2} i\sqrt{7} J_+^3 J_0 \\
&\quad - \frac{1}{4} i\sqrt{7} J_- J_0^3 + \frac{1}{4} i\sqrt{7} J_+ J_0^3 \\
R_y^{4(4,2F2)} &= \frac{J_- J_0}{4\sqrt{7}} + \frac{3J_-^2 J_- J_0}{4\sqrt{7}} - \frac{1}{2} \sqrt{7} J_-^3 J_0 + \frac{J_+ J_0}{4\sqrt{7}} + \frac{3J_+^2 J_+ J_0}{4\sqrt{7}} - \frac{1}{2} \sqrt{7} J_+^3 J_0 - \frac{1}{4} \sqrt{7} J_- J_0^3 \\
&\quad - \frac{1}{4} \sqrt{7} J_+ J_0^3 \\
R_z^{4(4,2F2)} &= \frac{5ij_-^2}{\sqrt{14}} + \frac{ij_-^2 J_-^2}{\sqrt{14}} - \frac{5ij_+^2}{\sqrt{14}} - \frac{ij_+^2 J_+^2}{\sqrt{14}} - i \sqrt{\frac{7}{2}} J_-^2 J_0^2 + i \sqrt{\frac{7}{2}} J_+^2 J_0^2 \\
R_x^{4(4,4F1)} &= \frac{1}{4} ij_- J_0 + \frac{3}{4} ij_-^2 J_- J_0 - \frac{1}{2} ij_-^3 J_0 - \frac{1}{4} ij_+ J_0 - \frac{3}{4} ij_+^2 J_+ J_0 + \frac{1}{2} ij_+^3 J_0 - \frac{7}{4} ij_- J_0^3 \\
&\quad + \frac{7}{4} ij_+ J_0^3 \\
R_y^{4(4,4F1)} &= -\frac{1}{4} J_- J_0 - \frac{3}{4} J_-^2 J_- J_0 - \frac{1}{2} J_-^3 J_0 - \frac{J_+ J_0}{4} - \frac{3}{4} J_+^2 J_+ J_0 - \frac{1}{2} J_+^3 J_0 + \frac{7}{4} J_- J_0^3 + \frac{7}{4} J_+ J_0^3 \\
R_z^{4(4,4F1)} &= -\frac{ij_-^4}{\sqrt{2}} + \frac{ij_+^4}{\sqrt{2}} \tag{3.17}
\end{aligned}$$

3.5 Теорема Вигнера-Эккарта

Преимущество использования формализма неприводимых тензорных операторов для описания квантовых явлений во многом определяется одной из основных теорем формализма – теоремой Вигнера-Экарта. Согласно этой теореме, любой матричный элемент неприводимых тензорных операторов, соответствующих физическим величинам, можно разделить на две части: коэффициент Клебша-Гордана, который описывает симметрию данной системы и так называемый приведенный матричный элемент, зависящий от конкретного вида базиса и операторов:

$$\langle Jvm | T_k^{(q)} | J'v'm' \rangle = (2J + 1)^{-\frac{1}{2}} C_{qk J'm'}^{Jm} \langle Jv || T^{(q)} || J'v' \rangle \quad (3.18)$$

Для тензоров типа $A^{(J,mC)}$ выполняется соответственно:

$$\langle \varphi_{v,\sigma}^{(J,n\Gamma)} | A_s^{(J,mC)} | \varphi_{v',\sigma'}^{(J',n'\Gamma')} \rangle = \begin{pmatrix} \Gamma & \Gamma' & C \\ \sigma & \sigma' & S \end{pmatrix} \langle \varphi_v^{(J,n\Gamma)} || A^{(J,mC)} || \varphi_{v'}^{(J',n'\Gamma')} \rangle \quad (3.19)$$

Доказательство этой теоремы довольно просто и очевидно. Более того, следствие этой теоремы позволяет нам легко проверить полученные результаты, т.е., приведенные матричные элементы неприводимых вращательных операторов при фиксированном ранге K должны друг с другом совпадать. С другой стороны, эта теорема сильно упрощает расчёт матричных элементов эффективного гамильтониана.

Приведенные матричные элементы неприводимых вращательных операторов на группе $SO(3)$ представлены в таблице 1.

$\langle J R^{(4)} J \rangle$	$\frac{1}{4\sqrt{70}} \left[\frac{(2J+5)!}{(2J-4)!} \right]^{\frac{1}{2}}$
$\langle J R^{(5)} J \rangle$	$\frac{1}{24\sqrt{14}} \left[\frac{(2J+6)!}{(2J-5)!} \right]^{\frac{1}{2}}$

$\langle J \ R^{(6)} \ J \rangle$	$\frac{1}{16\sqrt{231}} \left[\frac{(2J+7)!}{(2J-6)!} \right]^{\frac{1}{2}}$
$\langle J \ R^{(7)} \ J \rangle$	$\sqrt{\frac{2^5}{429}} \left[\frac{(2J+8)!}{(2J-7)!} \right]^{\frac{1}{2}}$
$\langle J \ R^{(8)} \ J \rangle$	$\frac{2^4}{3\sqrt{1430}} \left[\frac{(2J+9)!}{(2J-8)!} \right]^{\frac{1}{2}}$

Таблица 3.1 Приведенные матричные элементы вращательных операторов SO(3)

4. Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение

4.1 Оценка коммерческого потенциала и перспективности

проведения научных исследований с позиции ресурсоэффективности и ресурсосбережения

4.1.1 Потенциальные потребители результатов исследования

Полученные результаты данной дипломной работы являются вращательными операторами, которые будут использоваться при разработке программы SPHETOM реализуемой на языке FORTRAN, с помощью которой будет выполняться анализ спектров высокого разрешения молекул типа сферического волчка. Более того, результат может использоваться в научной работе, которая исследует вращательные свойства объекта, имеющего симметрию SO(3).

Данная научно-исследовательская работа выполнялась в помещении кафедры общая физика третьего корпуса Томского Политехнического университета в кабинете 126.

4.1.2 Анализ конкурентных технических решений

Целесообразно проводить данный анализ с помощью оценочной карты, пример которой приведен в табл. 1. Для этого необходимо отобрать не менее трех-четырёх конкурентных товаров и разработок.

K_1 – результат расчёта руководителя Уленев в 1985 году

K_2 – результат расчёта Вигнер в 1958 году

Таблица 4.1 Оценочная карта для сравнения конкурентных технических решений

Критерии оценки	Вес критерия	Баллы			Конкурентоспособность		
		B_{ϕ}	B_{k1}	B_{k2}	K_{ϕ}	K_{k1}	K_{k2}
1	2	3	4	5	6	7	8
Технические критерии оценки ресурсоэффективности							
1. Повышение производительности пользователя труда	0,05	4	3	3	0,20	0,15	0,15
2. Удобство в эксплуатации (соответствует требованиям потребителей)	0,05	4	4	4	0,20	0,20	0,20
3. Надежность	0,05	5	3	3	0,25	0,15	0,15
4. Безопасность	0,15	5	4	4	0,75	0,60	0,60
5. Простота эксплуатации	0,05	4	4	4	0,20	0,20	0,25
6. Уровень шума	0,15	5	3	4	0,75	0,45	0,60
7. Возможность подключения в сеть ЭВМ	0,20	5	2	3	1,00	0,40	0,60
Экономические критерии оценки эффективности							
1. Конкурентоспособность продукта	0,05	4	5	4	0,20	0,25	0,20
2. Уровень проникновения на рынок	0,05	3	4	4	1,00	0,20	0,20
3. Предполагаемый срок эксплуатации	0,05	4	4	4	0,20	0,20	0,20
4. Послепродажное обслуживание	0,05	5	3	4	0,25	0,15	0,20

5. Срок выхода на рынок	0,05	4	5	3	0,20	0,25	0,15
6. Финансирование научной разработки	0,05	5	5	5	0,25	0,25	0,25
Итого	1	57	49	47	4,60	3,45	3,75

Анализ конкурентных технических решений определяется по формуле:

$$K = \sum V_i \cdot B_i, \quad (4.1)$$

где K – конкурентоспособность научной разработки или конкурента;

V_i – вес показателя (в долях единицы);

B_i – балл i -го показателя.

4.1.3 Технология QuaD

Технология QuaD (QUality ADvisor) представляет собой гибкий инструмент измерения характеристик, описывающих качество новой разработки и ее перспективность на рынке и позволяющие принимать решение целесообразности вложения денежных средств в научно-исследовательский проект.

Для упрощения процедуры проведения QuaD рекомендуется оценку проводить в табличной форме (табл. 4.2).

Таблица 4.2 Оценочная карта для сравнения конкурентных технических решений

Критерии оценки	Вес критерия	Баллы	Максимальный балл	Относительное значение (3/4)	Средневзвешенное значение (3x2)
1	2	3	4	5	
Показатели оценки качества разработки					
1. Энергоэффективность	0,05	85	100	0,85	4,25

2. Время производства	0,1	93	100	0,93	9,3
3. Надежность	0,05	86	100	0,86	4,3
4. Безопасность	0,15	88	100	0,88	1,32
5. Простота эксплуатации	0,05	96	100	0,96	4,8
6. Уровень шума	0,15	94	100	0,94	14,1
7. Ремонтопригодность	0,05	100	100	1	5
Показатели оценки коммерческого потенциала разработки					
8. Конкурентоспособность продукта	0,05	82	100	0,82	4,1
9. Уровень проникновения на рынок	0,05	69	100	0,69	3,45
10. Унифицированность	0,05	79	100	0,79	3,95
11. Финансовая эффективность научной разработки	0,15	95	100	0,95	14,25
12. Срок выхода на рынок	0,05	84	100	0,84	4,2
13. Перспективность рынка	0,05	96	100	0,96	4,8
Итого	1	88,23	100	0,882	77,82

Оценка качества и перспективности по технологии QuaD определяется по формуле:

$$P_{cp} = \sum B_i \cdot B_i, \quad (4.2)$$

где P_{cp} – средневзвешенное значение показателя качества и перспективности научной разработки;

B_i – вес показателя (в долях единицы);

B_i – средневзвешенное значение i -го показателя.

4.1.4 SWOT-анализ

SWOT – Strengths (сильные стороны), Weaknesses (слабые стороны), Opportunities (возможности) и Threats (угрозы) – представляет собой комплексный анализ научно-исследовательского проекта. SWOT-анализ применяют для исследования внешней и внутренней среды проекта.

Использование интерактивной матрицы (таблица 4.3) помогает разобраться с различными комбинациями взаимосвязей областей SWOT.

Таблица 4.3 Матрица SWOT

	<p>Сильные стороны научно-исследовательского проекта:</p> <p>С1. Заявленная экономичность и энергоэффективность технологии.</p> <p>С2. Экологичность технологии.</p> <p>С3. Более низкая стоимость производства по сравнению с другими технологиями.</p> <p>С4. Наличие бюджетного финансирования.</p> <p>С5. Квалифицированный персонал.</p>	<p>Слабые стороны научно-исследовательского проекта:</p> <p>Сл1. Отсутствие прототипа научной разработки</p> <p>Сл2. Отсутствие у потенциальных потребителей квалифицированных кадров по работе с научной разработкой</p> <p>Сл3. Отсутствие инжиниринговой компании, способной построить производство под ключ</p> <p>Сл4. Отсутствие необходимого оборудования для проведения испытания опытного образца</p> <p>Сл5. Большой срок поставок материалов и комплектующих, используемые при проведении научного исследования</p>
<p>Возможности:</p> <p>В1. Использование инновационной инфраструктуры ТПУ</p> <p>В2. Появление дополнительного спроса на новый продукт</p> <p>В4. Снижение таможенных пошлин на сырье и материалы, используемые при научных исследованиях</p> <p>В5. Повышение стоимости конкурентных разработок</p> <p>...</p>	<p>По результатам анализа интерактивной матрицы проекта полей «Сильные стороны и возможности» можно сделать вывод о том, что нужно расширять лабораторию и попытаться улучшить программные обеспечения, чтобы увеличить эффективность программного обеспечения.</p>	<p>По результатам анализа интерактивной матрицы проекта полей «Слабые стороны и возможности» можно сделать вывод о том, что мы должны развивать новые методы исследования, чтобы уменьшить трудоёмкость работы.</p>
<p>Угрозы:</p> <p>У1. Отсутствие спроса на новые технологии производства</p>	<p>По результатам анализа интерактивной матрицы проекта полей «Сильные стороны и угрозы» можно</p>	<p>По результатам анализа интерактивной матрицы</p>

У2. Развитая конкуренция технологий производства У3. Ограничения на экспорт технологии У4. Введения дополнительных государственных требований к сертификации продукции У5. Несвоевременное финансовое обеспечение научного исследования со стороны государства ...	сделать вывод о том, что возможные угрозы при производстве, такие как отсутствие спроса и развитая конкуренция, могут сильно ослабить позиции данного научного исследования. Тематика очень актуальна, и мы имеем оригинальные решения поставленной задачи молекулярной спектроскопии высокого разрешения, поэтому мы имеем конкурентоспособность	проекта полей «Слабые стороны и угрозы» можно сделать вывод о том, что мы должны развивать новые методы исследования. При необходимости можно стремиться к сотрудничеству с другими научными центрами.
--	---	--

Таблица 4.4 Интерактивная матрица проекта

Сильные стороны проекта						
		C1	C2	C3	C4	C5
Возможности проекта	B1	+	+	-	0	+
	B2	-	+	+	-	0
	B3	-	+	+	-	0
	B4	+	-	0	+	0

4.2 Планирование научно-исследовательской работы

4.2.1 Планирование этапов работ

Для определения общего содержания работ, уточнения целей и разработки последовательных действий необходимо составить календарный график выполнения НИОКР.

Таблица 4.5 Перечень этапов, работ и распределение исполнителей

Основные этапы	№ раб	Содержание работ	Должность исполнителя
Разработка технического задания	1	Составление и утверждение технического задания	Руководитель

Выбор направления исследований	2	Подбор и изучение материалов по теме	бакалавр
	3	Проведение патентных исследований	бакалавр
	4	Выбор направления исследований	Руководитель, бакалавр
	5	Календарное планирование работ по теме	Руководитель, бакалавр
Теоретические и экспериментальные исследования	6	Выбор методики для исследований	Руководитель, бакалавр
	7	Ознакомление с методикой исследованием и программным обеспечением	Руководитель, бакалавр
	8	Проведения расчета на ПЭВМ	бакалавр
Обобщение и оценка результатов	9	Проверка полученных результатов	бакалавр
	10	Оформление заключение	бакалавр
Оформление отчета по НИР (комплекта документации по ОКР)	11	Составление пояснительной записки	бакалавр
	12	Оформление дипломной работы и подготовка к защите	бакалавр

4.2.2 Определение трудоемкости выполнения НИОКР

Трудовые затраты в большинстве случаях 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 трудоемкости $t_{ожі}$ используется следующая формула:

$$t_{ожі} = \frac{3t_{\min i} + 2t_{\max i}}{5}, \quad (4.3)$$

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.

$$T_{pi} = \frac{t_{ожi}}{Ч_i}, \quad (4.4)$$

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

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

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

4.2.3 Техническая готовность темы

Определение технической готовности темы позволяет дипломнику точно знать, на каком уровне выполнения находится определенный этап или работа.

Для начала следует определить удельное значение каждой работы в общей продолжительности работ:

$$Y_i = \frac{T_{pi}}{T_p} \times 100\%, \quad (4.5)$$

где Y_i – удельное значение каждой работы в %;

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

T_p – суммарная продолжительность темы, раб.дн.

Тогда техническую готовность темы Γ_i , можно рассчитать по формуле:

$$\Gamma_i = \frac{\sum_{i=1} T_{pi}}{T_p} \times 100\%, \quad (4.6)$$

где $\sum T_{pi}$ – нарастающая продолжительность на момент выполнения i -той работы.

4.2.4 Построение графика работ

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.

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

$$T_{ki} = T_{pi} \cdot k_{\text{кал}}, \quad (4.7)$$

где T_{ki} – продолжительность выполнения i -й работы в календарных днях;

T_{pi} – продолжительность выполнения i -й работы в рабочих днях;

$k_{\text{кал}}$ – коэффициент календарности.

Коэффициент календарности определяется по следующей формуле:

$$k_{\text{кал}} = \frac{T_{\text{кал}}}{T_{\text{кал}} - T_{\text{вых}} - T_{\text{пр}}}, \quad (4.8)$$

где $T_{\text{кал}}$ – количество календарных дней в году;

$T_{\text{вых}}$ – количество выходных дней в году;

$T_{\text{пр}}$ – количество праздничных дней в году.

Все рассчитанные значения необходимо свести в таблицу (табл. 4.8).

В 2016 году 365 календарных дней, из них 52 выходных дня и 14 праздничных дней. Тогда коэффициент календарности равен:

$$k_{\text{кал}} = \frac{365}{365 - 52 - 14} = 1,22$$

Таблица 4.6 Временные показатели проведения научного исследования

Название работы	Трудоёмкость работ						Исполнители		Длительность работ в рабочих днях		Длительность работ в календарных днях	
	t_{min} , чел-дни		t_{max} , чел-дни		$t_{\text{ожг}}$, чел-дни				T_{pi}		T_{ki}	
	Р	Б	Р	Б	Р	Б	Р	Б	Р	Б	Р	Б
Составление и утверждение технического задания	4	-	8	-	5,6	-	+	-	2,8	-	4	-
Подбор и изучение материалов по теме	-	2	-	5	-	3,2	-	+	-	1,6	-	2
Проведение патентных исследований	-	12	-	20	-	15,2	-	+	-	7,6	-	10
Выбор направления исследований	2	2	4	4	2,8	2,8	+	+	1,4	1,4	2	2
Календарное планирование работ по теме	4	4	4	4	3	3	+	+	2	2	3	3
Выбор методики для исследований	3	3	5	5	8	8	+	+	4	4	5	5
Ознакомление с методикой исследованием и программным обеспечением	2	2	3	3	5	5	+	+	3	3	4	4
Проведения расчета на ПЭВМ	-	10	-	15	-	12,5	-	+	-	7,5	-	10
Проверка полученных результатов	-	5	-	10	-	7,5	-	+	-	5	-	6
Оформление	-	2	-	3	-	2,5	-	+	-	2	-	3

заклучение												
Составление пояснительной записки	-	2	-	3	-	2,5	-	+	-	2	-	3
Оформление дипломной работы и подготовка к защите	-	10	-	15	-	12,5	-	+	-	10	-	12

На основе табл. 4.6 строится календарный план-график. График строится для максимального по длительности исполнения работ в рамках научно-исследовательского проекта на основе табл. 4.9 с разбивкой по месяцам и декадам (10 дней) за период времени дипломирования. При этом работы на графике следует выделить различной штриховкой в зависимости от исполнителей, ответственных за ту или иную работу.

Таблица 4.7 Календарный план-график проведения НИОКР по теме

№ работ	Вид работ	Исполнители	T _{кi} , кал. дн.	Продолжительность выполнения работ														
				февр		март			апрель			май			июнь			
				1	2	1	2	3	1	2	3	1	2	3	1	2		
1	Составление и утверждение технического задания	Руководитель	4	▨														
2	Подбор и изучение материалов по теме	бакалавр	2	■														
3	Проведение патентных исследований	бакалавр	10		■	■	■											
4	Выбор направления	Руководитель, бакалавр	2														▨	

	исследован ий																		
5	Календарн ое планирован ие работ по теме	Руководитель, бакалавр	2																
6	Выбор методики для исследован ий	Руководитель, бакалавр	3																
7	Ознакомле ние с методикой исследован ием и программн ым обеспечени ем	Руководитель, бакалавр	2																
8	Проведени я расчета на ПЭВМ	бакалавр	12																
9	Проверка полученны х результатов	бакалавр	7,5																
10	Оформлени е заключение	бакалавр	3																
11	Составлени е пояснитель ной записки	бакалавр	3																
12	Оформлени е дипломной работы и подготовка к защите	бакалавр	12																

▨ – руководитель ■ – бакалавр

4.3 Бюджет научно-технического исследования (НТИ)

В процессе формирования бюджета НТИ используется следующая

группировка затрат по различным статьям.

4.3.1 Расчет материальных затрат НИИ

В материальные затраты, помимо вышеуказанных, включаются дополнительно затраты на канцелярские принадлежности, диски, картриджи и т.п. Однако их учет ведется в данной статье только в том случае, если в научной организации их не включают в расходы на использование оборудования или накладные расходы.

Расчет материальных затрат осуществляется по следующей формуле:

$$Z_m = (1 + k_T) \cdot \sum_{i=1}^m C_i \cdot N_{расхi} , \quad (4.9)$$

где m – количество видов материальных ресурсов, потребляемых при выполнении научного исследования;

$N_{расхi}$ – количество материальных ресурсов i -го вида, планируемых к использованию при выполнении научного исследования (шт., кг, м, м² и т.д.);

C_i – цена приобретения единицы i -го вида потребляемых материальных ресурсов (руб./шт., руб./кг, руб./м, руб./м² и т.д.);

k_T – коэффициент, учитывающий транспортно-заготовительные расходы.

В данном научно-техническом исследовании нет материальных затрат, так как мы делаем теоретический анализ.

4.3.2 Расчет затрат на специальное оборудование для научных работ

В данную статью включают все затраты, связанные с приобретением специального оборудования необходимого для проведения работ по конкретной теме. Определение стоимости спецоборудования производится по действующим

прейскурантам, а в ряде случаев по договорной цене. Расчет затрат по данной статье заносится в табл. 4.10.

Все расчеты по приобретению спецоборудования и оборудования, имеющегося в организации, но используемого для каждого исполнения конкретной темы, сводятся в табл. 4.10.

Таблица 4.8 Расчет бюджета затрат на приобретение спецоборудования для научных работ

№ п/п	Наименование оборудования	Кол-во единиц оборудования	Цена единицы оборудования, тыс. руб.	Общая стоимость оборудования, тыс. руб.
1.	Персональный компьютер	1	40	40
Итого:				40

4.3.3 Основная заработная плата исполнителей темы

В настоящую статью включается основная заработная плата научных и инженерно-технических работников, рабочих макетных мастерских и опытных производств, непосредственно участвующих в выполнении работ по данной теме.

Статья включает основную заработную плату работников, непосредственно занятых выполнением НТИ, (включая премии, доплаты) и дополнительную заработную плату:

$$Z_{зп} = Z_{осн} + Z_{доп} , \quad (4.10)$$

где $Z_{осн}$ – основная заработная плата; $Z_{доп}$ – дополнительная заработная плата (12-20 % от $Z_{осн}$).

Основная заработная плата ($Z_{\text{осн}}$) руководителя от **предприятия** рассчитывается по следующей формуле:

$$Z_{\text{осн}} = Z_{\text{дн}} \cdot T_p, \quad (4.11)$$

где $Z_{\text{осн}}$ – основная заработная плата одного работника; T_p – продолжительность работ, выполняемых научно-техническим работником, раб. дн.; $Z_{\text{дн}}$ – среднедневная заработная плата работника, руб.

Среднедневная заработная плата рассчитывается по формуле:

$$Z_{\text{дн}} = \frac{Z_m \cdot M}{F_d}, \quad (4.12)$$

где Z_m – месячный должностной оклад работника, руб.;

M – количество месяцев работы без отпуска в течение года: при отпуске в 24 раб. дня $M = 11,2$ месяца, 5-дневная неделя; при отпуске в 48 раб. дней $M = 10,4$ месяца, 6-дневная неделя; F_d – действительный годовой фонд рабочего времени научно-технического персонала, раб. дн.

Таблица 4.9 Баланс рабочего времени

Показатели рабочего времени	Руководитель	Бакалавр
Календарное число дней	365	365
Количество нерабочих дней		
- выходные дни	52	104
- праздничные дни	14	14
Потери рабочего времени		
- отпуск	48	24
- невыходы по болезни	0	0
Действительный годовой фонд рабочего времени	251	223

Месячный должностной оклад работника:

$$Z_m = Z_{\text{тс}} \cdot (1 + k_{\text{пр}} + k_d) \cdot k_p, \quad (4.13)$$

где $Z_{тс}$ – заработная плата по тарифной ставке, руб.;

$k_{пр}$ – премиальный коэффициент, равный 0,3 (т.е. 30% от $Z_{тс}$);

$k_{д}$ – коэффициент доплат и надбавок составляет примерно 0,2 – 0,5;

$k_{р}$ – районный коэффициент, равный 1,3.

Расчёт основной заработной платы приведён в таблице 4.10.

Таблица 4.10 Расчёт основной заработной платы

Исполнители	Разряд	$k_{д}$	$k_{р}$	$Z_{м}$, руб	$Z_{дн}$, руб.	$T_{р}$, раб. дн.	$Z_{осн}$, руб.
Руководитель	22638,7	0,35	1,3	48560	2012	18	36216
Бакалавр	14874,5	0,35	1,3	25524,6	945,4	59	55755

4.3.4 Отчисления во внебюджетные фонды

В данной статье расходов отражаются обязательные отчисления по установленным законодательством Российской Федерации нормам органам государственного социального страхования (ФСС), пенсионного фонда (ПФ) и медицинского страхования (ФФОМС) от затрат на оплату труда работников.

Величина отчислений во внебюджетные фонды определяется исходя из следующей формулы:

$$Z_{внеб} = k_{внеб} \cdot (Z_{осн} + Z_{доп}), \quad (4.14)$$

где $k_{внеб}$ – коэффициент отчислений на уплату во внебюджетные фонды (пенсионный фонд, фонд обязательного медицинского страхования и пр.).

Отчисления во внебюджетные фонды рекомендуется представлять в табличной форме.

Таблица 4.11 Отчисления во внебюджетные фонды

Исполнитель	Основная заработная плата, руб.
Руководитель проекта	36216
Студент-дипломник	55755
Коэффициент отчислений во внебюджетные фонды	0,271
Итого	24924,4

4.3.5 Накладные расходы

Время использования оборудования: $59 \cdot 12 \text{ час} = 708 \text{ час}$ (бакалавр).

$18 \cdot 12 \text{ час} = 216 \text{ час}$ (руководитель). Мощность компьютера 400Вт.

Поэтому $W = P \cdot t = 708 \cdot 400 = 283200 \text{ Вт/час} = 283,2 \text{ кВт/час}$

$W = P \cdot t = 216 \cdot 400 = 86400 \text{ Вт/час} = 86,4 \text{ кВт/час}$

$283,2 \cdot 1,58 = 447,5 \text{ руб.}$

$86,4 \cdot 1,58 = 136,5 \text{ руб.}$

4.3.6 Формирование бюджет затрат НИИ

Рассчитанная величина затрат научно-исследовательской работы (темы) является основой для формирования бюджета затрат проекта, который при формировании договора с заказчиком защищается научной организацией в качестве нижнего предела затрат на разработку научно-технической продукции.

Определение бюджета затрат на научно-исследовательский проект по каждому варианту исполнения приведен в табл. 4.14.

Таблица 4.12 Расчет бюджета затрат НИИ

Наименование статьи	Сумма, руб.		Примечание
	руководитель	бакалавр	
1. Материальные затраты НИИ	0	0	

2. Затраты на специальное оборудование для научных (экспериментальных) работ	40000	40000	Таблица 4.10
3. Затраты по основной заработной плате исполнителей темы	36216	55755	Таблица 4.12
4. Отчисления во внебюджетные фонды	9790	15110	Таблица 4.13
5. Накладные расходы	136,5	447,5	
6. Бюджет затрат НИИ	86052,5	111312,5	Сумма ст. 1- 5

5. Социальная ответственность

5.1 Производная безопасность в компьютерном помещении среды

Социальная ответственность или корпоративная социальная ответственность это ответственность перед людьми и данными им обещаниями, когда организация учитывает интересы коллектива и общества, возлагая на себя ответственность за влияние их деятельности на заказчиков, поставщиков, работников, акционеров (IS CSR 26000:2011).

Данная научно-исследовательская работа выполнялась в помещении кафедры общая физика третьего корпуса Томского Политехнического университета в кабинете 126. Помещение оснащено видео-дисплейными терминалами(ВДТ), персональными электронно-вычислительными машинами(ПЭВМ), компьютерными столами, стульями, кофе машиной и противопожарной сигнализацией.

Помещение относится к классу помещений без повышенной опасности, так как отсутствуют условия, создающие повышенную или особо повышенную опасность.

Для того, чтобы обеспечивать производственную безопасность необходимо проанализировать воздействия на человека вредных и опасных производственных факторов, которые возможно возникают при разработке или эксплуатации проекта.

Все производственные факторы классифицируются по группам элементов: физические, химические, биологические и психофизические. Для

данной работы целесообразно рассмотреть физические и психофизические вредные и опасные факторы производства, характерные как для рабочей зоны программиста, как разработчика рассматриваемой в данной работе системы, так и для рабочей зоны пользователя готового продукта – врача-оператора ПЭВМ.

Выявленные факторы представлены в таблице 5.1.

Источник фактора, наименование видов работ	Факторы (по ГОСТ 12.0.003-74)		Нормативные документы
	Вредные	Опасные	
1) Работа за ПЭВМ	1) Повышенная или пониженная температура воздуха рабочей зоны; 2) Повышенный уровень электромагнитных излучений 3) Недостаточная освещенность рабочей зоны. 4) Монотонный режим работы	1) Опасность поражения электрическим током; 2) Опасность возникновения пожара.	1) СанПиН 2.2.4.548-96; 2) СанПиН 2.2.2/2.4.1340-03; 3) СП 52.13330.2011[3]; 4) ГОСТ Р 12.1.019-2009 ССБТ; 5) СНиП 21-01-97.

Таблица 5.1 Вредные и опасные производственные факторы при выполнении работ за ПЭВМ

5.2 Анализ вредных производных факторов окружающей работающей среды

5.2.1 Микроклимат

Микроклиматические параметры – это сочетание температуры, относительной влажности и скорости движения воздуха. Эти параметры в значительной степени влияют на функциональную деятельность человека, его

самочувствие здоровье, а также и на надежность работы вычислительной техники.

Оптимальные и допустимые значения параметров микроклимата приведены в таблице 5.2.

Период года	Температура, °С					Относительная влажность, %		Скорость движения воздуха, м/с	
	Оптимальная	Допустимая на рабочих местах				Оптимальная	Допустимая	Оптимальная, не более	Допустимая, не более
		Верхняя		Нижняя					
		Пост.	Не пост.	Пост.	Не пост.				
Холодный	22 - 24	25	26	21	18	40 - 60	75	0,1	0,1
Теплый	23 – 25	28	30	22	20	40 - 60	70	0,1	0,1

Таблица 5.2 Оптимальные и допустимые нормы микроклимата

Повышенная влажность воздуха ($\phi > 85\%$) затрудняет терморегуляцию организма, т.к. происходит снижения испарения пота, а пониженная влажность ($\phi < 20\%$) вызывает пересыхание слизистых оболочек дыхательных путей.

5.2.2 Уровень электромагнитного излучения

Уровень электромагнитных излучений на рабочем месте оператора ПЭВМ является вредным фактором производственной среды, величины параметров которого определяются СанПиН 2.2.2/2.4.1340-03.

Нарушения в организме человека при воздействии электромагнитных полей незначительных напряжений носят обратимый характер. При воздействии полей, имеющих напряженность выше предельно допустимого уровня, развиваются нарушения со стороны нервной, сердечно-сосудистой

систем, органов пищеварения и некоторых биологических показателей крови. Допустимые уровни воздействия электрического поля представлены в таблице 5.3.

ДУ, кВ/м	Условия облучения
,5	внутри жилых зданий
,0	на территории зоны жилой застройки
,0	в населенной местности вне зоны жилой застройки; (земли городов в пределах городской черты в границах их перспективного развития на 10 лет, пригородные и зеленые зоны, курорты, земли поселков городского типа в пределах поселковой черты и сельских населенных пунктов в пределах черты этих пунктов) а также на территории огородов и садов;
0,0	на участках пересечения воздушных линий электропередачи с автомобильными дорогами 1 – IV категорий;
5,0	в ненаселенной местности (незастроенные местности, хотя бы и часто посещаемые людьми, доступные для транспорта, и сельскохозяйственные угодья);
0,0	в труднодоступной местности (недоступной для транспорта и сельскохозяйственных машин) и на участках, специально выгороженных для исключения доступа населения.

Таблица 5.3 Допустимые уровни воздействия электрического поля

Согласно СанПиН 2.4.1340-03 напряженность электромагнитного поля на расстоянии 50 см вокруг ВДТ по электрической составляющей должна быть не более:

в диапазоне частот 5 Гц – 2 кГц – 25 в/м;

в диапазоне частот 2 – 400 кГц – 2.5 в/м.

5.2.3 Недостаточная освещённость

Недостаточная освещённость рабочей зоны является вредным производственным фактором, возникающим при работе с ПЭВМ, уровни которого регламентируются СП 52.13330.2011.

При нехватке освещённости человек испытывает дискомфорт и вследствие всего могут развиваться психические заболевания, ухудшение зрения, снижение концентрации. В рассматриваемом офисном помещении освещённость на поверхности стола в зоне размещения рабочего документа равна 300 лк. Освещение не создает бликов на поверхности экрана. Освещённость поверхности экрана равна примерно 300 лк. Яркость светильников общего освещения в зоне углов излучения от 50 до 90 градусов с вертикалью в продольной и поперечной плоскостях составляет не более 200 кд/м².

Причиной недостаточной освещённости являются недостаточность естественного освещения, недостаточность искусственного освещения, пониженная контрастность.

Разряд зрительных работ программиста и оператора ПЭВМ относится к разряду III и под разряд (работы высокой точности). В таблице 5.4 представлены нормативные показатели искусственного освещения при работах заданной точности.

Характеристика зрительной работы	Наименьший или эквивалентный размер объекта различения, мм	Разряд зрительной работы	Подразряд зрительной работы	Контраст объекта с фоном	Характеристика фона	Искусственное освещение		
						Освещённость, лк		
						При системе комбинированного освещения		При системе общего освещения
						всего	В том числе от общего	
Высокой точности	От 0,3 до 0,5	III	г	Средний, большой	Светлый, средний	400	200	200

Таблица 5.4 Требования к освещению помещений промышленных предприятий для операторов ПЭВМ

5.3 Анализ опасных производных факторов окружающей рабочей среды

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. [5]

Для приведенных работ вредными являются следующие факторы:

- шум на рабочем месте от работы оборудования;
- электромагнитные излучения от мониторов;
- опасность поражения электрическим током.

5.3.1 Электробезопасность

Лаборатория относится к помещению без повышенной опасности поражения электрическим током (в которой отсутствуют условия, создающие повышенную или особую опасность).

Помещение без повышенной опасности (сухое, хорошо отапливаемое, помещение с токонепроводящими полами, с температурой 18–20 С°, с влажностью 40–50%. Электробезопасность является опасным фактором и обычно она связана со следующими источниками:

- поражение электрическим током;
- статическое электричество;
- молниезащита.

Мероприятия защиты при электробезопасности следующие:

- отключать электрооборудование при его ремонте;
- периодически снимать электростатическое напряжение, касаясь пальцами рук, заземленных поверхностей;

– для безопасности во время гроз необходимо удостовериться о наличии молниеотвода, и того факта, что все розетки в кабинете заземлены.

В отличие от других источников опасности электрический ток нельзя обнаружить без специального оборудования и приборов, поэтому воздействие его на человека чаще всего неожиданно.

Следствия воздействия электрического тока на тело человека приведены в таблице 5.5.

Вид воздействия	Следствие	Виды электротравм
Термическое	Ожоги отдельных участков тела, нагрев внутренних органов	Электрический ожог, электрический знак, металлизация кожи.
Биологическое	Разложение и возбуждение живых тканей, судорожное сокращение мышц	Механические повреждения
Электролитическое	Разложение крови и других жидкостей, нарушение их физико-химического состава	Электрический удар

Таблица 5.5 Воздействие электрического тока на тело человека

Особое внимание необходимо уделять защите от статического электричества. Для его снижения применяют специальное покрытие полов, которое выполнено из линолеума антистатического поливинилхлоридного. К

другому методу защиты можно отнести нейтрализацию зарядов ионизированным воздухом.

5.3.2 Опасность возникновения пожара

Возникновение пожара является опасным производственным фактором, т.к. пожар на предприятии наносит большой материальный ущерб, а также часто сопровождается травмами и несчастными случаями. Причём пожары приводят к полной потере информации и большим трудностям восстановления всей информации в полном объёме. Регулирование пожаробезопасности производится СНиП 21-01-97.

Возможные виды источников воспламенения:

- Искра при разряде статического электричества;
- Искры от электрооборудования;
- Искры от удара и трения;
- Открытое пламя.

Согласно требованиям, в офисе необходимо вести журнал регистрации противопожарного инструктажа, инструкцию о мерах пожарной безопасности и инструкцию о порядке действий персонала при пожаре. Здание должно соответствовать требованиям пожарной безопасности, а именно, наличие охранно-пожарной сигнализации, плана эвакуации, порошковых или углекислотных огнетушителей с поверенным клеймом, табличек с указанием направления к запасному (эвакуационному) выходу (рисунок 5.1).

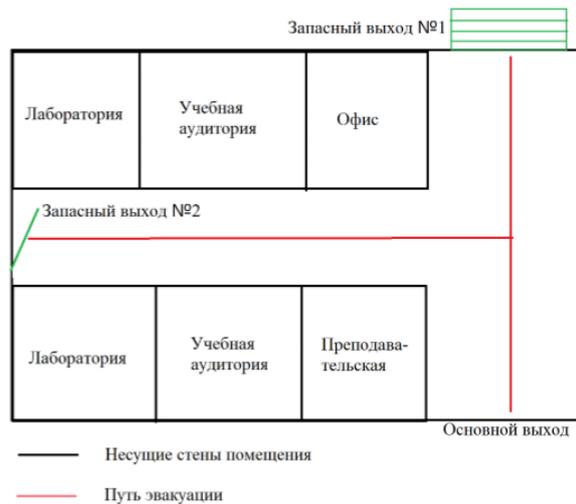


Рис. 5.1 - План эвакуации из лаборатории

5.4 Рекомендации по минимизации влияния

5.4.1 Рекомендации по улучшению микроклимата

Воздушной среды в исследовательском производственном помещении относятся правильная организация вентиляции и кондиционирования воздуха, отопление помещений. Вентиляция может осуществляться естественным и механическим.

Для обеспечения комфортных условий используют как организационные методы (рациональная организация проведения работ в зависимости от времени года и суток, чередование труда и отдыха), так и технические средства (вентиляция, кондиционирование воздуха, отопительная система).

5.4.2 Рекомендации по минимизации влияния электромагнитных излучений

Данная разработка направлена на уменьшение количества часов, затрачиваемых сотрудником на ввод персональных данных гражданина, что

сокращает влияние электромагнитного излучения. Время на переобучение сотрудников не сильно увеличит влияние фактора, так как это происходит однократно.

5.4.3 Рекомендации по минимизации влияния освещения

Для обеспечения требуемого уровня освещения в помещении используются лампы дневного освещения, равномерно распределенные по всему потолку офиса. Для освещения помещения выбраны наиболее широко применяемые лампы типа ЛБ.

5.4.4 Рекомендации по защите от электрического тока

Опасное и вредное воздействие на людей электрического тока, электрической дуги и электромагнитных полей проявляется в виде электротравм и профессиональных заболеваний.

Для защиты от поражения электрическим током все токоведущие части должны быть защищены от случайных прикосновений кожухами, корпус устройства должен быть заземлен. Заземление выполняется изолированным медным проводом сечением 1,5 мм², который присоединяется к общей шине заземления с общим сечением 5,4 мм² при помощи сварки. Общая шина присоединяется к заземлению, сопротивление которого не должно превышать 4 Ом. Питание устройства должно осуществляться от силового щита через автоматический предохранитель, который срабатывает при коротком замыкании нагрузки.

При эксплуатации ЭВМ запрещается:

- включать ЭВМ при неисправной защите электропитания;
- подключать и отключать разъемы кабелей электропитания и блоков вентиляции при поданном напряжении электросети;
- заменять съемные элементы под напряжением;
- производить пайку аппаратуры, находящейся под напряжением;
- снимать щиты, закрывающие доступ к токоведущим частям;
- пользоваться электроинструментами с напряжением 36В и выше с незаземленными корпусами.

5.4.5 Меры по обеспечению пожарной безопасности

Одним из условий обеспечения пожаробезопасности любого производственного процесса является ликвидация возможных источников воспламенения.

Для устранения возможности пожара в помещении должны соблюдаться следующие противопожарные меры:

- ограничение количества горючих веществ;
- устранение возможных источников возгорания (электрических искр, нагрева оболочек оборудования);
- применение средств пожаротушения;
- использование пожарной сигнализации;
- содержание электрооборудования в исправном состоянии, использование плавких предохранителей и автоматических выключателей в аппаратуре, по окончании работ все установки должны обесточиваться;

5.5 Экологическая безопасность

В данном разделе рассматривается воздействие на окружающую среду деятельности по данному исследованию.

Данное исследование программного обеспечения и работа за ПЭВМ не являются экологически опасными работами, потому что результат, который выполнялся в данной работе, а также объекты, на которых будет реализоваться его использование операторами ПЭВМ относятся к предприятиям пятого класса.

Люминесцентные лампы, применяющиеся для искусственного освещения рабочих мест, также требуют особой утилизации, т.к. в них присутствует от 10 до 70 мг ртути, которая относится к чрезвычайно-опасным химическим веществам и может стать причиной отравления живых существ, а также загрязнения атмосферы, гидросферы и литосферы. Сроки службы таких ламп составляют около 5-ти лет, после чего их необходимо сдавать на переработку в специальных пунктах приема. Юридические лица обязаны сдавать лампы на переработку и вести паспорт для данного вида отходов.

5.6 Безопасность в чрезвычайных ситуациях

Лаборатория расположена в городе Томск с континентально-циклоническим климатом и природные явления (землетрясения, наводнения, засухи, ураганы и т. д.), в данном городе отсутствуют. Возможными ЧС на объекте в данном случае в городе Томск могут быть сильные морозы и

диверсия. Для Сибири в зимнее время года характерны морозы и метели. В результате порывов ветра могут быть обрывы линий электропитания, из-за чего возможны перебои в электроснабжении; перегрузки, которые могут стать причиной пожара. Для предотвращения подобных ситуаций необходима организация системы аварийного электропитания, по возможности проведение линии электроснабжения под землей. Низкие температуры могут привести к авариям систем теплоснабжения. В случае разморозки труб должны быть предусмотрены запасные обогреватели. Их количества и мощности должно хватать для того, чтобы работа на производстве не прекратилась. В последнее время, в связи с внешней политикой страны, возможны проявления диверсии. Угрозы могут быть как ложными, так и действительными, поэтому необходимы меры предосторожности по этому поводу. В качестве мер безопасности могут быть приняты следующие действия – установка системы видеонаблюдения и круглосуточной охраны, сохранение конфиденциальной информации о охранной системе. Необходимо так же проводить информирование должностных лиц и тренировки по отработке действий на случай экстренной эвакуации.

5.7 Правовые и организационные вопросы обеспечения безопасности

1. СН 245-71. Санитарные нормы проектирования промышленных предприятий.

2. ГОСТ 12.11.005-88. Общие санитарно-технические требования к воздуху рабочей зоны.
3. СНиП 23-05-95. Естественное и искусственное освещение.
4. СанПиН 2.2.1/2.1.1.1278-03. Гигиенические требования к естественному, искусственному и совмещенному освещению жилых и общественных зданий.
5. СанПиН 2.2.2.542-96. Гигиенические требования к видеодисплейным терминалам, персональным электронно-вычислительным машинам и организации работ.
6. ГОСТ 12.1.009 – 2009. Система стандартов безопасности труда. Электробезопасность. Термины и определения
7. ГОСТ 12.1.030 – 81. Электробезопасность. Защитное заземление. Зануление.
8. ГОСТ 12.1.038-82 (2001). Электробезопасность. Предельно допустимые значения прикосновения и токов.
9. НПБ 105-03. Определение категорий помещений, зданий и наружных установок по взрывопожарной и пожарной опасности.
10. СНиП 21-01-97. Пожарная безопасность зданий и сооружений.

Заключение

В данной работе была 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 на группу симметрии T_d вращательные операторы. Для реализации задачи была использована квантовая алгебра в виде пакетов программ "Wolfram Mathematica" и блок "quantum".

Проверка полученных результатов работы, осуществлялась на основе теоремы Вигнера-Эккарта. Построены приведенные матричные элементы.

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 ее применение к задачам колебательно-вращательной спектроскопии молекул. Часть 1. – Томск: Издательство ТГУ, 1990. – 224 с.
2. Быков А.Д., Макушкин Ю.С., Улеников О.Н. Изотопозамещение в многоатомных молекулах. Новосибирск: Наука, 1985, 160 с.
3. Бехтерева Е. С. Спектроскопия высокого разрешения и внутренняя динамика молекул: дисс. докт. физ.-мат. наук. Томск: 2008. 310 с.
4. 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. – 224 с.
5. Давыдов А. С. Квантовая механика. – Издательство Наука, 1973. – 703 с.
6. Герцберг Г. Колебательные и вращательные спектры многоатомных молекул. М.: Издательство иностранной литературы, 1949, 647 с.
7. Герцберг Г. Колебательные и вращательные спектры многоатомных молекул. под ред. М. А. Ельяшевича. – М.: ИЛ, 1965, 648 с.
8. Банкер Ф. Симметрия молекул и молекулярная спектроскопия. – Москва: Издательство Мир, 1981, 451с.
9. Watson J. K. G. Simplification of the molecular vibrational-rotational Hamiltonian // Molecular Physics, 1968, №15, Pages 479-490.
10. Варшалович Д. А., Москалев А. Н., Херсонский В. К. Квантовая теория углового момента. Изд-во наука, Ленингр. отд., Л., 1975, 1–439.

11. Любарский Г. Я. Теория групп и ее применение в физике. Уч.-изд. Л., 1958, – 355с.
12. Wigner E.P. Quantum Theory of Angular Momentum. Academic Press, New York, 1965.
13. Wigner E.P. Group theory and its application to the quantum mechanics of atomic spectra. Academic press, New York, 1959, pages 443.
14. Edmonds A. D. Angular Momentum in Quantum Mechanics. Princeton: Princeton University Press, 1957. Ch. 4, pages 53-62.
15. Ka X.L. Advanced Quantum Mechanics. Higher Education Press, Beijing, 2001, pages 523. (In Chinese)
16. 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.
17. Ulenikov O. N., Malikova A. B., Alanko S., Koivusaari M., Anttila R.. High-Resolution Study of the 2v₅ Hybrid Band of the CHD₃ Molecule. // J. Mol. Spectrosc. – 1996. – V.179. – Pages 175-194.
18. Ulenikov O. N., Bekhtereva E. S., Albert S., Bauerecker S., Niederer H. M., Quack M.. Survey of the high-resolution infrared spectrum of methane (12CH₄ and 13CH₄): Partial vibrational assignment extended towards 12000 cm⁻¹. // Journal of Chemical Physics. – 2014. Vol. 141, – 234302_1 - 234302_33.
19. 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 MGeH₄ (M=76.74) in the dyad region. // Journal of Quantitative Spectroscopy & Radiative Transfer. –2014. Vol.144, –Pages 11-26.
20. 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.
21. 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.
22. Y. Y. Kwan. The Interacting States of An Asymmetric Top Molecule XY₂ of the Group C_{2v}, Application to Five Interacting States (101), (021), (120), (200), and (002) of H₂¹⁸O // J. Mol. Spectrosc. –1978. 71, -Pages 260-280.

Приложение А

Полученные вращательные операторы на группе SO(3) имеют вид:

$$R_{\pm 1}^{1(1)} = \mp J_{\pm}$$

$$R_0^{1(1)} = J_0$$

$$R_{\pm 2}^{2(2)} = J_{\pm}^2$$

$$R_{\pm 1}^{2(2)} = \mp \frac{[J_{\pm}, J_0]_{+}}{\sqrt{2}}$$

$$R_0^{2(2)} = -\frac{J^2 - 3J_0^2}{\sqrt{6}}$$

$$R_{\pm 3}^{3(3)} = \mp J_{\pm}^3$$

$$R_{\pm 2}^{3(3)} = \frac{\sqrt{3}}{2} [J_0, J_{\pm}^2]_{+}$$

$$R_{\pm 1}^{3(3)} = \pm \frac{1}{4} \sqrt{\frac{3}{5}} J_{-} \pm \frac{1}{2} \sqrt{\frac{3}{5}} J^2 J_{-} \mp \frac{1}{4} \sqrt{15} [J_0^2, J_{\pm}]_{+}$$

$$R_0^{3(3)} = \frac{J_0}{\sqrt{10}} - \frac{3J^2 J_0}{\sqrt{10}} + \sqrt{\frac{5}{2}} J_0^3$$

$$R_{\pm 4}^{4(4)} = J_{\pm}^4$$

$$R_{\pm 3}^{4(4)} = \mp [J_0, J_{\pm}^3]_{+}$$

$$R_{\pm 2}^{4(4)} = -\frac{10J_{\pm}^2 + 2J^2 J_{\pm}^2 - 7[J_0^2, J_{\pm}^2]_{+}}{2\sqrt{7}}$$

$$R_{\pm 1}^{4(4)} = \pm \frac{[J_0, J_{\pm}]_{+} + 3J^2 [J_0, J_{\pm}]_{+} - 7[J_0^3 \cdot J_{\pm}]_{+}}{2\sqrt{7}}$$

$$R_0^{4(4)} = \frac{-6J^2 + 3J^4 + 25J_0^2 - 30J^2J_0^2 + 35J_0^4}{2\sqrt{70}}$$

$$R_{\pm 5}^{5(5)} = \mp J_{\pm}^5$$

$$R_{\pm 4}^{5(5)} = \frac{\sqrt{5}}{2} [J_0, J_{\pm}^4]_+$$

$$R_{\pm 3}^{5(5)} = \pm \frac{\sqrt{5}}{12} (33J_{\pm}^3 + 2J^2J_{\pm}^3 - 9[J_0^2, J_{\pm}^3]_+)$$

$$R_{\pm 2}^{5(5)} = -\frac{1}{2} \sqrt{\frac{5}{3}} (6[J_0, J_{\pm}^2]_+ + J^2[J_0, J_{\pm}^2]_+ - 3[J_0^3, J_{\pm}^2]_+)$$

$$R_{\pm 1}^{5(5)} = \frac{1}{4} \sqrt{\frac{5}{42}} (3J_{\pm} - 2J^2J_{\pm} + 2J^4J_{\pm} - 14J^2[J_0^2, J_{\pm}]_+ + 21[J_0^4, J_{\pm}]_+)$$

$$R_0^{5(5)} = \frac{J_0(12 - 50J^2 + 15J^4 + 105J_0^2 - 70J^2J_0^2 + 63J_0^4)}{6\sqrt{14}}$$

$$R_{\pm 6}^{6(6)} = J_{\pm}^6$$

$$R_{\pm 5}^{6(6)} = \mp \sqrt{\frac{3}{2}} [J_0, J_{\pm}^5]_+$$

$$R_{\pm 4}^{6(6)} = -\frac{1}{2} \sqrt{\frac{3}{22}} (76J_{\pm}^4 + 2J^2J_{\pm}^4 - 11[J_0^2, J_{\pm}^4]_+)$$

$$R_{\pm 3}^{6(6)} = \pm \frac{1}{2} \sqrt{\frac{5}{22}} (59[J_0, J_{\pm}^3]_+ + 3J^2[J_0, J_{\pm}^3]_+ - 11[J_0^3, J_{\pm}^3]_+)$$

$$R_{\pm 2}^{6(6)} = \frac{1}{8} \sqrt{\frac{5}{11}} (204J_{\pm}^2 + 20J^2J_{\pm}^2 + 2J^4J_{\pm}^2 - 123[J_0^2, J_{\pm}^2]_+ - 18J^2[J_0^2, J_{\pm}^2]_+ + 33[J_0^4, J_{\pm}^2]_+)$$

$$R_{\pm 1}^{6(6)} = \mp \frac{12[J_0, J_{\pm}]_+ - 10J^2[J_0, J_{\pm}]_+ + 5J^4[J_0, J_{\pm}]_+ + 15[J_0^3, J_{\pm}]_+ - 30J^2[J_0^3, J_{\pm}]_+ + 33[J_0^5, J_{\pm}]_+}{4\sqrt{11}}$$

$$R_0^{6(6)} = -\frac{60J^2 - 40J^4 + 5J^6 - 294J_0^2 + 525J^2J_0^2 - 105J^4J_0^2 - 735J_0^4 + 315J^2J_0^4 - 231J_0^6}{4\sqrt{231}}$$

$$R_{\pm 7}^{7(7)} = \mp J_{\pm}^7$$

$$R_{\pm 6}^{7(7)} = \frac{\sqrt{7}}{2}[J_0, J_{\pm}^6]_+$$

$$R_{\pm 5}^{7(7)} = \pm \frac{1}{4}\sqrt{\frac{7}{13}}(145J_{\pm}^5 + 2J^2J_{\pm}^5 - 13[J_0^2, J_{\pm}^5]_+)$$

$$R_{\pm 4}^{7(7)} = -\frac{1}{2}\sqrt{\frac{7}{26}}(133[J_0, J_{\pm}^4]_+ + 3J^2[J_0, J_{\pm}^4]_+ - 13[J_0^3, J_{\pm}^4]_+)$$

$$R_{\pm 3}^{7(7)} = \mp \frac{1}{8}\sqrt{\frac{7}{143}}(5481J_{\pm}^3 + 222J^2J_{\pm}^3 + 6J^4J_{\pm}^3 - 1496[J_0^2, J_{\pm}^3]_+ - 66J^2[J_0^2, J_{\pm}^3]_+ + 143[J_0^4, J_{\pm}^3]_+)$$

$$R_{\pm 2}^{7(7)} = \frac{1}{8}\sqrt{\frac{7}{143}}(2092[J_0, J_{\pm}^2]_+ + 170J^2[J_0, J_{\pm}^2]_+ + 15J^4[J_0, J_{\pm}^2]_+ - 825[J_0^3, J_{\pm}^2]_+ - 110J^2[J_0^3, J_{\pm}^2]_+ + 143[J_0^5, J_{\pm}^2]_+)$$

$$R_{\pm 1}^{7(7)} = \pm \frac{1}{32}\sqrt{\frac{7}{429}}(225J_{\pm} + 270J^2J_{\pm} - 130J^4J_{\pm} + 20J^6J_{\pm} - 1092[J_0^2, J_{\pm}]_+ + 900J^2[J_0^2, J_{\pm}]_+ - 270J^4[J_0^2, J_{\pm}]_+$$

$$- 1155[J_0^4, J_{\pm}]_+ + 990J^2[J_0^4, J_{\pm}]_+ - 858[J_0^6, J_{\pm}]_+)$$

$$R_0^{7(7)} = \frac{J_0(180 - 882J^2 + 385J^4 - 35J^6 + 2121J_0^2 - 2205J^2J_0^2 + 315J^4J_0^2 + 2310J_0^4 - 693J^2J_0^4 + 429J_0^6)}{4\sqrt{429}}$$

$$R_{\pm 8}^{8(8)} = J_{\pm}^8$$

$$R_{\pm 7}^{8(8)} = \mp \sqrt{2}[J_0, J_{\pm}^7]_+$$

$$R_{\pm 6}^{8(8)} = -\frac{246J_{\pm}^6 + 2J^2J_{\pm}^6 - 15[J_0^2, J_{\pm}^6]_+}{\sqrt{30}}$$

$$R_{\pm 5}^{8(8)} = \pm \sqrt{\frac{7}{10}}(83[J_0, J_{\pm}^5]_+ + J^2[J_0, J_{\pm}^5]_+ - 5[J_0^3, J_{\pm}^5]_+)$$

$$R_{\pm 4}^{8(8)} = \frac{1}{4}\sqrt{\frac{7}{65}}(8568J_{\pm}^4 + 172J^2J_{\pm}^4 + 2J^4J_{\pm}^4 - 1313[J_0^2, J_{\pm}^4]_+ - 26J^2[J_0^2, J_{\pm}^4]_+ + 65[J_0^4, J_{\pm}^4]_+)$$

$$R_{\pm 3}^{8(8)} = \mp \frac{1}{2} \sqrt{\frac{7}{78}} (3648[J_0, J_{\pm}^3]_{+} + 128J^2[J_0, J_{\pm}^3]_{+} + 3J^4[J_0, J_{\pm}^3]_{+} - 663[J_0^3, J_{\pm}^3]_{+} - 26J^2[J_0^3, J_{\pm}^3]_{+} + 39[J_0^5, J_{\pm}^3]_{+})$$

$$R_{\pm 2}^{8(8)} = -\frac{1}{4} \sqrt{\frac{7}{286}} (9612J_{\pm}^2 + 744J^2J_{\pm}^2 + 26J^4J_{\pm}^2 + 2J^6J_{\pm}^2 - 5951[J_0^2, J_{\pm}^2]_{+} - 407J^2[J_0^2, J_{\pm}^2]_{+} - 33J^4[J_0^2, J_{\pm}^2]_{+} + 1144[J_0^4, J_{\pm}^2]_{+} + 143J^2[J_0^4, J_{\pm}^2]_{+} - 143[J_0^6, J_{\pm}^2]_{+})$$

$$R_{\pm 1}^{8(8)}$$

$$= \pm \frac{372[J_0, J_{\pm}]_{+} + 854J^2[J_0, J_{\pm}]_{+} - 315J^4[J_0, J_{\pm}]_{+} + 35J^6[J_0, J_{\pm}]_{+} - 2695[J_0^3, J_{\pm}]_{+} + 1925J^2[J_0^3, J_{\pm}]_{+} - 385J^4[J_0^3, J_{\pm}]_{+} - 2002[J_0^5, J_{\pm}]_{+} + 1001J^2[J_0^5, J_{\pm}]_{+} - 715[J_0^7, J_{\pm}]_{+}}{4\sqrt{1430}}$$

$$R_0^{8(8)}$$

$$= \frac{-5040J^2 + 3780J^4 - 700J^6 + 35J^8 + 27396J_0^2 - 59388J_0^2J_0^2 + 18270J_0^4J_0^2 - 1260J_0^6J_0^2 + 93555J_0^4 - 64680J_0^2J_0^4 + 6930J_0^4J_0^4 + 54054J_0^6 - 12012J_0^2J_0^6 + 6435J_0^8}{24\sqrt{1430}}$$

