

МОСКОВСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ

Химический факультет

**ПОСТРОЕНИЕ ПОВЕРХНОСТИ ПОТЕНЦИАЛЬНОЙ ЭНЕРГИИ И ПОИСК  
КРИТИЧЕСКИХ ТОЧЕК**

Студент: Безбородова Алина

Группа: 301

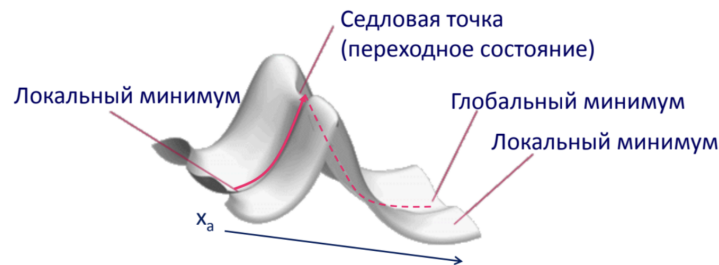
Москва  
2024

## ЗАДАНИЕ 2. ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ.

1. Определить значения  $q_1, q_2$  в критических точках ППЭ, установить тип критической точки из анализа собственных значений гессиана.
2. Построить поверхность потенциальной энергии  $E(q_1, q_2)$ .
3. Построить карту изолиний ППЭ в плоскости  $(q_1, q_2)$ .

Построить поверхность потенциальной энергии  $E(q_1, q_2)$  и определить геометрические параметры всех минимумов и переходных состояний:

$$E(q_1, q_2) = \left( \frac{1}{2} \cdot q_2 - \frac{\sqrt{3}}{2} \cdot q_1 \right)^4 - 2 \cdot \left( \frac{1}{2} \cdot q_2 - \frac{\sqrt{3}}{2} \cdot q_1 \right)^2 + \left( \frac{1}{2} \cdot q_1 - \frac{\sqrt{3}}{2} \cdot q_2 \right)$$



## ЗАДАНИЕ 2. РЕЗУЛЬТАТЫ.

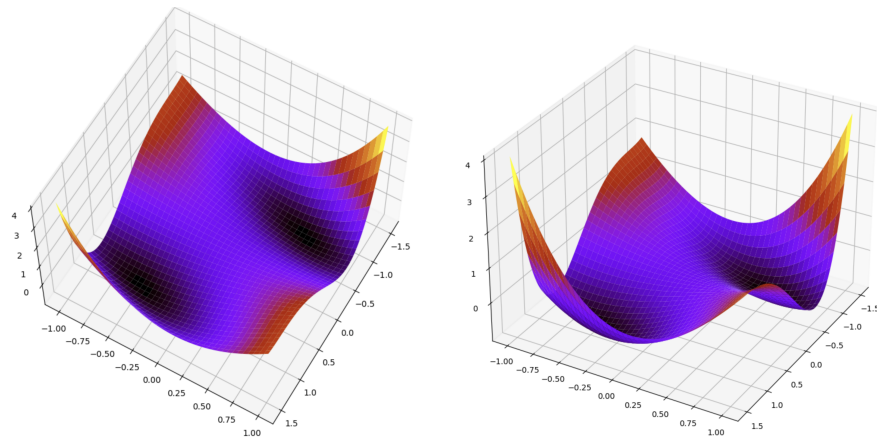


Рис. 1: График поверхности потенциальной энергии  $E(q_1, q_2)$

$$\frac{d^2}{dy^2} \left( \frac{1}{2} y - \frac{\sqrt{3}}{2} x \right)^4 - 2 \left( \frac{1}{2} y - \frac{\sqrt{3}}{2} x \right)^2 + \left( \frac{1}{2} x + \frac{\sqrt{3}}{2} y \right)^2$$

NATURAL LANGUAGE
MATH INPUT

√
∂f
(::)
√
ω
...

$\frac{\square}{\square}$ 
 $\square^\square$ 
 $\sqrt{\square}$ 
 $\sqrt[\square]{\square}$ 
 $\sqrt[\square]{\square}$ 
 $\frac{d}{d\square}$ 
 $\frac{d^2}{d^2\square}$ 
 $\int \square$ 
 $\int \square^\square$ 
 $\sum \square$ 
 $\lim_{\square \rightarrow \square}$ 
 $[\square, \square]$ 
 $\begin{pmatrix} \square & \square \\ \square & \square \end{pmatrix}$

Derivative
Approximate form
Step-by-step solution

$$\frac{\partial^2}{\partial y^2} \left( \left( \frac{y}{2} - \frac{\sqrt{3}x}{2} \right)^4 - 2 \left( \frac{y}{2} - \frac{\sqrt{3}x}{2} \right)^2 + \left( \frac{x}{2} + \frac{\sqrt{3}y}{2} \right)^2 \right) = \frac{3}{4} (y - \sqrt{3}x)^2 + \frac{1}{4}$$

$$\frac{d^2}{dx^2} \left( \frac{1}{2} y - \frac{\sqrt{3}}{2} x \right)^4 - 2 \left( \frac{1}{2} y - \frac{\sqrt{3}}{2} x \right)^2 + \left( \frac{1}{2} x + \frac{\sqrt{3}}{2} y \right)^2$$

NATURAL LANGUAGE
MATH INPUT

√
∂f
(::)
√
ω
...

$\frac{\square}{\square}$ 
 $\square^\square$ 
 $\sqrt{\square}$ 
 $\sqrt[\square]{\square}$ 
 $\sqrt[\square]{\square}$ 
 $\frac{d}{d\square}$ 
 $\frac{d^2}{d^2\square}$ 
 $\int \square$ 
 $\int \square^\square$ 
 $\sum \square$ 
 $\lim_{\square \rightarrow \square}$ 
 $[\square, \square]$ 
 $\begin{pmatrix} \square & \square \\ \square & \square \end{pmatrix}$

Derivative
Approximate form
Step-by-step solution

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2} \left( \left( \frac{y}{2} - \frac{\sqrt{3}x}{2} \right)^4 - 2 \left( \frac{y}{2} - \frac{\sqrt{3}x}{2} \right)^2 + \left( \frac{x}{2} + \frac{\sqrt{3}y}{2} \right)^2 \right) = \frac{9}{4} (y - \sqrt{3}x)^2 - \frac{5}{2}$$

$$\frac{d}{dx} \frac{d}{dy} \left( \frac{1}{2} y - \frac{\sqrt{3}}{2} x \right)^4 - 2 \left( \frac{1}{2} y - \frac{\sqrt{3}}{2} x \right)^2 + \left( \frac{1}{2} x + \frac{\sqrt{3}}{2} y \right)^2$$

NATURAL LANGUAGE
MATH INPUT

√
∂f
(::)
√
ω
...

$\frac{\square}{\square}$ 
 $\square^\square$ 
 $\sqrt{\square}$ 
 $\sqrt[\square]{\square}$ 
 $\sqrt[\square]{\square}$ 
 $\frac{d}{d\square}$ 
 $\frac{d^2}{d^2\square}$ 
 $\int \square$ 
 $\int \square^\square$ 
 $\sum \square$ 
 $\lim_{\square \rightarrow \square}$ 
 $[\square, \square]$ 
 $\begin{pmatrix} \square & \square \\ \square & \square \end{pmatrix}$

Derivative
Approximate form
Step-by-step solution

$$\frac{\partial}{\partial x} \left( \frac{\partial}{\partial y} \left( \left( \frac{y}{2} - \frac{\sqrt{3}x}{2} \right)^4 - 2 \left( \frac{y}{2} - \frac{\sqrt{3}x}{2} \right)^2 + \left( \frac{x}{2} + \frac{\sqrt{3}y}{2} \right)^2 \right) \right) = \frac{1}{4} (-9\sqrt{3}x^2 + 18xy - 3\sqrt{3}(y^2 - 2))$$

Рис. 2: Нахождение производных второго порядка от функции потенциальной энергии  $E(q_1, q_2)$

solve  $(-3 \sqrt{3} x^3 + 9 x^2 y - 3 \sqrt{3} x (-2 + y^2) + y (2 + y^2))/4 = 0$  and  $(9 x^3 - 9 \sqrt{3} x^2 y - \sqrt{3} (9 x^3 - 9 \sqrt{3} x^2 y - \sqrt{3} x (-2 + y^2) + y (2 + y^2)))/4 = 0$

NATURAL LANGUAGE MATH INPUT EXTENDED KEYBOARD EXAMPLES UPLOAD RANDOM

Input interpretation

solve  $\frac{1}{4} (-3 \sqrt{3} x^3 + 9 x^2 y - 3 \sqrt{3} x (-2 + y^2) + y (2 + y^2)) = 0$

$\frac{1}{4} (9 x^3 - 9 \sqrt{3} x^2 y - \sqrt{3} y (-6 + y^2) + x (-10 + 9 y^2)) = 0$

Results Approximate forms

$x = 0 \wedge y = 0$

$x = -\frac{\sqrt{3}}{2} \wedge y = \frac{1}{2}$

$x = \frac{\sqrt{3}}{2} \wedge y = -\frac{1}{2}$

Рис. 3: Решение уравнения в частных производных для нахождения критических точек

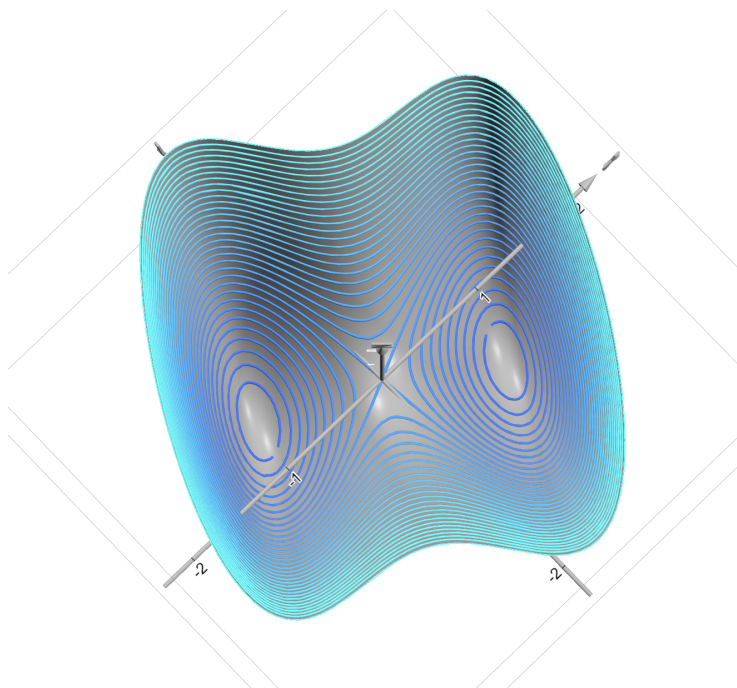


Рис. 4: Карта изолиний ППЭ в плоскости  $z = 0$

Выражения для производных:

$$\frac{d^2 f(x, y)}{dx^2} = \frac{9}{4} \cdot \left( y - \sqrt{3} \cdot x \right)^2 - \frac{5}{2}$$

$$\frac{d^2 f(x, y)}{dy^2} = \frac{3}{4} \cdot \left( y - \sqrt{3} \cdot x \right)^2 + \frac{1}{2}$$

$$\frac{d^2 f(x, y)}{dxdy} = \frac{1}{4} \cdot \left( -9\sqrt{3} \cdot x^2 + 18xy - 3\sqrt{3} \cdot (y^2 - 2) \right)$$

Условие глобального минимума:  $\frac{\partial E}{\partial x_i} = 0$ ,  $\frac{\partial^2 E}{\partial x_i^2} > 0$

Условие локального минимума:  $\frac{\partial E}{\partial x_i} = 0$ ,  $\frac{\partial^2 E}{\partial x_{i \neq a}^2} > 0$ ,  $\frac{\partial^2 E}{\partial x_a^2} < 0$

Значения производных в критических точках:

1.  $\frac{d^2 f(0, 0)}{dx^2} = -\frac{5}{2}$ ,  $\frac{d^2 f(0, 0)}{dy^2} = \frac{1}{2}$ ,  $\frac{d^2 f(0, 0)}{dxdy} = \frac{3\sqrt{3}}{2}$ ;
2.  $\frac{d^2 f(-\frac{\sqrt{3}}{2}, \frac{1}{2})}{dx^2} = \frac{13}{2}$ ,  $\frac{d^2 f(-\frac{\sqrt{3}}{2}, \frac{1}{2})}{dy^2} = \frac{7}{2}$ ,  $\frac{d^2 f(-\frac{\sqrt{3}}{2}, \frac{1}{2})}{dxdy} = -\frac{3\sqrt{3}}{2}$ ;
3.  $\frac{d^2 f(\frac{\sqrt{3}}{2}, -\frac{1}{2})}{dx^2} = \frac{13}{2}$ ,  $\frac{d^2 f(\frac{\sqrt{3}}{2}, -\frac{1}{2})}{dy^2} = \frac{7}{2}$ ,  $\frac{d^2 f(\frac{\sqrt{3}}{2}, -\frac{1}{2})}{dxdy} = -\frac{3\sqrt{3}}{2}$ .

## Нахождение собственных значений гессиана:

Матрица для критической точки  $(0, 0)$ :

```
[23]: import numpy as np
      from numpy import linalg as LA

      a = ([ -2.5, 2.5980762], [2.5980762, 0.5])

      eigenvalues, eigenvectors = LA.eig(a)
      for i in range(len(eigenvalues)):
          eigenvalues[i] = round(eigenvalues[i], 6)
      eigenvalues
```

```
[23]: array([-4., 2.])
```

Матрица для критических точек  $\left( -\frac{\sqrt{3}}{2}, \frac{1}{2} \right)$  и  $\left( \frac{\sqrt{3}}{2}, -\frac{1}{2} \right)$ :

```
[24]: a = ([ 6.5, -2.5980762], [-2.5980762, 3.5])

      eigenvalues, eigenvectors = LA.eig(a)
      for i in range(len(eigenvalues)):
          eigenvalues[i] = round(eigenvalues[i], 6)
      eigenvalues
```

```
[24]: array([8., 2.])
```

### Задание 2. Вывод.

1. Были построены график поверхности потенциальной энергии, карта изолиний;
2. Были найдены частные производные по координатам  $q_1, q_2$ , составлены уравнения для поиска критических точек;
3. Определены критические точки  $(0, 0)$ ,  $(-\frac{\sqrt{3}}{2}, \frac{1}{2})$  и  $(\frac{\sqrt{3}}{2}, -\frac{1}{2})$ . Точки были классифицированы, опираясь на собственные значения гессиана в каждом конкретном случае. Оказалось, что точка  $(0,0)$  является седловой точкой, все остальные – точками минимумами.