МОСКОВСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ

Химический факультет

Построение поверхности потенциальной энергии и поиск критических точек

Студент:	Безбородова Алина
Группа:	301

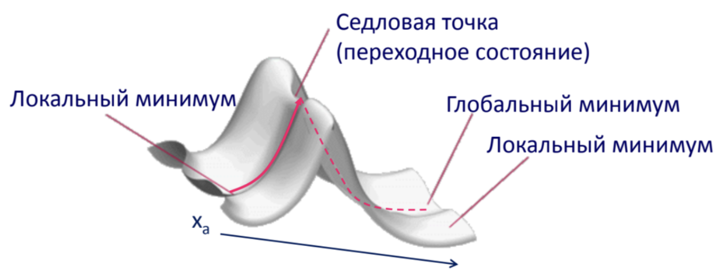
Москва
2024

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.

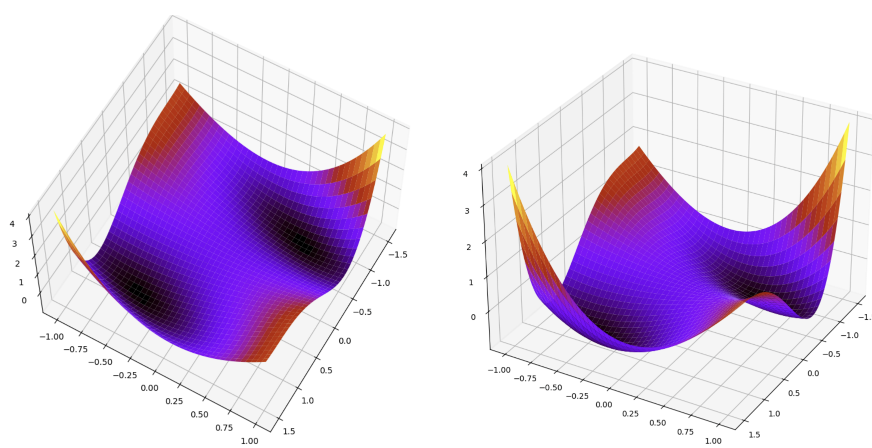


Рис. 1: График поверхности потенциальной энергии $E(q_1, q_2)$

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

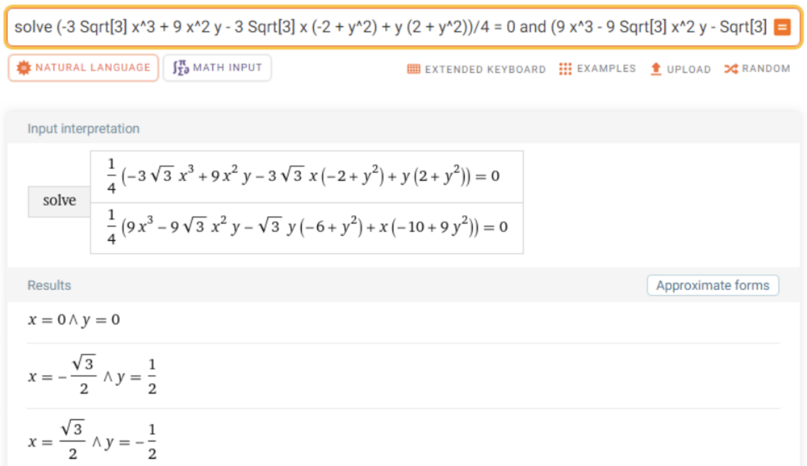


Рис. 3: Решение уравнения в частных производных для нахождения критических точек

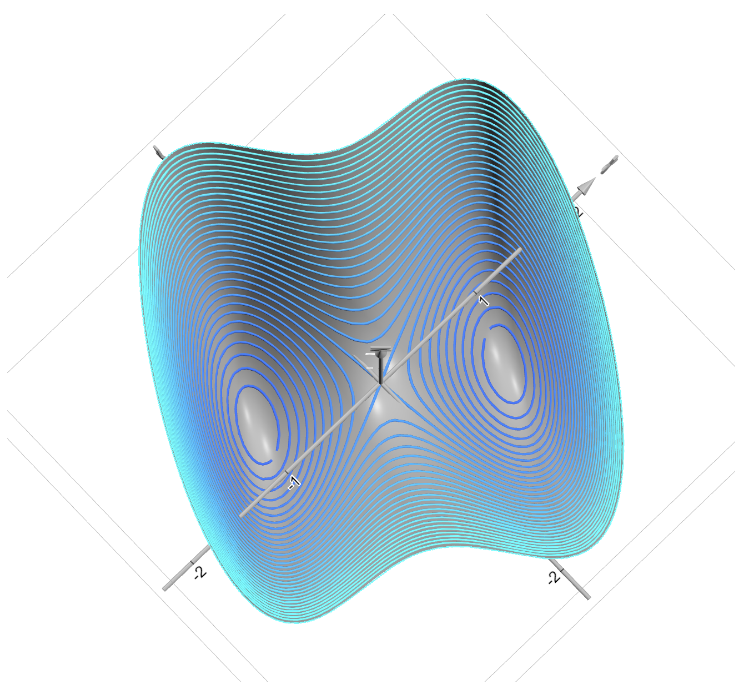


Рис. 4: Карта изолиний ППЭ в плоскости z = 0

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: $\frac{\partial E}{\partial x_i} = 0, \quad \frac{\partial^2 E}{\partial x_i^2} > 0$

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

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.