



โครงการ  
การเรียนการสอนเพื่อเสริมประสบการณ์

ชื่อโครงการ      การพัฒนาฟังก์ชันคะแนนเพื่อจำแนกโหมดการสั่นของโมเลกุล  
Developing Scoring Functions to Classify Vibrational Modes of  
Molecules

ชื่อนิสิต            นายวิศรุต รัตน์นรา

ภาควิชา             เคมี

ปีการศึกษา        2560

คณะวิทยาศาสตร์ จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย

การพัฒนาฟังก์ชันคะแนนเพื่อจำแนกโหมดการสั่นของโมเลกุล

Developing Scoring Functions to Classify Vibrational Modes of  
Molecules

โดย

นายวิศรุต รัตนนรา

รายงานนี้เป็นส่วนหนึ่งของการศึกษาตามหลักสูตร

ปริญญาวิทยาศาสตรบัณฑิต

ภาควิชาเคมี คณะวิทยาศาสตร์

จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย

ปีการศึกษา 2560

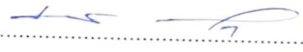
โครงการ การพัฒนาฟังก์ชันคะแนนเพื่อจำแนกโหมดการสั้นของโมเลกุล  
โดย นายวิศรุต รัตนนรา

ได้รับอนุมัติให้เป็นส่วนหนึ่งของการศึกษาตามหลักสูตรปริญญาวิทยาศาสตรบัณฑิต สาขาวิชาเคมี  
ภาควิชาเคมี คณะวิทยาศาสตร์ จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย

คณะกรรมการสอบโครงการ

  
..... ประธานกรรมการ  
(ศาสตราจารย์ ดร. สนอง เอกสิทธิ์)

  
..... อาจารย์ที่ปรึกษา  
(อาจารย์ ดร.ณัฐพงศ์ ไพบูลย์วรชาติ)

  
..... กรรมการ  
(รองศาสตราจารย์ ดร. ปกรณ์ วรานุกุล)

รายงานฉบับนี้ได้รับความเห็นชอบและอนุมัติโดยหัวหน้าภาควิชาเคมี

..... หัวหน้าภาควิชาเคมี  
(รองศาสตราจารย์ ดร.วุฒิชัย พาราสุข)

วันที่ ..... เดือนพฤษภาคม พ.ศ. 2561

คุณภาพของการเขียนรายงานเล่มนี้อยู่ในระดับ  ดีมาก  ดี  พอใช้



Project Title            Developing Scoring Functions to Classify Vibrational Modes of  
   Molecules

Student Name            Mister Witsarut Rattananara    Student ID 5733159723

Advisor Name            Dr. Nattapong Paiboonvorachat

Department of Chemistry, Faculty of Science, Chulalongkorn University, Academic Year 2017

### Abstract

Normal modes of a molecule, a set of patterns for molecular motions, can generally be divided into translations, rotations and vibrations. The vibrational modes can further be classified into various types, such as stretching and bending. In general, a given mode of motion can be identified to be one of the above classes by observation. However, this becomes extremely difficult when the molecules are larger. As a result, scores obtained by a specific mathematical description have been developed to help classify the modes of motion into the normal modes to which they are most similar. Since the scoring functions for translational and rotational modes have been previously determined, we would like to develop a scoring function used to classify the stretching mode of molecules in this research. Working out an appropriate definition involves careful investigation of the motion modes for small molecules (i.e.  $\text{H}_2\text{O}$ ,  $\text{NO}_2^-$  and  $\text{NO}_3^-$ ). The definition that best performed is that purely involves the change in bond lengths within the molecule, and was chosen for the development of a computer program in C++ language. The program was then applied to larger molecules, such as  $\text{HPO}_4^{2-}$  and  $\text{N}_2\text{O}_5$  to test its applicability. In summary, the implementation of the chosen definition of stretching scores into a program was a success, although the obtained scores may not be able to completely separate the stretches from the bends for larger molecules. Hence, the definition needs further refinement.

Keywords: molecular vibration, scoring function

### กิตติกรรมประกาศ

ในโครงการวิจัยนี้ขอขอบคุณอาจารย์ ดร.ณัฐพงศ์ ไพบุลย์วรชาติ อาจารย์ที่ปรึกษาโครงการวิจัยนี้ที่ช่วยให้คำปรึกษาและช่วยให้โครงการวิจัยสำเร็จลุล่วงไปได้ด้วยดี

ผู้วิจัยขอขอบคุณรองศาสตราจารย์ ดร.วิวัฒน์ วชิรวงศ์กวิน ทีมออบโปรแกรมคำนวณ EMIT และอนุญาตให้เข้าใช้งานเซิร์ฟเวอร์คอมพิวเตอร์ ทำให้สามารถดำเนินโครงการวิจัยนี้ต่อไปได้

สุดท้ายขอขอบคุณคณะวิทยาศาสตร์ จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัยที่จัดโครงการการเรียนการสอนเพื่อเสริมประสบการณ์นี้เพื่อฝึกฝนและเสริมประสบการณ์การทำงานให้กับนิสิตได้เตรียมความพร้อมก่อนออกไปทำงานหรือศึกษาต่อไปในอนาคต

นายวิศรุต รัตนรา



## สารบัญ

	หน้า
บทคัดย่อภาษาไทย	ค
บทคัดย่อภาษาอังกฤษ	ง
กิตติกรรมประกาศ	จ
สารบัญ	ฉ
สารบัญตารางที่	ช
สารบัญรูป	ซ
สารบัญสมการ	ฌ
สัญลักษณ์และคำย่อ	ญ
<b>บทที่ 1 บทนำ</b>	1
1.1 ความเป็นมาและมูลเหตุจูงใจในการเสนอโครงการ	1
1.2 วัตถุประสงค์และขอบเขตงานวิจัย	1
1.3 ทฤษฎีที่เกี่ยวข้อง	1
<b>บทที่ 2 การทดลอง</b>	7
2.1 รายการเครื่องมือ อุปกรณ์	7
2.2 วิธีการทดลอง	7
<b>บทที่ 3 ผลการทดลองและอภิปรายผลการทดลอง</b>	14
3.1 การเปรียบเทียบฟังก์ชันคะแนนเพื่อเลือกฟังก์ชันคะแนนที่เหมาะสมในการระบุลักษณะเฉพาะของโหนดการยึดของฟังก์ชันคลื่น	14
3.2 การพัฒนาโปรแกรมจากฟังก์ชันคะแนนของโหนดการยึด โดยใช้ภาษาคอมพิวเตอร์ C++	18
<b>บทที่ 4 สรุปผลการทดลอง</b>	21
เอกสารอ้างอิง	22
ภาคผนวก ก : ข้อมูลโครงสร้างของโมเลกุลที่ใช้ทดสอบ	23
ภาคผนวก ข : โปรแกรมคอมพิวเตอร์จากฟังก์ชันคะแนนสำหรับระบุโหนดการยึดของโมเลกุล	24
ภาคผนวก ค : ข้อมูลโครงสร้างโมเลกุลและโหนดการเคลื่อนไหวของโมเลกุลที่ใช้ทดสอบกับโปรแกรมฟังก์ชันคะแนนสำหรับระบุโหนดการยึดของโมเลกุล	26
ประวัติผู้วิจัย	34

สารบัญตารางที่

ตารางที่	หน้า
ตารางที่ 1.1 ตารางค่าแรงแคเตอร์ $C_{2V}$ ของ $H_2O$	3
ตารางที่ 1.2 วิธีตัวดำเนินการโพเจกต์ชันของ $C_{2V}$	3
ตารางที่ 1.3 ข้อมูลโหมดการเคลื่อนไหวของ CO จาก EMIT มีทั้งหมด 6 โหมด โดยในโหมดการเคลื่อนไหวประกอบด้วยเวกเตอร์การเคลื่อนที่ของ C และ O ตามลำดับ	5
ตารางที่ 2.1 โหมดการเคลื่อนไหวของ $H_2O$ ที่ได้มาจากโปรแกรม EMIT โดยในโหมดการเคลื่อนไหวจะประกอบด้วยเวกเตอร์การเคลื่อนที่ของอะตอมแต่ละอะตอมในโมเลกุล	8
ตารางที่ 2.2 โหมดการเคลื่อนไหวของ $NO_2$ ที่ได้มาจากโปรแกรม EMIT	9
ตารางที่ 2.3 โหมดการเคลื่อนไหวของ $NO_3$ ที่ได้มาจากโปรแกรม EMIT	10
ตารางที่ 3.1 ค่าคะแนนการยึดสำหรับโหมดการเคลื่อนไหวของ $H_2O$ จากแต่ละฟังก์ชันคะแนน	14
ตารางที่ 3.2 ค่าคะแนนการยึดสำหรับโหมดการเคลื่อนไหวของ $NO_2$ จากแต่ละฟังก์ชันคะแนน	15
ตารางที่ 3.3 ค่าคะแนนการยึดสำหรับโหมดการเคลื่อนไหวของ $NO_3$ จากแต่ละฟังก์ชันคะแนน	15
ตารางที่ 3.4 เปรียบเทียบอัตราส่วนระหว่างค่าคะแนนกับค่าคะแนนสูงสุดของโหมดการยึดของโหมดการเคลื่อนไหวของ $H_2O$ จากแต่ละฟังก์ชันคะแนน	16
ตารางที่ 3.5 เปรียบเทียบอัตราส่วนระหว่างค่าคะแนนกับค่าคะแนนสูงสุดของโหมดการยึดของโหมดการเคลื่อนไหวของ $NO_2$ จากแต่ละฟังก์ชันคะแนน	17
ตารางที่ 3.6 เปรียบเทียบอัตราส่วนระหว่างค่าคะแนนกับค่าคะแนนสูงสุดของโหมดการยึดของโหมดการเคลื่อนไหวของ $NO_3$ จากแต่ละฟังก์ชันคะแนน	17
ตารางที่ 3.7 ค่าคะแนนการยึดสำหรับโหมดการเคลื่อนไหวของ $HSO_3$ จากโปรแกรมคอมพิวเตอร์	18
ตารางที่ 3.8 ค่าคะแนนการยึดสำหรับโหมดการเคลื่อนไหวของ $HPO_4^{2-}$ จากโปรแกรมคอมพิวเตอร์	19
ตารางที่ 3.9 ค่าคะแนนการยึดสำหรับโหมดการเคลื่อนไหวของ $N_2O_5$ จากโปรแกรมคอมพิวเตอร์	20



สารบัญรูป

รูปที่	หน้า
รูปที่ 1.1 โหมดการยึดของโมเลกุลตามคำอธิบายของ M.E. Starzak	3
รูปที่ 1.2 โครงสร้างของ H <sub>2</sub> O ประกอบด้วยเวกเตอร์พันธะ $\vec{r}_1$ และ $\vec{r}_2$	2
รูปที่ 1.3 การเปลี่ยนแปลงของเวกเตอร์พันธะโดยใช้ตัวดำเนินการสมมาตร	3
รูปที่ 1.4 โหมดการยึดของ H <sub>2</sub> O จาก SALC	4
รูปที่ 1.5 โหมดการเคลื่อนไหวของ CO จาก EMIT โดยนำเวกเตอร์การเคลื่อนที่ของ C และ O จากตารางที่ 1.1 นำลงในโครงสร้างโมเลกุลเดียวกัน	5
รูปที่ 1.6 การหมุนของโมเลกุลบนแกน Z	6
รูปที่ 2.1 โหมดการเคลื่อนไหวของ H <sub>2</sub> O ที่ได้มาจากโปรแกรม EMIT และระบุชนิดของโหมดปกติที่ใกล้เคียงโดยการสังเกตตามนิยามแล้ว	8
รูปที่ 2.2 โหมดการเคลื่อนไหวของ NO <sub>2</sub> <sup>-</sup> ที่ได้มาจากโปรแกรม EMIT และระบุชนิดของโหมดปกติที่ใกล้เคียงโดยการสังเกตตามนิยามแล้ว	9
รูปที่ 2.3 โหมดการเคลื่อนไหวของ NO <sub>3</sub> <sup>-</sup> ที่ได้มาจากโปรแกรม EMIT และระบุชนิดของโหมดปกติที่ใกล้เคียงโดยการสังเกตตามนิยามแล้ว	11
รูปที่ 2.4 แผนงานพัฒนาโปรแกรมจากฟังก์ชันคะแนนของโหมดการยึดที่เลือกจากภาษาคอมพิวเตอร์ C++	13
รูปที่ 3.1 กราฟเปรียบเทียบค่าคะแนนของโหมดการยึดของโหมดการเคลื่อนไหวของ H <sub>2</sub> O จากแต่ละฟังก์ชัน	14
รูปที่ 3.2 กราฟเปรียบเทียบค่าคะแนนของโหมดการยึดของโหมดการเคลื่อนไหวของ NO <sub>2</sub> <sup>-</sup> จากแต่ละฟังก์ชัน	15
รูปที่ 3.3 กราฟเปรียบเทียบค่าคะแนนของโหมดการยึดของโหมดการเคลื่อนไหวของ NO <sub>3</sub> <sup>-</sup> จากแต่ละฟังก์ชัน	16
รูปที่ 3.4 กราฟเปรียบเทียบอัตราส่วนระหว่างค่าคะแนนกับค่าคะแนนสูงสุดของโหมดการยึดของโหมดการเคลื่อนไหวของ H <sub>2</sub> O จากแต่ละฟังก์ชันคะแนน	16
รูปที่ 3.5 กราฟเปรียบเทียบอัตราส่วนระหว่างค่าคะแนนกับค่าคะแนนสูงสุดของโหมดการยึดของโหมดการเคลื่อนไหวของ NO <sub>2</sub> <sup>-</sup> จากแต่ละฟังก์ชันคะแนน	17
รูปที่ 3.6 กราฟเปรียบเทียบอัตราส่วนระหว่างค่าคะแนนกับค่าคะแนนสูงสุดของโหมดการยึดของโหมดการเคลื่อนไหวของ NO <sub>3</sub> <sup>-</sup> จากแต่ละฟังก์ชันคะแนน	18
รูปที่ 3.7 กราฟค่าคะแนนการยึดสำหรับโหมดการเคลื่อนไหวของ HSO <sub>3</sub> <sup>-</sup> จากโปรแกรมคอมพิวเตอร์	19
รูปที่ 3.8 กราฟค่าคะแนนการยึดสำหรับโหมดการเคลื่อนไหวของ HPO <sub>4</sub> <sup>2-</sup> จากโปรแกรมคอมพิวเตอร์	19
รูปที่ 3.9 กราฟค่าคะแนนการยึดสำหรับโหมดการเคลื่อนไหวของ N <sub>2</sub> O <sub>5</sub> จากโปรแกรมคอมพิวเตอร์	20

สารบัญสมการ

สมการที่	หน้า
สมการที่ 1.1 วิธีดำเนินการโพรเจกต์ชั้น	2
สมการที่ 1.2 สมการความสัมพันธ์ระหว่างเทนเซอร์โมเมนต์เชิงมุม โมเมนต์เชิงมุม และความเร็ว- เชิงมุม	4
สมการที่ 1.3 ฟังก์ชันคະแนนสำหรับระบุโหมดการเลื่อนที่	6
สมการที่ 1.4 ฟังก์ชันคະแนนสำหรับระบุโหมดการหมุน	6
สมการที่ 2.1 ฟังก์ชันคະแนนสำหรับระบุโหมดการยืดของอะตอมล้อมรอบจากนิยามที่ 1	10
สมการที่ 2.2 ฟังก์ชันคະแนนสำหรับระบุโหมดการยืดของอะตอมกลางจากนิยามที่ 1	12
สมการที่ 2.3 ฟังก์ชันคະแนนสำหรับระบุโหมดการยืดจากนิยามที่ 1	12
สมการที่ 2.4 ฟังก์ชันคະแนนสำหรับระบุโหมดการยืดจากนิยามที่ 2.ก	12
สมการที่ 2.5 ฟังก์ชันคະแนนสำหรับระบุโหมดการยืดจากนิยามที่ 2.ข	12



สัญลักษณ์และคำย่อ

$R_x$	โมเมนต์การหมุนรอบแกน X
$R_y$	โมเมนต์การหมุนรอบแกน Y
$R_z$	โมเมนต์การหมุนรอบแกน Z
$T_x$	โมเมนต์การเลื่อนที่ตามแกน X
$T_y$	โมเมนต์การเลื่อนที่ตามแกน Y
$T_z$	โมเมนต์การเลื่อนที่ตามแกน Z
$v$	โมเมนต์การยึด
$v_s$	โมเมนต์การยึดแบบสมมาตร
$v_{as}$	โมเมนต์การยึดแบบอสมมาตร
$\delta$	โมเมนต์การงอ
$\vec{d}_a$	เวกเตอร์การเคลื่อนที่ของอะตอม
$\vec{r}_a$	เวกเตอร์ตำแหน่งของอะตอมก่อนการเคลื่อนที่
$\vec{r}'_a$	เวกเตอร์ตำแหน่งของอะตอมหลังการเคลื่อนที่
$\vec{B}$	เวกเตอร์พันธะก่อนการเคลื่อนที่ของอะตอม
$\vec{B}'$	เวกเตอร์พันธะหลังการเคลื่อนที่ของอะตอม
$\hat{Q}$	เวกเตอร์แกนหลัก
$s[T_Q]$	ค่าคะแนนโมเมนต์การเลื่อนที่
$s[R_Q]$	ค่าคะแนนโมเมนต์การหมุน
$s[v]$	ค่าคะแนนโมเมนต์การยึด
$s[v]_{C.A.}$	ค่าคะแนนโมเมนต์การยึดของอะตอมกลาง
$s[v]_{T.A.}$	ค่าคะแนนโมเมนต์การยึดของอะตอมล้อมรอบ
$m_a$	มวลอะตอม
$N$	จำนวนอะตอม
$N_{C.A.}$	จำนวนอะตอมกลาง
$N_{T.A.}$	จำนวนอะตอมล้อมรอบ
$N_Q$	จำนวนอะตอมที่ผ่านแกนหลัก
$N_B$	จำนวนพันธะ
$L$	โมเมนต์ตัมเชิงมุม
$I$	เทนเซอร์โมเมนต์ความเฉื่อย
$\omega$	ความเร็วเชิงมุม

# บทที่ 1

## บทนำ

### 1.1 ความเป็นมาและความสำคัญของปัญหา

โหมดปกติ (normal mode) ของโมเลกุลเป็นรูปแบบการเคลื่อนไหวโดยทั่วไปของโมเลกุล ซึ่งสามารถแบ่งเป็นการเลื่อนที่ (translation) การหมุน (rotation) และการสั่น (vibration) ซึ่งรูปแบบการสั่นของโมเลกุลนั้นยังสามารถจำแนกได้อีกเป็นหลายประเภท เช่น การยืด (stretching) และการงอ (bending) เป็นต้น โดยทั่วไปเราสามารถระบุโหมดปกติว่าเป็นรูปแบบใดได้จากฟังก์ชันคลื่น (wavefunction) ที่หาได้ของโหมดปกติสำหรับโมเลกุลนั้น ๆ ซึ่งในปัจจุบันมีวิธีการหาอยู่หลายวิธี เช่น วิธีตัวดำเนินการโพรเจกต์ชัน (Projection Operator Method หรือ POM) จากทฤษฎีกลุ่ม (Group Theory) ซึ่งหาฟังก์ชันคลื่นของโหมดปกติจากตัวแทนที่ลดทอนไม่ได้ (Irreducible representation) <sup>[1]</sup>, การคำนวณโดยใช้โปรแกรม Gaussian <sup>[2]</sup> หรือการหารูปแบบโดยประมาณของโหมดปกติจาก ไอเกนฟังก์ชัน (eigenfunction) ของเทนเซอร์โมเมนต์ความเฉื่อยแบบขยาย (Expanded Moment of Inertia Tensor หรือ EMIT) <sup>[3]</sup> เมื่อมีรูปแบบการเคลื่อนที่ที่หาได้ไม่ว่าจากวิธีการใด สามารถสังเกตได้ว่าโหมดหนึ่ง ๆ ที่สนใจนั้นคล้ายโหมดปกติรูปแบบใด ทว่าในโมเลกุลที่มีขนาดใหญ่ เวกเตอร์การเคลื่อนที่ของอะตอมก็ย่อมมีจำนวนมากขึ้นด้วย ทำให้สังเกตและระบุชนิดของการเคลื่อนที่ได้ยากด้วยเหตุนี้จึงได้มีความพยายามในการพัฒนาฟังก์ชันคะแนน (scoring function) ซึ่งคำนวณค่าคะแนนจากรูปร่างของโมเลกุลและชุดเวกเตอร์การเคลื่อนที่ของอะตอม มาใช้ระบุลักษณะพิเศษหรือรูปแบบการเคลื่อนที่ที่โหมดการเคลื่อนที่นั้น ๆ แสดงอยู่ <sup>[3]</sup> N. Paiboonvorachat และ V. Vchirawongkwin <sup>[3]</sup> ได้พัฒนาฟังก์ชันคะแนนเพื่อระบุโหมดการเคลื่อนที่และการหมุนแล้ว แต่ยังไม่มีการพัฒนาฟังก์ชันคะแนนเพื่อระบุโหมดการสั่นของโมเลกุล ผู้วิจัยจึงสนใจที่จะพัฒนาฟังก์ชันคะแนนเพื่อจำแนกโหมดการสั่นของโมเลกุล ทำให้ฟังก์ชันชุดนี้สมบูรณ์และสามารถนำไปใช้ระบุชนิดของโหมดได้อย่างถูกต้องและแม่นยำโดยอัตโนมัติ โดยในงานวิจัยนี้เป็นการพัฒนาฟังก์ชันคะแนนสำหรับโหมดการยืดของโมเลกุล

### 1.2 วัตถุประสงค์และขอบเขตของการวิจัย

พัฒนาฟังก์ชันคะแนนจากนิยามที่เหมาะสมสำหรับระบุลักษณะพิเศษสำหรับการยืดของโมเลกุลและทดสอบนิยามของโหมดการยืดโดยต้องการให้ฟังก์ชันคะแนนนี้สามารถแยกโหมดการยืดออกจากโหมดการเคลื่อนไหวอื่น ๆ ได้โดยเฉพาะโหมดอื่น ๆ ในโหมดการสั่นเช่นโหมดการงอ โมเลกุลที่ใช้ทดสอบคือ  $\text{H}_2\text{O}$ ,  $\text{NO}_2^-$  และ  $\text{NO}_3^-$  และพัฒนาเป็นโปรแกรมคอมพิวเตอร์แล้วทดสอบโปรแกรมกับโมเลกุลที่มีขนาดใหญ่ขึ้นหรือมีรูปร่างโมเลกุลต่างกัน ได้แก่  $\text{HSO}_3^-$ ,  $\text{HPO}_4^{2-}$  และ  $\text{N}_2\text{O}_5$

### 1.3 ทฤษฎีที่เกี่ยวข้อง

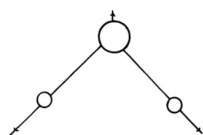
#### โหมดปกติของโมเลกุล (Normal modes)

โดยปกติโมเลกุลจะมีการเคลื่อนไหวในพื้นที่ 3 มิติ ซึ่งสามารถแบ่งออกได้เป็นการเคลื่อนที่ในทิศทางของแกนหลัก (principal axes) ทั้ง 3 ทิศทางเรียกว่าโหมดการเลื่อนที่ (translation mode) โดยอะตอมทุกอะตอมในโมเลกุลต้องเคลื่อนที่ไปในทิศทางเดียวกัน การหมุนของโมเลกุลรอบแกนหลักเรียกว่าโหมดการหมุน (rotation mode) โดยอะตอมที่อยู่ล้อมรอบแกนหมุนต้องเคลื่อนที่ที่ตั้งฉากกับเส้นระยะห่างจากแกนหมุน และการเคลื่อนที่ของอะตอมในโมเลกุลไปในทิศทางต่าง ๆ โดยไม่ขึ้นกับแกนหลักเรียกว่าโหมดการสั่น (vibration mode)<sup>[1, 3]</sup>

ในโหมดการสั่น โมเลกุลจะมีการเคลื่อนที่ซึ่งมีการเปลี่ยนแปลงความยาวพันธะหรือมุมระหว่างพันธะโดยไม่ทำให้เกิดการเคลื่อนที่ศูนย์กลางมวล (center of mass) หรือโมเมนตัมเชิงมุมกับโมเลกุล แสดงว่าไม่มีการเคลื่อนที่หรือการหมุนเกิดขึ้นกับโมเลกุล<sup>[1]</sup> โดยโหมดการสั่นสามารถแบ่งได้หลายชนิดเช่น โหมดการยืด (stretching mode) และโหมดการงอ (bending mode) เป็นต้น

การอธิบายโหมดการยืดของโมเลกุลมีอยู่หลายแบบ เช่น M.E. Starzak<sup>[4]</sup> ได้อธิบายว่าโมเลกุลที่มีการยืดนั้นอะตอมล้อมรอบของโมเลกุลจะเคลื่อนที่ไปตามแนวพันธะที่อยู่บนอะตอมนั้นและอะตอมกลางที่เหลือจะเคลื่อนที่ไปในทิศทางที่ทำให้จุดศูนย์กลางมวลของโมเลกุลนั้นยังคงอยู่ในตำแหน่งเดิมตามรูปที่ 1.1 หรือนิยามที่เป็นที่รู้จักกันอยู่การดูการเปลี่ยนแปลงความยาวพันธะในโมเลกุลเป็นต้น

สำหรับนิยามของโหมดการงอจะแตกต่างจากโหมดการยืดคือ โมเลกุลจะไม่มีการเปลี่ยนแปลงความยาวของพันธะแต่จะมีการเปลี่ยนแปลงมุมระหว่างพันธะในโมเลกุลแทน



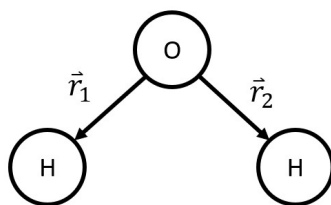
รูปที่ 1.1 โหมดการยืดของโมเลกุลตามคำอธิบายของ M.E. Starzak

#### วิธีตัวดำเนินการโพรเจกต์ชัน (Projection Operator Method หรือ POM)<sup>[1]</sup>

เป็นตัวดำเนินการที่ใช้สร้างเวกเตอร์ความหมายใหม่จากเวกเตอร์ฐาน (basis vector) ชุดหนึ่ง ๆ และตัวแทนที่ลดทอนไม่ได้ (Irreducible representation) ซึ่งหาได้จากตารางลักษณะ (character table) สำหรับพอยท์กรุป (point group) ของโมเลกุล โดยการหาเวกเตอร์การเคลื่อนที่ของอะตอมจะคำนวณจากความสัมพันธ์ของโพรเจกต์ชันโอเปอเรเตอร์กับตัวดำเนินการสมมาตร (symmetry operator) ตามสมการ

$$\hat{P}_\chi = \sum_R [\chi(\hat{R})\hat{R}]\hat{x} \quad (1.1)$$

โดย  $\hat{P}_\chi$  คือ ตัวดำเนินการโพรเจกต์ชัน,  $\hat{x}$  คือ พิกัดหรือเวกเตอร์ฐานที่ใช้,  $\chi(\hat{R})$  คือ คาแรกเตอร์ของตัวดำเนินการสำหรับตัวแทนที่ลดทอนไม่ได้และ  $\hat{R}$  คือ ตัวดำเนินการสมมาตร ซึ่งวิธีนี้สามารถใช้หาเวกเตอร์การเคลื่อนที่ของอะตอมต่าง ๆ ในโมเลกุลของโหมดปกติชนิดต่าง ตัวอย่างเช่น  $\text{H}_2\text{O}$  มีโครงสร้างตามรูปที่ 1.2 มีพอยท์กรุปเป็น  $C_{2v}$  มีตารางคาแรกเตอร์ตามตารางที่ 1.1



รูปที่ 1.2 โครงสร้างของ  $\text{H}_2\text{O}$  ประกอบด้วยเวกเตอร์พันธะ  $\vec{r}_1$  และ  $\vec{r}_2$

ตารางที่ 1.1. Character Table ของ  $C_{2v}$  point group

$C_{2v}$	$E$	$C_2$	$\sigma_v$	$\sigma_v'$		
$A_1$	1	1	1	1	$z$	$x^2, y^2, z^2$
$A_2$	1	1	-1	-1	$R_z$	$xy$
$B_1$	1	-1	1	-1	$x, R_y$	$xz$
$B_2$	1	-1	-1	1	$y, R_x$	$yz$

ขั้นถัดไปเป็นการหาเวกเตอร์การเคลื่อนที่ของอะตอมโดยการสร้าง Symmetry adapted linear combination (SALC) โดยวิธีใช้ตัวดำเนินการโพรเจกต์ชัน โดยเลือกเวกเตอร์ใดเวกเตอร์หนึ่งมาเป็นเวกเตอร์ฐานแล้วนำไปหาเวกเตอร์ใหม่โดยใช้ตัวดำเนินการสมมาตร สุดท้ายใช้ตัวดำเนินการโพรเจกต์ชันเปลี่ยนเวกเตอร์ฐานให้ได้เวกเตอร์ใหม่ เช่นการสร้าง SALC จากเวกเตอร์ฐาน  $\vec{r}_1$  เป็นไปตามรูปที่ 1.3 และตารางที่ 1.2

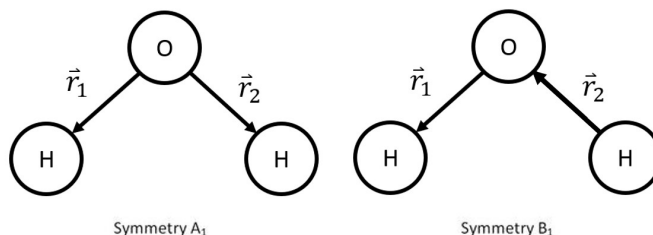
	$E$	$C_2$	$\sigma_v$	$\sigma_v'$
$\hat{R}\vec{x}$				
	$\vec{r}_1$ ไม่ถูกเปลี่ยน	$\vec{r}_1$ ถูกแทนที่ด้วย $\vec{r}_2$	$\vec{r}_1$ ถูกแทนที่ด้วย $\vec{r}_2$	$\vec{r}_1$ ไม่ถูกเปลี่ยน

รูปที่ 1.3 การเปลี่ยนแปลงของเวกเตอร์พันธะโดยใช้ตัวดำเนินการสมมาตร

ตารางที่ 1.2 วิธีตัวดำเนินการโพรเจกต์ชันของ  $C_{2v}$  สำหรับเวกเตอร์ฐาน  $\vec{r}_1$

	$E$	$C_2$	$\sigma_v$	$\sigma_v'$	Sum	Normalize
$A_1 \hat{R}\vec{r}_1$	$1(\vec{r}_1)$	$1(\vec{r}_2)$	$1(\vec{r}_2)$	$1(\vec{r}_1)$	$2(\vec{r}_1 + \vec{r}_2)$	$\frac{1}{\sqrt{2}}(\vec{r}_1 + \vec{r}_2)$
$A_2 \hat{R}\vec{r}_1$	$1(\vec{r}_1)$	$1(\vec{r}_2)$	$-1(\vec{r}_2)$	$-1(\vec{r}_1)$	0	0
$B_1 \hat{R}\vec{r}_1$	$1(\vec{r}_1)$	$-1(\vec{r}_2)$	$1(\vec{r}_2)$	$-1(\vec{r}_1)$	0	0
$B_2 \hat{R}\vec{r}_1$	$1(\vec{r}_1)$	$1(\vec{r}_2)$	$1(\vec{r}_2)$	$1(\vec{r}_1)$	$2(\vec{r}_1 - \vec{r}_2)$	$\frac{1}{\sqrt{2}}(\vec{r}_1 - \vec{r}_2)$

เมื่อนำ SALC มาดูในโมเลกุลเราจะได้โหมดการเคลื่อนไหวจากเวกเตอร์ฐาน  $\vec{r}_1$  ทั้งหมด 2 โหมดจากสมมาตร  $A_1$  และสมมาตร  $B_2$  โดยสมมาตร  $A_1$  คือโหมดการยืดแบบสมมาตร ( $\nu_s$ ) และสมมาตร  $B_2$  คือโหมดการยืดแบบอสมมาตร ( $\nu_{as}$ )



รูปที่ 1.4 โหมดการยืดของ  $H_2O$  จาก SALC ที่คำนวณจากเวกเตอร์ฐาน  $\vec{r}_1$

แต่วิธีนี้ทำได้ยากในโมเลกุลขนาดใหญ่เพราะมีตัวดำเนินการสมมาตรที่มากขึ้นทำให้ต้องใช้เวลาในการคำนวณมากขึ้น

### เทนเซอร์โมเมนต์ความเฉื่อยแบบขยาย (Expanded moment of inertia tensor หรือ EMIT) [3]

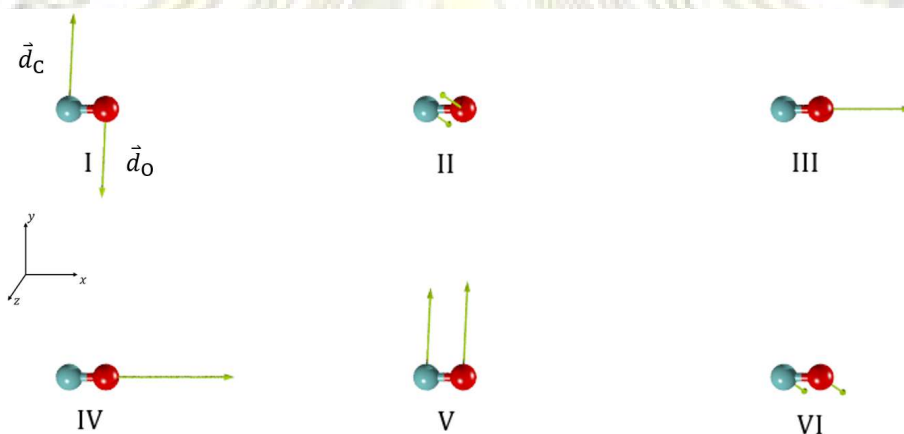
การศึกษาโมเลกุลด้วยคอมพิวเตอร์ใช้การคำนวณเทนเซอร์โมเมนต์ความเฉื่อย (Moment of inertia tensor หรือ MIT,  $I$ ) ซึ่งเป็นการคำนวณระหว่างโมเมนต์เชิงมุม ( $\vec{L}$ ) กับความเร็วเชิงมุม ( $\vec{\omega}$ )

$$\vec{L} = I \cdot \vec{\omega} \quad (1.2)$$

ซึ่งข้อมูลที่ได้มีเฉพาะข้อมูลของโมเลกุลเท่านั้น ปกติ MIT จะประกอบด้วย 3 ตัวแปรอิสระ (degrees of freedom) เมื่อพิจารณาองค์ประกอบย่อยของแต่ละอะตอม MIT จะถูกขยายให้เป็นตัวแปรอิสระจำนวน  $3N$  เรียกส่วนที่ถูกขยายนี้ว่าเทนเซอร์โมเมนต์ความเฉื่อยแบบขยาย (Expanded moment of inertia tensor หรือ EMIT) ซึ่งข้อมูลที่ได้สามารถนำไปใช้หาไอเกนฟังก์ชัน (eigenfunction) ซึ่งสามารถนำไปแปลงเป็นข้อมูลโหมดการเคลื่อนไหว (motion mode) ของโมเลกุล ในข้อมูลโหมดการเคลื่อนไหวประกอบด้วยเวกเตอร์โหมดการเคลื่อนไหวขนาด  $3N$  มิติ เป็นจำนวน  $3N$  โหมด เมื่อ  $N$  คือจำนวนอะตอมในโมเลกุล ในเวกเตอร์โหมดการเคลื่อนไหวจะประกอบด้วยเวกเตอร์การเคลื่อนที่ของอะตอมแต่ละอะตอมในโมเลกุลซึ่งสามารถนำไปเขียนแสดงในโครงสร้างโมเลกุลเพื่อทำให้เห็นภาพรวมของโหมดการเคลื่อนไหวนั้นได้ ตัวอย่างเช่น CO ตามตารางที่ 1.3 และรูปที่ 1.5 โดย  $\vec{d}_a$  คือเวกเตอร์การเคลื่อนที่ของอะตอม  $a$

ตารางที่ 1.3 ข้อมูลโหมตการเคลื่อนไหวของ CO จาก EMIT มีทั้งหมด 6 โหมต โดยในโหมตการเคลื่อนไหวประกอบด้วยเวกเตอร์การเคลื่อนที่ของ C และ O ตามลำดับ

เวกเตอร์การเคลื่อนที่		โหมตการเคลื่อนไหวที่					
		I	II	III	IV	V	VI
C	$x$	0.0000	0.0000	1.0000	0.0000	0.0000	0.0000
	$y$	0.7318	0.0000	0.0000	0.0000	0.6815	0.0000
	$z$	0.0000	0.7318	0.0000	0.0000	0.0000	0.6815
O	$x$	0.0000	0.0000	0.0000	1.0000	0.0000	0.0000
	$y$	-0.6815	0.0000	0.0000	0.0000	0.7318	0.0000
	$z$	0.0000	-0.6815	0.0000	0.0000	0.0000	0.7318



รูปที่ 1.5 โหมตการเคลื่อนไหวของ CO จาก EMIT โดยนำเวกเตอร์การเคลื่อนที่ของ C และ O จากตารางที่ 1.3 แสดงในโครงสร้างโมเลกุลเดียวกัน ทำให้เห็นการเคลื่อนไหวที่แตกต่างกัน

ยกตัวอย่างเช่นโหมตที่ III ประกอบด้วยเวกเตอร์การเคลื่อนที่ของ C = (1, 0, 0) และ O = (0, 0, 0) แสดงว่า C เคลื่อนที่ไปทางขวาตามแนวแกน X ในขณะที่ O กำลังอยู่นิ่ง หรือโหมตที่ V ประกอบด้วยเวกเตอร์การเคลื่อนที่ของ C = (0, 0.6815, 0) และ O = (0, 0.7318, 0) แสดงว่า ทั้ง C และ O เคลื่อนที่ขึ้นด้านบนตามแนวแกน Y

การหาโหมตการเคลื่อนไหวจาก EMIT สามารถทำได้ง่ายเมื่อเทียบกับ POM และในโมเลกุลขนาดเล็ก EMIT จะให้โหมตการเคลื่อนไหวที่ใกล้เคียงกับโหมตปกติ แต่มีข้อเสียคือถ้าโมเลกุลที่คำนวณมีขนาดใหญ่โหมตการเคลื่อนไหวที่ได้อาจไม่ใกล้เคียงกับรูปแบบของโหมตปกติตามนิยาม

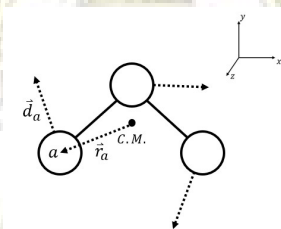


### ฟังก์ชันคะแนนสำหรับโหมดการเลื่อนที่และการหมุน<sup>[3]</sup>

ฟังก์ชันคะแนนสำหรับโหมดการเลื่อนที่พัฒนามาจากแนวคิดที่ว่าในโหมดการเลื่อนที่อะตอมทุกอะตอมในโมเลกุลจะต้องเคลื่อนที่ไปในทิศทางเดียวกันทั้งหมด คะแนนที่ได้จึงมาจากการหาค่าเฉลี่ยของผลคูณเชิงสเกลาร์ (dot product) ระหว่างทิศทางของเวกเตอร์การเคลื่อนที่ของอะตอมในโมเลกุลทั้งหมดกับเวกเตอร์แกนหลักที่กำลังสนใจโดยการหาทิศทางเวกเตอร์ต้องนอร์มัลไลซ์ (normalize) เวกเตอร์โดยการหารด้วยขนาดของเวกเตอร์นั้น ถ้าคะแนนเท่ากับ 1 หรือ -1 แสดงว่าอะตอมทุกอะตอมในโมเลกุลเคลื่อนที่ไปในทิศทางเดียวกันหรือทิศทางตรงกันข้ามกับแกนหลัก จะได้ฟังก์ชันคะแนนสำหรับโหมดการเลื่อนที่ตามสมการที่ 1.4 โดย  $\hat{Q}$  คือเวกเตอร์แกนหลัก  $X$ ,  $Y$  หรือ  $Z$

$$s[T_Q] = \frac{1}{N} \sum_{a=1}^N \frac{\vec{d}_a}{|\vec{d}_a|} \cdot \hat{Q}, \quad (1.3)$$

ฟังก์ชันคะแนนการหมุนพัฒนามาจากแนวคิดที่ในหนึ่งโหมดการหมุนทุกอะตอมในโมเลกุลจะต้องเคลื่อนที่รอบแกนหลักที่สนใจ คะแนนที่ได้จึงมาจากการคำนวณอะตอมที่อยู่รอบแกนและไม่คำนวณอะตอมที่ผ่านแกนนั้น ๆ ทิศทางของเวกเตอร์การเคลื่อนที่ของอะตอมเหล่านั้นต้องตั้งฉากกับเวกเตอร์ซึ่งบอกระยะห่าง (ที่สั้นที่สุด) ของอะตอมจากแกนนั้น ๆ



รูปที่ 1.6 การหมุนของโมเลกุลบนแกน  $Z$

การหาคะแนนจึงมาจากการหาผลคูณเชิงเวกเตอร์ (cross products) ระหว่างทิศทางเวกเตอร์ตำแหน่งของอะตอมแล้วกับทิศทางเวกเตอร์การเคลื่อนที่ของอะตอม การหาเวกเตอร์ตำแหน่งของอะตอมที่ย้ายจุดกำเนิดแล้วทำโดยการลบกับโปรเจกชัน (projection) เวกเตอร์ตำแหน่งของอะตอมบนแกนหลัก ผลคูณเวกเตอร์ที่ได้จะเป็นเวกเตอร์ที่ตั้งฉากกับเวกเตอร์ที่ใช้คำนวณทั้งสองซึ่งจะขนานกับเวกเตอร์แกนหลักที่สนใจ แล้วนำเวกเตอร์ที่ได้มาหาผลคูณเชิงสเกลาร์กับเวกเตอร์แกนหลัก แล้วนำคะแนนจากแต่ละอะตอมมาหาค่าเฉลี่ย ถ้าคะแนนที่ได้เท่ากับ 1 หรือ -1 แสดงว่าโมเลกุลหมุนไปในทิศทางทวนเข็มนาฬิกาหรือทิศทางตามเข็มนาฬิกาการรอบแกนหลัก จะได้ฟังก์ชันคะแนนสำหรับโหมดการหมุนตามสมการที่ 1.5 โดย  $\vec{r}_a$  คือเวกเตอร์ของตำแหน่งของอะตอม  $a$  และ  $N_Q$  คือจำนวนอะตอมที่อยู่บนแกนหลัก  $\hat{Q}$

$$s[R_Q] = \frac{1}{N - N_Q} \sum_{a=1}^N \left( \frac{\vec{r}_a - \text{proj}_Q \vec{r}_a}{|\vec{r}_a - \text{proj}_Q \vec{r}_a|} \times \frac{\vec{d}_a}{|\vec{d}_a|} \right) \cdot \hat{Q} \quad (1.4)$$

## บทที่ 2

### การทดลอง

#### 2.1 อุปกรณ์และเครื่องมือ

โปรแกรมการคำนวณ Expanded Moment of Inertia Tensor (EMIT)

โปรแกรม Code::Blocks

โปรแกรม Microsoft Excel 2016

#### 2.2 ขั้นตอนการทดลอง

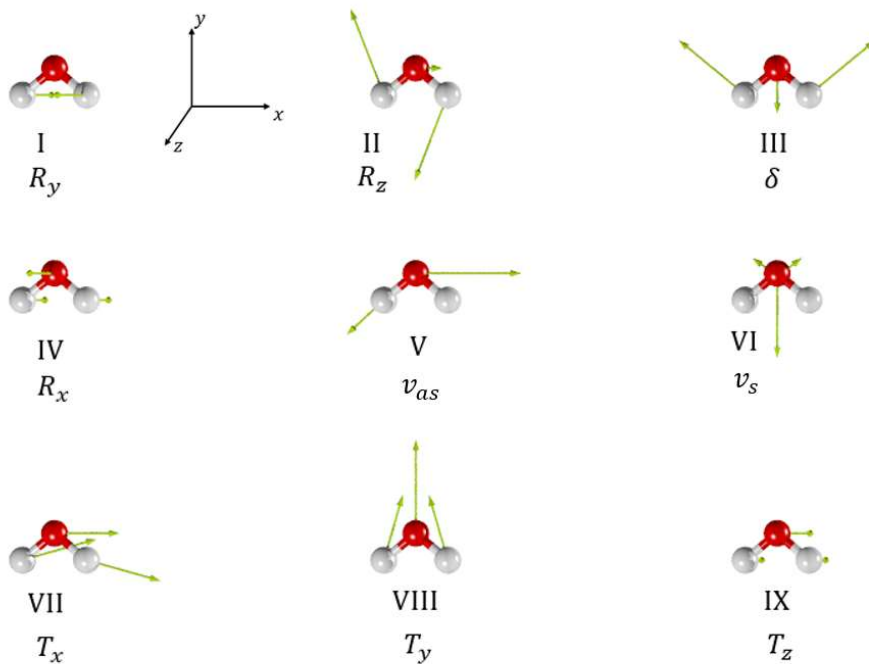
ในการทดลองนี้ ต้องการหาปริมาณที่เหมาะสมสำหรับระบุโหมดการยึดของโมเลกุลโดยนำปริมาณโหมดการยึดมาแปลงเป็นสมการเชิงคณิตศาสตร์ แล้วนำฟังก์ชันคะแนนที่ได้มาพัฒนาเป็นโปรแกรมคอมพิวเตอร์

การทดลองนี้เริ่มต้นจากการสร้างโหมดการเคลื่อนไหวของโมเลกุลที่ใช้ทดสอบจากโปรแกรมการคำนวณ EMIT แล้วนำโหมดการเคลื่อนไหวที่ได้มาพิจารณาตามนิยามว่ามีโหมดใดที่ใกล้เคียงโหมดการยึด หลังจากนั้นจึงพัฒนาฟังก์ชันคะแนนสำหรับระบุโหมดการยึดขึ้นมาจากนิยามต่าง ๆ ที่ได้ศึกษามา แล้วจึงหาค่าคะแนนของโหมดการเคลื่อนไหวของโมเลกุลที่ใช้ทดสอบโดยใช้ฟังก์ชันคะแนนสำหรับระบุโหมดการยึดที่พัฒนาขึ้นมา นำชุดค่าคะแนนที่ได้มาเปรียบเทียบกันเพื่อเลือกนิยามที่เหมาะสมที่สุดต่อการใช้ระบุโหมดการยึด นำฟังก์ชันคะแนนที่เลือกมาพัฒนาเป็นโปรแกรมคอมพิวเตอร์ สุดท้ายนำโปรแกรมที่ได้มาทดสอบกับโมเลกุลที่มีขนาดใหญ่ขึ้น

1) สร้างโหมดการเคลื่อนไหวของโมเลกุลที่ใช้ทดสอบจากโปรแกรม EMIT จากโครงสร้างโมเลกุลเพื่อใช้เป็นข้อมูลตั้งต้นในการทดสอบฟังก์ชันคะแนนที่พัฒนาขึ้น โดยโมเลกุลที่ใช้ทดสอบคือโมเลกุลที่มีขนาดเล็กเนื่องจากสามารถสังเกตได้ง่ายว่าโหมดการเคลื่อนไหวที่สร้างขึ้นมานั้นตรงกับโหมดปกติใดตามนิยาม โมเลกุลสำหรับทดสอบที่เลือกมาใช้ในการพิจารณาความเหมาะสมของนิยามได้แก่  $H_2O$ ,  $NO_2^-$  และ  $NO_3^-$  โดยสังเกตว่าโหมดการเคลื่อนไหวใกล้เคียงกับโหมดปกติใดเมื่อเทียบกับนิยาม ได้ผลตามตารางที่ 2.1 - 2.3 และรูปที่ 2.1 - 2.3 สำหรับโมเลกุลที่ใช้ทดสอบกับโปรแกรมคอมพิวเตอร์ได้ในภาคผนวก ค. โดย  $T_x$ ,  $T_y$  และ  $T_z$  คือโหมดการเคลื่อนที่ตามแกน  $X$ ,  $Y$  และ  $Z$ ,  $R_x$ ,  $R_y$  และ  $R_z$  คือโหมดการหมุนรอบแกน  $X$ ,  $Y$  และ  $Z$ ,  $\delta$  คือโหมดการงอ และ  $v_s$  และ  $v_{as}$  คือโหมดการยึดแบบสมมาตรและอสมมาตร

ตารางที่ 2.1 โหมดการเคลื่อนไหวของ  $\text{H}_2\text{O}$  ที่ได้จากโปรแกรม EMIT โดยในโหมดการเคลื่อนไหวจะประกอบด้วยเวกเตอร์การเคลื่อนที่ของอะตอมแต่ละอะตอมในโมเลกุล

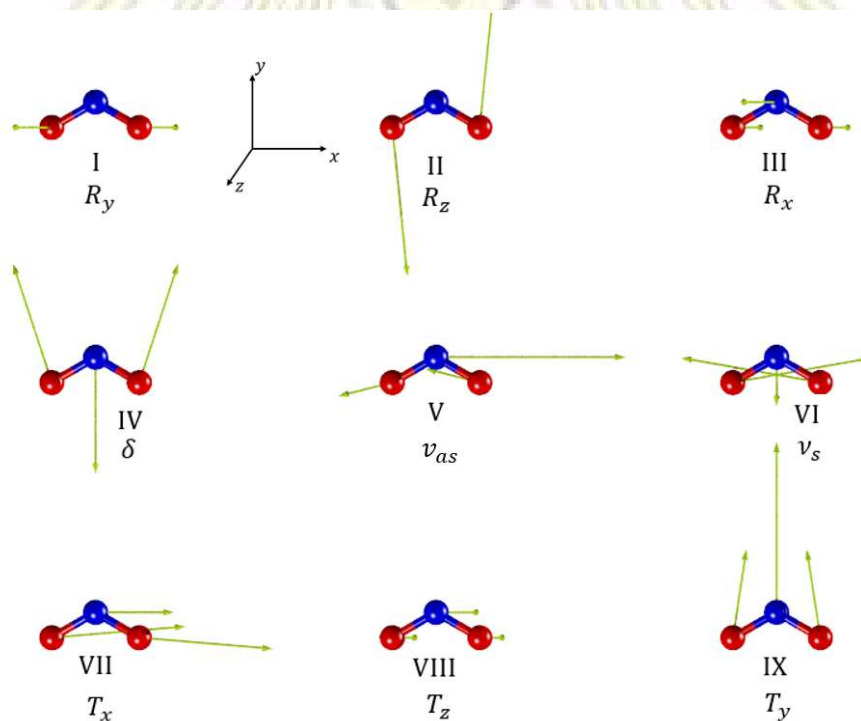
เวกเตอร์ การเคลื่อนที่		โหมดการเคลื่อนไหวที่								
		I	II	III	IV	V	VI	VII	VIII	IX
O	x	0.0000	-0.2127	0.0000	0.0000	0.8307	0.0000	0.5143	0.0000	0.0000
	y	0.0000	0.0000	-0.3414	0.0000	0.0000	0.6300	0.0000	0.6974	0.0000
	z	0.0000	0.0000	0.0000	-0.6171	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.7868
$\text{H}_1$	x	0.0000	0.2628	-0.5248	0.0000	-0.2955	-0.4497	0.5861	0.1493	0.0000
	y	0.0000	-0.6389	0.4077	0.0000	-0.2598	-0.3150	0.1554	0.4842	0.0000
	z	0.7071	0.0000	0.0000	0.5564	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.4364
$\text{H}_2$	x	0.0000	0.2628	0.5248	0.0000	-0.2955	0.4497	0.5861	-0.1493	0.0000
	y	0.0000	0.6389	0.4077	0.0000	0.2598	-0.3150	-0.1554	0.4842	0.0000
	z	-0.7071	0.0000	0.0000	0.5563	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.4364



รูปที่ 2.1 โหมดการเคลื่อนไหวของ  $\text{H}_2\text{O}$  ที่ได้จากโปรแกรม EMIT และระบุชนิดของโหมดปกติที่ใกล้เคียง โดยการสังเกตตามนิยามแล้ว

ตารางที่ 2.2 โหมดการเคลื่อนไหวของ  $\text{NO}_2^-$  ที่ได้จากโปรแกรม EMIT

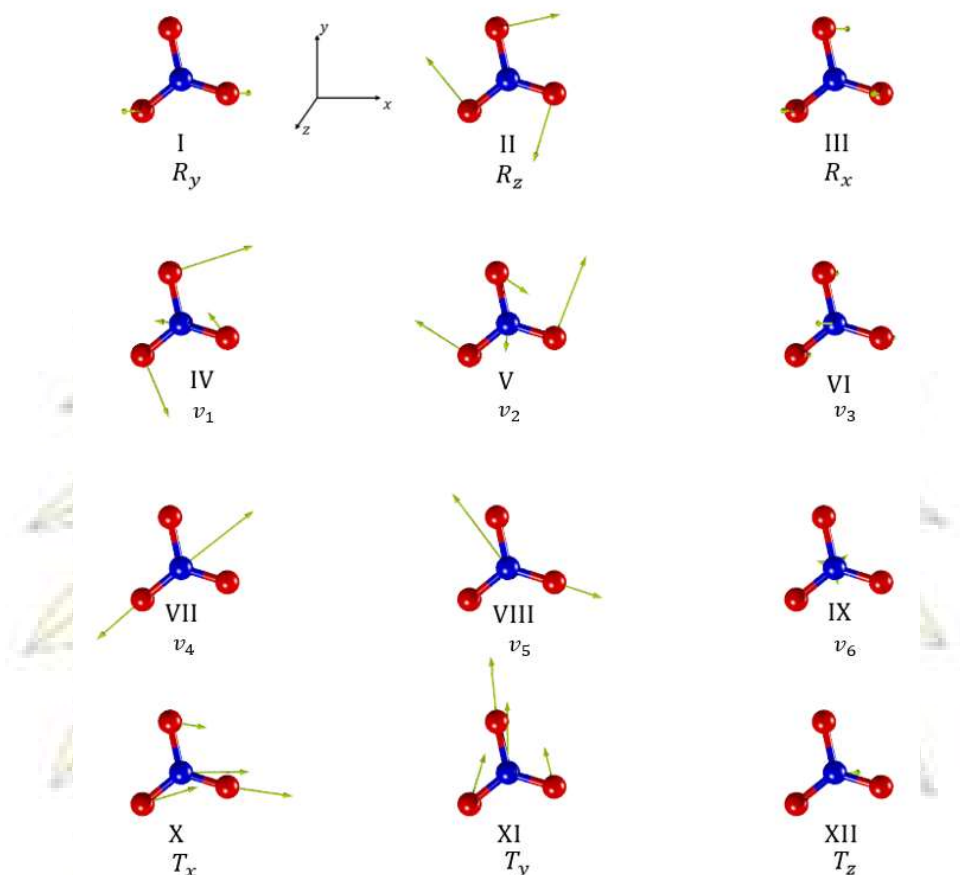
เวกเตอร์ การเคลื่อนที่		โหมดการเคลื่อนไหวที่								
		I	II	III	IV	V	VI	VII	VIII	IX
N	x	0.0000	0.0670	0.0000	-0.0040	0.9217	0.0080	0.3819	0.0000	0.0064
	y	0.0000	-0.0064	0.0000	-0.5420	-0.0062	0.2598	0.0029	0.0000	0.7991
	z	-0.0069	0.0000	-0.6515	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.7586	0.0000
O <sub>1</sub>	x	0.0000	-0.0842	0.0000	0.2148	-0.2699	0.6663	-0.6512	0.0000	-0.0761
	y	0.0000	-0.6929	0.0000	0.5629	0.0715	-0.1324	-0.0611	0.0000	0.4201
	z	-0.6997	0.0000	0.5451	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.4618	0.0000
O <sub>2</sub>	x	0.0000	-0.0825	0.0000	-0.2103	-0.2572	-0.6743	0.6504	0.0000	0.0715
	y	0.0000	0.7080	0.0000	0.5466	-0.0794	-0.1274	0.0574	0.0000	0.4171
	z	0.7143	0.0000	0.5275	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.4597	0.0000



รูปที่ 2.2 โหมดการเคลื่อนไหวของ  $\text{NO}_2^-$  ที่ได้จากโปรแกรม EMIT และระบุชนิดของโหมดปกติที่ใกล้เคียงโดยการสังเกตตามนิยามแล้ว

ตารางที่ 2.3 โหมดการเคลื่อนไหวของ  $\text{NO}_3^-$  ที่ได้จากโปรแกรม EMIT

เวกเตอร์ การเคลื่อนที่		โหมดการเคลื่อนไหวที่					
		I	II	III	IV	V	VI
N	x	0.0000	0.0035	0.0000	-0.2317	-0.0224	-0.0002
	y	0.0000	0.0015	0.0000	0.0227	-0.2412	0.0003
	z	-0.0009	0.0000	0.0027	-0.0001	0.0002	-0.6016
O <sub>1</sub>	x	-0.0013	-0.1793	0.0017	-0.1687	0.2714	-0.0034
	y	0.0048	-0.5684	0.0012	0.2186	0.6747	0.0013
	z	0.7473	0.0043	-0.3337	-0.0034	0.0007	0.4580
O <sub>2</sub>	x	0.0000	0.5403	0.0015	0.7097	0.2728	0.0007
	y	0.0003	0.1155	-0.0024	0.2227	-0.1783	-0.0037
	z	-0.0857	-0.0015	0.8091	0.0011	-0.0032	0.4657
O <sub>3</sub>	x	0.0013	-0.3731	-0.0033	0.2235	-0.4709	0.0026
	y	-0.0051	0.4476	0.0012	-0.5161	0.2907	0.0026
	z	-0.6589	-0.0028	-0.4838	0.0025	0.0024	0.4597
เวกเตอร์ การเคลื่อนที่		โหมดการเคลื่อนไหวที่					
		VII	VIII	IX	X	XI	XII
N	x	0.6185	-0.4732	-0.0097	0.5824	-0.0058	-0.0006
	y	0.4695	0.6121	0.0126	0.0046	0.5882	0.0008
	z	0.0000	-0.0005	0.0060	0.0002	-0.0003	0.7987
O <sub>1</sub>	x	-0.2714	0.4122	-0.5514	0.5574	-0.0866	0.0016
	y	0.0878	-0.1321	0.1768	-0.078	0.3339	-0.0004
	z	-0.0011	0.0011	-0.0021	0.0012	-0.0003	0.3469
O <sub>2</sub>	x	0.0484	0.0956	0.1194	0.3173	-0.0601	-0.0004
	y	-0.2237	-0.4504	-0.5622	-0.0509	0.5777	0.0015
	z	-0.0007	-0.0020	-0.0019	0.0000	0.0006	0.3480
O <sub>3</sub>	x	-0.3920	-0.0348	0.4417	0.4698	0.1353	-0.0013
	y	-0.3310	-0.0292	0.3729	0.1413	0.4236	-0.0009
	z	0.0018	-0.0004	-0.0020	-0.0006	-0.0009	0.3472



รูปที่ 2.3 โหมดการเคลื่อนไหวของ  $\text{NO}_3^-$  ที่ได้มาจากโปรแกรม EMIT และระบุชนิดของโหมดปกติที่ใกล้เคียง โดยการสังเกตตามนิยามแล้ว

2) พัฒนาฟังก์ชันคะแนนที่เหมาะสมในการระบุลักษณะเฉพาะของโหมดการยึดของฟังก์ชันคลื่นจากนิยามของโหมดการยึดที่ได้จากการศึกษา โดยนำนิยามนั้นมาแปลงเป็นสมการเชิงคณิตศาสตร์ ซึ่งมีนิยามที่ใช้ทั้งหมด 2 นิยาม นิยามแรกได้มาจากคำอธิบายของ M.E. Starzak อธิบายว่าทิศทางการเคลื่อนที่ของอะตอมล้อมรอบจะต้องขนานกับพันธะบนอะตอมนั้นและการเคลื่อนที่ของอะตอมทั้งหมดจะต้องไม่ทำให้จุดศูนย์กลางมวลของโมเลกุลเคลื่อนที่ และนิยามที่สองคือความยาวพันธะในโมเลกุลจะต้องมีการเปลี่ยนแปลง

**นิยามที่ 1** จะแบ่งออกเป็นสองส่วนคือทิศทางการเคลื่อนที่ของอะตอมล้อมรอบจะต้องขนานกับพันธะบนอะตอมนั้นและการไม่เคลื่อนที่ของจุดศูนย์กลางมวลของโมเลกุล ในส่วนแรกสามารถหาค่าคะแนนได้จากค่าเฉลี่ยของค่าสัมบูรณ์ของผลคูณเชิงสเกลาร์ระหว่างทิศทางเวกเตอร์การเคลื่อนที่ของอะตอมล้อมรอบกับทิศทางเวกเตอร์พันธะบนอะตอมนั้น ถ้าได้ค่าคะแนนเท่ากับ 1 แสดงว่าเวกเตอร์ทั้งสองขนานกัน แต่ถ้าได้ค่าคะแนนเท่ากับ 0 แสดงว่าเวกเตอร์ทั้งสองตั้งฉากกัน จึงได้ฟังก์ชันคะแนนสำหรับอะตอมล้อมรอบตามสมการที่ 2.1 โดย  $N_{T.A.}$  คือจำนวนอะตอมล้อมรอบของโมเลกุล

$$s[v_s]_{T.A.} = \frac{1}{N_{T.A.}} \sum_{a=1}^{N_{T.A.}} \left| \frac{\vec{d}_a}{|\vec{d}_a|} \cdot \frac{\vec{B}_a}{|\vec{B}_a|} \right| \quad (2.1)$$

ในส่วนที่สองจะหาค่าคะแนนจากขนาดของเวกเตอร์การเคลื่อนที่ของจุดศูนย์กลางมวลของโมเลกุลโดยเราต้องการให้ค่าคะแนนอยู่ในช่วง 0 - 1 จึงหารขนาดเวกเตอร์การเคลื่อนที่ของจุดศูนย์กลางมวลด้วยขนาดสูงสุดเวกเตอร์การเคลื่อนที่ของจุดศูนย์กลางมวลที่เป็นไปได้ซึ่งหาได้จากการหาค่าเฉลี่ยของขนาดเวกเตอร์การเคลื่อนที่ของอะตอม แต่เราต้องการให้คะแนนเป็น 1 ถ้าจุดศูนย์กลางมวลไม่เคลื่อนที่ จึงต้องนำผลที่ได้ไปลบกับ 1 จะได้ฟังก์ชันคะแนนของอะตอมกลางตามสมการที่ 2.2 โดย  $N_{C.A.}$  คือจำนวนอะตอมกลางของโมเลกุลแล้วนำค่าคะแนนทั้งสองส่วนมาหาค่าเฉลี่ยเพื่อเป็นค่าคะแนนของโมเลกุลจึงได้เป็นฟังก์ชันคะแนนตามสมการที่ 2.3

$$s[v_s]_{C.A.} = 1 - \frac{|\sum_{a=1}^N m_a \vec{d}_a|}{\sum_{a=1}^N m_a |\vec{d}_a|} \quad (2.2)$$

$$s[v_s] = \frac{1}{N} \left[ \left( \sum_{a=1}^{N_{T.A.}} \left| \frac{\vec{d}_a}{|\vec{d}_a|} \cdot \frac{\vec{B}_a}{|\vec{B}_a|} \right| \right) + N_{C.A.} \left( 1 - \frac{|\sum_{a=1}^N m_a \vec{d}_a|}{\sum_{a=1}^N m_a |\vec{d}_a|} \right) \right] \quad (2.3)$$

**นิยามที่ 2** เป็นนิยามที่รู้จักกันทั่วไปคือความยาวพันธะในโมเลกุลจะต้องมีการเปลี่ยนแปลงซึ่งสามารถหาค่าคะแนนจากการเปลี่ยนแปลงขนาดของเวกเตอร์พันธะในโมเลกุลก่อนและหลังการเคลื่อนที่ของอะตอมซึ่งมีวิธีการคำนวณเพื่อดูการเปลี่ยนแปลงหลายวิธีโดยได้เลือกวิธีคำนวณมาทั้งหมดสองวิธีคือความต่างและความสัมพันธ์

**นิยามที่ 2.ก** จะคำนวณค่าคะแนนจากการหาผลต่างขนาดระหว่างเวกเตอร์พันธะก่อนและหลังการเคลื่อนที่ของอะตอมซึ่งจะได้เป็นฟังก์ชันคะแนนตามสมการที่ 2.4

$$s[v_s] = \sum_{i=1}^{N_B} \left| |\vec{B}'_i| - |\vec{B}_i| \right| \quad (2.4)$$

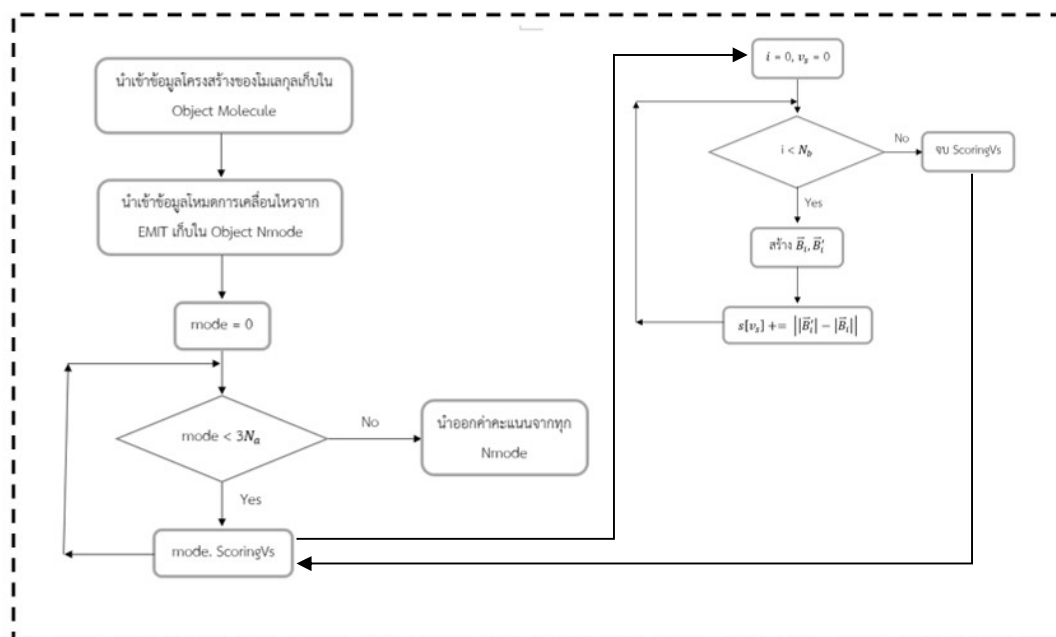
**นิยามที่ 2.ข** จะคำนวณจากการหาอัตราส่วนของขนาดเวกเตอร์พันธะก่อนและหลังการเคลื่อนที่ของอะตอมซึ่งจะได้เป็นฟังก์ชันคะแนนตามสมการที่ 2.5

$$s[v_s] = \sum_{i=1}^{N_B} \left| \frac{|\vec{B}'_i|}{|\vec{B}_i|} - 1 \right| \quad (2.5)$$

3) หาค่าคะแนนของโหนดการเคลื่อนไหวของโมเลกุลที่ใช้ทดสอบที่ได้จากขั้นตอนที่ 1) จากฟังก์ชันคะแนนสำหรับระบุโหนดการยึดที่พัฒนาในขั้นตอนที่ 2) (สมการที่ 2.3, 2.4 และ 2.5) โดยใช้โปรแกรม Microsoft Excel 2016 ช่วยในการคำนวณ

4) เปรียบเทียบชุดค่าคะแนนของโหมดการเคลื่อนไหวของโมเลกุลที่ใช้ทดสอบจากแต่ละฟังก์ชันคะแนนสำหรับระบุโหมดการยึดที่ได้มาจากขั้นตอนที่ 3) เพื่อเลือกฟังก์ชันคะแนนที่เหมาะสมที่สุดในการระบุลักษณะเฉพาะของโหมดการยึด โดยโหมดการเคลื่อนไหวที่เป็นโหมดการยึดควรมีค่าคะแนนที่สูงและโหมดการเคลื่อนไหวที่ไม่ได้เป็นโหมดการยึดควรมีค่าคะแนนที่ต่ำ และเปรียบเทียบอัตราส่วนระหว่างค่าคะแนนในแต่ละโหมดการเคลื่อนไหวกับค่าคะแนนของโหมดการเคลื่อนไหวที่สูงที่สุดจากฟังก์ชันคะแนนเดียวกันเพื่อดูความสามารถในการแยกโหมดการยึดออกจากโหมดการเคลื่อนไหวอื่น ๆ

5) พัฒนาพัฒนาโปรแกรมจากฟังก์ชันคะแนนของโหมดการยึดที่เลือกจากภาษาคอมพิวเตอร์ C++ โดยใช้โปรแกรม Code::Blocks ช่วยในการเขียนโปรแกรมตามแผนด้านล่าง



รูปที่ 2.4 ผังพัฒนาโปรแกรมจากฟังก์ชันคะแนนของโหมดการยึดที่เลือกจากภาษาคอมพิวเตอร์ C++

6) ทดสอบโปรแกรมที่ได้กับโมเลกุลที่มีขนาดใหญ่ขึ้นหรือมีรูปร่างโมเลกุลต่างกัน ได้แก่  $\text{HSO}_3^-$ ,  $\text{HPO}_4^{2-}$  และ  $\text{N}_2\text{O}_5$  เพื่อดูประสิทธิภาพการทำงานของโปรแกรม



### บทที่ 3

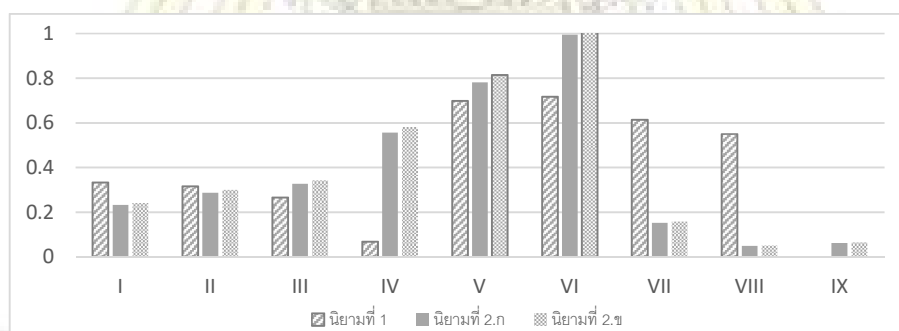
#### ผลการทดลองและอภิปรายผลการทดลอง

#### 3.1 การเปรียบเทียบค่าคะแนนที่ได้จากนิยามแบบต่าง ๆ เพื่อเลือกฟังก์ชันคะแนนที่เหมาะสมในการระบุลักษณะเฉพาะของโหมดการยึดของฟังก์ชันคลื่น

หลังจากที่พัฒนาฟังก์ชันคะแนนเพื่อระบุโหมดการยึดมาทั้งหมด 3 นิยามแล้วคือฟังก์ชันคะแนนที่ 1 ฟังก์ชันคะแนนที่ 2.ก และฟังก์ชันคะแนนที่ 2.ข และนำไปใช้หาค่าคะแนนโหมดการยึดของโหมดการเคลื่อนไหวของโมเลกุลที่ใช้ทดสอบ จึงนำค่าคะแนนทั้งสามฟังก์ชันมาเปรียบเทียบกันเพื่อเลือกนิยามที่เหมาะสมที่สุดในการระบุลักษณะเฉพาะของโหมดการยึด ค่าคะแนนโหมดการยึดของโหมดการเคลื่อนไหวของโมเลกุลต่าง ๆ ที่ใช้ทดสอบจากแต่ละฟังก์ชันคะแนนได้ตามตารางที่ 3.1, 3.2 และ 3.3 โดยค่าคะแนนที่ขีดเส้นใต้คือค่าคะแนนที่สูงสุดจากนิยามนั้น

ตารางที่ 3.1 ค่าคะแนนการยึดสำหรับโหมดการเคลื่อนไหวของ  $H_2O$  จากแต่ละฟังก์ชันคะแนน

นิยามที่	ค่าคะแนนโหมดการยึด (s[ $\nu$ ])								
	I	II	III	IV	V	VI	VII	VIII	IX
1	0.3333	0.3156	0.2652	0.0675	0.6983	<u>0.7171</u>	0.6132	0.5500	0.0000
2.ก	0.2324	0.2874	0.3280	0.5563	0.7818	<u>0.9942</u>	0.1521	0.0488	0.0619
2.ข	0.2422	0.2995	0.3418	0.5798	0.8148	<u>1.0362</u>	0.1585	0.0509	0.0645

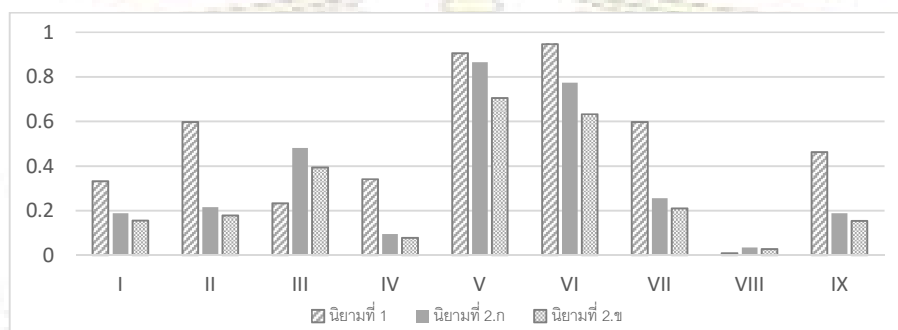


รูปที่ 3.1 กราฟเปรียบเทียบค่าคะแนนของโหมดการยึดของโหมดการเคลื่อนไหวของ  $H_2O$  จากแต่ละฟังก์ชัน

สำหรับการทดสอบนิยามสำหรับโหมดการยึดด้วย  $H_2O$  ได้ผลว่าทั้งสามนิยามให้ค่าคะแนนสูงสุดกับโหมดการเคลื่อนไหว VI และ V ตามลำดับซึ่งทั้งสองโหมดเป็นโหมดการยึดตามรูปที่ 2.1 แสดงว่าทั้งสามนิยามสามารถให้คะแนนที่สูงกับโหมดการเคลื่อนไหวที่เป็นโหมดการยึดได้ แต่นิยามที่ 1 กลับให้ค่าคะแนนที่สูงกับโหมด VII และ VIII ที่เป็นโหมดการเคลื่อนไหวที่แสดงว่านิยามที่หนึ่งไม่สามารถให้ค่าคะแนนที่ถูกต้องกับโหมดอื่น ๆ ที่ไม่ใช่โหมดการยึด

ตารางที่ 3.2 ค่าคะแนนการยึดสำหรับโหมดการเคลื่อนไหวของ $\text{NO}_2^-$  จากแต่ละฟังก์ชันคะแนน

นียมที่	ค่าคะแนนโหมดการยึด (s[ช])								
	I	II	III	IV	V	VI	VII	VIII	IX
1	0.3313	0.5978	0.2338	0.3416	<b>0.9066</b>	0.9466	0.5982	0.0097	0.4633
2.ก	0.1895	0.2158	0.4817	0.0963	<b>0.8665</b>	0.7748	0.2571	0.0357	0.1888
2.ข	0.1548	0.1779	0.3937	0.0790	<b>0.7057</b>	0.6330	0.2101	0.0292	0.1542

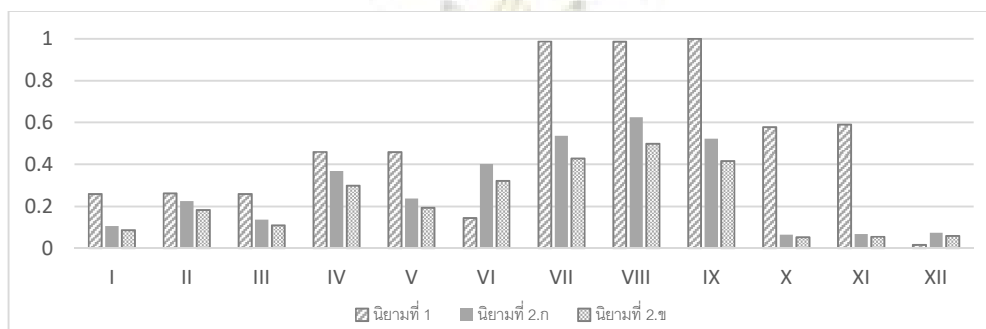


รูปที่ 3.2 กราฟเปรียบเทียบค่าคะแนนของโหมดการยึดของโหมดการเคลื่อนไหวของ  $\text{NO}_2^-$  จากแต่ละฟังก์ชัน

สำหรับการทดสอบนียมสำหรับโหมดการยึดด้วย  $\text{NO}_2^-$  ผลที่ได้ใกล้เคียงกับผลการทดสอบด้วย  $\text{H}_2\text{O}$  คือ ทั้งสามนียมให้ค่าคะแนนสูงสุดกับโหมดการเคลื่อนไหว VI และ V ตามลำดับซึ่งทั้งสองโหมดเป็นโหมดการยึดตามลำดับ แต่นียมที่ 1 กลับให้ค่าคะแนนที่สูงกับโหมด II, VII และ IX ที่เป็นโหมดการหมุนและการเลื่อนที่ตามลำดับ นอกจากนี้จะเห็นว่าคะแนนของนียมที่ 2.ก และ 2.ข จะให้ค่าคะแนนที่ต่ำกว่าสำหรับโหมดการเคลื่อนไหว V และ VI

ตารางที่ 3.3 ค่าคะแนนการยึดสำหรับโหมดการเคลื่อนไหวของ $\text{NO}_3^-$  จากแต่ละฟังก์ชันคะแนน

นียมที่	ค่าคะแนนโหมดการยึด (s[ช])					
	I	II	III	IV	V	VI
1	0.2587	0.2612	0.2579	0.4591	0.4579	0.1433
2.ก	0.1055	0.2249	0.1366	0.3695	0.2361	0.4021
2.ข	0.0854	0.1820	0.1083	0.2978	0.1918	0.3220
นียมที่	ค่าคะแนนโหมดการยึด (s[ช])					
	VII	VIII	IX	X	XI	XII
1	0.9862	0.9848	<b>0.9995</b>	0.5766	0.5901	0.0149
2.ก	0.5363	<b>0.6245</b>	0.5222	0.0637	0.0669	0.0731
2.ข	0.4279	<b>0.4982</b>	0.4168	0.0517	0.0547	0.0585

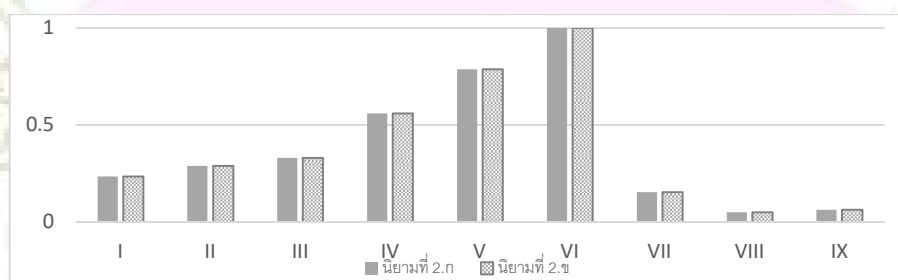


รูปที่ 3.3 กราฟเปรียบเทียบค่าคะแนนของโหมดการยึดของโหมดการเคลื่อนไหวของ  $\text{NO}_3^-$  จากแต่ละฟังก์ชัน

สำหรับการทดสอบนิยามสำหรับโหมดการยึดด้วย  $\text{NO}_3^-$  ผลที่ได้ยังคงใกล้เคียงกับผลการทดสอบด้วย  $\text{H}_2\text{O}$  และ  $\text{NO}_3^-$  คือทั้งสามนิยามให้ค่าคะแนนสูงกับโหมดการเคลื่อนไหว VII, VIII และ IX ซึ่งทั้งสามโหมดเป็นโหมดการยึดตามรูปที่ 2.3 โดยที่คะแนนของนิยามที่ 2.ก และ 2.ข จะให้ค่าคะแนนที่ต่ำกว่านิยามที่ 1 แต่นิยามที่ 1 กลับให้ค่าคะแนนที่สูงกับโหมด X และ XI ที่เป็นโหมดการเคลื่อนไหวที่ จากผลการทดสอบนิยามสำหรับโหมดการยึดด้วยโมเลกุลทดสอบทั้งสามโมเลกุลจึงสรุปว่าฟังก์ชันที่ 1 ไม่มีประสิทธิภาพมากพอที่จะแยกโหมดการยึดออกจากโหมดอื่น ๆ ได้จึงไม่ยอมรับฟังก์ชันที่ 1 เมื่อเปรียบเทียบค่าคะแนนของฟังก์ชันที่ 2.ก กับ 2.ข จะเห็นว่าในโหมดการเคลื่อนไหวเดียวกันเมื่อโมเลกุลมีขนาดใหญ่ขึ้นค่าคะแนนของฟังก์ชันที่ 2.ข จะมีค่าน้อยกว่าค่าคะแนนของฟังก์ชันที่ 2.ก จึงนำค่าคะแนนของฟังก์ชันทั้งสองมาวิเคราะห์โดยการนำค่าคะแนนสูงสุดของโหมดการเคลื่อนไหวจากนิยามเดียวกันมาหารเพื่อดูอัตราส่วนระหว่างค่าคะแนนกับค่าคะแนนสูงสุดของโหมดการเคลื่อนไหวจากแต่ละนิยามตามตารางที่ 3.4, 3.5 และ 3.6

ตารางที่ 3.4 เปรียบเทียบอัตราส่วนระหว่างค่าคะแนนกับค่าคะแนนสูงสุดของโหมดการเคลื่อนไหวของ  $\text{H}_2\text{O}$  จากแต่ละฟังก์ชันคะแนน

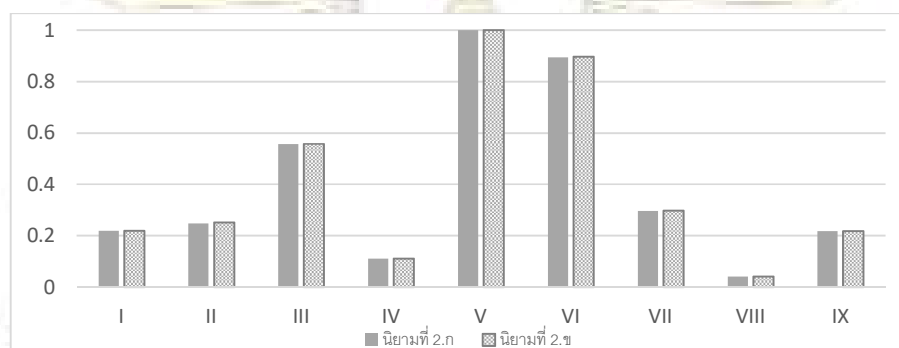
นิยามที่	ค่าคะแนนโหมดการยึด (sr)								
	I	II	III	IV	V	VI	VII	VIII	IX
2.ก	0.2338	0.2891	0.3299	0.5596	0.7864	1.0000	0.1530	0.04914	0.06234
2.ข	0.2338	0.2891	0.3299	0.5596	0.7864	1.0000	0.1530	0.04914	0.06234



รูปที่ 3.4 กราฟเปรียบเทียบอัตราส่วนระหว่างค่าคะแนนกับค่าคะแนนสูงสุดของโหมดการเคลื่อนไหวของ  $\text{H}_2\text{O}$  จากแต่ละฟังก์ชันคะแนน

ตารางที่ 3.5 เปรียบเทียบอัตราส่วนระหว่างค่าคะแนนกับค่าคะแนนสูงสุดของโหมดการเคลื่อนไหวของ  $\text{NO}_2^-$  จากแต่ละฟังก์ชันคะแนน

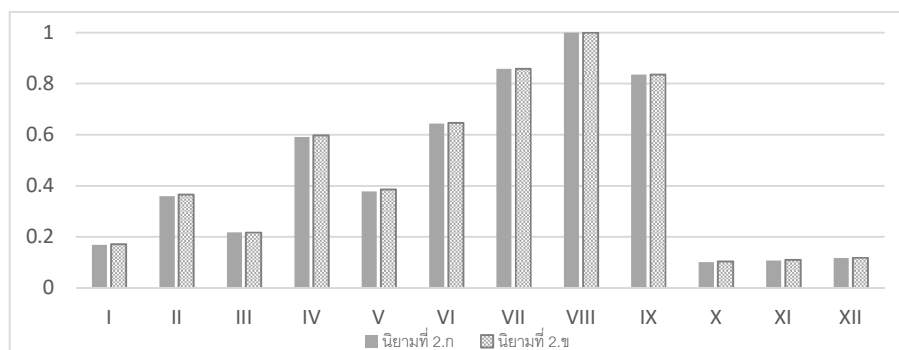
นิยามที่	ค่าคะแนนโหมดการยึด ( $s[x]$ )								
	I	II	III	IV	V	VI	VII	VIII	IX
2.ก	0.2187	0.2490	0.5559	0.1112	1.0000	0.8942	0.2967	0.0412	0.2179
2.ข	0.2194	0.2521	0.5579	0.1120	1.0000	0.8970	0.2978	0.0414	0.2184



รูปที่ 3.5 กราฟเปรียบเทียบอัตราส่วนระหว่างค่าคะแนนกับค่าคะแนนสูงสุดของโหมดการเคลื่อนไหวของ  $\text{NO}_2^-$  จากแต่ละฟังก์ชันคะแนน

ตารางที่ 3.6 เปรียบเทียบอัตราส่วนระหว่างค่าคะแนนกับค่าคะแนนสูงสุดโหมดการเคลื่อนไหวของ  $\text{NO}_3^-$  จากแต่ละฟังก์ชันคะแนน

นิยามที่	ค่าคะแนนโหมดการยึด ( $s[x]$ )					
	I	II	III	IV	V	VI
2.ก	0.1690	0.3601	0.2187	0.5917	0.3781	0.6440
2.ข	0.1715	0.3652	0.2175	0.5977	0.3850	0.6463
นิยามที่	ค่าคะแนนโหมดการยึด ( $s[x]$ )					
	VII	VIII	IX	X	XI	XII
2.ก	0.8589	1.0000	0.8362	0.1020	0.1071	0.1171
2.ข	0.8589	1.0000	0.8365	0.1037	0.1098	0.1175



รูปที่ 3.6 กราฟเปรียบเทียบอัตราส่วนระหว่างค่าคะแนนกับค่าคะแนนสูงสุดของโหมตการยึดของโหมตการเคลื่อนไหวของ  $\text{NO}_3^-$  จากแต่ละฟังก์ชันคะแนน

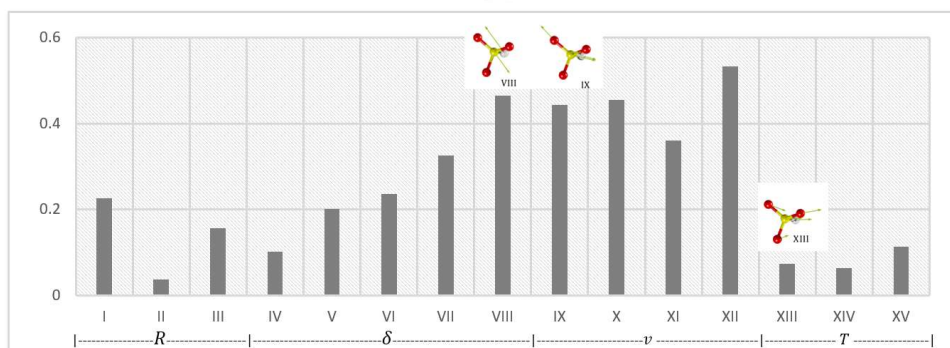
จากรูปที่ 3.4, 3.5 และ 3.6 จะเห็นได้ว่าฟังก์ชันคะแนนทั้งสองมีอัตราส่วนของค่าคะแนนที่ให้ในแต่ละโหมตเหมือนกัน แสดงว่าฟังก์ชันทั้งสองมีประสิทธิภาพในการแยกโหมตการยึดได้ดีเท่ากัน จึงสรุปได้ว่าฟังก์ชันคะแนน 2.ก และ 2.ข สามารถใช้ในการระบุสำหรับโหมตการยึดได้ดี จึงทำให้ต้องมาพิจารณาว่านิยามใดที่จะเหมาะสมกับการนำมาพัฒนาเป็นโปรแกรมคอมพิวเตอร์ต่อไปโดยตัดสินใจจากจำนวนขั้นตอนในการคำนวณฟังก์ชันที่ 2.ข มีขั้นตอนในการคำนวณที่มากกว่าฟังก์ชันที่ 2.ก ในส่วนของการหารด้วยขนาดเวกเตอร์พันธะก่อนการเคลื่อนที่ของอะตอม จึงสรุปได้ว่าฟังก์ชันคะแนนที่เหมาะสมกับการนำไปพัฒนาเป็นโปรแกรมคือฟังก์ชันคะแนน 2.ก

### 3.2 การพัฒนาโปรแกรมจากฟังก์ชันคะแนนของโหมตการยึด โดยใช้ภาษาคอมพิวเตอร์ C++

หลังจากเลือกฟังก์ชันคะแนนการยึดที่เหมาะสมในหัวข้อที่ 3.1 แล้ว จึงนำมาพัฒนาเป็นโปรแกรมคอมพิวเตอร์เพื่อการใช้งานแบบอัตโนมัติที่รวดเร็วขึ้นโดยใช้ภาษาคอมพิวเตอร์ C++ ในการพัฒนาโปรแกรม นำโปรแกรมที่ได้ไปทดสอบเพื่อหาว่าโปรแกรมสามารถใช้กับโมเลกุลที่มีขนาดใหญ่ขึ้นอย่าง  $\text{HSO}_3^-$ ,  $\text{HPO}_4^{2-}$  และ  $\text{N}_2\text{O}_5$  ได้หรือไม่ ข้อมูลของโมเลกุลและโหมตการเคลื่อนไหวของโมเลกุลอยู่ในภาคผนวก ค. และผลที่ได้จากโปรแกรมคอมพิวเตอร์เป็นไปตามตารางที่ 3.7 – 3.9 และ รูปที่ 3.7 – 3.9

ตารางที่ 3.7 ค่าคะแนนการยึดสำหรับโหมตการเคลื่อนไหวของ  $\text{HSO}_3^-$  จากโปรแกรมคอมพิวเตอร์

	โหมตการเคลื่อนไหวที่							
	I	II	III	IV	V	VI	VII	VIII
$s[v]$	0.2256	0.0373	0.1558	0.1020	0.2010	0.2359	0.3256	0.4654
	IX	X	XI	XII	XIII	XIV	XV	
$s[v]$	0.4431	0.4548	0.3598	0.5327	0.0731	0.0627	0.1126	

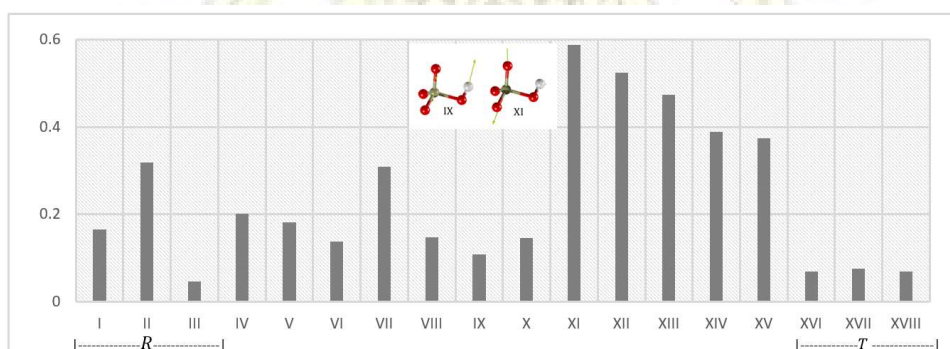


รูปที่ 3.7 กราฟค่าคะแนนการยึดสำหรับโหนดการเคลื่อนไหวของ $\text{HSO}_3^-$  จากโปรแกรมคอมพิวเตอร์

จากผลการทดสอบกับ  $\text{HSO}_3^-$  ตามตารางที่ 3.7 และรูปที่ 3.7 จะเห็นว่าในโหนดที่ I - III , IV - VII และ XIII - XV ซึ่งเป็นโหนดการหมุน, การงอ และการเลื่อนที่ตามลำดับมีค่าคะแนนที่ต่ำ และโหนดที่ VIII - XIII มีค่าคะแนนสูงโดยที่โหนดที่ IX - XIII เป็นโหนดการยึดแต่โหนดที่ VIII เป็นโหนดการงอ แสดงว่าโปรแกรมนี้ไม่สามารถให้ค่าคะแนนที่ถูกต้องได้กับโหนดการเคลื่อนไหวที่เป็นโหนดการสั่นบางโหนดของ  $\text{HSO}_3^-$

ตารางที่ 3.8 ค่าคะแนนการยึดสำหรับโหนดการเคลื่อนไหวของ $\text{HPO}_4^{2-}$  จากโปรแกรมคอมพิวเตอร์

	โหนดการเคลื่อนไหวที่									
	I	II	III	IV	V	VI	VII	VIII	IX	
s[v]	0.1651	0.3194	0.0472	0.2015	0.1821	0.1374	0.3095	0.1479	0.1088	
	X	XI	XII	XIII	XIV	XV	XVI	XVII	XVIII	
s[v]	0.1469	0.5878	0.5244	0.4742	0.3883	0.3734	0.0693	0.0764	0.0699	

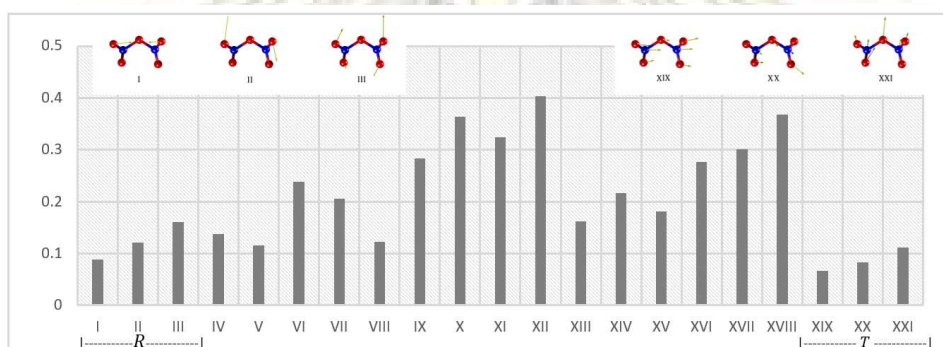


รูปที่ 3.8 กราฟค่าคะแนนการยึดสำหรับโหนดการเคลื่อนไหวของ $\text{HPO}_4^{2-}$  จากโปรแกรมคอมพิวเตอร์

จากผลการทดสอบกับ  $\text{HPO}_4^{2-}$  ตามตารางที่ 3.8 และรูปที่ 3.8 จะเห็นว่าในโหนดที่ XI - XV ซึ่งเป็นโหนดการยึดมีค่าคะแนนที่สูง และโหนดอื่น ๆ ที่ไม่ใช่โหนดการยึดมีค่าคะแนนต่ำ แสดงว่าโปรแกรมนี้สามารถให้ค่าคะแนนที่ถูกต้องได้กับโหนดการเคลื่อนไหวของ  $\text{HPO}_4^{2-}$

ตารางที่ 3.9 ค่าคะแนนการยึดสำหรับโหมดการเคลื่อนไหวของ  $N_2O_5$  จากโปรแกรมคอมพิวเตอร์

	โหมดการเคลื่อนไหวที่						
	I	II	III	IV	V	VI	VII
$s[v]$	0.0880	0.1213	0.1607	0.1378	0.1149	0.239	0.2062
	VIII	IX	X	XI	XII	XIII	XIV
$s[v]$	0.1229	0.2827	0.3631	0.3242	0.4039	0.1615	0.2163
	XV	XVI	XVII	XVIII	XIX	XX	XXI
$s[v]$	0.1804	0.2764	0.3015	0.3678	0.0666	0.0827	0.1111



รูปที่ 3.9 กราฟค่าคะแนนการยึดสำหรับโหมดการเคลื่อนไหวของ  $N_2O_5$  จากโปรแกรมคอมพิวเตอร์

จากผลการทดสอบกับ  $N_2O_5$  ตามตารางที่ 3.9 และรูปที่ 3.9 จะเห็นว่าในโหมดที่ I - III และ XIX - XXI ซึ่งเป็นโหมดการหมุนและการเลื้อนที่ตามลำดับจะมีค่าคะแนนที่ต่ำ แต่โหมดที่ IV - XVIII ที่เป็นโหมดการสั่นมีคะแนนที่ใกล้เคียงกัน ทำให้ไม่สามารถแยกโหมดการยึดออกจากโหมดการสั่นโหมดอื่น ๆ ได้ แสดงว่าโปรแกรมนี้ไม่สามารถให้ค่าคะแนนที่ถูกต้องได้กับโหมดการเคลื่อนไหวที่เป็นโหมดการสั่นบางโหมดของ  $N_2O_5$

จากผลการทดลองทั้งหมดสามารถสรุปได้ว่าโปรแกรมนี้สามารถให้คะแนนที่ถูกต้องกับโหมดการเลื้อนที่และโหมดการหมุนได้ แต่ไม่สามารถให้คะแนนที่ถูกต้องกับโหมดการสั่นบางโหมดของโมเลกุลขนาดใหญ่ได้ จึงจำเป็นต้องมีการศึกษาและพัฒนาต่อไป

## บทที่ 4

### สรุปผลการทดลอง

งานวิจัยนี้ต้องการหาปริมาณที่เหมาะสมของฟังก์ชันคะแนนจากการใช้นิยามของโหมดการยึดแบบต่าง ๆ เพื่อใช้บอกความเป็นโหมดการยึดของชุดเวกเตอร์ของโหมดการเคลื่อนไหวของโมเลกุลที่สนใจ พร้อมพัฒนาเป็นโปรแกรมคอมพิวเตอร์ด้วยภาษาคอมพิวเตอร์ C++ ผลการทดลองสรุปว่านิยามที่เหมาะสมที่สุดในการพัฒนาเป็นฟังก์ชันคะแนนสำหรับระบุโหมดการยึดของโมเลกุลคือการคำนวณที่เกี่ยวข้องกับการเปลี่ยนแปลงความยาวพันธะในโมเลกุล โดยฟังก์ชันคะแนนจากนิยามนี้เมื่อทดสอบกับโหมดการเคลื่อนไหวต่าง ๆ ของโมเลกุลขนาดเล็กจะให้ค่าคะแนนที่สูงกับโหมดการเคลื่อนไหวที่คล้ายกับโหมดการยึดและให้ค่าคะแนนที่ต่ำกับโหมดการเคลื่อนไหวที่คล้ายกับโหมดปกติแบบอื่น ๆ เช่น โหมดการเลื่อนที่และการหมุน เมื่อนำโปรแกรมที่พัฒนาจากนิยามนี้มาทดสอบกับโมเลกุลที่มีขนาดใหญ่ขึ้น พบว่าโปรแกรมให้ค่าคะแนนที่ถูกต้องกับโหมดการยึด, การเลื่อนที่ และการหมุน แต่ยังไม่สามารถให้ค่าคะแนนที่ถูกต้องกับโหมดการสั่นบางโหมดได้ จึงจำเป็นต้องมีการศึกษาและพัฒนาต่อไป





### เอกสารอ้างอิง

1. F. Albert Cotton. *Chemical Applications of Group Theory*, 3rd ed.; John Wiley & Sons: New York. 1990.
2. B. Rosman. Calculation of Molecular Vibrational Normal Modes. Computational and Applied Mathematics Honours Dissertation. The University of the Witwatersrand. 2008.
3. N. Paiboonvorachat; V. Vchirawongkwin. *Normal Mode Analysis via Expanded – Moment of Inertia Tensor*. Unpublished work, 2016.
4. M.E. Starzak. *Mathematical Methods in Chemistry and Physics*, 1st ed.; Springer Science & Business Media: New York. 1989.



## ภาคผนวก ก.

## ข้อมูลโครงสร้างโมเลกุลที่ใช้ทดสอบกับนิยามของโหนดการยึด

ข้อมูลโครงสร้างของ  $\text{H}_2\text{O}$ 

ตารางที่ข้อมูลโครงสร้าง  $\text{H}_2\text{O}$  ประกอบด้วยประกอบด้วยชนิดของอะตอม, ตำแหน่งในพิกัดฉาก และอะตอมที่สร้างพันธะด้วยกัน

ชนิดอะตอม	ตำแหน่งในพิกัดฉาก			อะตอมที่สร้างพันธะด้วยกัน
	$x$	$y$	$z$	
O	0.0000	0.0665	0.0000	H <sub>1</sub> , H <sub>2</sub>
H <sub>1</sub>	-0.7533	-0.5277	0.0000	O
H <sub>2</sub>	0.7533	-0.5277	0.0000	O

ข้อมูลโครงสร้างของ  $\text{NO}_2^-$ 

ตารางที่ข้อมูลโครงสร้าง  $\text{NO}_2^-$  ประกอบด้วยประกอบด้วยชนิดของอะตอม, ตำแหน่งในพิกัดฉาก และอะตอมที่สร้างพันธะด้วยกัน

ชนิดอะตอม	ตำแหน่งในพิกัดฉาก			อะตอมที่สร้างพันธะด้วยกัน
	$x$	$y$	$z$	
N	0.0000	0.4574	0.0000	O <sub>1</sub> , O <sub>2</sub>
O <sub>1</sub>	1.0321	-0.1725	0.0000	N
O <sub>2</sub>	-1.0321	-0.2279	0.0000	N

ข้อมูลโครงสร้างของ  $\text{NO}_3^-$ 

ตารางที่ข้อมูลโครงสร้าง  $\text{NO}_3^-$  ประกอบด้วยประกอบด้วยชนิดของอะตอม, ตำแหน่งในพิกัดฉาก และอะตอมที่สร้างพันธะด้วยกัน

ชนิดอะตอม	ตำแหน่งในพิกัดฉาก			อะตอมที่สร้างพันธะด้วยกัน
	$x$	$y$	$z$	
N	0.02407	-0.03105	-0.01485	O <sub>1</sub> , O <sub>2</sub> , O <sub>3</sub>
O <sub>1</sub>	1.19286	-0.3824	0.00463	N
O <sub>2</sub>	-0.25827	1.21629	0.00401	N
O <sub>3</sub>	-0.95566	-0.80671	0.00436	N

## ภาคผนวก ข.

## โปรแกรมคอมพิวเตอร์จากฟังก์ชันคะแนนสำหรับระบุโหมดการยึดของโมเลกุล

```

1  #include <iostream>
2  #include <string>
3  #include <fstream>
4  #include <iomanip>
5  #include <math.h>
6
7  using namespace std;
8
9  void cross_product(double *u,double *v,double *Ans)
10 {
11     Ans[0] = u[1]*v[2] - u[2]*v[1];
12     Ans[1] = u[2]*v[0] - u[0]*v[2];
13     Ans[2] = u[0]*v[1] - u[1]*v[0];
14 }
15
16 class Molecule
17 {
18     public:
19     int AtomNum, BondNum;
20     double *r_atom[3];
21     int *bond[2];
22 };
23
24 Molecule Mole;
25
26 class Mode
27 {
28     public:
29     int i;
30     double* EigVec;
31     double Vs,Vb,sizeVec,sizeVec1,sizeVec2;
32     double ra[3],rb[3];
33     double vec1[3],vec2[3];
34     void scoringVs()
35     {
36         int nb =0;
37         int n,a,b;
38         double vecBond[3],vecBond2[3];
39         Vs = 0.0;
40         for(i=0;i<Mole.BondNum;++i)
41         {
42             a = Mole.bond[0][i]-1;
43             b = Mole.bond[1][i]-1;
44             vec1[0] = EigVec[3*a]; vec1[1] = EigVec[3*a+1]; vec1[2] = EigVec[3*a+2];
45             vec2[0] = EigVec[3*b]; vec2[1] = EigVec[3*b+1]; vec2[2] = EigVec[3*b+2];
46             ra[0] = Mole.r_atom[0][a]; ra[1] = Mole.r_atom[1][a]; ra[2] = Mole.r_atom[2][a];
47             rb[0] = Mole.r_atom[0][b]; rb[1] = Mole.r_atom[1][b]; rb[2] = Mole.r_atom[2][b];
48             vecBond[0] = rb[0]-ra[0]; vecBond[1] = rb[1]-ra[1]; vecBond[2] = rb[2]-ra[2];
49             vecBond2[0]=vecBond[0]+vec2[0]-vec1[0]; vecBond2[1]=vecBond[1]+vec2[1]-vec1[1];
50             vecBond2[2]=vecBond[2]+vec2[2]-vec1[2];
51             Vs += abs(size_vector(vecBond2) - size_vector(vecBond));
52             ++nb;
53         }
54         if(nb>0)
55             Vs /= nb;
56         else Vs = 0.0;
57     };
58
59 int main()
60 {
61     int i,j,q;
62     string fname,none;
63     cout << "Input molecule name: ";
64     cin >> fname;
65     string fname2 = fname + ".dat",fname3 = fname + "_MIT.dat",fname4 = fname + ".txt",fname5
66 = fname + "_BOND.dat";
67     ifstream readfile_EMIT(fname2.c_str()); // mole.dat
68     ifstream readfile_MIT(fname3.c_str()); // mole_MIT.dat
69     ifstream readfile_BOND(fname5.c_str()); // mole_BOND.dat
70     ofstream writefile(fname4.c_str());
71
72     readfile_MIT >> Mole.AtomNum;
73     readfile_BOND >> Mole.BondNum;
74     double EigVec[3*Mole.AtomNum][3*Mole.AtomNum];
75     double r_atom[3][Mole.AtomNum];
76     int AtomBondNum[Mole.AtomNum];
77     int bond[2][Mole.BondNum];
78     double vec[3],a;
79     Mode Nmode[3*Mole.AtomNum];
80     //for input EigVec
81     for(i=0;i<3*Mole.AtomNum;++i)
82     {
83         Nmode[i].EigVec = EigVec[i];
84     }
85     for(i=0;i<3*Mole.AtomNum;i+=3)
86     {
87         readfile_EMIT >> none >> none >> none;
88         readfile_EMIT >> Nmode[i].EigVal >> Nmode[i+1].EigVal >> Nmode[i+2].EigVal;
89         for(j=0;j<3*Mole.AtomNum;++j)
90         {
91             readfile_EMIT >> none >> EigVec[i][j] >> EigVec[i+1][j] >> EigVec[i+2][j];
92         }
93     }
94     //for input Coordinate
95     for(i=0;i<3;++i)
96     {
97         Mole.r_atom[i] = r_atom[i];
98     }

```

```
98     readfile_MIT >> none;
99     for(i=0;i<Mole.AtomNum;++i)
100     {
101         for(j=0;j<3;++j)
102         {
103             readfile_MIT >> r_atom[j][i];
104         }
105     }
106     //for input Bond
107     for(i=0;i<2;++i)
108     {
109         Mole.bond[i] = bond[i];
110     }
111     for(i=0;i<Mole.BondNum;++i)
112     {
113         readfile_BOND >> bond[0][i] >> bond[1][i];
114     }
115     //for calculate
116     cout << "Vs = ";
117     writefile << endl;
118     writefile << "Vs = ";
119     for(i=0,Best_Vs=0;i<3*Mole.AtomNum;++i)
120     {
121         cout << setw(13) << right << Nmode[i].Vs << " ";
122         writefile << setw(13) << right << Nmode[i].Vs << " ";
123         if(abs(Nmode[i].Vs) > abs(Nmode[Best_Vs].Vs)) Best_Vs = i;
124     }
125     cout << endl;
126     return 0;
127 }
128
```



## ภาคผนวก ค.

ข้อมูลโครงสร้างโมเลกุลและโหนดการเคลื่อนไหวของโมเลกุลที่ใช้ทดสอบกับโปรแกรมฟังก์ชันคะแนน  
สำหรับระบุโหนดการยึดของโมเลกุล

## ข้อมูลโครงสร้างโมเลกุลที่ใช้ทดสอบกับโปรแกรมฟังก์ชันคะแนนสำหรับระบุโหนดการยึดของโมเลกุล

ตารางที่ข้อมูลโครงสร้าง  $\text{HSO}_3^-$  ประกอบด้วยประกอบด้วยชนิดของอะตอม, ตำแหน่งในพิกัดฉาก และอะตอมที่สร้างพันธะด้วยกัน

ชนิดอะตอม	ตำแหน่งในพิกัดฉาก			อะตอมที่สร้างพันธะด้วยกัน
	$x$	$y$	$z$	
S	0.0000	0.0000	0.0000	H, O <sub>1</sub> , O <sub>2</sub> , O <sub>3</sub>
H	-0.8003	0.2043	1.0174	S
O <sub>1</sub>	1.419	0.0297	0.5906	S
O <sub>2</sub>	-0.214	0.9910	-1.0501	S
O <sub>3</sub>	-0.3056	-1.3536	-0.4858	S

ตารางที่ข้อมูลโครงสร้าง  $\text{HPO}_4^{2-}$  ประกอบด้วยประกอบด้วยชนิดของอะตอม, ตำแหน่งในพิกัดฉาก และอะตอมที่สร้างพันธะด้วยกัน

ชนิดอะตอม	ตำแหน่งในพิกัดฉาก			อะตอมที่สร้างพันธะด้วยกัน
	$x$	$y$	$z$	
P	2.7359	4.8247	-4.5923	O <sub>1</sub> , O <sub>2</sub> , O <sub>3</sub> , O <sub>4</sub>
O <sub>1</sub>	4.2623	4.8152	-4.3512	P
O <sub>2</sub>	2.1126	3.4089	-4.7127	P
O <sub>3</sub>	2.3383	5.8079	-5.6779	P
O <sub>4</sub>	2.0027	5.5375	-3.1830	P, H
H	1.0781	5.2654	-3.2290	O <sub>4</sub>

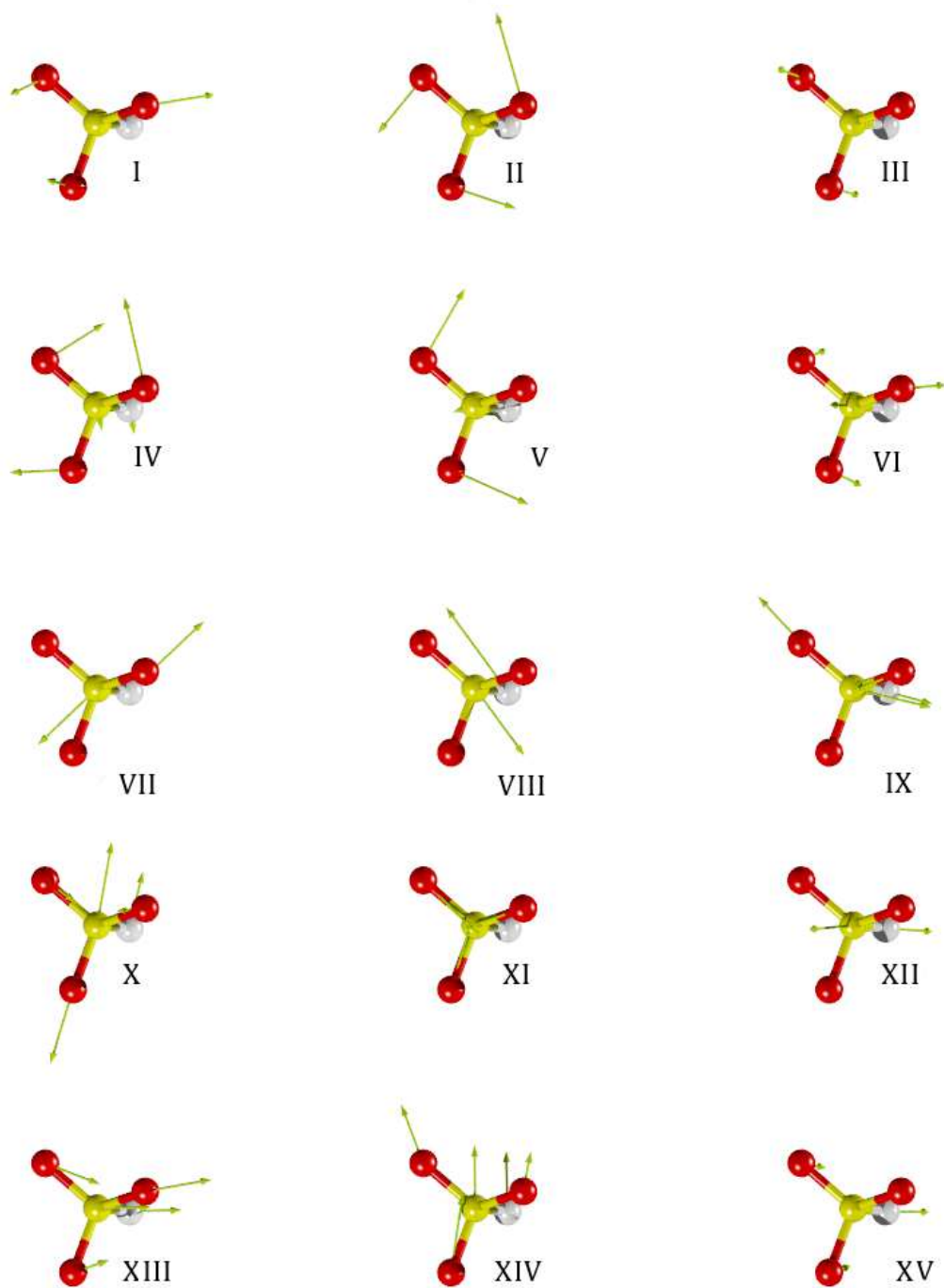
ตารางที่ข้อมูลโครงสร้าง  $N_2O_5$  ประกอบด้วยประกอบด้วยชนิดของอะตอม, ตำแหน่งในพิกัดฉาก และอะตอมที่สร้างพันธะด้วยกัน

ชนิดอะตอม	ตำแหน่งในพิกัดฉาก			อะตอมที่สร้างพันธะด้วยกัน
	$x$	$y$	$z$	
$O_1$	3.6807	-0.3307	-0.153	$N_1, N_2$
$N_1$	3.5697	0.4325	0.9942	$O_1$
$O_2$	4.5753	0.8665	1.4194	$N_1$
$O_3$	2.4561	0.5099	1.3425	$N_1$
$N_2$	4.7541	-0.0084	-1.0013	$O_1$
$O_4$	5.3544	-0.9853	-1.2359	$N_2$
$O_5$	4.8955	1.1703	-1.2652	$N_2$

ข้อมูลโหมตการเคลื่อนไหวของโมเลกุลที่ใช้ทดสอบกับโปรแกรมฟังก์ชันคะแนนสำหรับระบุโหมตการยึดของโมเลกุล

ตารางที่โหมตการเคลื่อนไหวของ  $\text{HSO}_3^-$  ที่ได้มาจากโปรแกรม EMIT

เวกเตอร์การเคลื่อนที่		โหมตการเคลื่อนไหวที่							
		I	II	III	IV	V	VI	VII	VIII
S	x	-0.00326	0.010259	-0.00126	0.040961	-0.17978	0.001774	-0.47601	0.395005
	y	-0.00183	-0.02182	-0.00068	-0.18281	-0.04536	0.004776	-0.39984	-0.47798
	z	-0.0142	0.001939	0.004853	-0.00022	-0.00633	-0.33609	-0.01594	0.013785
H	x	-0.00323	0.010488	-0.00133	0.04228	-0.1854	0.00685	0.598553	-0.50064
	y	-0.00197	-0.0223	-0.00066	-0.18829	-0.04675	-9.9E-05	0.49729	0.597342
	z	-0.01418	0.001724	0.004855	-0.00215	-0.00517	-0.33579	0.016706	-0.00553
O <sub>1</sub>	x	0.089576	-0.17913	-0.01343	-0.17445	-0.14315	0.106423	-0.06145	0.030074
	y	0.079841	0.662846	0.001895	0.649082	-0.04356	0.026892	-0.01011	0.020896
	z	0.820896	-0.07141	-0.0802	0.008631	0.115545	0.454337	0.00964	-0.0008
O <sub>2</sub>	x	-0.02943	-0.32976	0.189148	0.416479	0.367012	-0.09309	0.004158	0.047322
	y	-0.12164	-0.39633	0.062239	0.266608	0.510125	0.076119	0.01569	-0.04268
	z	-0.44616	-0.07473	-0.65019	0.127547	-0.04847	0.504378	-0.00164	0.016111
O <sub>3</sub>	x	-0.04371	0.456108	-0.16911	-0.44459	0.658588	-0.03739	-0.00538	-0.02288
	y	0.05141	-0.15503	-0.06074	-0.02084	-0.24601	-0.11347	-0.05558	-0.04042
	z	-0.30335	0.137028	0.706144	-0.13015	-0.0415	0.52212	-0.00977	-0.0028
เวกเตอร์การเคลื่อนที่		โหมตการเคลื่อนไหวที่							
		IX	X	XI	XII	XIII	XIV	XV	
S	x	0.604457	0.136269	-0.00429	0.053612	0.443072	-0.00755	-0.0085	
	y	-0.13519	0.595057	0.002317	-0.02898	0.008241	0.449866	0.00462	
	z	0.060094	-0.02658	0.056886	-0.71157	-0.00613	0.004284	0.610239	
H	x	0.40945	0.091768	-0.00128	0.002911	0.42265	-0.00691	0.000194	
	y	-0.08942	0.404981	0.009607	-0.02193	0.008098	0.430212	-0.00405	
	z	-0.04619	0.031301	-0.28662	0.654324	0.005234	-0.00685	0.610897	
O <sub>1</sub>	x	-0.44042	-0.25425	-0.5337	-0.16011	0.563173	0.069046	-0.04192	
	y	-0.13948	-0.01998	-0.13956	-0.04187	0.082776	0.285909	-0.01053	
	z	0.069404	0.036209	0.072746	0.021823	-0.03967	-0.01041	0.284744	
O <sub>2</sub>	x	-0.31284	0.233655	0.407511	0.064126	0.429989	-0.16389	0.033825	
	y	0.332533	-0.15826	-0.38394	-0.06042	-0.14948	0.41836	-0.03212	
	z	-0.07053	0.044368	0.08157	0.012836	0.033798	-0.03223	0.288758	
O <sub>3</sub>	x	0.046713	-0.13728	0.131755	0.039456	0.288138	0.070829	0.010889	
	y	-0.03348	-0.52831	0.511577	0.1532	0.087694	0.562112	0.044751	
	z	-0.00073	-0.08544	0.075416	0.022585	0.013261	0.042858	0.28927	

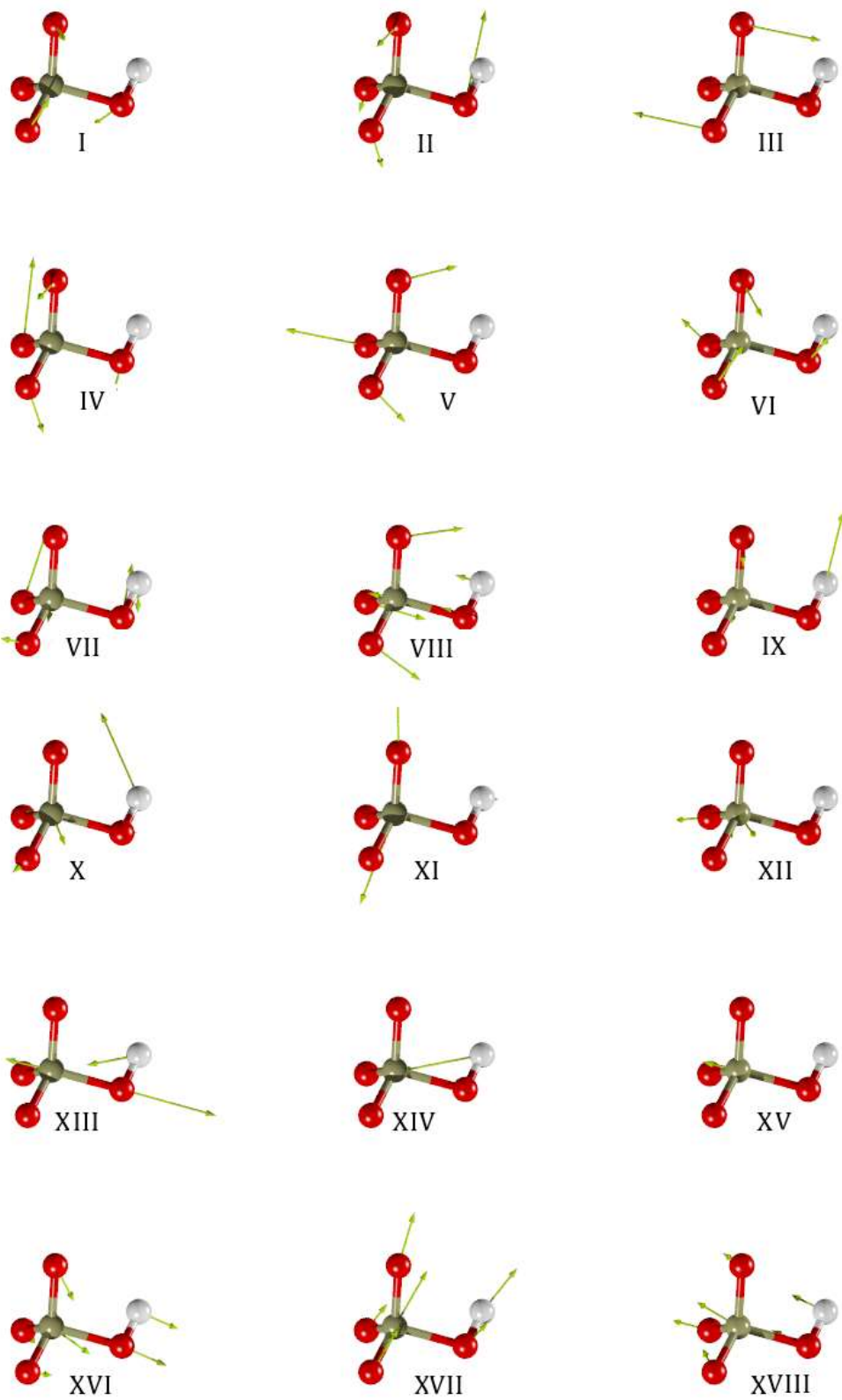


รูปแสดงโหมดการเคลื่อนไหวของ  $\text{HSO}_3^-$  ที่ได้จากโปรแกรม EMIT



ตารางโหมดการเคลื่อนไหวของ  $HPO_4^-$  ที่ได้จากโปรแกรม EMIT

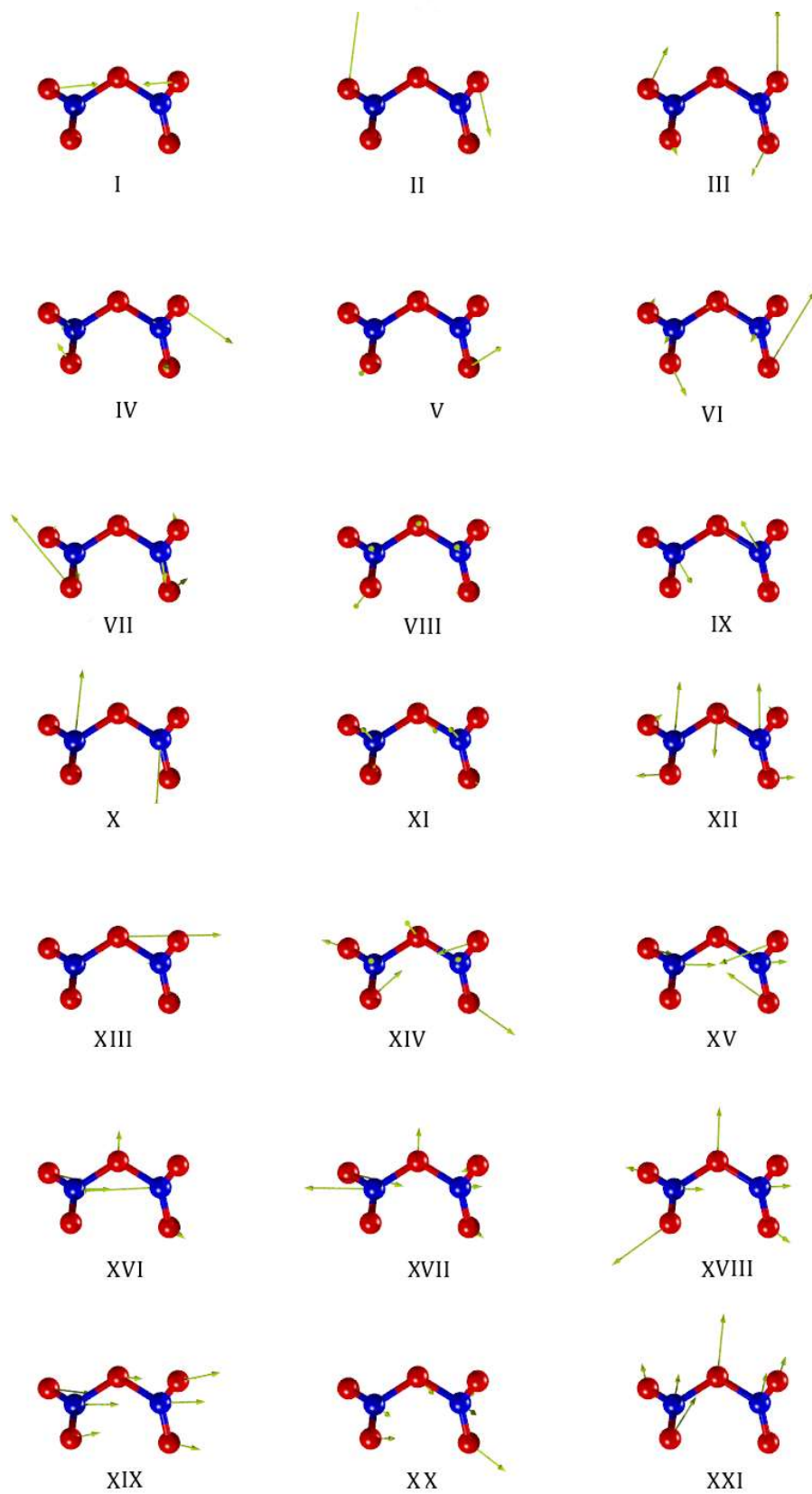
โหมดการเคลื่อนไหว	โหมดการเคลื่อนไหวที่																		
	I	II	III	IV	V	VI	VII	VIII	IX	X	XI	XII	XIII	XIV	XV	XVI	XVII	XVIII	
P	X	-0.00331	-0.00565	0.000808	0.003986	-0.01393	0.039597	-0.08143	-0.19426	0.057621	-0.02024	-0.22572	-0.26045	-0.36387	0.609645	-0.27465	0.423514	0.259327	-0.07195
	Y	0.00658	-0.00986	0.000214	0.015442	0.00381	-0.15575	-0.13507	0.018477	-0.28937	-0.12333	-0.73249	0.176861	0.060929	-0.10208	0.045988	-0.29396	0.429755	-0.05146
	Z	-0.0073	-0.00687	-0.00129	0.007487	0.000437	0.131266	-0.14282	0.091801	0.11945	-0.30771	-0.10622	-0.68717	0.132915	-0.22269	0.100323	0.025714	0.090222	0.524619
O <sub>1</sub>	X	-0.01854	0.168273	-0.40272	0.23319	0.260291	0.015304	-0.28121	0.270939	-0.00697	-0.1722	0.218602	0.266451	0.111484	0.184967	0.412028	0.280732	0.292548	0.070876
	Y	0.400844	-0.34304	-0.10898	-0.43211	-0.23648	0.498151	0.089617	-0.15039	0.054317	-0.06698	0.104349	0.140314	0.057377	0.095196	0.212056	-0.09358	0.287324	0.027008
	Z	-0.2427	-0.00967	0.575511	0.008577	-0.18709	-0.2619	-0.03024	-0.38314	-0.0162	-0.08407	0.17333	0.205701	0.088857	0.147427	0.328403	0.077785	0.171767	0.325108
O <sub>2</sub>	X	-0.10195	-0.34414	0.370865	-0.31494	0.523253	-0.03576	0.279767	0.452277	0.029525	0.024631	-0.07514	0.008429	-0.01562	-0.01121	0.077329	0.229613	0.095279	-0.03467
	Y	0.032324	-0.02492	0.127301	0.004822	0.080817	-0.09246	-0.13562	0.149481	-0.23436	-0.14207	0.500422	-0.07177	0.107337	0.07708	-0.53153	-0.32936	0.432395	-0.01334
	Z	-0.32629	-0.27722	-0.583	-0.27839	0.009371	-0.43545	0.303211	-0.19926	-0.05637	0.033273	0.06236	-0.01781	0.013517	0.009707	-0.06693	-0.01015	0.069972	0.244335
O <sub>3</sub>	X	-0.04902	-0.08864	0.017826	0.158786	-0.71977	-0.13287	0.244358	0.556478	-0.0122	0.000525	-0.00128	-0.00174	5.28E-05	-7.8E-05	-0.00058	0.202805	0.129429	-0.03267
	Y	0.031456	-0.16154	-0.00796	0.593066	0.158511	0.110479	0.51441	-0.18639	-0.0736	0.130513	0.0736	-0.26474	-0.02309	0.033935	0.253655	-0.18676	0.241871	-0.16454
	Z	0.007153	-0.09356	-0.00597	0.337939	0.089987	0.279241	0.229952	-0.02705	0.201047	-0.13251	-0.14596	0.457371	0.040334	-0.05929	-0.44314	0.103652	-0.02354	0.485783
O <sub>4</sub>	X	0.189822	0.298328	0.009144	-0.10037	0.020124	-0.08007	0.207332	-0.18845	0.041708	0.135041	-0.06568	-0.07556	0.701335	-0.10699	-0.16403	0.397485	0.182115	-0.16766
	Y	-0.50493	0.589562	-0.01163	-0.25944	-0.02453	0.384951	0.304661	0.067821	0.041109	-0.00215	0.002837	0.014898	-0.12374	0.018877	0.028939	-0.16859	0.192246	-0.00237
	Z	0.606221	0.422288	0.021281	-0.11348	0.084997	-0.33486	0.315088	0.085454	-0.04454	-0.00945	0.028132	0.025492	-0.32395	0.049421	0.075765	-0.07688	0.015785	0.303478
H	X	-0.00362	-0.00547	0.000789	0.003623	-0.01412	0.050159	-0.07853	-0.19494	-0.18183	0.036713	0.141631	0.046465	-0.43338	-0.67633	-0.0501	0.401859	0.283196	-0.08361
	Y	0.007576	-0.01111	0.000214	0.017658	0.00484	-0.19273	-0.16431	0.034084	0.805635	0.333823	-0.00971	0.018448	-0.07882	-0.12301	-0.00911	-0.19471	0.334285	-0.04665
	Z	-0.00837	-0.00798	-0.00147	0.008756	0.000338	0.162165	-0.18069	0.111112	-0.32082	0.812945	-0.02372	-0.04228	0.048329	0.075421	0.005587	0.012564	0.056654	0.38848



รูปแสดงโหมดการเคลื่อนไหวของ  $\text{HPO}_4^{2-}$  ที่ได้มาจากโปรแกรม EMIT

ตารางใหม่การเคลื่อนไหวของ  $N_2O_5$  ที่ได้มาจากโปรแกรม EMIT

เวกเตอร์เคลื่อนที่	ใหม่การเคลื่อนไหว																					
	I	II	III	IV	V	VI	VII	VIII	IX	X	XI	XII	XIII	XIV	XV	XVI	XVII	XVIII	XIX	XX	XI	
$O_1$	X	-0.00597	-0.02354	-0.0017	-0.04372	-0.03129	-0.08557	0.062831	0.071809	-0.00195	-0.01153	-0.07242	0.010748	0.952428	0.047343	0.001916	-0.01362	-0.01496	-0.02364	0.253206	0.007837	-0.00936
	Y	-7.8E-05	-0.02394	-0.06593	0.039677	-0.01454	-0.06163	-0.10251	0.034965	-0.00589	0.007462	-0.17547	-0.40361	0.016377	0.144177	-0.03949	0.280614	0.308228	0.487263	-0.01906	-0.16348	0.568423
	Z	-0.02385	0.008176	-0.0342	-0.08721	0.045259	-0.07306	0.009768	-0.15668	0.018239	0.003856	0.707797	-0.12297	0.094678	-0.45595	-0.00941	0.066865	0.073445	0.116105	-0.04159	0.403548	0.192981
$N_1$	X	-0.00402	-0.0197	0.000521	-0.03073	-0.02596	-0.05442	0.041022	0.063916	-0.06321	-0.02221	0.044735	0.008427	-0.12776	0.035291	0.393256	0.344533	-0.65197	0.282958	0.430273	0.038237	0.006072
	Y	-0.00142	-0.03453	-0.10695	0.057471	-0.02256	-0.13906	-0.2662	0.088665	-0.27072	0.643737	0.120812	0.541738	0.013162	0.049172	-0.00499	-0.00437	0.008279	-0.00359	-0.00052	-0.11196	0.280895
	Z	-0.02922	0.009716	-0.04904	-0.10852	0.067554	-0.11503	-0.0107	-0.28965	0.637869	0.003975	0.012117	0.07219	-0.27388	-0.01927	0.277703	0.027304	-0.03048	-0.03056	-0.42672	0.272109	0.114539
$O_2$	X	0.001546	-0.02837	0.082314	-0.06488	-0.25609	0.194194	-0.52632	-0.38588	0.003975	0.012117	0.07219	-0.27388	-0.01927	0.277703	0.027304	-0.03048	-0.03056	-0.42672	0.272109	0.114539	0.166235
	Y	0.01052	-0.04032	-0.15549	0.185382	-0.10833	-0.30076	0.65532	-0.18713	0.007159	-0.00797	0.084376	-0.01728	-0.08005	0.257944	0.02421	-0.02703	-0.04483	-0.37838	0.054692	0.001022	0.37829
	Z	-0.0401	0.035439	-0.03592	-0.19286	0.420065	-0.10942	-0.12478	0.642931	-0.00904	-0.00091	-0.07814	-0.16558	-0.0716	0.080705	0.022554	-0.02518	-0.04176	-0.35248	0.032016	0.342013	0.225657
$O_3$	X	0.178125	0.141468	0.135237	0.026202	-0.0297	0.02198	0.080258	0.072769	-0.00215	-0.00789	-0.04678	0.145937	-0.10645	-0.24835	0.275173	0.392401	0.568969	-0.23625	0.41977	-0.07155	-0.09957
	Y	0.043354	0.826455	0.385327	0.161857	0.422483	-0.055	0.124341	-0.02845	0.103029	-0.00465	0.000687	-0.05909	-0.00133	0.037914	-0.03959	-0.05766	-0.08223	-0.11923	0.049943	-0.049	0.229972
	Z	0.808605	-0.08439	0.161857	0.422483	-0.055	0.124341	-0.02845	0.103029	-0.00465	0.000687	-0.05909	-0.00133	0.037914	-0.03959	-0.05766	-0.08223	-0.11923	0.049943	-0.049	0.229972	0.101378
$N_2$	X	-0.00375	-0.01918	0.00348	-0.03103	-0.02643	-0.0485	0.051988	0.068106	0.064573	0.058425	0.0459	-0.05069	-0.12765	0.049058	0.25835	-0.75965	0.205554	0.294447	0.426871	0.040665	0.025435
	Y	-0.00123	-0.03442	-0.10856	0.060103	-0.02193	-0.13848	-0.28271	0.05731	0.278854	-0.65809	0.110657	0.512967	-0.00374	0.048988	0.012049	-0.03543	0.009587	0.013733	0.011351	-0.10907	0.279647
	Z	-0.0295	0.010171	-0.04949	-0.10974	0.069955	-0.1159	-0.01205	-0.30539	-0.6582	-0.27307	-0.41659	0.118944	-0.01743	-0.22122	0.030454	-0.08955	0.024231	0.034709	-0.00091	0.3231	0.113748
$O_4$	X	-0.14112	0.130466	-0.13189	0.290515	-0.04877	-0.04138	-0.04658	0.101043	-0.00546	-0.00095	-0.08628	-0.10862	-0.09685	-0.40404	-0.62597	-0.06474	-0.17916	-0.06724	0.432595	-0.17204	0.059306
	Y	-0.02677	-0.5016	0.665407	-0.3422	-0.00789	0.079022	0.163326	0.027888	0.000382	-0.0075	-0.01161	0.106986	-0.04779	-0.11797	-0.20788	-0.0215	-0.0595	-0.02233	0.076703	-0.14171	0.229221
	Z	-0.53299	-0.02658	0.36569	0.638897	-0.05566	0.173539	-0.00523	0.099859	-0.00392	-0.00046	-0.04815	0.060879	0.047622	0.020096	0.176721	0.018278	0.03058	0.018982	-0.07854	0.27652	0.065246
$O_5$	X	0.002324	-0.07437	-0.08422	0.043844	0.538155	0.323085	0.120289	-0.22643	0.007938	-0.00412	0.106923	0.201338	-0.02847	0.403487	-0.33003	0.131558	0.122122	0.176452	0.286932	0.217535	-0.09013
	Y	-0.01986	-0.08	-0.30394	-0.00261	0.180705	0.689193	0.122512	-0.01643	-0.00204	-0.000245	-0.05049	0.007623	0.083437	-0.2943	0.274273	-0.10149	-0.14664	-0.06293	-0.25826	0.303431	0.030784
	Z	-0.05795	0.019148	-0.21868	-0.25133	-0.6306	0.346812	0.176623	0.295876	-0.00448	0.000954	-0.04707	0.171432	-0.05209	0.113487	-0.1995	0.079523	0.073823	0.106665	0.030405	0.369439	0.030784



รูปแสดงโหมดการเคลื่อนไหวของ  $N_2O_5$  ที่ได้มาจากโปรแกรม EMIT

### ประวัติผู้วิจัย

นายวิศรุต รัตนนรา เกิดเมื่อวันที่ 8 เดือนมิถุนายน พ.ศ. 2539 ที่จังหวัดสงขลา สำเร็จการศึกษาชั้นมัธยมศึกษาตอนปลายจากโรงเรียนพรหมานุสรณ์ จังหวัดเพชรบุรีเมื่อปีการศึกษา 2556 เคยได้รับรางวัลรองชนะเลิศอันดับ 1 โครงการงานหุ่นยนต์อัตโนมัติระดับการศึกษามัธยมศึกษาตอนต้น การประกวดและแข่งขันหุ่นยนต์ สพฐ. ชิงแชมป์ประเทศไทยเมื่อ พ.ศ. 2553 เข้าศึกษาต่อในหลักสูตรวิทยาศาสตรบัณฑิต ภาควิชาเคมี คณะวิทยาศาสตร์ จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย เมื่อปีการศึกษา 2557 ที่อยู่ที่สามารถติดต่อได้ บ้านเลขที่ 77 ตำบลบ้านหม้อ อำเภอเมืองเพชรบุรี จังหวัดเพชรบุรี รหัสไปรษณีย์ 76000 อีเมล witsarut\_0001@hotmail.com

