

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

Физико-технический институт
Направление подготовки 03.04.02 «Физика»
Кафедра общей физики

МАГИСТЕРСКАЯ ДИССЕРТАЦИЯ

Тема работы
Исследование колебательно-вращательного спектра высокого разрешения молекулы as-C₂H₂D₂ в диапазоне 600-1300 см⁻¹

УДК 530.145

Студент

Группа	ФИО	Подпись	Дата
ОБМ41	Каширина Надежда Владимировна		

Руководитель

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Профессор каф. ОФ ФТИ	Уленев О.Н.	Д.ф.-м.н., профессор		

КОНСУЛЬТАНТЫ:

По разделу «Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение»

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Доцент каф. Мен.	Верховская М.В.	К.э.н.		

По разделу «Социальная ответственность»

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Профессор каф. ЭБЖ ИНК	Федорчук Ю.М.	Д.т.н.		

ДОПУСТИТЬ К ЗАЩИТЕ:

Зав. кафедрой	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Общей физики	Лидер А.М.	К.т.н.		

Томск – 2016 г.

РЕЗУЛЬТАТЫ ОБУЧЕНИЯ

Код результата	Результат обучения (Выпускник должен быть готов)	Требования ФГОС, критериев и/или заинтересованных сторон
<i>Общекультурные (универсальные) компетенции</i>		
P1	Понимает необходимость самостоятельного обучения и повышения квалификации в течение всего периода профессиональной деятельности.	Требования ФГОС (ОК-7), критерий 5 АИОР
P2	Проявляет способность эффективно работать самостоятельно в качестве члена команды по междисциплинарной тематике, быть лидером в команде, консультировать по вопросам проектирования научных исследований, а также быть готовым к педагогической деятельности.	Требования ФГОС (ОК-6, ПК-11), критерий 5 АИОР
P3	Умеет находить зарубежных и отечественных партнеров, владеет иностранным языком, позволяющим работать с зарубежными партнерами с учетом культурных, языковых и социально-экономических условий.	Требования ФГОС (ОК-2, ОК-4), критерий 5 АИОР
P4	Проявляет понимание используемых методов, области их применения, вопросов безопасности и здравоохранения, юридических аспектов, ответственности за профессиональную деятельность и ее влияния на окружающую среду.	Требования ФГОС (ОК-3), критерий 5 АИОР
P5	Следует кодексу профессиональной этики, ответственности и нормам научно-исследовательской деятельности.	Требования ФГОС (ОК-5), критерий 5 АИОР
<i>Профессиональные компетенции</i>		
P6	Проявляет глубокие естественнонаучные, математические профессиональные знания в проведении научных исследований в перспективных областях профессиональной деятельности.	Требования ФГОС (ОК-1, ПК-1), критерий 5 АИОР
P7	Принимает участие в фундаментальных исследованиях и проектах в области физики низких температур, конденсированного состояния и материаловедения, а также в модернизации современных и создании новых методов изучения механических,	Требования ФГОС (ПК-2), критерий 5 АИОР

	электрических, магнитных и тепловых свойств твердых, жидких и газообразных веществ.	
P8	Способен обрабатывать, анализировать и обобщать научно-техническую информацию, передовой отечественный и зарубежный опыт в профессиональной деятельности, осуществлять презентацию научной деятельности.	Требования ФГОС (ПК-4), критерий 5 АИОР
P9	Способен применять полученные знания для решения нечетко определенных задач, в нестандартных ситуациях, использует творческий подход для разработки новых оригинальных идей и методов исследования в области физики конденсированного состояния, низких температур и сжижения природного газа.	Требования ФГОС (ПК-3), критерий 5 АИОР
P10	Способен планировать проведение аналитических имитационных исследований по профессиональной деятельности с применением современных достижений науки и техники, передового отечественного и зарубежного опыта в области научных исследований, умеет критически оценивать полученные теоретические и экспериментальные данные и делает выводы, знает правовые основы в области интеллектуальной собственности.	Требования ФГОС (ОК-4, ПК-6, ПК-7, ПК-8, ПК-9), критерий 5 АИОР
P11	Умеет интегрировать знания в различных и смежных областях научных исследований и решает задачи, требующие абстрактного и креативного мышления и оригинальности в разработке концептуальных аспектов проектов научных исследований.	Требования ФГОС (ОК-5, ПК-10), критерий 5 АИОР

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

Физико-технический институт
Направление подготовки 03.04.02 «Физика»
Кафедра общей физики

УТВЕРЖДАЮ:

Зав. кафедрой

(Подпись)

(Дата)

Лидер А.М.
(Ф.И.О.)

ЗАДАНИЕ
на выполнение выпускной квалификационной работы

В форме:

Магистерской диссертации
(бакалаврской работы, дипломного проекта/работы, магистерской диссертации)

Студенту:

Группа	ФИО
ОБМ41	Кашириной Надежде Владимировне

Тема работы:

Исследование колебательно-вращательного спектра высокого разрешения молекулы $as-C_2H_2D_2$ в диапазоне $600-1300\text{ см}^{-1}$
Утверждена приказом директора (дата, номер)

Срок сдачи студентом выполненной работы:

ТЕХНИЧЕСКОЕ ЗАДАНИЕ:

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>	Объект исследования: Молекула этилена и ее изотопологи
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>	Обзор литературы. Интерпретация спектра молекулы $CH_2=CD_2$. Решение обратной спектроскопической задачи (получение спектроскопических постоянных). Раздел «Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение» Раздел «Социальная ответственность»

Перечень графического материала <i>(с точным указанием обязательных чертежей)</i>		
Консультанты по разделам выпускной квалификационной работы <i>(с указанием разделов)</i>		
Раздел	Консультант	
Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение	Верховская М.В.	
Социальная ответственность	Федорчук Ю.М.	
Названия разделов, которые должны быть написаны на русском и иностранном языках:		
Раздел 4: Результаты проведенного исследования		

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

Задание выдал руководитель:

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Профессор каф. ОФ	Уленеков О.Н.	Д.ф.-м.н., профессор		

Задание принял к исполнению студент:

Группа	ФИО	Подпись	Дата
ОБМ41	Каширина Н.В.		

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

Физико-технический институт
Направление подготовки 03.04.02 «Физика»
Уровень образования : Магистратура
Кафедра общей физики
Период выполнения :весенний семестр 2015/2016 учебного года)

Форма представления работы:

Магистерская диссертация
(бакалаврская работа, дипломный проект/работа, магистерская диссертация)

**КАЛЕНДАРНЫЙ РЕЙТИНГ-ПЛАН
выполнения выпускной квалификационной работы**

Срок сдачи студентом выполненной работы:	
--	--

Дата контроля	Название раздела (модуля) / вид работы (исследования)	Максимальный балл раздела (модуля)
01.03.16	Обзор литературы	10
20.03.16	Объект и методы исследования; Расчеты и аналитика	20/20
25.05.16	Результаты проведенного исследования	30
05.06.16	Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение	10
05.06.16	Социальная ответственность	10

Составил преподаватель:

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Профессор каф. ОФ	Уленеков О.Н.	Д.ф.-м.н., профессор		

СОГЛАСОВАНО:

Зав. кафедрой	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Общей физики	Лидер А.М.	К.т.н.		

РЕФЕРАТ

Выпускная квалификационная работа выполнена на 109 с., содержит 13 рис., 29 табл., 3 прил. с использованием 33 источников.

Ключевые слова: Молекулярная спектроскопия, спектры высокого разрешения, спектроскопические параметры, молекула $\text{CH}_2=\text{CD}_2$, резонансные взаимодействия.

Объектом исследования является молекула этилена и ее изотопологи.

Целью работы является исследование экспериментального спектра высокого разрешения молекулы $\text{CH}_2=\text{CD}_2$ в диапазоне $600 - 1300 \text{ см}^{-1}$.

В процессе исследования проводилась интерпретация спектра с помощью метода комбинационных разностей. На основе полученных результатов интерпретации была решена обратная спектроскопическая задача.

В результате исследования экспериментального спектра было проинтерпретировано около 12200 колебательно-вращательных переходов. По итогам решения обратной спектроскопической задачи был получен набор из 133 параметров (колебательных, вращательных и параметров центробежного искажения различных порядков). Данный набор параметров воспроизводит исходные экспериментальные колебательно-вращательные энергии (3920) с ошибкой rms : $d_{rms} = 2.3 \times 10^{-4} \text{ см}^{-1}$.

Полученные результаты используются для пополнения российских и международных баз данных.

Область применения: астрофизика, планетология и атмосферная оптика.

В будущем планируется провести исследование интенсивностей линий в спектре поглощения и на основе полученных результатов определить параметры дипольного момента.

ОГЛАВЛЕНИЕ

Введение.....	11
1 Обзор литературы	14
1.1 Предшествующие исследования	14
1.2 Математическая формулировка задачи	17
1.2.1 Теория возмущения	17
1.2.2 Метод эффективных операторов.....	18
2 Объект и методы исследования	22
2.1 Общая информация о молекуле $\text{CH}_2=\text{CD}_2$	22
2.2 Метод комбинационных разностей.....	25
2.3 Модель эффективного гамильтониана	27
3 Расчеты и аналитика	30
3.1 Эффект изотопозамещения в молекуле этилена и оценка спектроскопических параметров.....	30
4 Результаты проведенного исследования	32
4.1 Детали эксперимента	32
4.2 Описание спектров и определение переходов	33
4.3 Колебательно-вращательный анализ взаимодействующих состояний ($\nu_{10} = 1$), ($\nu_7 = 1$), ($\nu_4 = 1$), ($\nu_8 = 1$), ($\nu_3 = 1$) и ($\nu_6 = 1$).....	40
5 Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение.....	48
5.1 Оценка коммерческого и инновационного потенциала НТИ	48
5.1.1 SWOT-анализ	48
5.2 Планирование процесса управления НТИ: структура и график проведения, бюджет, риски и организация закупок	52
5.2.1 Планирование научно-исследовательских работ	52

5.3 Бюджет научного исследования	54
5.3.1 Специальное оборудование для научных работ	55
5.3.2 Расчет основной заработной платы	56
5.3.3 Дополнительная заработная плата научно-производственного персонала	57
5.3.4 Отчисления на социальные нужды	58
5.3.5 Накладные расходы	58
5.4 Определение ресурсной (ресурсосберегающей), финансовой, бюджетной, социальной и экономической эффективности исследования.....	59
6 Социальная ответственность	64
6.1 Анализ выявленных вредных факторов проектируемой производственной среды.....	64
6.1.1 Метеоусловия	64
6.1.2 Шум	66
6.1.3 Освещенность.....	66
6.1.5 Электромагнитные поля.....	71
6.2 Анализ выявленных опасных факторов производственной среды.....	73
6.2.1 Электробезопасность.....	73
6.2.2 Факторы пожарной и взрывной природы.....	74
6.3 Охрана окружающей среды	77
6.4 Защита в ЧС	78
6.5 Правовые и организационные вопросы обеспечения безопасности	79
Заключение	81
Список публикаций.....	82
Список используемой литературы	83

Приложение А	86
Приложение Б	89
Приложение В.....	91

ВВЕДЕНИЕ

Современный уровень развития теоретической колебательно-вращательной молекулярной спектроскопии позволяет с высокой точностью интерпретировать получаемую в ходе экспериментов информацию и, путём изучения тонкой структуры спектров, определять различные характеристики молекул.

Колебательно-вращательные спектры высокого разрешения являются на сегодняшний день наиболее полным и надёжным источником информации о внутренней структуре молекул, их состоянии и свойствах, а также о характере межмолекулярных взаимодействий. Параметры спектральных линий, которые можно определить из эксперимента, содержат информацию о таких важных характеристиках молекулы, как структурные постоянные, электрический и магнитный потенциалы, внутримолекулярное поле и т.д. Эти данные очень важны как для академических, так и практических приложений, например, в астрофизике, физической химии, атмосферной оптике и многих других областях.

Однако не всегда информация, получаемая из спектров молекул, является достаточной. В этом случае становится важным исследование изотопозамещённых модификаций, свойства которых, естественно, связаны со свойствами «материнской» молекулы, при этом спектры разных модификаций могут иметь значительные отличия. Таким образом, для решения многих задач большое значение приобретает информация об изотопической зависимости между спектроскопическими и молекулярными постоянными и параметрами спектральных линий. При этом на сегодняшний момент эти соотношения известны для ограниченного числа молекул, поэтому развитие теории изотопозамещения представляет большой интерес. В качестве примера использования информации о дейтерированных модификациях для описания «материнской» молекулы можно рассмотреть задачу определения внутримолекулярной потенциальной функции. Для корректного описания

потенциальной функции молекулы необходимо большое количество экспериментально зарегистрированных и проанализированных колебательно-вращательных полос [1, 2]. Такое количество полос невозможно набрать, используя только материнскую молекулу, поэтому используются так же колебательно-вращательные полосы различных модификаций.

В данной работе в качестве исследуемой молекулы выбрана дважды дейтерированная асимметричная модификация этилена. Этилен – самое производимое органическое соединение в мире, поскольку является ведущим продуктом основного органического синтеза. Исключительную важность имеет в биохимии и биофизике, в частности, является фитогормоном почти у всех растений. Этилен является ведущим продуктом, на основе которого вырабатывается почти половина всех органических соединений, таких как полиэтилен, уксусная кислота, этиловый спирт и др. Многие из этих соединений выбрасываются предприятиями химической и нефтехимической промышленности в атмосферу, влияя, таким образом, на генерацию озона и формирование глобального климата [3,4]. Этилен является одним из важнейших объектов исследования в астрофизике, физики и химии планет солнечной системы (в частности, он был найден в атмосферах планет гигантов) [5, 6, 7]. Наконец, этилен является хорошей модельной молекулой для исследования более сложных органических веществ. Выбор именно дважды дейтерированной модификации обусловлен более низкой её симметрией, что приводит к увеличению количества разрешённых переходов, а, следовательно, к большему количеству информации о параметрах молекулы, которую можно получить из эксперимента. Поэтому актуальной задачей представляется исследование колебательно-вращательных спектров молекулы этилена и его изотопологов для получения полной информации о внутренней структуре молекулы.

Целью работы является исследование колебательно-вращательного спектра высокого разрешения молекулы $\text{CH}_2=\text{CD}_2$ в диапазоне $600 — 1300\text{см}^{-1}$.

Для достижения цели были поставлены следующие задачи:

-интерпретация колебательно-вращательного спектра в диапазоне 600 — 1300 см⁻¹;

-решение обратной спектроскопической задачи и определение спектроскопических параметров полос, расположенных в исследуемом диапазоне.

1 ОБЗОР ЛИТЕРАТУРЫ

1.1 Предшествующие исследования

Исследование молекулы этилена и множества ее изотопологов проводится по всему миру с начала развития Фурье-спектроскопии. В настоящее время современные технологии позволяют зарегистрировать спектры высокого разрешения с точностью 0.00001 см^{-1} , что на несколько порядков выше, чем было в самом начале развития спектроскопической науки. Напомним, что анализ колебательно-вращательных спектров позволяет определить расположение энергетических уровней. Таким образом, экспериментальная точность напрямую влияет на точность определения энергетической структуры молекулы, что в дальнейшем может внести погрешность в определение внутренних свойств молекулы, например, на точность определения межатомных расстояний.

Исходная модификация молекулы этилена, C_2H_4 , наиболее распространена в природе и, следовательно, гораздо чаще и подробнее исследовалась, чем ее изотопологи. Так, например, международная база HITRAN из года в год пополняется новой информацией о данной молекуле [6, 8, 9, 10]. Однако, для возможности определения поверхности потенциальной энергии необходимо знать так же информацию и о всех изотопологах основной модификации. Большинство таких молекул никогда ранее не исследовались, в лучшем случае, для некоторых из них было исследовано несколько фундаментальных полос. Такой информации недостаточно для проведения полных и корректных расчётов внутренних характеристик или, например, для определения потенциальной функции. К тому же, большинство исследований было проведено много лет назад, что приводит к невысокой точности полученной информации. Поэтому в настоящее время активно проводятся исследования всех изотопозамещенных модификаций этилена [11, 12]. В таблице 1 приведены последние работы по различным изотопологам этилена.

Таблица 1 — Работы за последние несколько лет, охватывающие исследования изотопологов этилена

$^{13}\text{C}_2\text{H}_4$	[13]	$\text{C}_2\text{H}_2\text{D}_2\text{-trans}$	[14]
$^{13}\text{C}^{12}\text{CH}_4$	[15]	C_2HD_3	[16]
$\text{C}_2\text{H}_2\text{D}_2\text{-cis}$	[17]		

Ранее спектры высокого разрешения молекулы $\text{CH}_2=\text{CD}_2$ были предметом исследований в работах [18, 19, 20]. Впервые данная молекула была изучена в работе [18] (1972), в которой был проведен первый анализ фундаментальных полос ν_7 и ν_8 с разрешением спектрометра $\sim 0,2 \text{ см}^{-1}$. На основе анализа вращательной структуры данных полос были получены значения параметров основного состояния, а именно вращательные постоянные A_0 , B_0 и C_0 . В следующей работе [19] (1974) параметры основного состояния были улучшены на основе интерпретации спектра в области расположения полос $\nu_6+\nu_9$, ν_9 , $\nu_6+\nu_{11}$, $\nu_1+\nu_6$. Стоит отметить, что в данной работе были не только улучшены уже известные ранее параметры основного состояния, но так же впервые получены новые параметры центробежного искажения Δ_K , Δ_{JK} , Δ_J . Экспериментальное разрешение составило $0.03\text{-}0.04 \text{ см}^{-1}$, а абсолютная точность 0.01 см^{-1} . В последующих работах из-за улучшения качества эксперимента представлялась возможность определить большее количество энергетических переходов и на их основе улучшить спектроскопические параметры основного состояния и определить новые параметры центробежного ускорения высоких порядков. Последняя работа [21] по улучшению параметров основного состояния была выполнена недавно – 2015. Для сравнения, подробная статистическая информация представлена в таблице 2.

Таблица 2 - Статистическая информация по исследованиям основного состояния молекулы $\text{CH}_2=\text{CD}_2$

	Год	Колич. комбинац. разностей	Полосы	Вращат. парамет ры	Кол- вопар- овцентроб . искаж.	Разреш- ение, см^{-1}	Точность , см^{-1}
[18]	1972		ν_7 и ν_8	+	-	0.2	
[19]	1974	240	$\nu_6+\nu_9$, ν_9 , $\nu_6+\nu_{11}$, $\nu_1+\nu_6$	+	3	0.03	0.01
[22]	1981	409	ν_7 и ν_8 часть ν_6 и ν_{10}	+	5	0.05	0.005
[23]	1990	4317	ν_7 и ν_8 часть ν_6 , ν_{10} и ν_3	+	9	0.004	
[21]	2015	2500	ν_{12} и $2\nu_{10}$	+	11	0.0032	0.0001

Из таблицы 2 видно, что со временем улучшается качество эксперимента, что ведет к возможности определения большего количества энергетических переходов. Это, в свою очередь, влияет на точность спектроскопических параметров и их количество. Также не стоит забывать, что качество эксперимента (а именно, разрешение и точность) влияют на возможность регистрации запрещенных по симметрии и «горячих» полос.

Как уже было отмечено выше, первая работа по исследованию спектров высокого разрешения молекулы $\text{CH}_2=\text{CD}_2$ была выполнена в 1972 научной группой профессора Дункана [18]. В работе исследовались четыре фундаментальных полосы: ν_7 , ν_8 , ν_6 и ν_{10} . Разрешение эксперимента на тот момент составило $0,02 \text{ см}^{-1}$. Далее указанные выше полосы были изучены снова при более высоких разрешениях эксперимента: 0.5 см^{-1} (1981, [22]) и 0.004 см^{-1} (1990, [23]). Следует отметить, что в последней работе [23] были рассмотрены также фундаментальные полосы ν_3 и ν_4 .

1.2 Математическая формулировка задачи

1.2.1 Теория возмущения

Точное решение уравнения Шрёдингера, как известно, возможно только для наиболее простых молекулярных систем [24] (например, молекулярного иона водорода H_2^+). Для решения задачи для более сложных молекул, необходимо использовать теорию возмущения. Гамильтониан системы при этом обычно выбирается в следующем виде

$$H(a) = H_0(a) + h(a), \quad (1)$$

где $H_0(a)$ – оператор, решение уравнения Шрёдингера с которым известно; $h(a)$ – малая добавка к оператору H_0 ; a – набор переменных, от которых зависит гамильтониан. С другой стороны, колебательно-вращательный гамильтониан можно представить и следующим образом:

$$H = H_0 + \sum_{n=1}^{\infty} H_n(k^n), \quad (2)$$

где $H_n(k^n)$ является оператором порядка малости k^n по отношению к оператору H_0 .

Формально можно отождествить оператор $\sum_{n=1}^{\infty} H_n(k^n)$ с оператором h и решать уравнение Шрёдингера, используя традиционную теорию возмущений. Однако у этих операторов есть существенное отличие, которое не позволяет поступить таким образом. Дело в том, что оператор h должен быть функцией тех же координат, что и оператор начального приближения. В то же время, операторы $H_n(k^n)$, которые рассматриваются в теории молекул, помимо переменных, от которых зависит оператор начального приближения H_0 , как правило, являются функциями еще и других переменных.

В качестве H_0 в колебательно-вращательной задаче удобно выбрать чисто колебательный оператор. Тогда оператор h должен зависеть, помимо колебательных, ещё и от вращательных координат. Таким образом, выражение (2.1) примет вид

$$H(a) = H_0(a) + h(a, b). \quad (3)$$

В традиционной теории возмущений искомые величины (поправки к собственным энергиям и волновым функциям) получаются в виде суммы различных комбинаций матричных элементов, т.е. *чисел*. В то же время, матричные элементы операторов возмущения на собственных функциях оператора нулевого приближения представляют собой уже не числа, а операторы. Причем в общем случае эти операторы не коммутируют и, как следствие, в теории появляются неэрмитовы вклады в оператор энергии. По этой причине использование результатов обычной теории возмущений для рассматриваемых молекулярных задач является неприемлемым. Выход кроется в использовании метода эффективных операторов [25].

1.2.2 Метод эффективных операторов

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

- решение уравнения Шрёдингера с этим оператором определяется в явном виде;
- множество B' всех решений уравнения Шрёдингера с оператором H' совпадает с неким подмножеством B множества A всех решений уравнения Шрёдингера с исходным оператором H .

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

Рассмотрим гамильтониан вида (3). Пусть E_α и $|\alpha\rangle$ — собственные значения и собственные функции оператора H_0 , причем $|\alpha\rangle$ — полный ортонормированный набор функций, зависящих от переменных a . Берется некоторый произвольный набор функций $|i\rangle$, зависящих от переменных b и

удовлетворяющих условиям полноты и ортонормированности. Тогда функции $|\alpha, i\rangle = |\alpha\rangle|i\rangle$ также будут образовывать полный набор ортонормированных функций в гильбертовом пространстве, в котором действует оператор (2), и их можно рассматривать в качестве базиса этого пространства. В этом случае задача определения собственных значений и собственных функций оператора (2) решается следующим образом: нужно построить матрицу эрмитова оператора H на функциях $|\alpha\rangle|i\rangle$ и затем диагонализировать её, проделав унитарное преобразование:

$$H \rightarrow H' = U^+ H U. \quad (4)$$

При этом элементы диагональной матрицы H' будут собственными значениями исходного оператора H , а собственные функции $|\beta\rangle$ оператора H будут задаваться соотношениями:

$$\psi_\beta(a, b) = \sum_{\alpha, i} U_{\beta, \alpha i} |\alpha, i\rangle, \quad (5)$$

где $U_{\beta, \alpha i}$ — элементы унитарной матрицы U , диагонализирующей исходную. Таким образом, при выборе соответствующего набора функций $|i\rangle$, задачу можно было бы считать разрешимой. Однако решение практических задач в молекулярной спектроскопии, как правило, по описанной схеме невозможно, так как собственные функции оператора начального приближения $|\alpha\rangle$ образуют бесконечномерный базис, а следом и все прочие матрицы, рассмотренные здесь, оказываются бесконечномерными. Это приводит к невозможности диагонализации матрицы H непосредственно с помощью описанной процедуры.

Процесс построения и диагонализации матрицы H можно разбить на два этапа — построить матрицу $\langle \alpha | H | \beta \rangle$ на функциях $|\alpha\rangle$ (величины $\langle \alpha | H | \beta \rangle$ являются операторами, зависящими от переменных b), а уже затем строить и диагонализировать матрицу $\langle i | \langle \alpha | H | \beta \rangle | j \rangle$.

Очевидно, что в общем случае все элементы операторной матрицы $\langle \alpha | H | \beta \rangle$ будут отличны от нуля. Поэтому если построить числовую матрицу

$\langle i | \langle \alpha | H | \beta \rangle | j \rangle$, процедура определения собственных значений и собственных функций оператора H сведётся к уже описанной (4), (5) процедуре простой диагонализации.

Существует другой путь – вместо оператора H берётся оператор

$$H \rightarrow H' = G^+ H G, \quad (6)$$

где оператор G – произвольный унитарный оператор, который выбирается таким образом, чтобы оператор $(G-1)$ был малым по сравнению с единичным. Это условие легко выполнить, взяв оператор следующего вида

$$G = \exp \left(i \sum_{n=1}^{\infty} g_n (\kappa^n) \right), \quad (7)$$

где $g_n = g_n(a, b)$ – малые эрмитовы операторы порядка κ^n . Далее, строится матрица $\langle \alpha | H' | \beta \rangle$. Поскольку оператор G пока произволен, есть смысл выбрать его в таком виде, чтобы некоторые элементы матрицы $\langle \alpha | H' | \beta \rangle$ обратились бы в нуль. Для этого всё пространство L_α волновых функций $|\alpha\rangle$ разбивается на два произвольных подпространства $L_{\alpha 0}$ и $L_{\alpha'}$, так, чтобы $L_\alpha = L_{\alpha 0} + L_{\alpha'}$, притом важно, чтобы пространство $L_{\alpha 0}$ было бы конечномерным. Таким образом, всё множество матричных элементов $\langle \alpha | H' | \beta \rangle$ разбивается на четыре совокупности элементов: $\langle \alpha^0 | H' | \beta^0 \rangle$, $\langle \alpha^0 | H' | \beta' \rangle$, $\langle \alpha' | H' | \beta^0 \rangle$, $\langle \alpha' | H' | \beta' \rangle$.

Оператор G выберем таким образом, чтобы все элементы типа $\langle \alpha^0 | H' | \beta' \rangle$ или $\langle \alpha' | H' | \beta^0 \rangle$ обратились в нули.

$$\langle \alpha | H' | \beta \rangle = \begin{pmatrix} & 0 & 0 & .. \\ \tilde{H}_{\alpha\phi\phi} & .. & .. & .. \\ & 0 & 0 & .. \\ 0 & 0 & .. & x & x & .. \\ .. & .. & .. & .. & .. & .. \\ 0 & 0 & .. & x & x & .. \end{pmatrix}. \quad (8)$$

Если теперь построить числовую матрицу $\langle i | \langle \alpha | H' | \beta \rangle | j \rangle$, то она будет иметь тот же вид, что и построенная. Собственные значения оператора H' , а, следовательно, и оператора H , можно определить путём диагонализации полученной матрицы. Известно, что задача диагонализации произвольной

матрицы A сводится к решению секулярного уравнения $\det(A-Ex)=0$, где E – единичная матрица. Так как определитель матрицы не меняется при перестановке её столбцов и строк, матрицу $\langle \alpha | H' | \beta \rangle$ можно привести к блочно-диагональному виду. Таким образом, вся матрица $\langle i | \langle \alpha | H' | \beta \rangle | j \rangle$ разбивается на две независимые подматрицы, дальнейшая диагонализация которых также производится независимо. Главное здесь то, что подматрица $\langle i | H'_{эфф} | j \rangle$ является конечномерной по индексам $|\alpha\rangle$ и $|\beta\rangle$. В этом случае, если нас интересуют только уровни энергии, 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 $|\alpha^0_1\rangle, |\alpha^0_2\rangle \dots |\alpha^0_N\rangle$.

$$H^{vib-rot} = \sum_{\nu, \tilde{\nu}}^2 | \nu \rangle \langle \tilde{\nu} | H^{\nu \tilde{\nu}}, \quad (9)$$

где суммирование ведётся по всем колебательным состояниям (в нашем случае рассматривается 6 состояний: $|1\rangle = (v_3 = 1, A_1)$, $|2\rangle = (v_7 = 1, B_2)$, $|3\rangle = (v_8 = 1, B_2)$, $|4\rangle = (v_4 = 1, A_2)$, $|5\rangle = (v_{10} = 1, B_1)$, и $|6\rangle = (v_6 = 1, B_1)$).

2 ОБЪЕКТ И МЕТОДЫ ИССЛЕДОВАНИЯ

2.1 Общая информация о молекуле $\text{CH}_2=\text{CD}_2$

Молекула $\text{CH}_2=\text{CD}_2$ является асимметричным волчком (все три главных момента инерции различны), значение параметра асимметрии которой равно

$$k = (2B - A - C)/(A - C) \cong -0.860,$$

$$A = \frac{h}{8\pi^2 c I_A}, \quad B = \frac{h}{8\pi^2 c I_B}, \quad C = \frac{h}{8\pi^2 c I_C},$$

где I_A, I_B, I_C – главные моменты инерции в порядке возрастания.

Группа симметрии данной молекулы изоморфна точечной группе C_{2v} (свойства симметрии молекулы $\text{CH}_2=\text{CD}_2$ представлены в таблице 3[21]). В исследуемой молекуле имеется одна ось симметрии второго порядка и две плоскости симметрии, проходящие через нее и перпендикулярные друг другу (рисунок 1). Молекула $\text{CH}_2=\text{CD}_2$ вызывает большой интерес, поскольку в спектрах дейтерированной модификации появляются дополнительные переходы, запрещенные в материнской молекуле. Это происходит благодаря тому, что она обладает более низкой симметрией по сравнению с молекулой этилена, C_2H_4 , группа симметрии которой изоморфна точечной группе D_{2h} и имеет в 2 раза больше неприводимых представлений (а именно, 8).

Таблица 3 – Типы симметрии и характеры неприводимых представлений группы C_{2v}

Представление	E	C_2	$\sigma_v(xz)$	$\sigma_v(yz)$	Колебательные координаты	Операторы углового момента
1	2	3	4	5	6	7
A_1	1	1	1	1	$q_1, q_2, q_3, q_{11}, q_{12}$	
A_2	1	1	-1	-1	q_4	J_z, k_{zz}
B_1	1	-1	1	-1	q_5, q_6, q_9, q_{10}	J_y, k_{zy}
B_2	1	-1	-1	1	q_7, q_8	J_x, k_{zx}

где в колонках 1-5 представлен список неприводимых представлений и таблица характеров группы C_{2v} . Симметрия колебательных координат, q_i , вращательных операторов J_α и направляющих косинусов $k_{\alpha\alpha}$ представлена соответственно в колонках 6 и 7.

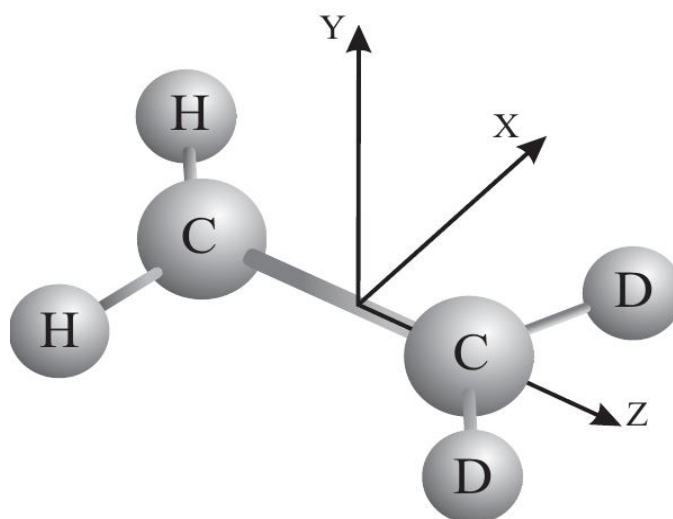


Рисунок 1 – Равновесная конфигурация молекулы $\text{CH}_2=\text{CD}_2$

Как уже было отмечено выше, в таблице 3, молекула $\text{CH}_2=\text{CD}_2$ имеет 12 нормальных колебаний, изображенных на рисунке 2.

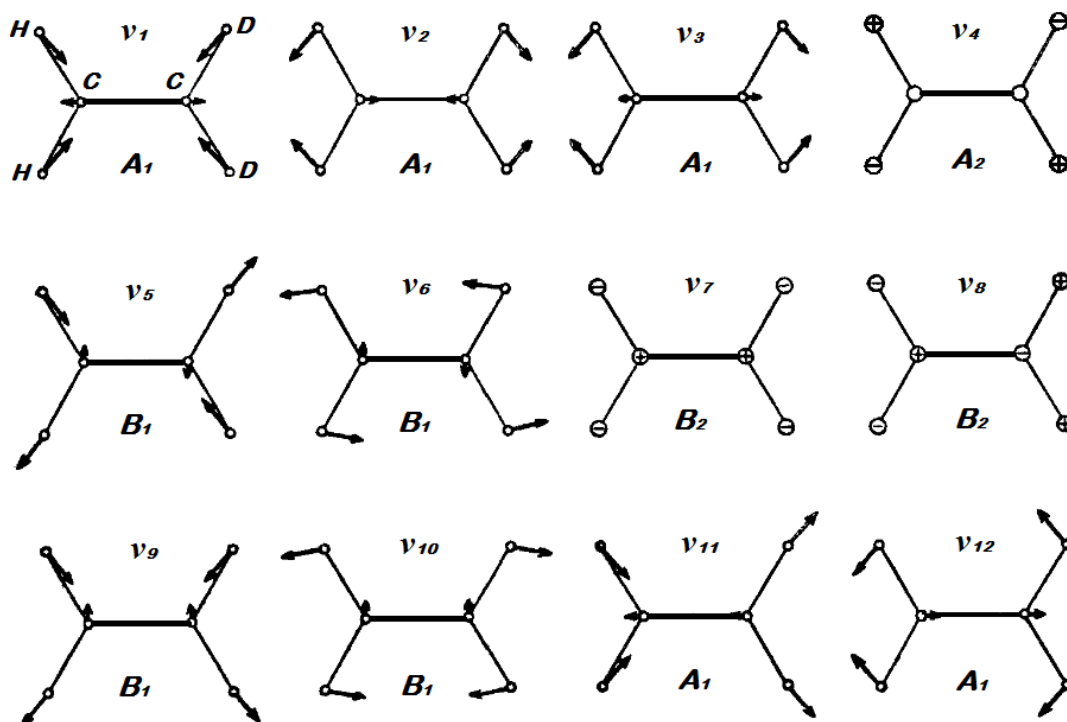


Рисунок 2 — Нормальные колебания молекулы $\text{CH}_2=\text{CD}_2$ [26]. Для каждого колебания указана его симметрия

На основе анализа, представленной выше таблицы 3, можно видеть, что переходы в спектре поглощения запрещены между колебательными

состояниями $(\nu\Gamma)$ и $(\nu'\Gamma')$, если $(\nu\Gamma) \otimes (\nu'\Gamma') = A_2$ (где знак $\otimes$ обозначает свертку).

Для разрешенных колебаний:

1. если $(\nu\Gamma) \otimes (\nu'\Gamma') = A_1$, тогда соответствующая полоса — *a*-типа и правила отбора имеют вид: $\Delta J = 0, \pm 1$; $\Delta K_a = \text{чет.}$; $\Delta K_c = \text{нечет.}$;

2. если $(\nu\Gamma) \otimes (\nu'\Gamma') = B_1$, тогда соответствующая полоса — *b*-типа и правила отбора имеют вид: $\Delta J = 0, \pm 1$; $\Delta K_a = \text{нечет.}$; $\Delta K_c = \text{нечет.}$;

3. если $(\nu\Gamma) \otimes (\nu'\Gamma') = B_2$, тогда соответствующая полоса — *c*-типа и правила отбора имеют вид: $\Delta J = 0, \pm 1$; $\Delta K_a = \text{нечет.}$; $\Delta K_c = \text{чет.}$

Таким образом, исследуемые в данной работе полосы относятся к разным типам: ν_3 — это полоса *a*-типа, ν_6 и ν_{10} — полосы типа *b*, ν_7 и ν_8 относятся к *c*-типу полос. Полоса ν_4 является запрещенной по симметрии молекулы и может быть зарегистрирована в спектре поглощения только при наличии резонансных взаимодействий и перераспределении интенсивности с соседних колебательных полос.

В диапазоне спектра $700\text{--}1150\text{ см}^{-1}$ расположено 6 колебательных состояний $(\nu_{10} = 1)$, $(\nu_7 = 1)$, $(\nu_4 = 1)$, $(\nu_8 = 1)$, $(\nu_3 = 1)$, $(\nu_6 = 1)$, поэтому можно ожидать сильное резонансное взаимодействие между всеми состояниями. На рисунке 3 представлено расположение этой изолированной группы взаимодействующих уровней [23]. Также на рисунке 3 отображены взаимодействия типа Ферми и Кориолиса.

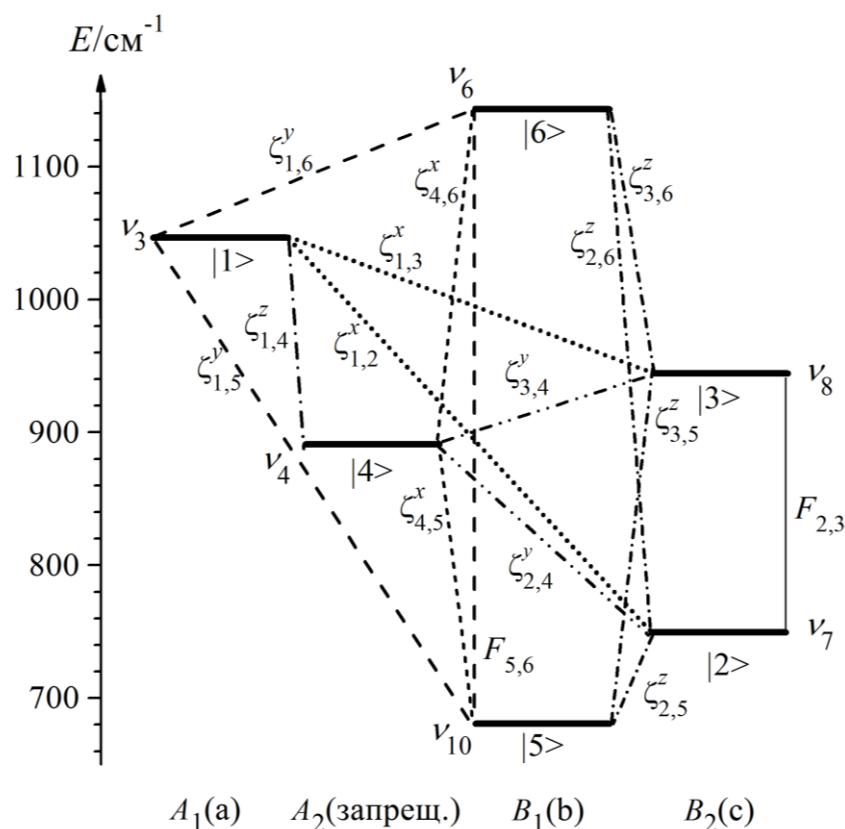


Рисунок 3 – Колебательные энергетические уровни молекулы $\text{CH}_2=\text{CD}_2$ ниже 1150 cm^{-1} .

2.2 Метод комбинационных разностей

Для определения колебательных уровней энергии возбужденных состояний, используется метод комбинационных разностей [27]. Данный метод основан на следующих принципах:

На один и тот же вращательный уровень возбужденного колебательного состояния возможны переходы сразу с нескольких уровней основного состояния (см. рисунок 4). Предполагается, что структура основного колебательного состояния известна с высокой точностью. Её можно определить из анализа микроволновых спектров (вращательные переходы внутри основного колебательного состояния) или из анализа инфракрасных спектров.

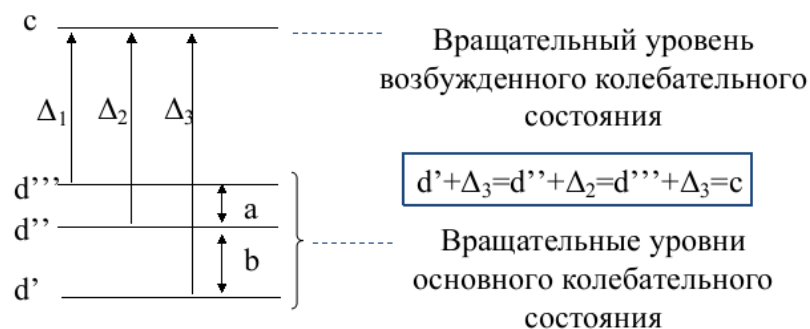


Рисунок 4 — Переходы с вращательных уровней основного колебательного состояния на вращательный уровень возбужденного колебательного состояния

Зная с высокой точностью энергетическую структуру основного колебательного состояния (параметры a и b на рисунке 4), можно создать масштабную линейку. Тогда расстояние между делениями такой линейки эквивалентно энергетической структуре основного состояния, т.е. расстоянию между его вращательными уровнями. Перемещая получившийся шаблон по спектру, можно зарегистрировать линии, которые совпадут сразу с несколькими делениями масштабной линейки (рисунок 5).

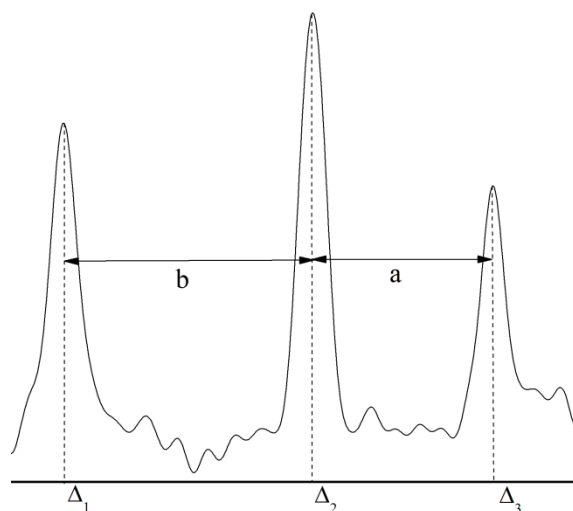


Рисунок 5 — Линии, совпадающие с зубчиками масштабной линейки

Таким образом, в результате анализа спектра будут получены данные об энергетических переходах между колебательными состояниями. Сложив ранее известные данные о положениях нижнего уровня и энергетические переходы, можно получить энергии возбужденных состояний. Правильным окажется тот

набор линий, энергия верхнего состояния которого будет одинакова для всех возможных на нее переходов. Конечно же, абсолютно точное совпадение энергий невозможно из-за погрешности эксперимента и наличия в спектре перекрывающихся линий, поэтому задается определенная точность поиска.

2.3 Модель эффективного гамильтониана

Напомним, что оператор $H'_{эфф}$ называют эффективным оператором системы N состояний $|\alpha_1^0\rangle, |\alpha_2^0\rangle.. |\alpha_N^0\rangle$.

$$H^{vib-rot} = \sum_{\nu, \tilde{\nu}} |\nu\rangle \langle \tilde{\nu}| H^{\nu\tilde{\nu}}, \quad (9)$$

где суммирование ведется по всем колебательным состояниям (в нашем случае рассматривается 6 состояний: $|1\rangle = (v_3 = 1, A_1)$, $|2\rangle = (v_7 = 1, B_2)$, $|3\rangle = (v_8 = 1, B_2)$, $|4\rangle = (v_4 = 1, A_2)$, $|5\rangle = (v_{10} = 1, B_1)$, и $|6\rangle = (v_6 = 1, B_1)$), а $H^{\nu, \nu}$ представлен в следующем виде (в качестве примера для трех состояний):

$$H^{\nu\tilde{\nu}} = \begin{vmatrix} & 1 & 2 & 3 \\ 1 & W & F & C \\ 2 & - & W & - \\ 3 & - & - & W \end{vmatrix}, \quad (10)$$

где W обозначают матричные элементы диагонального оператора $H^{\nu\tilde{\nu}}$; F — это оператор резонансного взаимодействия типа Ферми; C соответствует Кориолисову типу взаимодействия.

Диагональные блоки гамильтониана в выражении $H^{\nu\tilde{\nu}}$, описывающие вращательную структуру невозмущенных колебательных состояний, взяты в виде оператора Уотсона [28]:

$$\begin{aligned}
H^{v,v} = & E^v + \left[A^v - 0.5(B^v + C^v) \right] J_z^2 + \frac{1}{2}(B^v + C^v) J^2 + \frac{1}{2}(B^v - C^v) J_{xy}^2 \\
& - \Delta_K^v J_z^4 - \Delta_{JK}^v J_z^4 J^2 - \Delta_J^v J^4 - \delta_K^v [J_z^2, J_{xy}^2] - 2\delta_J^v J^2 J_{xy}^2 \\
& + H_K^v J_z^6 + H_{KJ}^v J_z^4 J^2 + H_{JK}^v J_z^2 J^4 + H_J^v J^6 + [J_{xy}^2, h_K^v J_z^4 + h_{JK}^v J^2 J_z^2 + h_J^v J^4] \\
& + L_K^v J_z^8 + L_{KKJ}^v J_z^6 J^2 + L_{JK}^v J_z^4 J^4 + L_{KJJ}^v J_z^4 J^6 + L_J^v J^8 \\
& + [J_{xy}^2, l_K^v J_z^6 + l_{KJ}^v J^2 J_z^4 + l_{JK}^v J^4 J_z^2 + l_J^v J^6] + \dots
\end{aligned} \quad (11)$$

где E — центр полосы, A, B, C — вращательные постоянные, $\Delta_K, \Delta_{JK}, \Delta_J$ — параметры центробежного искажения, и т.д., $J_\alpha (\alpha = x, y, z)$ — компоненты оператора углового момента, определенного в молекулярно-фиксированной системе координат, $J_{xy}^2 = J_x^2 - J_y^2$;

Можно определить четыре типа операторов $H^{v\tilde{v}}$, ($v \neq \tilde{v}$), которые соответствуют 4 типам резонансных взаимодействий, возникающим между набором состояний A_1, A_2, B_1 и B_2 , группы C_{2v} . Если результат произведения симметрий состояний v и $\tilde{v}$, $\Gamma = \Gamma^v \otimes \Gamma^{\tilde{v}}$, равен A_1 (т.е. $\Gamma^v = \Gamma^{\tilde{v}}$), тогда состояния v и $\tilde{v}$ связаны ангармоническим резонансным взаимодействием, и им соответствуют операторы в виде:

$$\begin{aligned}
H_{v,\tilde{v}} (v \neq \tilde{v}) = & \tilde{F}_0 + \tilde{F}_K J_z^2 + \tilde{F}_J J^2 + \dots + \tilde{F}_{xy} (J_x^2 - J_y^2) \\
& + \tilde{F}_{Kxy} \{J_z^2, (J_x^2 - J_y^2)\}_+ + 2\tilde{F}_{Jxy} J^2 (J_x^2 - J_y^2) + \dots
\end{aligned} \quad (12)$$

Если $\Gamma = \Gamma^v \otimes \Gamma^{\tilde{v}} = B_1$, то осуществляется c -тип Кориолисового взаимодействия:

$$\begin{aligned}
H_{v,\tilde{v}} = & iJ_y H_{v\tilde{v}}^{(1)} + H_{v\tilde{v}}^{(1)} iJ_y + [J_x, J_z] H_{v\tilde{v}}^{(2)} + H_{v\tilde{v}}^{(2)} [J_x, J_z] \\
& + [iJ_y, (J_x^2 - J_y^2)] H_{v\tilde{v}}^{(3)} + H_{v\tilde{v}}^{(3)} [iJ_y, (J_x^2 - J_y^2)] + \dots,
\end{aligned} \quad (13)$$

Когда $\Gamma = \Gamma^v \otimes \Gamma^{\tilde{v}} = B_2$, возможен b -тип взаимодействия типа Кориолиса:

$$\begin{aligned}
H_{v,\tilde{v}} = & iJ_x H_{v\tilde{v}}^{(1)} + H_{v\tilde{v}}^{(1)} iJ_x + [J_y, J_z] H_{v\tilde{v}}^{(2)} + H_{v\tilde{v}}^{(2)} [J_y, J_z] \\
& + [iJ_x, (J_x^2 - J_y^2)] H_{v\tilde{v}}^{(3)} + H_{v\tilde{v}}^{(3)} [iJ_x, (J_x^2 - J_y^2)] + \dots,
\end{aligned} \quad (14)$$

Наконец, если $\Gamma = A_2$, то состояния v и $\tilde{v}$ связаны резонансным взаимодействием типа a в форме:

$$\begin{aligned}
H_{v,\tilde{v}} = & iJ_z H_{v\tilde{v}}^{(1)} + [J_x, J_y] H_{v\tilde{v}}^{(2)} + H_{v\tilde{v}}^{(2)} [J_x, J_y] \\
& + [iJ_z, (J_x^2 - J_y^2)] H_{v\tilde{v}}^{(3)} + H_{v\tilde{v}}^{(3)} [iJ_z, (J_x^2 - J_y^2)] + \dots,
\end{aligned} \tag{15}$$

Оператор $H_{v\tilde{v}}^{(i)}$ в уравнениях (12) – (15), в свою очередь, имеет вид:

$$H_{v\tilde{v}}^{(i)} = \frac{1}{2} \tilde{v} C^i + \tilde{v} C_K^i J_z^2 + \frac{1}{2} \tilde{v} C_j^i J^2 + \tilde{v} C_{KK}^i J_z^4 + \dots \tag{16}$$

3 РАСЧЕТЫ И АНАЛИТИКА

3.1 Эффект изотопозамещения в молекуле этилена и оценка спектроскопических параметров

Так как корректная информация о спектроскопических параметрах молекулы $\text{CH}_2=\text{CD}_2$ ограничена, то в данной работе проводилась численная оценка основных параметров эффективного гамильтониана (см. уравнения 11-16). Для расчетов спектроскопических параметров используется общая теория изотопозамещения [29, 30].

Для любой изотопической замены в многоатомной молекуле справедливы следующие следствия теории изотопозамещения:

1. Система уравнений, которая позволяет определить гармонические частоты изотопозамещенной молекулы, ω'_c , как функцию от гармонических частот основной молекулы, ω_a , и набора коэффициентов A_{ab} или, наоборот, определить коэффициенты A_{ab} как функцию от гармонических частот «материнской» и изотопозамещенной молекул, имеет вид:

$$\sum_a A_{ba} \omega_a^2 \alpha_{ac} = \alpha_{bc} \omega'_c{}^2, \quad (17)$$

где $\alpha_{ac, bc}$ – добавочные коэффициенты, которые так же определяются из решения системы уравнений(17) и дополнительных соотношений:

$$A_{ab} = \sum_c \alpha_{ac} \alpha_{bc}. \quad (18)$$

2. Уравнение (18) может иметь следующую форму:

$$A_{ab} = \delta_{ab} - \sum_{N\alpha} \frac{(m'_N - m_N)}{m'_N} l_{N\alpha a} l_{N\alpha b}, \quad (19)$$

где m_N и m'_N – массы атомов до и после изотопозамещения. Представленное выше соотношение (19), определяет коэффициенты A_{ab} через структурные постоянные, $l_{N\alpha a}$, основной модификации.

3. Третье следствие может быть записано как:

$$l'_{N\gamma a} = \sum_{ab} K_{\alpha\gamma}^e \left(\frac{m_N}{m'_N} \right)^{1/2} l_{Nab} (\alpha^{-1})_{ab} . \quad (20)$$

Выражение (20) используется для расчёта структурных постоянных изотопозамещенной молекулы, с использованием параметров «материнской» молекулы. В данном уравнении $K_{\alpha\gamma}^e$ является матрицей, которая обеспечивает поворот координатных осей, соответствующих равновесной конфигурации при переходе от основной модификации к изотопозамещенной.

Уравнения (17) – (20) позволяют получить структурные постоянные $l'_{N\gamma a}$ для любой молекулы с замещенными атомами. Для этого необходимо знать только соответствующие постоянные $l_{N\gamma a}$ исходной молекулы. Таким образом, представленные выше расчеты позволяют численно рассчитать значения всех необходимых структурных постоянных, $l'_{N\gamma a}$, для молекулы $\text{CH}_2=\text{CD}_2$. В свою очередь, представленные постоянные используются для численной оценки центров полос и начальных значений параметров взаимодействия типа Кориолиса.

4 РЕЗУЛЬТАТЫ ПРОВЕДЕННОГО ИССЛЕДОВАНИЯ

4.1 Детали эксперимента

Экспериментальный спектр молекулы $\text{CH}_2=\text{CD}_2$ в диапазоне 950 — 1300 см^{-1} был зарегистрирован на Фурье-спектрометре высокого разрешения Bruker IFS 125 в Наньянском Технологическом Университете (г. Сингапур) с разрешением 0.0063 см^{-1} . Исследуемый образец $\text{CH}_2=\text{CD}_2$ в виде газа был поставлен лабораторией «Cambridge Isotope» (Массачусетс, США) и имел химическую чистоту более 98%. Эксперимент проводился при температуре окружающей среды около $296 \pm 0.5\text{K}$, с использованием инфракрасного источника GLOBAR, высокочувствительного Hg-Cd-Te детектора, охлаждённого в жидком азоте и KBr-светоделитель. Давление в газовой ячейке составило 800 Па, оптическая длина пути — 0,8 м, апертура -1.5 мм.. Эксперимент проводился в течение 16 часов с общим числом сканирований равным 970. Для калибровки спектра были использованы линии поглощения N_2O в диапазоне 1238—1322 см^{-1} [31]. Учитывая систематические ошибки, возникающие из-за ограниченного разрешения зарегистрированного спектра (0.0063 см^{-1}), калибровки и уровня шума, абсолютная точность положения измеряемых линий молекулы $\text{CH}_2=\text{CD}_2$ может приближенно быть равной 0,00065 см^{-1} .

Другая часть диапазона (600 — 1200 см^{-1}) была зарегистрирована в Лаборатории Инфракрасного излучения в Брауншвейге (Германия) с помощью Фурье-спектрометра IFS 120HR. Для эксперимента использовалась многоходовая кювета Уайта из нержавеющей стали с базовой длиной до 1 м и максимальной оптической длиной пути около 50 м, KBr-светоделитель, Hg-Cd-Te полупроводниковый детектор и образец $\text{CH}_2=\text{CD}_2$ в виде газа с химической чистотой более 99%. (поставлен лабораторией CDN Isotopes). В качестве источника ИК-излучения использовался GLOBAR. В данном диапазоне было зарегистрировано несколько спектров с различными экспериментальными условиями: время сканирования 14.8 и 19 часов, количество сканирований 310

и 400, давление газа 7 и 150 Па, температура около $296 \pm 0.5 \text{ К}$ для всех экспериментов. Перечисленные выше параметры позволили получить 2 спектра с различной интенсивностью зарегистрированных линий. Разрешение для обоих экспериментальных спектров составило 0.0021 см^{-1} . Более подробная информация для возможности сравнения всех спектров представлена в таблице 4.

Таблица 4 — Экспериментальные данные о зарегистрированных спектрах в диапазоне $600 — 1300 \text{ см}^{-1}$

	Диапазон, см^{-1}	Разрешение, см^{-1}	Время измерени я, час	Количество скан.	T , К	P , Па
I	600 - 1200	0.0021	14,8	310	296 ± 0.5	7.0
II	600 - 1200	0.0021	19	400	296 ± 0.5	150
III	950 - 1300	0.0063	16	970	296 ± 0.5	800
	Источник	Светоделитель	Опт. длина пути, м	Апертура, мм	Калибр. газ	
I	Globalar	KBr	4	1.5	N_2O , H_2O	
II	Globalar	KBr	4	1.5	N_2O , H_2O	
III	Globalar	KBr	0.8	1.5	N_2O	

Итоговое спектральное разрешение в основном ограничено доплеровским уширением и составляет порядка 0.0022 см^{-1} при частоте 600 см^{-1} и 0.0032 см^{-1} для частоты 1200 см^{-1} . Влияние уширения под давлением на итоговое спектральное разрешение является незначительным для давлений до нескольких сотен Па.

4.2 Описание спектров и определение переходов

В данной работе рассматриваются фундаментальные полосы ν_6 и ν_{10} (b -тип), ν_3 типа a , две полосы типа c — ν_7 и ν_8 и запрещенная по симметрии молекулы полоса ν_4 . Стоит отметить, что переходы, соответствующие

запрещенной полосе ν_4 , могут быть зарегистрированы только вследствие «перетекания» интенсивности с других полос в результате различных Кориолисовых взаимодействий.

Исследуемые спектры I и II в диапазоне $600 - 1100 \text{ см}^{-1}$, где расположены фундаментальные полосы ν_{10} , ν_7 , ν_4 , ν_8 и ν_3 , представлены на рисунке 6. Аналогично, на рисунке 8 представлен исследуемый спектр III в диапазоне $950 - 1300 \text{ см}^{-1}$. Также приведено несколько фрагментов экспериментального спектра с большим увеличением для демонстрации высокого разрешения — рисунок 7 и 9.

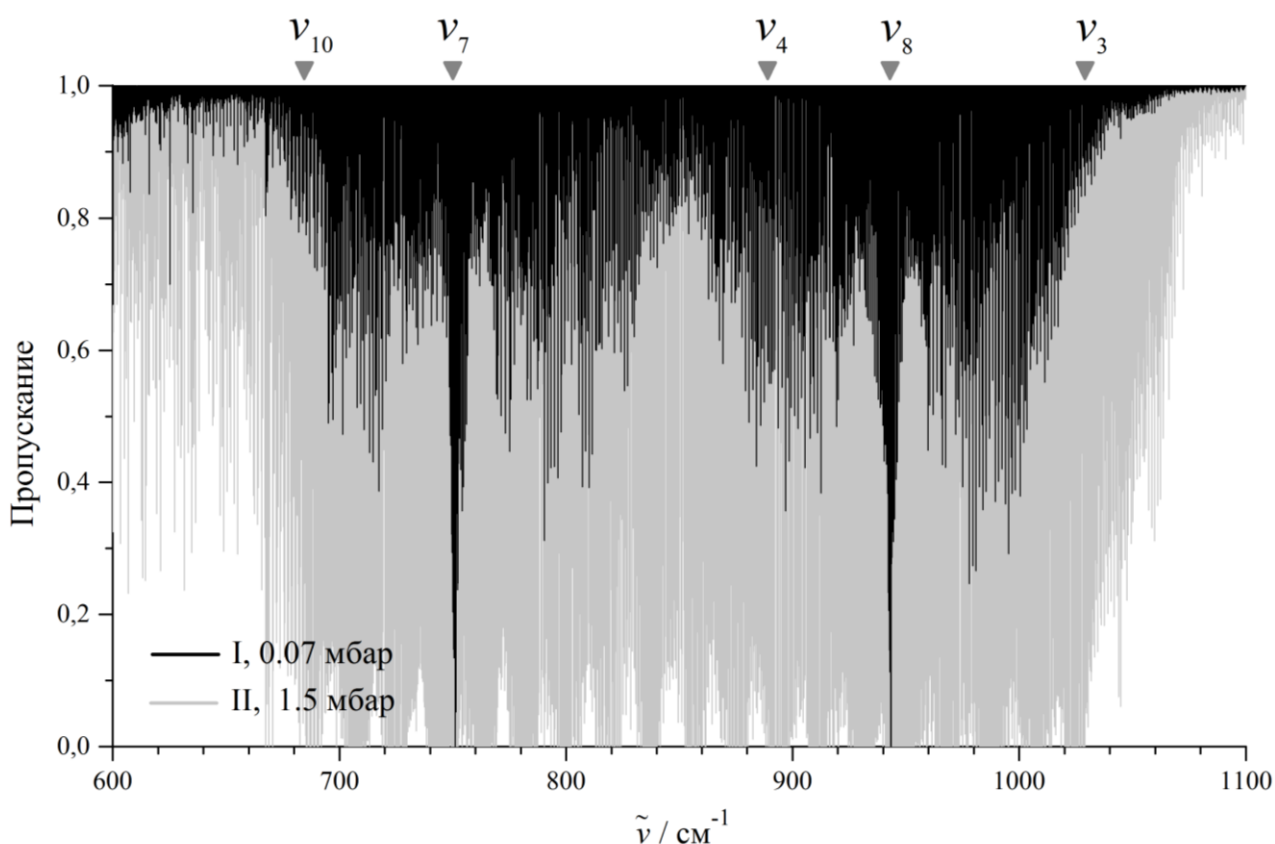


Рисунок 6 — Экспериментальный спектр молекулы $\text{CH}_2=\text{CD}_2$ в диапазоне $600 - 1100 \text{ см}^{-1}$

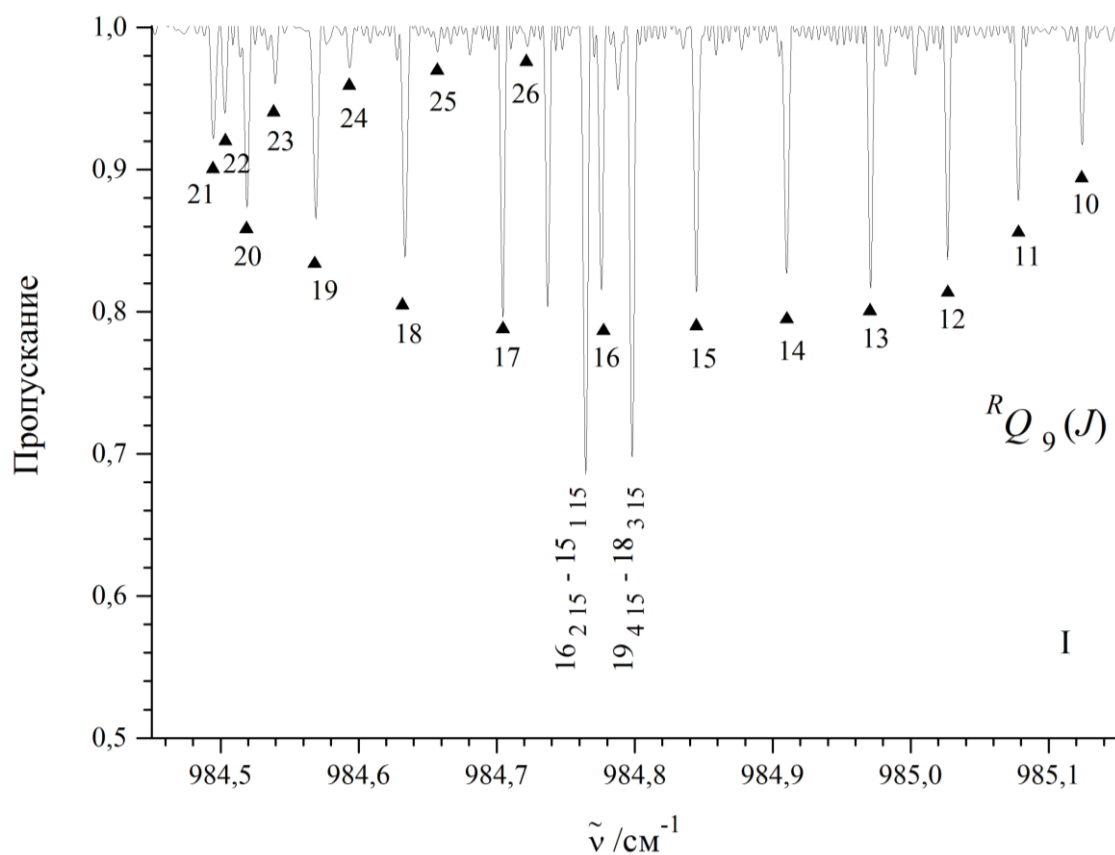


Рисунок 7 — Фрагмент экспериментального спектра высокого разрешения молекулы $\text{CH}_2=\text{CD}_2$ в области Q-ветки полосы ν_8

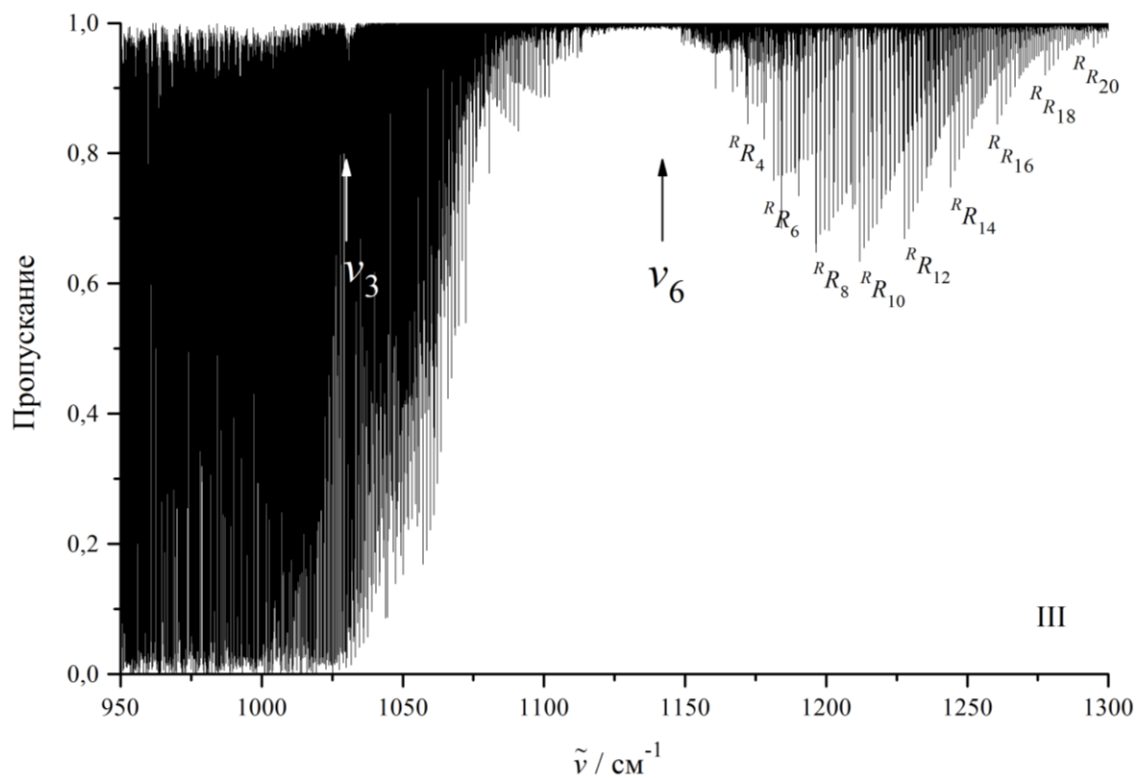


Рисунок 8 — Экспериментальный спектр молекулы $\text{CH}_2=\text{CD}_2$ в диапазоне $950 - 1300 \text{ cm}^{-1}$

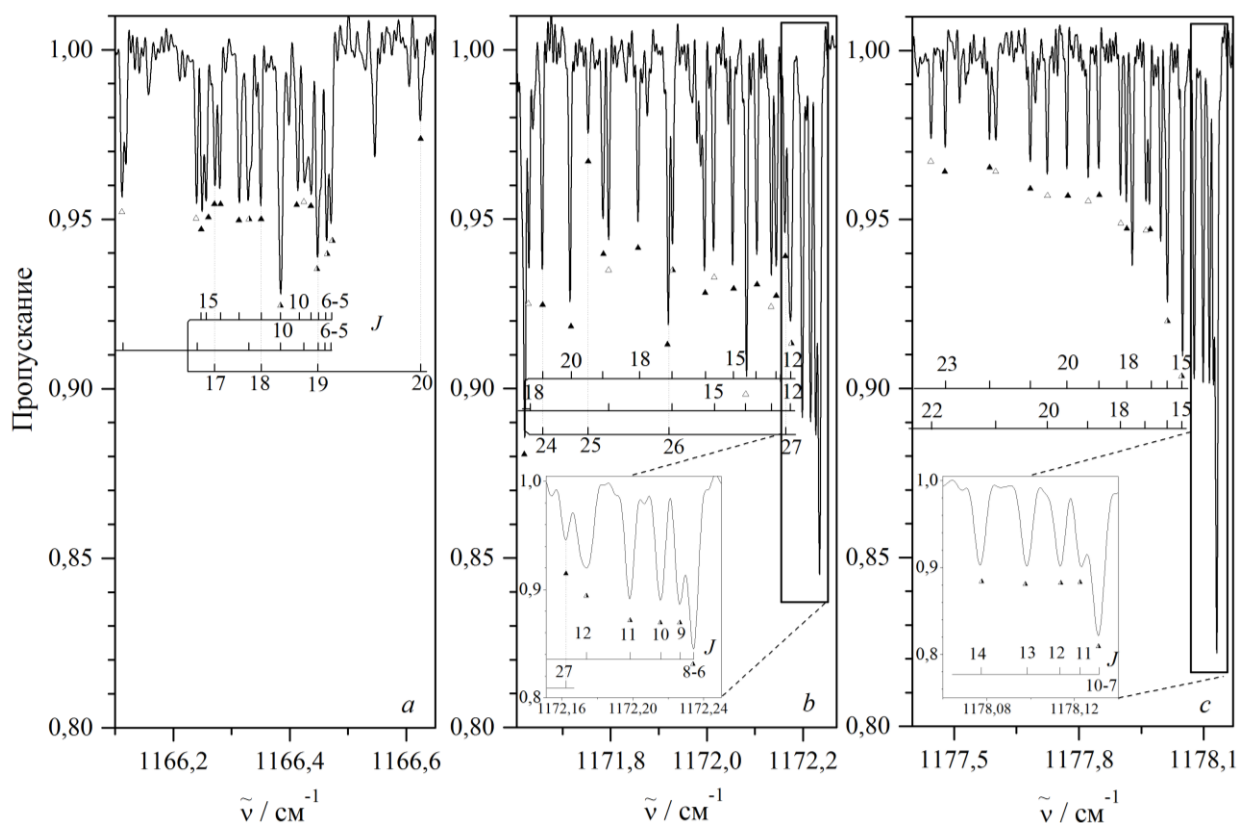


Рисунок 9 — Небольшая часть Q-ветки полосы ν_6 (спектр III). Переходы ${}^RQ_4(J)$ - 9.a, ${}^RQ_5(J)$ - 9.б и ${}^RQ_6(J)$ - 9.в промаркированы черными и белыми треугольниками

На рисунке 8 можно проследить явно выраженную R-ветку полосы ν_6 . Проводя сравнение рисунков 6 и 8 можно сделать выводы об относительной интенсивности исследуемых полос. Как можно видеть из рисунка 7, фундаментальные полосы ν_7 и ν_8 являются самыми сильными полосами поглощения в данной области, полосы ν_{10} , ν_3 и ν_6 значительно слабее. Запрещенная по симметрии полоса ν_4 не может иметь высокую относительную интенсивность, так как наличие относящихся к ней переходов зависит от близлежащих полос.

Как уже было отмечено ранее, переходы на исследуемые полосы осуществляются с основного состояния, и их интерпретация проводилась на основе метода комбинационных разностей. В этом случае параметры для расчета вращательных энергий основного колебательного состояния были взяты из работы [21] (приведены ниже в таблице 5 для возможности сравнения

с итогами проведенной работы). Таким образом, в результате интерпретации всех представленных выше спектров было определено порядка 1450, 3170, 3980, 1500 и 1900 энергетических переходов для каждой фундаментальной полосы — ν_{10} , ν_7 , ν_8 , ν_3 и ν_6 соответственно. Данные переходы соответствуют следующим значениям квантовых чисел J^{max}/K_a^{max} — 31/20, 46/18, 50/26, 44/20 и 42/21. Указанное количество переходов в два раза больше, чем было получено в предыдущей работе [23], где соответствующие полосы рассматривались в последний раз (1990 г.). Более подробная статистическая информация представлена в таблице 6. Наличие сильных резонансных взаимодействий между состояниями ($\nu_4=1$) и ($\nu_8=1$) позволило впервые определить около 186 энергетических переходов относящихся к запрещенной полосе ν_4 . Важно отметить, что корректность определения энергий возбужденного состояния подтверждается наличием комбинационных разностей для всех переходов.

Перечень определенных переходов представлен в работе [32]. На основе этих переходов было получено 3881 колебательно-вращательных энергий для возбуждённых колебательных состояний ($\nu_{10} = 1$), ($\nu_7 = 1$), ($\nu_8 = 1$), ($\nu_3 = 1$), ($\nu_6 = 1$). В качестве иллюстрации, в таблице 6 приведены небольшие фрагменты списка полученных энергий, представленные в колонке 2.

Часть определенных для состояния ($\nu_4 = 1$) переходов вместе с коэффициентами пропускания представлена в таблице А.1 (колонка 4). Значения колебательно-вращательных энергий возбуждённого состояния, которые были получены из расчёта положений экспериментальных линий, а также соответствующие средние значения приведены в колонках 6 и 7.

Таблица 5 — Статистическая информация для фундаментальных полос ν_{10} , ν_7 , ν_4 , ν_8 , ν_3 и ν_6 молекулы $\text{CH}_2=\text{CD}_2$

Полоса	Центр, см^{-1}	$J^{\max}$	$K_a^{\max}$	N_{tr}	N_l	m_1	m_2	m_3
1	2	3	4	5	6	7	8	9
ν_{10} (B_1), [23]	684.6418	26	16					
ν_{10} (B_1), данная работа	684.6410	31	20	1450	519	71.2	17.9	10.9
ν_7 (B_2), [23]	750.5674	37	17					
ν_7 (B_2), данная работа	750.5677	46	18	3170	798	62.3	30.1	7.6
ν_4 (A_2), [23]	888.71							
ν_4 (A_2), данная работа	890.4378	33	11	186	39	68.3	9.8	21.9
ν_8 (B_2), [23]	943.4059	35	18					
ν_8 (B_2), данная работа	943.4057	50	26	3980	1070	82.4	12.9	4.7
ν_3 (A_1), [23]	1029.8560	40	11					
ν_3 (A_1), данная работа	1029.8555	44	20	1500	714	71.2	20.7	8.1
ν_6 (B_1), [23]	1142.2742	39	18					
ν_6 (B_1), данная работа	1142.2742	42	21	1900	780	62.4	23.0	14.6
Итого, [23]				6308				
Итого, данная работа				12200	3920			
d_{rms} , [23]	$9.3 \times 10^{-4} \text{ см}^{-1}$							
d_{rms} , данная работа	$2.3 \times 10^{-4} \text{ см}^{-1}$							

где N_{tr} — количество определенных переходов, N_l — количество полученных энергий возбужденных состояний, $m_i = n_i / N_l \times 100\%$ ($i=1,2,3$) и n_i — количество энергий возбужденных состояний, для которых разница $\delta = E^{\text{exp}} - E^{\text{calc}}$ удовлетворяет условиям $\delta_1 \leq 2 \times 10^{-4} \text{ см}^{-1}$, $2 \times 10^{-4} \text{ см}^{-1} < \delta_2 \leq 4 \times 10^{-4} \text{ см}^{-1}$ и $\delta_3 > 4 \times 10^{-4} \text{ см}^{-1}$

Таблица 6 — Часть экспериментальных колебательно-вращательных энергий возбуждённых колебательных состояний ($v_{10} = 1$), ($v_7 = 1$), ($v_8 = 1$), ($v_3 = 1$), ($v_6 = 1$) молекулы $\text{CH}_2=\text{CD}_2$ (в см^{-1})

Полоса			v_{10}		v_7		v_8		v_3		v_6	
J	K_a	K_c	E	δ	E	δ	E	δ	E	δ	E	δ
1			2	3	2	3	2	3	2	3	2	3
8	0	8			804.0037	0	996.7184	-1	1083.2686	-1	1195.7045	-4
8	1	8			804.7160	1	997.3274	2	1083.8675	1	1196.3543	7
8	1	7			810.8261	-1	1003.4894	1	1090.4735	-1		
8	2	7			815.7030	1	1007.9012	-1	1094.9430	-1	1207.4563	0
8	2	6	750.3856	1	817.3028	0	1009.6137	0	1096.8328	-2	1209.2319	3
8	3	6	761.1428	-1	829.0634	0	1020.5473	0	1108.0673	0	1220.7596	0
8	3	5	761.2821	2	829.1857	0	1020.6900	0	1108.2316	0	1220.9060	0
8	4	5	777.8209	-1	847.0549	0	1037.5023	1	1125.6085	0	1238.6022	-2
8	4	4	777.8251	-1	847.0584	1	1037.5065	-1	1125.6138	0	1238.6067	-2
8	5	4	799.2957	0	870.1829	1	1059.3186	0	1148.1712	0	1261.5540	7
8	5	3	799.2957	0	870.1829	0	1059.3186	-1	1148.1712	0	1261.5540	7
8	6	3	825.5942	1	898.4446	2	1086.0147	0	1175.7724	2	1289.6241	1
8	6	2	825.5942	1	898.4446	2	1086.0147	0	1175.7724	2	1289.6241	1
8	7	2	856.7133	1	931.8091	0	1117.5778	0	1208.3918	1	1322.7942	1
8	7	1	856.7133	1	931.8091	0	1117.5778	0	1208.3918	1	1322.7942	1
8	8	1	892.6555	-2	970.2532	0	1154.0010	1	1246.0154	1	1361.0481	0
8	8	0	892.6555	-2	970.2532	0	1154.0010	1	1246.0154	1	1361.0481	0
9	0	9			816.9826	0	1009.6529	0	1096.1951	1	1208.6519	-7
9	1	9			817.5015	1	1010.0875	0	1096.6178	0	1209.1168	-1
9	1	8			825.0510	0	1017.6879	0	1104.7583	0	1217.0549	-3
9	2	8	762.2422	3	829.3075	1	1021.4896	-1	1108.5828	2	1221.0844	2
9	2	7	764.7084	-6	831.6817	1	1024.0167	0	1111.3635	2	1223.7051	-6
9	3	7			842.9091	1	1034.3951	0	1121.9932	0	1234.6564	2
9	3	6	775.1968	1	843.1495	0	1034.6749	1	1122.3149	1	1234.9433	1
9	4	6	791.5981	5	860.8905	1	1051.3444	0	1139.5305	1	1252.4924	-1
9	4	5	791.6084	-2	860.8994	0	1051.3556	-1	1139.5440	0	1252.5043	3
9	5	5	813.0473	1	883.9915	0	1073.1340	0	1162.0637	1	1275.4154	1
9	5	4	813.0473	-1	883.9915	0	1073.1340	-2	1162.0637	-2	1275.4154	-1
9	6	4	839.3308	1	912.2364	1	1099.8138	0	1189.6468	0	1303.4688	0
9	6	3	839.3308	1	912.2364	1	1099.8138	0	1189.6468	0	1303.4688	0
9	7	3	870.4406	-1	945.5835	-1	1131.3665	0	1222.2551	0	1336.6278	0
9	7	2	870.4406	-1	945.5835	-1	1131.3665	0	1222.2551	0	1336.6278	0
9	8	2	906.3764	0	984.0210	-1	1167.7821	-1	1259.8710	2	1374.8736	-1
9	8	1	906.3764	0	984.0210	-1	1167.7821	-1	1259.8710	2	1374.8736	-1
9	9	1	947.1476	0	1027.5121	2	1209.0549	-1	1302.4799	0	1418.1911	0
9	9	0	947.1476	0	1027.5121	2	1209.0549	-1	1302.4799	0	1418.1911	0

где δ — разница между $E^{exp}-E^{calc}$ в 10^{-4} см^{-1}

4.3 Колебательно-вращательный анализ взаимодействующих состояний ($v_{10} = 1$), ($v_7 = 1$), ($v_4 = 1$), ($v_8 = 1$), ($v_3 = 1$) и ($v_6 = 1$)

Значения энергий, полученные из экспериментальных переходов, были затем использованы в процедуре варьирования параметров гамильтониана (раздел 2.3, ур. 11-16). В этом случае начальные значения центров полос и основных параметров Кориолисова взаимодействия были оценены на основе теории, представленной в разделе 3.1. Начальные значения вращательных постоянных и центробежных коэффициентов искажения всех изученных колебательных состояний были приняты равными значениям соответствующих параметров основного колебательного состояния. Конечно, можно было бы использовать значения параметров, полученных в предыдущих работах [23], однако, как видно из той же работы 1990 года [23] многие из одинаковых параметров, относящихся к колебательным состояниям v_3 , v_6 , v_7 , v_8 и v_{10} сильно отличаются друг от друга (например, параметры H_J , H_{JK} и H_{KJ} имеют даже различный знак). Это означает, что данные параметры физически не обоснованы. Что касается состояния v_4 , то данное состояние не было исследовано ранее. В таких условиях было принято решение зафиксировать начальные значения параметров центробежных искажений всех колебательных состояний равными соответствующим значениям параметров основного колебательного состояния.

Следуя утверждению общей колебательно-вращательной теории — параметры диагональных блоков могут отличаться от соответствующих параметров основного колебательного состояния не более чем на несколько процентов [28] — варьировались только центры полос, колебательные и некоторые наиболее важные (квадратичные) параметры центробежного искажения. Если значение различных параметров центробежного искажения было меньше или даже сравнимо с 1σ статистического доверительного интервала, такие параметры фиксировались равными первоначальному значению. Для того чтобы достичь удовлетворительного соответствия между теоретическими и экспериментальными результатами, было использовано

несколько больше параметров резонансных взаимодействий, чем обычно используется в аналогичных процедурах.

Результаты варьирования параметров гамильтониана представлены в колонках 3, 5, 7, 9, 11 и 13 таблицы 7 и в таблице Б.1 (значения в скобках являются 1σ статистическим доверительным интервалом). Параметры, представленные без доверительных интервалов, были приравнены к исходному значению. Для возможности сравнения полученных результатов, в таблице 7 в колонках 4, 6, 8, 10, 12 и 14 представлены значения спектроскопических параметров, полученные в более ранней работе [23]. Можно наблюдать хорошую корреляцию между параметрами, полученными в данной работе. В то же время, корреляция между параметрами, полученными в работе [23], значительно хуже. Полученный в настоящей работе набор различных параметров — 36 параметров для 6 диагональных блоков и 97 параметров резонансного взаимодействия — воспроизводит начальные экспериментальные данные (3920 значений колебательно-вращательных энергий возбуждённых состояний и около 12200 экспериментальных переходов) с $d_{rms} = 2.3 \times 10^{-4}$, что значительно лучше, чем аналогичное значение в работе [23]. Стоит отметить, что относительно большое количество параметров резонансного взаимодействия в модели может быть объяснено сложной картиной колебательно-вращательной структуры взаимодействующих состояний, рассматриваемых в данной работе. В качестве иллюстрации, на рисунке 10 приведена диаграмма колебательно-вращательных энергетических уровней.

Таблица 7 — Спектроскопические параметры колебательных состояний
($\nu_{10} = 1$), ($\nu_7 = 1$), ($\nu_4 = 1$), ($\nu_8 = 1$), ($\nu_3 = 1$) и ($\nu_6 = 1$) молекулы $\text{CH}_2=\text{CD}_2$ (в см^{-1})

Параметр	(000)	ν_{10}	ν_{10}	ν_7	ν_7
1	2	3	4	5	6
E		684.640950(59)	684.6418	750.567673(32)	750.56743
A	3.2521275	3.2435531(24)	3.263299	3.2687046(19)	3.247939
B	0.856434612	0.8563392(24)	0.856545	0.85576718(81)	0.8557117
C	0.676094350	0.6753319(37)	0.674959	0.6775356(17)	0.6775781
$\Delta_K \times 10^4$	0.406308	0.40143(68)	0.293	0.41324(42)	0.5818
$\Delta_{KJ} \times 10^4$	0.064568	0.064568	0.0097	0.064568	0.1139
$\Delta_J \times 10^4$	0.0109715	0.009843(78)	0.01123	0.011774(66)	0.010770
$\delta_K \times 10^4$	0.069199	0.069199	0.06856	0.069199	0.0709
$\delta_J \times 10^4$	0.00262819	0.00262819	0.0026213	0.002514(34)	0.002398
$H_K \times 10^8$	0.2024	0.2024	0.2024	0.2024	-0.99
$H_{KJ} \times 10^8$	0.00547	0.00547	-0.0067	0.00547	0.134
$H_{JK} \times 10^8$			0.0045		0.0539
$H_J \times 10^8$	0.000050	0.000050	0.00025	0.000050	0.00025
$h_K \times 10^8$	-0.1258	-0.1258		-0.1258	
Параметр	ν_4	ν_4	ν_8	ν_8	
1	7	8	9	10	
E	890.4378(36)	888.71	943.405668(27)	943.40593	
A	3.215965(29)	3.2379	3.22494471(78)	3.237216	
B	0.855161(19)	0.860153	0.8521823(11)	0.8520728	
C	0.676866(25)	0.668873	0.67671366(83)	0.6767220	
$\Delta_K \times 10^4$	0.406308	0.40606	0.406308	0.2761	
$\Delta_{KJ} \times 10^4$	0.064568	0.06473	0.06575(55)	0.06091	
$\Delta_J \times 10^4$	0.0109715	0.010967	0.010297(66)	0.010938	
$\delta_K \times 10^4$	0.069199	0.06856	0.069199	0.0607	
$\delta_J \times 10^4$	0.00262819	0.0026213	0.002168(34)	0.002539	
$H_K \times 10^8$	0.2024	0.2054	0.2024	0.338	
$H_{KJ} \times 10^8$	0.00547	-0.0067	0.00547	-0.298	
$H_{JK} \times 10^8$		0.0045		0.0173	
$H_J \times 10^8$	0.000050	0.00025	0.000050	0.00025	
$h_K \times 10^8$	-0.1258		-0.1258		
Параметр	ν_3	ν_3	ν_6	ν_6	
1	11	12	13	14	
E	1029.855466(28)	1029.8560	1124.274186(45)	1142.2742	
A	3.2671044(14)	3.261844	3.2841008(13)	3.273350	
B	0.8578872(17)	0.8580725	0.8569726(11)	0.8569949	
C	0.6754484(23)	0.6749199	0.67393609(98)	0.6743671	
$\Delta_K \times 10^4$	0.406308	0.5247	0.406308	0.4546	
$\Delta_{KJ} \times 10^4$	0.064568	0.0257	0.07709(15)	0.09884	
$\Delta_J \times 10^4$	0.0109715	0.011985	0.011604(55)	0.010788	
$\delta_K \times 10^4$	0.069199	0.0883	0.077586(78)	0.0702	

Продолжение таблицы 7

$\delta_J \times 10^4$	0.00262819	0.002466	0.002266(19)	0.003133
$H_K \times 10^8$	0.2024	0.2054	0.2024	0.750
$H_{KJ} \times 10^8$	0.00547	0.54	0.00547	-0.551
$H_{JK} \times 10^8$		-0.005		0.0045
$H_J \times 10^8$	0.000050	0.00025	0.000050	0.00025
$h_K \times 10^8$	-0.1258		-0.1258	

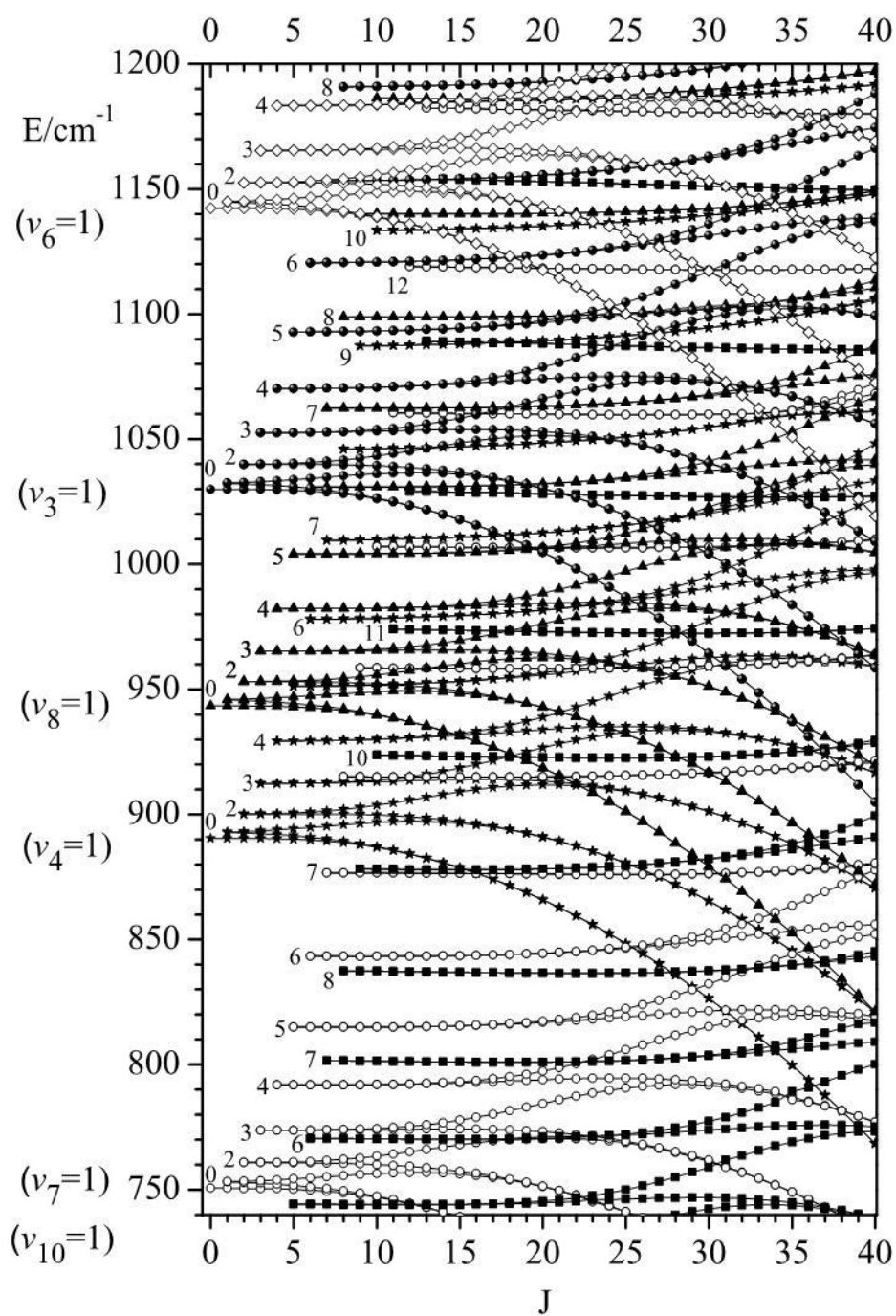


Рисунок 10 — Диаграмма колебательно-вращательных энергетических уровней

Как видно из таблицы Б.1 основные параметры резонансного взаимодействия, ${}^{\nu\bar{\nu}}C^1$, представлены без доверительных интервалов. Это значит, что параметры не варьировались, а были приравнены значениям, рассчитанным на основе соотношений теории изотопозамещения. Это было сделано, так как попытки изменять параметры ${}^{\nu\bar{\nu}}C^1$ приводили к значительным, физически необоснованным, изменениям их значений, но, в тоже время, к незначительному улучшению d_{rms} . В связи с этим, интересно сравнить значения $\zeta_{\lambda\mu}^{\alpha}$ -констант, полученных из ${}^{\nu\bar{\nu}}C^1$ (таблица Б.1), со значениями, полученными на основании *ab initio* расчётов [33]. Результаты данного сравнения приведены в таблице 8. Хорошо видно, что существует более чем удовлетворительное соответствие между обоими наборами данных.

Таблица 8 — Значения некоторых коэффициентов Кориолиса $\zeta_{\lambda\mu}^{\alpha}$

α	λ, μ	a	$[33]^{\bar{o}}$	α	λ, μ	a	$[33]^{\bar{o}}$	α	λ, μ	a	$[33]^{\bar{o}}$
1	2	3	4	1	2	3	4	1	2	3	4
z	7, 10	0.37	0.41	x	4, 10	-0.82	0.82	y	4, 7	0.0	0.0
z	8, 10	0.21	0.19	x	4, 6	0.35	0.34	y	4, 8	0.0	0.0
z	6, 7	-0.25	0.24	x	3, 7	0.64	0.64	y	3, 10	-0.15	0.19
z	6, 8	0.42	0.47	x	3, 8	0.06	0.02	y	3, 6	-0.30	0.25
z	3, 4	-0.25	0.28								

где $z \equiv A$, $x \equiv B$, $y \equiv C$. a — значения оценены на основе соотношений теории изотопозамещения, $^{\bar{o}}$ — значения оценены на основе *ab initio* методов.

Для иллюстрации качества анализа, в таблице 6 (колонка 3) и в таблице Б.1 (колонка 7) представлены разницы между экспериментальными и рассчитанными значениями отдельных колебательно-вращательных энергий. Из представленных данных можно видеть хорошее соответствие между экспериментальными и расчетными значениями. Более подробная информация о качестве анализа содержится на рисунке 11, демонстрирующему зависимость разницы между экспериментальными и теоретически вычисленными положениями линий от квантового числа J . Данная информация демонстрирует хорошее совпадение экспериментальных и расчетных результатов.

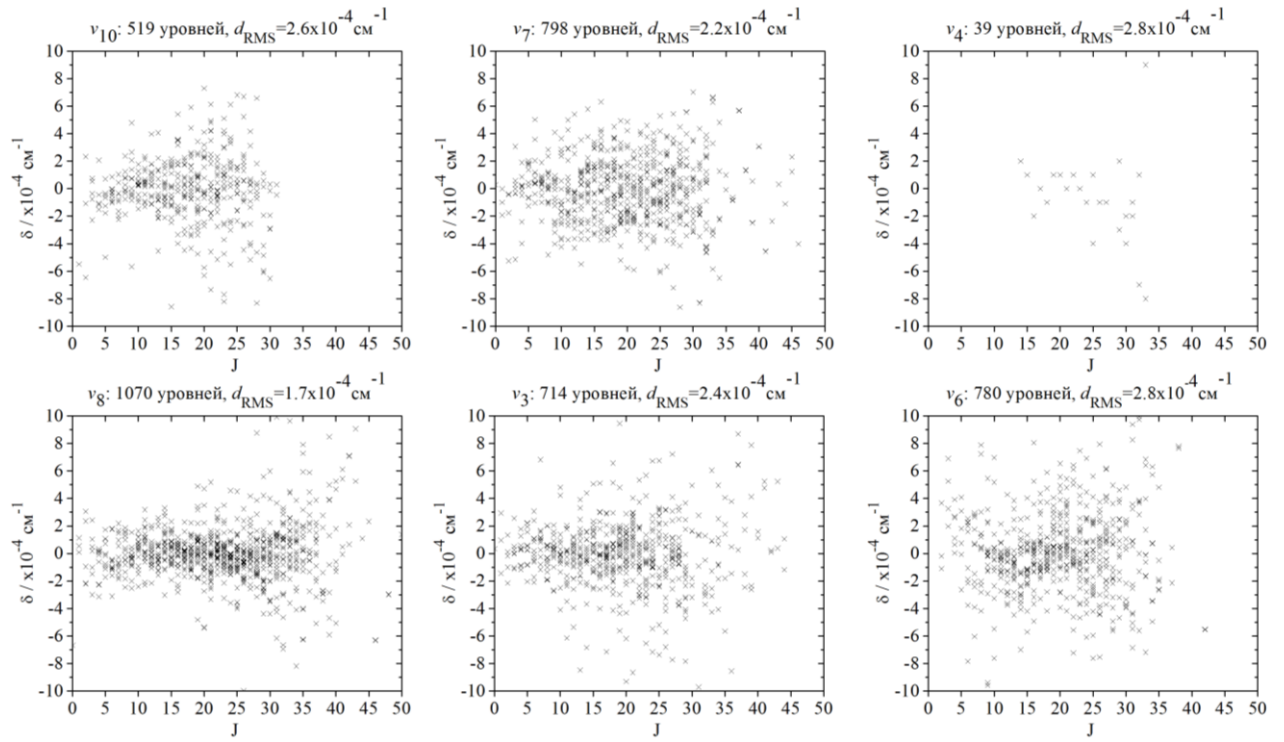


Рис. 11 — Разница между экспериментальными и рассчитанными положениями линий для колебательных состояний ($v_{10} = 1$), ($v_7 = 1$), ($v_4 = 1$), ($v_8 = 1$), ($v_3 = 1$) и ($v_6 = 1$) молекулы $\text{CH}_2=\text{CD}_2$

Как уже было отмечено выше, фундаментальная полоса v_4 может быть зарегистрирована только благодаря сильному взаимодействию Кориолисова типа между колебательными состояниями ($v_4=1$) и ($v_8=1$). В этом случае, степень заимствования интенсивности линиями полосы v_4 из v_8 может быть оценена на основе анализа коэффициентов смешения волновых функций колебательно-вращательных состояний:

$$[J K_a K_c](v_4 = 1) = \sum_{\tilde{K}} C_{J\tilde{K}}^4 |v_4 = 1\rangle |J\tilde{K}\rangle + \sum_{\tilde{K}} C_{J\tilde{K}}^8 |v_8 = 1\rangle |J\tilde{K}\rangle \quad (21)$$

В качестве иллюстрации, в таблице 9 представлены значения параметров $C^4 = \sum_{\tilde{K}} (C_{J\tilde{K}}^4)^2$ и $C^8 = \sum_{\tilde{K}} (C_{J\tilde{K}}^8)^2$, которые характеризуют вклад колебательных состояний ($v_4=1$) и ($v_8=1$), соответственно, в конкретные колебательно-вращательные функции. Сравнивая колонки 3 и 4 данной таблицы, можно удостовериться в наличии смешения состояний и, как следствие, значительного заимствования интенсивностей линиями полосы v_4 из полосы v_8 .

Таблица 9 — Относительный вклад состояний ($v_4=1$) и ($v_8=1$) в колебательно вращательные функции состояния ($v_4=1$)

J	K_a	K_c	E	C^4	C^8	J	K_a	K_c	E	C^4	C^8
1			2	3	4	1			2	3	4
14	11	d	1345.5229	0.97	0.03	24	11	d	1645.9313	0.78	0.22
15	11	d	1368.6580	0.96	0.04	25	11	d	1684.3696	0.82	0.18
16	11	d	1393.3371	0.95	0.05	26	11	d	1724.3526	0.84	0.16
17	11	d	1419.5603	0.93	0.07	27	11	d	1765.8846	0.86	0.14
18	11	d	1447.3241	0.89	0.11	29	11	d	1853.6121	0.88	0.12
19	11	d	1476.6246	0.82	0.18	30	11	d	1899.8134	0.89	0.11
20	11	d	1507.4530	0.72	0.28	31	11	d	1947.5772	0.91	0.09
21	11	d	1539.7987	0.57	0.43	32	11	d	1996.9057	0.94	0.06
22	11	d	1573.6563	0.59	0.41	33	11	d	2047.8034	0.96	0.04
23	11	d	1609.0300	0.72	0.28	25	5	21	1457.7041	0.69	0.31

где d обозначает 2 значения для квантового числа K_c , которые равны $K_c=J-K_a$ и $K_c=J-K_a+1$.

ЗАДАНИЕ ДЛЯ РАЗДЕЛА «ФИНАНСОВЫЙ МЕНЕДЖМЕНТ, РЕСУРСОЭФФЕКТИВНОСТЬ И РЕСУРСОСБЕРЕЖЕНИЕ»

Студенту:

Группа	ФИО
ОБМ41	Кашириной Надежде Владимировне

Институт	Физико-технический	Кафедра	Общей физики
Уровень образования	магистр	Направление/специальность	Физика / Физика конденсированного состояния веществ

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

1. Стоимость ресурсов научного исследования (НИ): материально-технических, энергетических, финансовых, информационных и человеческих	Стоимость материалов и оборудования Оклада участников проекта
2. Нормы и нормативы расходования ресурсов	Нормы рабочего времени
3. Используемая система налогообложения, ставки налогов, отчислений, дисконтирования и кредитования	Ставка налога отчислений во внебюджетные средства

Перечень вопросов, подлежащих исследованию, проектированию и разработке:

1. Оценка коммерческого и инновационного потенциала НТИ	SWOT - анализ
2. Планирование процесса управления НТИ: структура и график проведения, бюджет, риски и организация закупок	Планирование НТИ Подсчет бюджета
3. Определение ресурсной, финансовой, экономической эффективности	Определение ресурсоэффективности сравнительным методом

Перечень графического материала(с точным указанием обязательных чертежей):

1. Матрица SWOT
2. График проведения и бюджет НТИ
3. Оценка ресурсной, финансовой и экономической эффективности НТИ

Дата выдачи задания для раздела по линейному графику

Задание выдал консультант:

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Доцент каф. Мен.	Верховская М.В.	К.э.н.		

Задание принял к исполнению студент:

Группа	ФИО	Подпись	Дата
ОБМ41	Каширина Н.В.		

5 ФИНАНСОВЫЙ МЕНЕДЖМЕНТ, РЕСУРСОЭФФЕКТИВНОСТЬ И РЕСУРСОСБЕРЕЖЕНИЕ

5.1 Оценка коммерческого и инновационного потенциала НТИ

5.1.1 SWOT-анализ

Для исследования внешней и внутренней среды выполняемого научного исследования проводят - SWOT-анализ. SWOT – Strengths (сильные стороны), Weaknesses (слабые стороны), Opportunities (возможности) и Threats (угрозы).

Анализ проводится в несколько этапов.

Первый этап заключается в описании сильных и слабых сторон проекта, в выявлении возможностей и угроз для реализации проекта, которые проявились или могут появиться в его внешней среде. Результаты первого этапа SWOT-анализа представлены в таблице 12.

После того как сформулированы четыре области SWOT переходят к реализации второго этапа.

Второй этап заключается в выявлении соответствия сильных и слабых сторон научно-исследовательского проекта внешним условиям окружающей среды. Это соответствие или несоответствие должны помочь выявить степень необходимости проведения стратегических изменений.

Использование интерактивной матрицы (таблица 13) помогает разобраться с различными комбинациями взаимосвязей областей SWOT. Возможно использование этой матрицы в качестве одной из основ для оценки вариантов стратегического выбора. Анализ интерактивных таблиц представляется в форме записи сильно коррелирующих сильных сторон и возможностей, или слабых сторон и возможностей и т.д. следующего вида: B1C1C2C3; B2C1C2C3. Каждая из записей представляет собой направление реализации проекта. В таблице факторы помечаются: соответствие сильных сторон возможностям знаком плюс «+»; слабое соответствие знаком минус «-»; если есть сомнения в том, что поставить «+» или «-» - знак «0».

Таблица 1 - SWOT-анализ

	Сильные стороны научно-исследовательского проекта:	Слабые стороны научно-исследовательского проекта:
	С1. Заявленная экономичность технологии. С2. Экологичность технологии. С3. Уникальный квалифицированный персонал. С4. Наличие бюджетного финансирования.	Сл1. Длительный период при некоторых видах исследований. Сл2 Длительный период обучения персонала. Сл3. Отсутствие доступа к коллективным исследованиям Сл4. Большой срок поставки эксперим. данных
Возможности:		
В1. Интерес к подобным исследованиям со стороны иностранных партнеров В2. Использование научно-исследовательские достижения ТПУ В3. Ценовая стабильность на рынке товаров-конкурентов		
Угрозы:		
У1. Отсутствие спроса на новые технологии У2. Ограничения на экспорт технологии У3. Несвоевременное финансовое обеспечение научного исследования со стороны государства		

Таблица 13 - Интерактивная матрица работы

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

Третий этап включает в себя итоговую матрицу SWOT-анализа, которая приводится в магистерской диссертации (таблица 14). Результаты SWOT-анализа учитываются при разработке структуры работ, выполняемых в рамках научно-исследовательского проекта.

Результаты SWOT-анализа учитываются при разработке структуры работ, выполняемых в рамках научно-исследовательского проекта.

Приведённый анализ показал, что технология, находясь на этапе разработки, имеет хорошие шансы на коммерциализацию, с учетом проявляемого интереса партнеров и удачных исследований. При этом, если переход разработки в стадию коммерциализации затянется, то возможна потеря спроса на готовую технологию.

Таблица 14 - SWOT-анализ

	Сильные стороны научно-исследовательского проекта: С1. Заявленная экономичность технологии. С2. Экологичность технологии. С3. Уникальный квалифицированный персонал. С4. Наличие бюджетного финансирования.	Слабые стороны научно-исследовательского проекта: Сл1. Длительный период при некоторых видах исследований. Сл2. Длительный период обучения персонала. Сл3. Отсутствие доступа к коллективным исследованиям Сл4. Большой срок поставки эксперим. данных
Возможности: В1. Интерес к подобным исследованиям со стороны иностранных партнеров В2. Использование научно-исследовательские достижения ТПУ В3. Ценовая стабильность на рынке товаров-конкурентов	При использовании научно-исследовательских достижений ТПУ можно снизить стоимость производимой продукции и тем самым заявить об экономичности, экологичности технологии, а сотрудничество с иностранными коллегами позволяет расширить область знаний и повысить и квалификацию персонала.	Научно-исследовательские достижения ТПУ могут быть использованы при отсутствии необходимых экспериментальных данных и недостатке финансирования. Интерес зарубежных партнеров предоставляет доступ к коллективным исследования и доп. финансированию
Угрозы: У1. Отсутствие спроса на новые технологии производства У2. Ограничения на экспорт технологии У3. Несвоевременное финансовое обеспечение научного исследования со стороны государства	Заявленная экономичность и энергоэффективность может быть не оправдана приотсутствие спроса на новые технологии, ограничении на экспорт и несвоевременном финансировании научного исследования.	Отсутствие необходимых экспериментальных данных и длительность периода исследований может привести к отсутствию спроса на новые технологии.

5.2 Планирование процесса управления НТИ: структура и график проведения, бюджет, риски и организация закупок

5.2.1 Планирование научно-исследовательских работ

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

Таблица 15 - Календарный план ВКР

№ работы	Название	Длительность, дни	Дата начала работ	Дата окончания работ	Состав участников
1	Разработка технического задания на ВКР	3	12.01.2016	15.01.2016	Руководитель
2	Составление и утверждение технического задания	2	16.01.2016	18.01.2016	Руководитель
3	Выбор направления исследования и способов решения задач	2	19.01.2016	21.01.2016	Руководитель магистрант
4	Подбор и изучение научно-технической литературы по теме	38	22.01.2016	01.03.2016	магистрант
5	Разработка методики экспериментальных исследований	2	02.03.2016	04.03.2016	Руководитель магистрант
6	Проведение полупырических исследований	40	04.03.2016	14.04.2016	магистрант
7	Анализ и обработка полученных результатов	20	15.04.2016	8.05.2016	Руководитель магистрант
8	Оформление пояснительной записки	21	10.05.2016	31.05.2016	магистрант
9	Подготовка к защите ВКР	17	1.06.2016	17.06.2016	Руководитель, магистрант

Таблица 16 - Календарный план-график проведения НИОКР

№	Вид работ	Исполните	Продолжительность выполнения работ																	
			январь			февраль			март			апрель			май			июнь		
			Декады (10 дней)																	
			1	2	3	1	2	3	1	2	3	1	2	3	1	2	3	1	2	
1	Разработка технического задания на ВКР	р		□																
2	Составление и утверждение технического задания	р		□																
3	Выбор направления исследования и способов решения задач	р, м			□ ■															
4	Подбор и изучение научно- технической литературы по теме	м				■														
5	Разработка методики эксперимен- тальных исследований	р, м							□ ■											
6	Проведение полу- эмпирических исследований	м, и							■											
7	Анализ и обработка полученных результатов	р, м										□ ■								
8	Оформление пояснительной записки	м												■						
9	Подготовка к защите ВКР	м															□ ■			

р – руководитель - ☐

м – магистрант - ☒,

Иллюстрацию календарного плана представляют в виде диаграммы Ганта таблица 16, представляющую собой тип столбчатых диаграмм (гистограмм). Они характеризуют начало даты и окончания выполнения работ, и представлены протяженными во времени отрезками с различной штриховкой (отвечающей за исполнителя работы).

5.3 Бюджет научного исследования

При планировании бюджета научного исследования должно быть обеспечено полное и достоверное отражение всех видов планируемых расходов, необходимых для его выполнения. В процессе формирования бюджета, планируемые затраты группируются по статьям (учет материальных затрат НТИ, затрат на специальное оборудование для научных (экспериментальных) работ, основную заработную плату исполнителей темы и другие статьи по затратам), представленным в таблице (таблица 17)

Таблица 17 - Группировка затрат по статьям

Виды работ	Сырье, материалы (за вычетом возвратных отходов), покупные изделия	Специальное оборудование для научных (экспериментальных) работ	Основная заработная плата	Дополнительная заработная плата	Отчисления на соц. нужды	Накладные расходы	Итого Плановая себестоимость НИР
1 2	300	50 000	9944 5 1320 0	9944	32926	87511	333191 13200

Сырье, материалы, покупные изделия и полуфабрикаты (за вычетом отходов). В эту статью включаются затраты на приобретение всех видов материалов, комплектующих изделий и полуфабрикатов, необходимых для выполнения работ по данной теме. Количество потребных материальных ценностей определяется по нормам расхода.

Магистерская работа является полностью теоретической поэтому материальные затраты осуществляют только на покупку канцелярских принадлежностей (таблица 18).

Таблица 18 - Сырье, материалы, комплектующие изделия и покупные полуфабрикаты

Материал	Единица материала	Цена, руб/ед.	Количество материала	Затраты, руб.
Бумага	упаковка	200	0,5	100
Пишущие предметы	Шт.	40	5	200
Всего за материалы				300
Итого				300

5.3.1 Специальное оборудование для научных работ

В данную статью включают все затраты, связанные с приобретением специального оборудования (приборов, контрольно-измерительной аппаратуры, стендов, устройств и механизмов), необходимого для проведения работ по конкретной теме.

Для осуществления исследования по тематике магистерской диссертации необходимо наличие персонального компьютера или ноутбука (таблица 19).

Таблица 19 - Расчет затрат по статье «Спецоборудование для научных работ»

Наименование оборудования	Кол.ед. оборудо-вания	Стоимость (руб.)
Персональный компьютер (ноутбук)	1	50 000
Итого		50 000

5.3.2 Расчет основной заработной платы

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

$$C_{\text{зп}} = Z_{\text{осн}} + Z_{\text{доп}}, \quad (1)$$

где $Z_{\text{осн}}$ – основная заработная плата; $Z_{\text{доп}}$ – дополнительная заработная плата.

Основная заработная плата ($Z_{\text{осн}}$) руководителя (лаборанта, инженера) от предприятия (при наличии руководителя от предприятия) рассчитывается по следующей формуле:

$$Z_{\text{осн}} = Z_{\text{дн}} \cdot T_{\text{раб}}, \quad (2)$$

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

Среднедневная заработная плата рассчитывается по формуле:

$$Z_{\text{дн}} = \frac{Z_{\text{м}} \cdot M}{F_{\text{д}}}, \quad (3)$$

где $Z_{\text{м}}$ – месячный должностной оклад работника, руб. (окладом магистранта выступает стипендия, 2200руб.); 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;

$F_{\text{д}}$ – действительный годовой фонд рабочего времени научно-технического персонала, раб.дн. (таблица 20).

Месячный должностной оклад

$$Z_{\text{м}} = Z_{\text{б}} k_{\text{р}} = 44974 \text{ руб}, \quad (4)$$

где $Z_{\text{б}}$ – базовый оклад, руб; $k_{\text{р}}$ – районный коэффициент, равный 1,3.

Таблица 20 – Баланс рабочего времени

Показатели рабочего времени	Руководитель	Магистр
Календарное число дней	365	365
Количество нерабочих дней		
- выходные дни	96	104
- праздничные дни	12	12
Потери рабочего времени		
- отпуск	24	24
- невыходы по болезни	-	-
Действительный годовой фонд рабочего времени	233	225

Таблица 21 – Расчет основной заработной платы

Исполнители	З _б , руб.	k _р	З _м , руб	З _{дн} , руб.	T _{раб.дн.}	З _{осн} , руб.
Руководитель	34595,56	1.3	44974	2162	46	99445
Магистрант	-	-	2200	-	-	13200

5.3.3 Дополнительная заработная плата научно-производственного персонала

Дополнительную заработную плату рассчитывали на примере руководителя. Она включает оплату за непроработанное время (очередной и учебный отпуск, выполнение государственных обязанностей, выплата вознаграждений за выслугу лет и т.п.) и рассчитывается исходя из 10-15% от основной заработной платы, работников, непосредственно участвующих в выполнении темы:

$$З_{\text{доп}} = k_{\text{доп}} З_{\text{осн}} = 0,1 * 99445 = 9944,5 \text{ руб.} \quad (5)$$

где $З_{\text{доп}}$ – дополнительная заработная плата, руб.; $k_{\text{доп}}$ – коэффициент дополнительной зарплаты ($k_{\text{доп}} = 0,1$); $З_{\text{осн}}$ – основная заработная плата, руб.

Расчёт основной и дополнительной заработной платы представлен в таблице 22.

Таблица 22 – Заработная плата исполнителей НИР

Заработная плата	Руководитель	Магистрант
Основная зарплата	99445	2200
Дополнительная зарплата	9944	-
Зарплата исполнителя	109389	13200
Итого по статье $C_{зп}$, руб	122589	

5.3.4 Отчисления на социальные нужды

Статья включает в себя отчисления во внебюджетные фонды:

$$C_{внеб} = k_{внеб} \cdot (З_{осн} + З_{доп}) = 0,301 \cdot (99445 + 9944) = 32926 \text{ руб.} \quad (6)$$

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

5.3.5 Накладные расходы

В эту статью включаются затраты на управление и хозяйственное обслуживание, которые могут быть отнесены непосредственно на конкретную тему. Кроме того, сюда относятся расходы по содержанию, эксплуатации и ремонту оборудования, производственного инструмента и инвентаря, зданий, сооружений и др. В расчетах эти расходы принимаются в размере 70 - 90 % от суммы основной заработной платы научно-производственного персонала данной научно-технической организации.

Накладные расходы составляют 80-100% от суммы основной и дополнительной заработной платы, работников, непосредственно участвующих в выполнение темы.

Расчет накладных расходов ведется по следующей формуле на примере руководителя:

$$C_{накл} = k_{накл} \cdot (З_{осн} + З_{доп}) = 0,8 \cdot (99445 + 9944) = 87511 \text{ руб.} \quad (7)$$

где $k_{накл}$ – коэффициент накладных расходов.

5.4 Определение ресурсной (ресурсосберегающей), финансовой, бюджетной, социальной и экономической эффективности исследования

Определение эффективности происходит на основе расчета интегрального показателя эффективности научного исследования. Его нахождение связано с определением двух средневзвешенных величин: финансовой эффективности и ресурсоэффективности. Интегральный показатель финансовой эффективности научного исследования получают в ходе оценки бюджета затрат трех (или более) вариантов исполнения научного исследования. Для этого наибольший интегральный показатель реализации технической задачи принимается за базу расчета (как знаменатель), с которым соотносятся финансовые значения по всем вариантам исполнения. Интегральный финансовый показатель разработки определяется как:

$$I_{фин}^{исп.i} = \frac{\Phi_{pi}}{\Phi_{max}}, \quad (8)$$

где $I_{фин}^{исп.i}$ - интегральный финансовый показатель разработки, Φ_{pi} - стоимость i -го варианта исполнения; Φ_{max} - максимальная стоимость исполнения научно-исследовательского проекта (в т.ч. аналоги).

Полученная величина интегрального финансового показателя разработки отражает соответствующее численное увеличение бюджета затрат разработки в размах (значение больше единицы), либо соответствующее численное удешевление стоимости разработки в размах (значение меньше единицы, но больше нуля).

Интегральный показатель ресурсоэффективности вариантов исполнения объекта исследования можно определить следующим образом:

$$I_{pi} = \sum a_i b_i, \quad (9)$$

где I_{pi} - интегральный показатель ресурсоэффективности для i -ого варианта исполнения разработки; a_i - весовой коэффициент i -ого варианта исполнения разработки; b_i^a, b_i^q - бальная оценка i -ого варианта исполнения разработки,

устанавливается экспертным путем по выбранной шкале оценивания; n – число параметров сравнения.

Расчет интегрального показателя ресурсоэффективности рекомендуется проводить в форме таблицы (таблица 23).

Таблица 23 – Сравнительная оценка характеристик вариантов исполнения проекта

Критерии	Весовой коэффициент параметра	Исп. 1	Исп. 2
Удовлетворяет потребности потребителя	0,2	5	4
Энергосбережение	0,25	4	3
Надежность	0,3	4	4
Материалоемкость	0,25	4	4
Итого	1		
I_{pi}		4,2	3,75

Интегральный показатель эффективности вариантов исполнения проекта определяет на основании интегрального показателя ресурсоэффективности и интегрального финансового показателя по формуле:

$$I_{ucn1} = \frac{I_{p-ucn1}}{I_{финр}}, I_{ucn2} = \frac{I_{p-ucn2}}{I_{финр}} \quad (10)$$

Сравнение интегрального показателя эффективности вариантов исполнения разработки позволит определить сравнительную эффективность проекта и выбрать наиболее целесообразный вариант из предложенных. Сравнительная эффективность проекта ($\mathcal{E}_{cp}$):

$$\mathcal{E}_{cp} = \frac{I_{ucn1}}{I_{ucn2}} \quad (11)$$

Таблица 24 – Сравнительная эффективность разработки

Показатели	Исп1	Исп2
Интегральный финансовый показатель	1	0,98
Интегральный показатель ресурсоэффективности	4,2	3,75
Интегральный показатель эффективности	4,2	3,82
Сравнительная эффективность проекта относительно исп1	1	0,9

Представленные в таблице 24 расчеты показывают, что более эффективным вариантом решения технической задачи, является исполнение 1, так как в совокупности интегральные показатели данного исполнения выше, чем у других исполнений.

ЗАДАНИЕ ДЛЯ РАЗДЕЛА «СОЦИАЛЬНАЯ ОТВЕТСТВЕННОСТЬ»

Студенту:

Группа	ФИО
ОБМ41	Кашириной Надежде Владимировне

Институт	Физико-технический	Кафедра	Общей физики
Уровень образования	магистр	Направление/специальность	Физика / Физика конденсированного состояния веществ

Тема дипломной работы: Исследование колебательно-вращательного спектра высокого разрешения молекулы $as-C_2H_2D_2$ в диапазоне 600-1300 cm^{-1}

Исходные данные к разделу «Социальная ответственность»:

Описание рабочего места на предмет возникновения:

– вредных проявлений факторов производственной среды

(для обслуживающего персонала необходимо обеспечить оптимальные, в крайнем случае, допустимые значения метеоусловий на рабочем месте, обеспечить комфортную освещенность рабочего места, уменьшить до допустимых пределов шум);

– опасных проявлений факторов производственной среды

(в связи с присутствием электричества для питания персональных компьютеров и освещенности лаборатории необходимо предусмотреть, если есть, то перечислить средства коллективной и индивидуальной защиты от электро- и пожароопасности);
негативного воздействия на окружающую природную среду

– негативного воздействия на окружающую природную среду

(предусмотреть мероприятия по предотвращению негативного воздействия на окружающую природную среду используемых энергетических проявлений и образующихся отходов: «черновые» листы бумаги, отработанные картриджи, принтеры и др. оргтехника);

– чрезвычайных ситуаций (необходимо обеспечить меры безопасности при возникновении чрезвычайных ситуаций, характерных для Сибири – сильные морозы, пурга, человеческий фактор, диверсия; рассмотреть минимум 2 ЧС – 1 природную, 1 техногенную).

Перечень вопросов, подлежащих исследованию, проектированию и разработке:

1. Анализ выявленных вредных факторов проектируемой производственной среды в следующей последовательности:

а) приводятся данные по оптимальным и допустимым значениям микроклимата на рабочем месте, перечисляются методы обеспечения этих значений

б) приводятся данные по допустимым значениям шума на рабочем месте

в) приводится 1 из расчетов (расчет освещенности на рабочем месте, расчет необходимого воздухообмена на рабочем месте, расчет необходимого времени эвакуации рабочего персонала);

г) приводятся данные по реальным значениям электромагнитных полей на рабочем месте, в том числе от компьютера или процессора, если они используются, перечисляются СКЗ и СИЗ;

приведение допустимых норм с необходимой размерностью (с ссылкой на соответствующий нормативно-технический документ);

предлагаемые средства защиты

(сначала коллективной защиты, затем – индивидуальные защитные средства)

2. Анализ выявленных опасных факторов проектируемой среды в следующей последовательности

а) приводятся данные по значениям напряжения используемого оборудования, классификация помещения по электробезопасности, допустимые безопасные для человека значения напряжения, тока и заземления (в т.ч. статическое электричество, молниезащита - источники, средства защиты); перечисляются СКЗ и СИЗ;

б) приводится классификация пожароопасности помещений, указывается класс пожароопасности вашего помещения, перечисляются средства пожаробнаружения и принцип их работы, средства пожаротушения, принцип работы, назначение (какие пожары можно тушить, какие – нет), маркировка;

пожаровзрывобезопасность (причины, профилактические мероприятия).

3. Охрана окружающей среды:

организация безотходного производства (приводится перечень отходов при эксплуатации установки, перечисляются методы улавливания, переработки, хранения и утилизации образовавшихся на вашем производстве промышленных отходов).

Защита в чрезвычайных ситуациях: а) Приводятся возможные для Сибири ЧС; Возможные ЧС: морозы, диверсия разрабатываются превентивные меры по предупреждению ЧС; разработка мер по повышению устойчивости объекта к данной ЧС; разработка действий в результате возникшей ЧС и мер по ликвидации её последствий
Правовые и организационные вопросы обеспечения безопасности: специальные (характерные для проектируемой рабочей зоны) правовые нормы трудового законодательства (приводится перечень ГОСТов, СНиПов и др. законодательных документов, использованных в своей работе);
Перечень графического материала: 1) План размещения светильников на потолке рабочего помещения 2) Пути эвакуации

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

Задание выдал консультант:

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Профессор каф. ЭБЖ ИНК	Федорчук Ю.М.	Д.т.н.		

Задание принял к исполнению студент:

Группа	ФИО	Подпись	Дата
ОБМ41	Каширина Н.В.		

6 СОЦИАЛЬНАЯ ОТВЕТСТВЕННОСТЬ

6.1 Анализ выявленных вредных факторов проектируемой производственной среды

В лаборатории, где расположены рабочие места за персональными компьютерами могут быть следующие вредные факторы: наличие - а) некомфортных метеоусловий; б) шума; в) недостаточной освещенности; г) электромагнитных полей.

6.1.1 Метеоусловия

Микроклимат на рабочем месте зависит от ряда многих факторов, в том числе таких, как теплофизические особенности технологического процесса и вида используемого оборудования, климат, сезон или период года, число работников, а также условий отопления и вентиляции, размеров и состояния производственного помещения и др. Микроклимат, особенно температура воздуха и тепловое излучение, может меняться на протяжении рабочего дня, быть различным на отдельных участках одного и того же помещения. Кроме этих параметров, являющихся основными, не следует забывать об атмосферном давлении, которое влияет на парциальное давление основных компонентов воздуха (кислорода и азота), а, следовательно, и на процесс дыхания.

Требования, предъявленные к воздуху, т.е. оптимальные и допустимые значения показателей микроклимата в производственных помещениях для работ разной категории тяжести и в зависимости от периода года, представлены в санитарных нормах проектирования промышленных предприятий СН 245-71 и ГОСТ 12.11.005-88 ССБТ «Общие санитарно-технические требования к воздуху рабочей зоны». В таблице 25 представлены оптимальные и допустимые параметры рабочей зоны для конкретной категории работ – 2а, т.е. работы, связанные с постоянной ходьбой, выполняемые стоя или сидя, но не требующие перемещения тяжестей.

Таблица 25 - Оптимальные и допустимые параметры для рабочей зоны

Период года	Температура, °С					Относительная влажность, %		Скорость движения, м/с	
	Оптим.	Допустимая				Оптим.	Допуст., не более	Оптим., не более	Допуст.
		Верхняя граница		Нижняя граница					
		Постоян.	Непостоян	Постоян.	Непостоян.				
Холод.	22-23	21	23	19	17	40-60	15-75	0,2	0,1-0,3
Тепл.	23-25	23	27	20	18	40-60	15-75	0,3	0,2-0,4

При высокой температуре воздуха в помещении кровеносные сосуды кожи расширяются, происходит повышенный приток крови к поверхности тела, и выделение тепла в окружающую среду значительно увеличивается. При низкой температуре окружающего воздуха реакция человеческого организма иная: кровеносные сосуды кожи сужаются, приток крови к поверхности тела замедляется, и теплоотдача конвекцией и излучением уменьшается. Таким образом, для теплового самочувствия человека важно определенное сочетание температуры, относительной влажности и скорости движения воздуха в рабочей зоне.

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.

Для обеспечения оптимальных и допустимых показателей микроклимата в холодный период года следует применять средства защиты рабочих мест от остекленных поверхностей оконных проемов, чтобы не было охлаждения, а так же необходимо установить отопительную систему. В теплый период года необходимо предусмотреть защиту от попадания прямых солнечных лучей. К средствам коллективной защиты можно отнести установки кондиционирования воздуха, основная задача которых поддерживать параметры воздуха в установленных пределах, для обеспечения надежной работы и комфортных условий для работников

6.1.2 Шум

Для определения допустимого уровня шума на рабочих местах используется ГОСТ 12.1.003-83. ССБТ «Шум. Общие требования безопасности», СН 2.2.4/2.1.8.562-96 «Шум на рабочих местах, в помещениях жилых, общественных зданий и на территории жилой застройки». Согласно ГОСТ 12.1.003 – 83, нормируемой шумовой характеристикой рабочих мест при шуме являются уровни звуковых давлений в децибелах в октановых полосах. В таблице 26 приведены допустимые уровни звукового давления на рабочем месте.

Таблица 26 - Допустимы уровни звукового давления на рабочем месте

Вид деятельности	Частота, Гц							
	Уровень звукового давления, дБ							
	62	125	250	500	1000	2000	4000	8000
Научная деятельность, проектирование	71	61	54	49	45	42	40	38

В нашей научно-исследовательской лаборатории не находится никаких приборов и устройств, создающих шум, который может оказать влияние на здоровье. Так же в помещении отсутствует вентиляционная система, которая могла бы создавать дополнительные шумы. Лаборатория расположена среди учебных комнат, что означает, что в соседних комнатах так же отсутствует производственное оборудование.

6.1.3 Освещенность

Неудовлетворительное и некачественное освещение утомляет зрение, может стать причиной его снижения, реже слепоты. Плохо освещенные участки рабочего места могут стать причиной травматизма.

Источник естественного освещения – поток энергии солнца. Естественное освещение является наиболее гигиеничным. Однако по условиям зрительной работы в лаборатории естественного освещения, как правило,

недостаточно, поэтому на рабочих местах оказывается задействованным и искусственное освещение. Оно может быть обеспечено с помощью люминесцентных ламп ЛВ (белого цвета) мощностью 20, 40, 80 Вт. Для рабочих мест с искусственным освещением регламентирована допустимая освещенность, согласно действующим санитарным нормам и правилам СНиП 23-05-95.

«Гигиенические требования к естественному, искусственному и совмещенному освещению жилых и общественных зданий. СанПиН 2.2.1/2.1.1.1278-03» определяет наименьшую освещенность рабочих поверхностей в производственных помещениях в зависимости от вида производимой деятельности. В соответствии со СНиП 23-05-95 все зрительные работы делятся на 8 разрядов и в зависимости от размера объекта различия и условий зрительной работы. Принимаем четвертый разряд зрительной работы (средней точности). Допустимые значения наименьшей освещенности рабочих поверхностей в производственных помещениях в соответствии со СНиП 23-05-95 для четвертого разряда зрительной работы приведены в таблице 27. На рабочей поверхности должны отсутствовать резкие тени, которые создают неравномерное распределение поверхностей с различной яркостью в поле зрения, искажает размеры и формы объектов различия, в результате повышается утомляемость и снижается производительность труда.

Таблица 27 - Нормирование значения освещенности на рабочих местах производственных помещений при искусственном освещении

Характер зрительной работы	Наименьший размер объекта, мм	Подразряд зрительной работы	Контраст объекта различия с фоном	Характер фона	Освещенность, лк	
					Комбинированное	Общее
Средняя точность (4 разряд зрительной работы)	0,5-1,0	а	Малый	Темный	750	300
		б	Малый	Средний	500	200
			Средний	Темный	500	200
		в	Малый	Светлый	400	200
			Средний	Светлый	400	200

		г	Большой	Темный	400	200
			Средний	Светлый	300	150
			Большой	Светлый	300	150
			Большой	Средний	300	150

Согласно СНиП 23-05-95 газоразрядные лампы приняты в качестве основного источника света. Основными преимуществами таких ламп перед лампами накаливания являются высокая световая отдача – 40–110 лм/Вт, большой срок службы (до 8000–12000 ч), возможность получения светового потока практически с любым спектром. В частности, люминесцентные лампы, рекомендуемые для использования в производственных помещениях, обеспечивают достаточный уровень освещения, сохраняют зрение, снижают утомляемость, повышают работоспособность. С противоположной стороны, пульсация светового потока, слепящее действие, а также возникновение стробоскопического эффекта – все следует учитывать при производственном процессе. Для уменьшения коэффициента пульсации люминесцентные лампы включают в разные фазы трехфазной электрической сети.

Расчёт общего равномерного искусственного освещения горизонтальной рабочей поверхности выполняется методом коэффициента светового потока, учитывающим световой поток, отражённый от потолка и стен. Длина помещения $A = 5,3$ м, ширина $B = 4,7$ м, высота = 3,5 м. Высота рабочей поверхности над полом $h_p = 0,8$ м. Согласно СНиП 23-05-95 необходимо создать освещенность не ниже 150 лк, в соответствии с разрядом зрительной работы.

Площадь помещения: $S = A \times B = 24,91 \text{ м}^2$,

Коэффициент отражения свежестроенных стен с окнами, без штор $\rho_c = 50\%$, свежестроенного потолка $\rho_{II} = 70\%$. Коэффициент запаса, соответствующий помещению с малым выделением пыли равен $K_z = 1,5$. Коэффициент неравномерности для люминесцентных ламп $Z = 1,1$.

Для освещения комнаты, с представленными выше параметрами, выбираем лампу дневного света ЛД-40, световой поток которой равен $\Phi_{ЛД} = 2300 \text{ Лм}$.

Светильники с люминесцентными лампами типа ОДОР-2-40. Этот светильник имеет две лампы мощностью 40 Вт каждая, длина светильника равна 1227 мм, ширина – 265 мм.

Интегральным критерием оптимальности расположения светильников является величина λ , которая для люминесцентных светильников с защитной решёткой ОДОР лежит в диапазоне 1,1–1,3. Возьмем минимальное значение $\lambda=1,1$ и расстояние светильников от перекрытия (свес) $h_c = 0,3$ м.

Высота светильника над рабочей поверхностью определяется по формуле: $h = H - h_{pn} - h_c = 2,4$ м.

Расстояние между соседними светильниками или рядами определяется по формуле: $L = \lambda \cdot h = 2,64$ м.

Число рядов светильников в помещении: $Nb = B/L = 1,74 = 2$.

Число светильников в ряду: $Na = A/L = 2,01 \approx 2$.

Однако помещение близко к квадратной форме, поэтому разумно добавить дополнительный светильник в середине помещения. Таким образом светильники будут расположены в шахматном порядке и общее количество светильников будет равно $N=5$.

Расстояние от крайних светильников или рядов до стены определяется по формуле: $l = L/3 = 0,88$ м

На рисунке 12 изображен план помещения и размещения светильников с люминесцентными лампами.

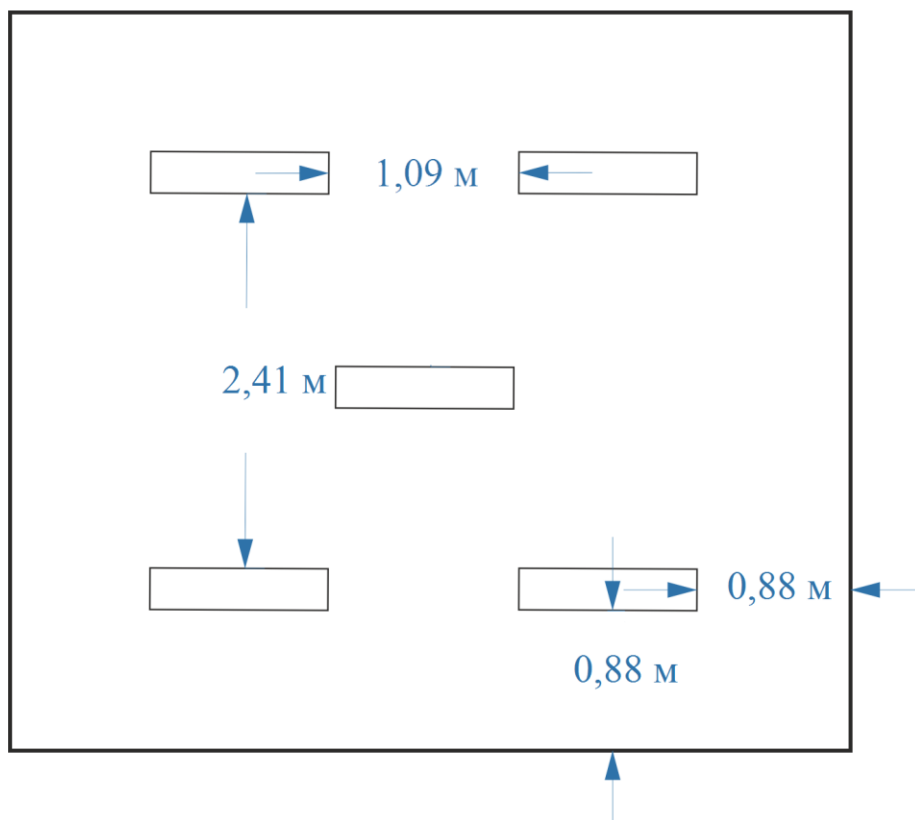


Рисунок 12 – План помещения и размещения светильников с люминесцентными лампами

Индекс помещения определяется по формуле:

$$i = \frac{A \cdot B}{h(A + B)} = 1,04.$$

Коэффициент использования светового потока, показывающий какая часть светового потока ламп попадает на рабочую поверхность, для светильников типа ОДОР с люминесцентными лампами при $\rho_{\text{П}} = 70 \%$, $\rho_{\text{С}} = 50\%$ и индексе помещения $i = 1,6$ равен $\eta = 0,42$.

Потребный световой поток группы люминесцентных ламп светильника определяется по формуле:

$$\Phi_n = \frac{E \cdot A \cdot B \cdot K_3 \cdot Z}{N \cdot \eta} = 2836 \text{ лм}.$$

Делаем проверку выполнения условия:

$$-10\% \leq \frac{\Phi_{\text{ЛД}} - \Phi_{\text{П}}}{\Phi_{\text{ЛД}}} \cdot 100\% \leq 20\%,$$

$$\frac{\Phi_{ЛД} - \Phi_{П}}{\Phi_{ЛД}} \cdot 100\% = -9,07\%.$$

Таким образом необходимый световой поток светильника не выходит за пределы требуемого диапазона.

6.1.5 Электромагнитные поля

Электромагнитное поле, создаваемое персональным компьютером, имеет сложный спектральный состав в диапазоне частот от 0 Гц до 1000 МГц.

Наличие в помещении нескольких компьютеров со вспомогательной аппаратурой и системой электропитания создает сложную картину электромагнитного поля. Очевидно, что электромагнитная обстановка в помещениях с компьютерами крайне сложная, распределение полей неравномерное, а уровни достаточно высоки, чтобы говорить об опасности их биологического действия. В таблице 28 приведены диапазоны возможных значений ЭМП.

Таблица 28 - Диапазоны возможных значений ЭМП, измеренных на рабочих местах пользователей ПК

	5 Гц-2 кГц	2 – 400 кГц
Напряженность переменного электрического поля	1 – 35	0,1 – 1,1
Индукция переменного магнитного поля	6 - 770	1 - 32

По обобщенным данным, у работающих за монитором от 2 до 6 часов в сутки функциональные нарушения центральной нервной системы происходят в среднем в 4,6 раза чаще, чем в контрольных группах, болезни сердечно-сосудистой системы - в 2 раза чаще, болезни верхних дыхательных путей - в 1,9 раза чаще, болезни опорно-двигательного аппарата - в 3,1 раза чаще. С увеличением продолжительности работы на компьютере соотношения

здоровых и больных среди пользователей резко возрастает. даже при кратковременной работе (45 минут) в организме пользователя под влиянием электромагнитного излучения монитора происходят значительные изменения гормонального состояния и специфические изменения биотоков мозга. Особенно ярко и устойчиво эти эффекты проявляются у женщин. Замечено, что у групп лиц (в данном случае это составило 20%) отрицательная реакция функционального состояния организма не проявляется при работе с ПК менее 1 часа. Исходя из анализа полученных результатов сделан вывод о возможности формирования специальных критериев профессионального отбора для персонала, использующего компьютер в процессе работы.

В целях обеспечения безопасности здоровья пользователей в Российской Федерации действуют Санитарные нормы и правила " Гигиенические требования к видеодисплейным терминалам, персональным электронно-вычислительным машинам и организации работ" СанПиН 2.2.2.542-96. Цель Санитарных норм - определить такие нормированные величины факторов воздействия, чтобы их вред был минимальным, а условия труда - комфортными. Предельно допустимые уровни, генерируемого монитором электромагнитного поля и поверхностного электростатического потенциала установлены СанПиН 2.2.2.542-96 и приведены в таблице 29.

Таблица 29 - ПДУ электромагнитного поля монитора компьютера

Вид поля	Диапазон частот	Единица измерения	ПДУ
Магнитное	5 Гц-2 кГц	нТл	250
	2 – 400 кГц		25
Электрическое	5 Гц-2 кГц	В/м	25
	2 – 400 кГц		2,5

В основном из средств защиты предлагаются защитные фильтры для экранов мониторов. Они используются для ограничения действия на пользователя вредных факторов со стороны экрана монитора, улучшает

эргономические параметры экрана монитора и снижает излучение монитора в направлении пользователя.

Представленные на рынке защитные фильтры для экранов мониторов по назначению делятся на 2 основные группы:

- защитные фильтры улучшающие эргономические параметры дисплея и ослабляющие инфракрасное, ультрафиолетовое излучения, но не влияющие на электромагнитные параметры;
- защитные фильтры улучшающие эргономические параметры дисплея, ослабляющие инфракрасное, ультрафиолетовое излучения, ослабляющие электростатическое поле и переменное электрическое поле.

6.2 Анализ выявленных опасных факторов производственной среды

6.2.1 Электробезопасность

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

Строгое выполнение организационных и технических мероприятий при проведении работ с электроустановками, очень важно в целях предупреждения электротравматизма, кроме этого используют средства защиты, к которым относятся: электрическая изоляция токоведущих частей, защитное заземление и отключение, электрическое разделение сети. Использование этих средств позволяет обеспечить защиту людей от прикосновения к токоведущим частям, от опасности перехода напряжения к металлическим нетокведущим частям, от шагового напряжения.

Преднамеренное соединение с землей металлических нетокведущих частей, которые могут оказываться под напряжением, называют защитным заземлением (ГОСТ 12.1.009 – 2009). Чтобы защитить человека от поражения электрическим током, защитное заземление должно удовлетворять ряду требований, изложенных в ПУЭ и ГОСТ 12.1.030 – 81 “ССВТ.

Электробезопасность. Защитное заземление. Зануление”. Эти требования зависят от напряжения электроустановок и мощности источника питания. К средствам защиты относятся: электрическая изоляция токоведущих частей, защитное заземление и отключение, электрическое разделение сети. Использование этих средств позволяет обеспечить защиту людей от прикосновения к токоведущим частям, от опасности перехода напряжения к металлическим нетокведущим частям, от шагового напряжения.

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.

Рабочая среда (сырость, высокая температура, токопроводящая пыль, едкие пары и газы, токопроводящие полы и т.д.) могут оказывать в той или иной степени оказывать воздействие – усиливать или уменьшать опасность поражения током. При проектировании способов и средств защиты от поражения электрическим током руководствуются безопасными значениями тока при данной длительности и пути его прохождения через тело в соответствии с ГОСТ 12.1.038-82. При длительном воздействии допустимый безопасный ток принят в 1 мА, при продолжительности воздействия до 30 с – 6 мА.

6.2.2 Факторы пожарной и взрывной природы

Источниками пожаровзрывоопасности в лаборатории могут быть любые электроприборы. При работе с электроприборами не исключено оплавление изоляционных проводов, их оголение, что влечет за собой короткое замыкание, перегрузку электронных схем, которые, перегреваясь, сгорают с разбрызгиванием искр.

По пожарной опасности помещения подразделяют на категории А,Б,В,Г,Д. Данная лаборатория согласно НПБ 105-03 относится к категории Д, т.е. нет горючих веществ и материалы в холодной состоянии.

По степени огнестойкости данное помещение относится к 1-й степени огнестойкости по СНиП 21-01-97 (выполнено из кирпича, которое относится к трудно сгораемым материалам). Возникновение пожара при работе с электронной аппаратурой может быть по причинам электрического характера. Причины возникновения пожара электрического характера: короткое замыкание, перегрузки по току, искрение и электрические дуги, статическое электричество и т. п. Не реже одного раза в квартал необходимо производить очистку от пыли агрегатов и узлов, кабельных каналов и межпольного пространства

К первичным средствам пожаротушения при ликвидации пожара на ранней стадии относят: водопровод пожарный, огнетушители, сухой песок, асбестовые одеяла и др. В корпусе пожарные краны установлены в коридорах, на лестничных площадках, у входов. Ручные углекислотные огнетушители размещают в помещении.

Для устранения причин возникновения и локализации пожаров в помещении лаборатории должны проводиться следующие мероприятия:

- а) использование только исправного оборудования;
- б) проведение периодических инструктажей по пожарной безопасности;
- в) отключение электрооборудования, освещения и электропитания при предполагаемом отсутствии обслуживающего персонала или по окончании работ;
- г) курение в строго отведенном месте;
- д) содержание путей и проходов для эвакуации людей в свободном состоянии.

Пожарная безопасность обеспечивается наличием огнетушителей:

– Углекислотные огнетушители (ОУ-2). Углекислотные огнетушители предназначены для тушения загораний веществ, горение которых не может

происходить без доступа воздуха, загораний электроустановок, находящихся под напряжением не более 1000В. Рекомендуется периодически проверять массу заряда - не реже одного раза в два года. Преимуществом Углекислотных огнетушителей, является то, что они не оставляют следов тушения, т.к. двуокись углерода полностью испаряется. Эта особенность огнетушителей углекислотных не портит при тушении электронное оборудование, приборы и механизмы, а также и само охраняемое помещение и определяет их специфику использования

– Огнетушитель воздушно-пенный ОВП-10 (А и В): Первичные средства пожаротушения. Огнетушитель воздушно-пенный предназначен для тушения возгораний твердых, тлеющих материалов органического происхождения (дерево, бумага, уголь и т.д.) - класс пожара А и жидкостей или твердых тел, превращающихся в жидкости (нефтепродукты, масла, краски и т.п.) - класс пожара В. Основным достоинством огнетушителей воздушно-пенных является продолжительное время работы, превышающее время работы других типов огнетушителей. По истечении 1 года хранения водные растворы зарядов выборочно должны проверяться на кратность пенообразования

– Порошковые огнетушители (ОП-2): Огнетушители ОВП обеспечивают подачу воздушно-механической пены. Огнетушащий состав - раствор пенообразователя. Порошковые огнетушители используются в качестве первичного средства тушения загорания пожаров класса А (твердых веществ), В (жидких веществ), С (газообразных веществ) и электроустановок, находящихся под напряжением до 1000 В. Огнетушители не предназначены для тушения загораний щелочных и щелочноземельных металлов и других материалов, горение которых может происходить без доступа воздуха. Перезарядка - один раз в год. Применение для тушения электроустановок, находящихся под напряжением не допускается.

Согласно требованиям, в офисе необходимо вести журнал регистрации противопожарного инструктажа, инструкцию о мерах пожарной безопасности и инструкцию о порядке действий персонала при пожаре. Сотрудник,

ответственный за пожарную безопасность, должен иметь аттестацию учебного центра МЧС.

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 13).

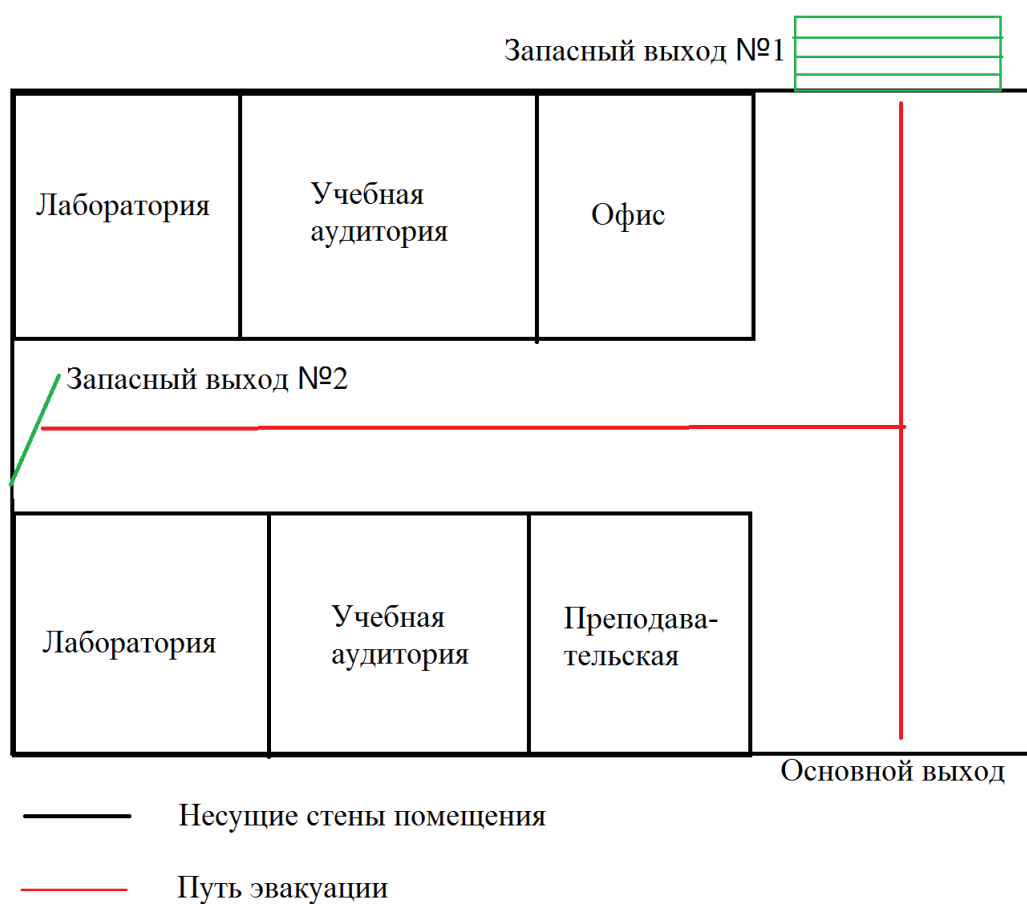


Рис. 13 - План эвакуации из лаборатории

6.3 Охрана окружающей среды

Лаборатория является не производственной, а значит отсутствует производственный мусор (в том числе и пожароопасный, и вредный для окружающей среды). Тем не менее могут быть приняты следующие меры по сохранению окружающей среды: сортировка мусора на пластик, стекло,

макулатура и алюминий. В частности, в городе Томск существует две компании, которые занимаются сбором и доставкой на перерабатывающие заводы подобного сырья. Например, компания «Чистый мир» устанавливает по всему городу желтые сетки с памяткой, какой мусор можно утилизировать путем переработки. Данная компания бесплатно обслуживает подобные сетки и проводит различные благотворительные акции.

Отходы, содержащие гальванические элементы (например, батарейки) собирает на переработку компания «Батарейки, сдавайтесь!», у которой расположены точки сбора по всему городу.

6.4 Защита в ЧС

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, 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 переморозки 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.

6.5 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. ГОСТ 12.1.003-83. Шум. Общие требования безопасности.

4. СН 2.2.4/2.1.8.562-96. Шум на рабочих местах, в помещениях жилых, общественных зданий и на территории жилой застройки»

5. СНиП 23-05-95. Естественное и искусственное освещение.

6. СанПиН 2.2.1/2.1.1.1278-03. Гигиенические требования к естественному, искусственному и совмещенному освещению жилых и общественных зданий.

7. СанПиН 2.2.2.542-96. Гигиенические требования к видеодисплейным терминалам, персональным электронно-вычислительным машинам и организации работ.

8. ГОСТ 12.1.009 – 2009. Система стандартов безопасности труда. Электробезопасность. Термины и определения

9. ГОСТ 12.1.030 – 81. Электробезопасность. Защитное заземление. Зануление.

10. ГОСТ 12.1.038-82 (2001). Электробезопасность. Предельно допустимые значения прикосновения и токов.

11. НПБ 105-03. Определение категорий помещений, зданий и наружных установок по взрывопожарной и пожарной опасности.

12. СНиП 21-01-97. Пожарная безопасность зданий и сооружений.

Графические материалы

- 1) Освещенность на рабочем месте
- 2) Пути эвакуации

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В представленной работе был проведен анализ колебательно-вращательного спектра высокого разрешения молекулы $\text{CH}_2=\text{CD}_2$ в диапазоне $600 - 1300 \text{ см}^{-1}$. Рассматриваемый диапазон содержит шесть фундаментальных полос: ν_{10} , ν_7 , ν_4 , ν_8 , ν_3 и ν_6 . В результате анализа экспериментального спектра было определено около 12200 колебательно-вращательных переходов, что в 2 раза больше, чем было получено в последней работе по представленному диапазону. Также важно отметить, что фундаментальная полоса ν_4 была исследована в первый раз. Максимальное значение квантовых чисел $J^{\text{max}}/K_a^{\text{max}}$ для найденных переходов составляет 31/20, 46/18, 33/11, 50/26, 44/20 и 42/21 для исследуемых полос ν_{10} , ν_7 , ν_4 , ν_8 , ν_3 и ν_6 , соответственно. Данные переходы соответствуют 3920 колебательно-вращательным энергиям шести возбужденных состояний.

Информация, полученная из анализа экспериментального спектра, была использована в процедуре варьирования параметров гамильтониана. Сами параметры гамильтониана учитывают не только невозмущенную вращательную структуру колебательного состояния, но и резонансные взаимодействия. В результате решения обратной спектроскопической задачи был получен набор из 133 параметров (колебательных, вращательных и параметров центробежного искажения различных порядков). Данный набор параметров воспроизводит исходные экспериментальные колебательно-вращательные энергии (3920) с ошибкой rms : $d_{rms} = 2.3 \times 10^{-4} \text{ см}^{-1}$.

СПИСОК ПУБЛИКАЦИЙ

Тезисы на конференции:

- Beryozkin K. B. , Kashirina N. V. High resolution analysis of the ν_6 band of the $\text{CH}_2=\text{CD}_2$ molecule // XVIII Symposium and School on High Resolution Molecular Spectroscopy: Abstract of Reports, Tomsk, 30 June-4 July 2015. - Tomsk: Publishing House of IOA SB RAS, 2015 - p. 28
- Ulenekov O. N., Bekhtereva E. S., Gromova O. V., Beryozkin K. B., Kashirina N. V., Baueresker S., Sydow C., Tan T. L. Study of resolution ro-vibrational spectra of the $\text{CH}_2=\text{CD}_2$ molecule: set of the lowest fundamental bands // High Resolution Molecular Spectroscopy: Program and Abstracts of Twenty-fourth Colloquium, Dijon, August 24-28, 2015. - Dijon: University of Burgundy, 2015 - p. 133

Статьи:

- O.N. Ulenikov, O.V. Gromova, E.S. Bekhtereva, K.B. Berezkin, N.V. Kashirina, T.L. Tan, C. Sydow, C. Maul, S. Bauerecker. Study of resonance interactions in polyatomic molecules on the basis of highly accurate experimental data: Set of strongly interacting Bands $\nu_{10}(\text{B}_1)$, $\nu_7(\text{B}_2)$, $\nu_4(\text{A}_2)$, $\nu_8(\text{B}_2)$, $\nu_3(\text{A}_1)$ and $\nu_6(\text{B}_1)$ of $\text{CH}_2=\text{CD}_2$ // Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer, Volume 180, September 2016, Pages 14–28

СПИСОК ИСПОЛЬЗУЕМОЙ ЛИТЕРАТУРЫ

1. Partridge H., Schwenke D. The determination of an accurate isotope dependent potential energy surface for water from extensive ab initio calculations and experimental data // J. Chemical Physics. – 1997. - V. 106. - pp. 4618 – 4639.
2. Ulenikov O.N., Bekhtereva E.S., Alanko S., Horneman V.M., Gromova O.V., Leroy C. On the high resolution spectroscopy and intramolecular potential function of SO₂ // J. Mol. Spectrosc. – 2009. – V. 257. – I. 2. – pp. 137 – 156.
3. Abele F.B., Heggetad H.E. Ethylene: an urban air pollutant // J. Air Pollut. Control Assoc. - 1973. - V.23. - pp. 517-21.
4. Martin J.M.L., Lee T.J., Taylor P.R., Francois J.P. The anharmonic force field of ethylene, C₂H₄, by means of accurate ab initio calculations // J. Chem. Phys. - 1995. - V. 103. - pp. 2589 – 2602.
5. Kostiuk T., Romani P., Espenak F., Livengood T.A., Goldstein J.J. Temperature and abundances in the jovian auroral stratosphere 2. Ethylene as a probe of the microbar region // J. Geophys. Res. - 1993. - V. 98. - pp. 18823 – 30.
6. Rothman L.S., Barbe A., Benner D.C., Brown L.R., Camy-Peyret C., Carleer M., et al. The HITRAN molecular spectroscopic database: edition of 2000 including updates through 2001 // J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transf. – 2003. – V. 82. – pp. 5 – 44.
7. Bézard B., Moses J.L., Lacy J., Greathouse T., Richter M., Griffith C. Detection of ethylene (C₂H₄) on Jupiter and Saturn in non-auroral regions // Bull. Am. Astron. Soc. – 2001. – V. 33. – pp. 1079.
8. Rothman L.S., Gordon I.E., Babikov Y., Barbe A., Benner D.C., Bernath P.F., et al. The HITRAN 2012 molecular spectroscopic database // J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transf. – 2013 – V. 130. – pp. 4 – 50.
9. Ulenikov O.N., Gromova O.V., Aslapovskaya Yu.S., Horneman V-M. High resolution spectroscopic study of C₂H₄: re-analysis of the ground state and ν_4 , ν_{10} and ν_{12} vibrational bands // J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transf. – 2013. – V. 118. - pp. 14 – 25.
10. Auwera J., Fayt A., Tudorie M., Rotger M., Boudon V., Franco B., Mahieu E. Self-broadening coefficients and improved line intensities for the ν_7 band of ethylene near 10.5 μm , and impact on ethylene retrievals from Jungfrau solar spectra // J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transf. – 2014. – V. 148. – pp. 177 – 85.
11. Ng L.L., Tan T.L., Gabona M.G. Coriolis interaction of the ν_{12} and $2\nu_{10}$ bands of ethylene-cis-1,2-d₂ (cis-C₂H₂D₂) by high-resolution FTIR spectroscopy // J. Mol. Spectrosc. – 2015. – V. 316. – pp. 90 – 94.
12. Tan T.L., Gabona M.G., Godfrey Peter D., McNaughton Don. Ro-vibrational analysis of the ethylene isotopologue ¹³C₂D₄ by high-resolution Fourier transform infrared spectroscopy // J. Mol. Spectrosc. – 2015. – V. 307. – pp. 40–43.
13. Ulenikov O.N., Gromova O.V., Bekhtereva E.S., Kashirina N.V., Onopenko G.A., Maul C., Bauerecker S. Ro-vibrational analysis of the hot bands of ¹³C₂H₄: $\nu_7+\nu_{10}-\nu_{10}$ and $\nu_{10}+\nu_{12}-\nu_{10}$ // J. Mol. Spectrosc. – 2015. – V.317. – pp.32 – 40.

14. Tan T.L., Ng L.L., Gabona M.G. The hybrid A/B type ν_{12} band of trans-ethylene-1,2-d₂ by high-resolution Fourier transform infrared spectroscopy // J. Mol. Spectrosc. – 2015. – V. 312. – pp. 6 – 12.
15. Gabona M.G., Tan T.L., Woo J.Q. High-resolution FTIR analysis and rotational constants for the ν_{12} band of ethylene-1-¹³C (¹³C¹²CH₄) // J. Mol. Spectrosc. – 2014. – V. 305. – pp. 22-24.
16. Ng L.L., Tan T.L., Gabona M.G., Godfrey Peter D., McNaughton Don. High-resolution FTIR spectroscopy of ethylene-d₃ (C₂H₃D₃): Rovibrational constants for the ground state and the $\nu_8 = 1$ state // J. Mol. Spectrosc. – 2015. – V. 316. – pp. 79 – 83.
17. Ng L.L., Tan T.L., Gabona M.G. Coriolis interaction of the ν_{12} and $2\nu_{10}$ bands of ethylene-cis-1,2-d₂ (cis-C₂H₂D₂) by high-resolution FTIR spectroscopy // J. Mol. Spectrosc. – 2015. – V. 316. – pp. 90–94.
18. Duncan J.L., Wright I.J., Van Lerberghe D. Ground state rotational constants of H₂CCD₂ and C₂D₄ and geometry of ethylene // J. Mol. Spectrosc. – 1972. – V. 42. – pp. 463-77.
19. Spelrs G.K., Duncan J.L., Van Lerberghe D. High resolution infrared spectroscopic studies of ethylene-1,1-D₂ // J. Mol. Spectrosc. – 1974. – V. 51. – pp. 524-38.
20. Hegelund F. The high-resolution infrared spectrum of the ν_{12} band in 1,1-ethylene-d₂ // J. Mol. Spectrosc. – 1991. – V. 148. – pp. 415-26.
21. Ulenikov O.N., Gromova O.V., Bekhtereva E.S., Berezkin K.B., Sklyarova E.A., Maul C., Gericke K.H., Bauerecker S. Study of the High Resolution FTIR Spectrum of CH₂=CD₂ in the Region of 1300-1450 cm⁻¹: the $\nu_{12}(A_1)$ and $2\nu_{10}(A_1)$ Bands // J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer. – 2015. – V. 161. – pp. 180–96.
22. Hegelund F., Duncan J.L. High resolution infrared study of the a-axis Coriolis interacting band system ν_6 , ν_7 , ν_8 , ν_{10} , in 1,1-ethylene-d₂ // Mol. Phys. – 1981. – V. 44. – pp. 803-15.
23. Hegelund F. The infrared spectrum of 1,1-Ethylene-d₂ between 500 and 1300 cm⁻¹ // J. Mol. Spectrosc. – 1990. – V. 139. – pp. 286-98.
24. Давыдов А. С. Квантовая механика / А. С. Давыдов. – М.: Наука, 1975. – С. 703.
25. Симметрия и ее применение к задачам колебательно-вращательной спектроскопии молекул, часть 2 / Ю. С. Макушкин, О. Н. Улеников, А. Е. Чеглоков. – Томск :Изд-во ТГУ, 1990. – 222 с.
26. Колебательные и вращательные спектры многоатомных молекул / Г. Герцберг; под ред. М. А. Ельяшевича. – М. :ИЛ, 1965. – 648 с.
27. Bykov A.D., Makushkin Yu.S., Ulenikov O.N. // J. Mol. Spectrosc. – 1981. – V. 85. – pp. 462–479.
28. Watson. J.K.G. Determination of centrifugal coefficients of asymmetric – top molecules // J. Chem. Phys. – 1967. – V. 46 – pp.1935-1949.

29. Ulenikov O.N., Fomchenko A.L., Bekhtereva E.S., Gromova O.V., Leroy C. On the “expanded local mode” approach applied to the methane molecule: isotopic substitution $\text{CH}_2\text{D}_2 \leftarrow \text{CH}_4$ // *Mol. Phys.* – 2011. – V. 109. – pp. 2111–30.
30. Ulenikov O.N., Bekhtereva E.S., Fomchenko A.L., Litvinovskaya A.G., Leroy C., Quack M. On the “expanded local mode” approach applied to the methane molecule: isotopic substitution $\text{CH}_3\text{D} \leftarrow \text{CH}_4$ and $\text{CHD}_3 \leftarrow \text{CH}_4$ // *Mol. Phys.* – 2014. – V. 112. – pp. 2529–56.
31. Maki A.G., Wells J.S. Wavenumber calibration tables from heterodyne frequency measurements (version 1.3). Gaithersburg, MD: National Institute of Standards and Technology; 1998.
32. Ulenikov O.N., Gromova O.V., Bekhtereva E.S., Berezkin K.B., Kashirina N.V., Tan T.L., Sydow C., Maul C., Bauerecker S. Study of resonance interactions in polyatomic molecules on the basis of highly accurate experimental data: Set of strongly interacting Bands ν_{10} (B1), ν_7 (B2), ν_4 (A2), ν_8 (B2), ν_3 (A1) and ν_6 (B1) of $\text{CH}_2=\text{CD}_2$ // *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer.* – 2016. – V. 180. – pp. 14–28.
33. Duncan J.L., Hamilton E. An improved general harmonic force field for ethylene // *J. Mol. Struct.* – 1981. – V. 76. – pp. 65–80.

Приложение А

(обязательное)

Таблица А.1 – Список переходов, соответствующих полосе ν_4 молекулы $\text{CH}_2=\text{CD}_2$

Верхний			Нижний			Положение линии	I, %	Энергия верхнего уровня, см^{-1}	Среднее значение, см^{-1}	δ
J	K_a	K_c	J'	K'_a	K'_c					
1			2			3	4	5	6	7
14	11	d	14	11	d	884.4530	88.2	1345.5227	1345.5229	2
			13	11	d	905.9335	96.0	1345.5226		
			14	9	d	983.3832	89.9	1345.5234		
15	11	d	15	11	d	884.5692	80.2	1368.6580	1368.6580	1
			14	11	d	907.5888	85.6	1368.6585		
			15	9	d	983.4670	90.7	1368.6579		
			14	9	d	1006.5173	71.9	1368.6576		
16	11	d	16	9	d	766.1432	80.8	1393.3368	1393.3371	-2
			16	11	d	884.6905	69.6	1393.3378		
			15	11	d	909.2481	77.3	1393.3369		
			17	9	d	957.4082	78.3	1393.3367		
			15	9	d	1008.1465	55.6	1393.3374		
17	11	d	18	11	d	857.1741	79.0	1419.5603	1419.5603	0
			17	11	d	884.8149	77.6	1419.5610		
			16	11	d	910.9129	86.0	1419.5602		
			16	9	d	1009.7734	46.2	1419.5598		
18	11	d	18	11	d	884.9380	66.6	1447.3242	1447.3241	-1
			17	11	d	912.5775	80.4	1447.3236		
			17	9	d	1011.3960	35.9	1447.3244		
19	11	d	20	11	d	854.3302	51.6	1476.6246	1476.6246	1
			19	11	d	885.0562	53.0	1476.6248		
			18	11	d	914.2383	79.7	1476.6245		
			19	9	d	983.7661	42.0	1476.6246		
			18	9	d	1013.0063	94.0	1476.6248		
20	11	d	21	11	d	852.8886	36.6	1507.4533	1507.4530	1
			20	11	d	885.1582	50.7	1507.4526		
			19	11	d	915.8843	65.2	1507.4529		
			21	9	d	951.4573	76.6	1507.4533		
			19	9	d	1014.5946	89.3	1507.4530		
21	11	d	22	13	d	733.1275	94.9	1539.7979	1539.7987	-1
			22	11	d	851.4180	40.9	1539.7989		
			21	11	d	885.2340	31.9	1539.7987		
			20	11	d	917.5041	69.8	1539.7985		
			22	9	d	949.9013	69.2	1539.7990		
			21	9	d	983.8026	91.0	1539.7986		
			20	9	d	1016.1484	87.0	1539.7987		

Продолжение таблицы А.1

22	11	d	23	11	d	849.9125	92.7	1573.6565	1573.6563	1
			22	11	d	885.2758	86.9	1573.6567		
			21	11	d	919.0913	61.9	1573.6560		
			23	9	d	948.2988	64.8	1573.6565		
			22	9	d	983.7583	92.4	1573.6560		
			21	9	d	1017.6602	84.9	1573.6563		
23	11	d	24	11	d	848.3745	93.8	1609.0300	1609.0300	-2
			23	11	d	885.2859	92.9	1609.0299		
			23	9	d	983.6722	91.2	1609.0297		
			22	9	d	1019.1327	83.8	1609.0303		
24	11	d	23	13	d	803.9606	90.7	1645.9311	1645.9313	-1
			25	11	d	846.8142	93.9	1645.9312		
			24	11	d	885.2759	86.9	1645.9315		
			23	11	d	922.1872	70.0	1645.9313		
			24	9	d	983.5533	87.8	1645.9313		
			23	9	d	1020.5737	86.2	1645.9313		
25	11	d	26	11	d	845.2399	36.1	1684.3695	1684.3696	-3
			25	11	d	885.2528	92.7	1684.3697		
			24	11	d	923.7137	67.2	1684.3694		
			25	9	d	983.4079	90.4	1684.3696		
			24	9	d	1021.9915	86.6	1684.3696		
26	11	d	27	11	d	843.6576	44.1	1724.3525	1724.3526	-1
			26	11	d	885.2233	93.1	1724.3528		
			26	9	d	983.2412	91.8	1724.3522		
			25	9	d	1023.3909	87.7	1724.3527		
27	11	d	28	13	d	724.2786	68.9	1765.8850	1765.8846	-2
			28	11	d	842.0700	45.8	1765.8846		
			27	11	d	885.1897	42.9	1765.8846		
			26	11	d	926.7546	72.0	1765.8842		
			27	9	d	983.0554	19.1	1765.8847		
			26	9	d	1024.7730	90.6	1765.8842		
29	11	19	30	11	19	838.8880	50.4	1853.6122	1853.6121	-3
			29	11	19	885.1215	49.9	1853.6118		
			28	11	17	929.7973	69.4	1853.6120		
			28	9	19	1027.4932	92.6	1853.6125		
29	11	18	30	11	20	838.8880	50.4	1853.6122	1853.6119	0
			29	11	18	885.1215	49.9	1853.6118		
			28	11	18	929.7973	69.4	1853.6120		
			28	9	20	1027.4932	92.6	1853.6115		
30	11	20	31	11	20	837.2959	51.4	1899.8133	1899.8134	-2
			30	11	20	885.0885	57.3	1899.8127		
			29	11	18	931.3225	60.4	1899.8130		
			31	9	22	934.3608	81.9	1899.8134		
			30	9	22	982.3899	67.3	1899.8138		
			29	9	20	1028.8299	94.8	1899.8139		

Продолжение таблицы А.1

30	11	19	31	11	21	837.2959	51.4	1899.8133	1899.8127	-4
			30	11	19	885.0885	57.3	1899.8127		
			29	11	19	931.3225	60.4	1899.8130		
			31	9	23	934.3666	81.9	1899.8132		
			30	9	21	982.3846	50.9	1899.8118		
			29	9	21	1028.8299	94.8	1899.8121		
31	11	21	32	13	19	718.4457	86.9	1947.5780	1947.5772	-2
			32	11	21	835.7043	50.8	1947.5766		
			32	9	23	932.5125	91.0	1947.5769		
			30	11	19	932.8527	80.7	1947.5769		
			30	9	21	1030.1505	40.3	1947.5777		
31	11	20	32	13	20	718.4457	86.9	1947.5780	1947.5769	2
			32	11	22	835.7043	50.8	1947.5766		
			30	11	20	932.8527	80.7	1947.5769		
			31	9	22	982.1236	65.9	1947.5762		
32	11	22	31	13	18	816.9769	95.9	1996.9057	1996.9057	-9
			33	11	22	834.1146	77.4	1996.9053		
			32	11	22	885.0329	69.6	1996.9051		
			31	11	20	934.3891	54.1	1996.9065		
			32	9	24	981.8517	70.2	1996.9057		
32	11	21	31	13	19	816.9769	95.9	1996.9057	1996.9056	1
			33	11	23	834.1146	77.4	1996.9053		
			32	11	21	885.0329	69.6	1996.9052		
			31	11	21	934.3891	54.1	1996.9065		
			32	9	23	981.8412	68.3	1996.9056		
33	11	23	34	11	23	832.5287	81.3	2047.8036	2047.8034	-9
			33	11	23	885.0126	14.3	2047.8032		
			32	11	21	935.9314	87.9	2047.8037		
			33	9	25	981.5534	74.4	2047.8030		
33	11	22	34	11	24	832.5287	81.3	2047.8035	2047.8035	9
			33	11	22	885.0126	14.4	2047.8033		
			32	11	22	935.9314	87.9	2047.8037		
25	5	21	26	3	23	878.7354	30.0	1457.7040	1457.7041	1
			26	1	25	932.9476	52.2	1457.7041		
			25	3	23	941.6049	8.9	1457.7043		
			24	3	21	958.2741	54.7	1457.7042		
			24	1	23	1005.9384	12	1457.7040		

где $[JK_a d]$ обозначает пару вырожденных или почти вырожденных состояний $[JK_a K_c = J - K_a]$ и $[JK_a K_c = J - K_a + 1]$. $\delta = E^{exp} - E^{calc}$ (10^{-4} см $^{-1}$) – разница между экспериментальным значением энергии возбужденного состояния из колонки 6 и соответствующего значения, рассчитанного на основе параметров, представленных в таблице 7 и Б.1.

Приложение Б

(обязательно)

Таблица Б.1 — Параметры резонансного взаимодействия для состояний ($\nu_3 = 1$), ($\nu_7 = 1$), ($\nu_8 = 1$), ($\nu_4 = 1$), ($\nu_{10} = 1$), и ($\nu_6 = 1$) молекулы $\text{CH}_2=\text{CD}_2$, полученные при варьировании гамильтониана

Параметр	Значение, см^{-1}	Параметр	Значение, см^{-1}
$^{1,2}C^1 \equiv (2B\zeta^*)^{1,2}$	1.1	$^{1,2}C^1_K \times 10^3$	-0.1100(35)
$^{1,2}C^1_J \times 10^4$	-0.3132(86)	$^{1,2}C^1_{KJ} \times 10^6$	-0.1332(54)
$^{1,2}C^1_{JJ} \times 10^8$	0.232(22)	$^{1,2}C^1_{KKJ} \times 10^9$	0.450(21)
$^{1,2}C^1_{KJJ} \times 10^{10}$	0.330(33)		
$^{1,2}C^2 \times 10^2$	-0.2936(86)	$^{1,2}C^2_J \times 10^4$	-0.923(24)
$^{1,2}C^2_{KK} \times 10^8$	-0.772(41)	$^{1,2}C^2_{KJ} \times 10^8$	0.746(36)
$^{1,2}C^2_{JJ} \times 10^8$	0.2457(86)		
$^{1,3}C^1 \equiv (2B\zeta^*)^{1,3}$	0.1	$^{1,3}C^1_J \times 10^4$	0.612(44)
$^{1,3}C^1_{JJ} \times 10^7$	-0.232(10)	$^{1,3}C^1_{JJJ} \times 10^{11}$	0.732(25)
$^{1,3}C^2 \times 10^3$	0.8410(77)	$^{1,3}C^2_J \times 10^5$	0.2999(83)
$^{1,3}C^2_{KJ} \times 10^8$	0.101(10)	$^{1,3}C^2_{JJ} \times 10^9$	-0.487(31)
$^{1,3}C^2_{KJJ} \times 10^{11}$	-0.1118(73)		
$^{2,3}F_J \times 10^2$	0.1948(88)	$^{2,3}F_{xy} \times 10^2$	0.3148(44)
$^{2,3}F_{Kxy} \times 10^5$	-0.2213(84)	$^{2,3}F_{Jxy} \times 10^5$	-0.1121(71)
$^{2,3}F_{KJxy} \times 10^8$	0.401(20)	$^{2,3}F_{JJxy} \times 10^9$	0.338(23)
$^{2,3}F_{KKJxy} \times 10^{11}$	-0.823(27)	$^{2,3}F_{KJJxy} \times 10^{12}$	-0.964(52)
$^{1,4}C^1 \equiv (2A\zeta^*)^{1,4}$	-1.6	$^{1,4}C^1_K \times 10^3$	0.19252(72)
$^{1,4}C^1_J \times 10^4$	-0.892(19)	$^{1,4}C^1_{KKK} \times 10^{10}$	-0.831(72)
$^{1,4}C^1_{KKJ} \times 10^{10}$	0.917(68)		
$^{1,4}C^2 \times 10^3$	0.7636(95)	$^{1,4}C^2_K \times 10^5$	-0.1365(85)
$^{2,4}C^1_{KK} \times 10^6$	0.7249(87)	$^{2,4}C^1_{JJ} \times 10^7$	0.1863(54)
$^{2,4}C^1_{KKJ} \times 10^9$	-0.464(22)	$^{2,4}C^1_{KJJ} \times 10^{10}$	0.639(49)
$^{2,4}C^2 \times 10^2$	1.2517(59)	$^{2,4}C^2_{KJ} \times 10^8$	-0.534(32)
$^{2,4}C^2_{KJJ} \times 10^{11}$	0.227(18)	$^{2,4}C^2_{JJJ} \times 10^{12}$	0.782(44)
$^{3,4}C^1_K \times 10^4$	0.379(31)	$^{3,4}C^1_J \times 10^4$	-0.1850(84)
$^{3,4}C^1_{KK} \times 10^6$	-0.1145(86)	$^{3,4}C^1_{KJ} \times 10^7$	-0.346(29)
$^{3,4}C^1_{JJ} \times 10^8$	-0.125(25)	$^{3,4}C^1_{KKK} \times 10^9$	-0.334(26)
$^{3,4}C^2 \times 10^3$	-0.276(22)	$^{3,4}C^2_{KKK} \times 10^{11}$	-0.353(20)
$^{3,4}C^2_{KJJ} \times 10^{12}$	0.755(43)		
$^{1,5}C^1 \equiv (2C\zeta^*)^{1,5}$	-0.2		
$^{2,5}C^1 \equiv (2A\zeta^*)^{2,5}$	2.4	$^{2,5}C^1_J \times 10^3$	-0.11402(99)
$^{2,5}C^1_{KK} \times 10^7$	-0.2016(94)	$^{2,5}C^1_{KJ} \times 10^7$	0.2151(94)
$^{2,5}C^1_{JJ} \times 10^7$	0.1095(70)	$^{2,5}C^1_{JJJ} \times 10^{11}$	-0.947(52)
$^{2,5}C^2 \times 10^2$	0.7069(81)	$^{2,5}C^2_K \times 10^5$	0.5279(85)
$^{2,5}C^2_J \times 10^6$	0.6654(84)	$^{2,5}C^2_{KK} \times 10^7$	-0.196(11)

Продолжение таблицы Б.1

$^{2,5}C_{KJ}^2 \times 10^8$	-0.765(18)	$^{2,5}C_{KKK}^2 \times 10^{10}$	0.244(49)
$^{2,5}C_{KKJ}^2 \times 10^{10}$	0.349(13)	$^{2,5}C_{KJJ}^2 \times 10^{11}$	0.1008(37)
$^{3,5}C^I \equiv (2A\zeta^*)^{3,5}$			
$^{4,5}C^I \equiv (2B\zeta^*)^{4,5}$	-1.4	$^{4,5}C_K^I \times 10^3$	0.2105(35)
$^{4,5}C_{KK}^I \times 10^6$	0.1656(81)	$^{4,5}C_{KJ}^I \times 10^8$	-0.1526(44)
$^{4,5}C_{JJ}^I \times 10^7$	0.367(38)	$^{4,5}C_{KKK}^I \times 10^9$	0.312(18)
$^{4,5}C_{KKJ}^I \times 10^9$	0.305(17)		
$^{4,5}C^2 \times 10^1$	-0.3925(15)	$^{4,5}C_J^2 \times 10^5$	0.8650(89)
$^{4,5}C_{KJ}^2 \times 10^7$	-0.1161(27)	$^{4,5}C_{JJ}^2 \times 10^9$	0.316(94)
$^{4,5}C_{KKK}^2 \times 10^{10}$	0.1493(62)	$^{4,5}C_{JJJ}^2 \times 10^{12}$	0.647(54)
$^{1,6}C^I \equiv (2C\zeta^*)^{1,6}$	-0.4	$^{1,6}C_J^I \times 10^5$	-0.592(31)
$^{1,6}C_{KK}^I \times 10^6$	-0.780(67)	$^{1,6}C_{KJ}^I \times 10^7$	-0.942(27)
$^{1,6}C_{JJ}^I \times 10^8$	0.309(14)		
$^{1,6}C^2 \times 10^2$	-0.3089(51)	$^{1,6}C_K^2 \times 10^5$	-0.2170(89)
$^{1,6}C_J^2 \times 10^5$	0.2931(80)		
$^{2,6}C^I \equiv (2A\zeta^*)^{2,6}$	1.6	$^{2,6}C_{KJ}^I \times 10^7$	0.258(12)
$^{2,6}C_{JJ}^I \times 10^7$	-0.786(26)		
$^{2,6}C^2 \times 10^6$	-0.33(59)	$^{2,6}C_{KJ}^2 \times 10^7$	0.1458(36)
$^{2,6}C_{KKJ}^2 \times 10^{10}$	-0.159(10)		
$^{3,6}C^I \equiv (2A\zeta^*)^{3,6}$	-2.7	$^{3,6}C_K^I \times 10^3$	0.158232(99)
$^{3,6}C_{JJ}^I \times 10^8$	-0.517(36)		
$^{3,6}C^2 \times 10^3$	0.496(10)	$^{3,6}C_J^2 \times 10^6$	0.583(25)
$^{3,6}C_{KJJ}^2 \times 10^{12}$	-0.343(22)	$^{3,6}C_{JJJ}^2 \times 10^{12}$	-0.1078(48)
$^{4,6}C^I \equiv (2B\zeta^*)^{4,6}$	0.6		
$^{5,6}F_J \times 10^2$	0.5426(95)	$^{5,6}F_{KJ} \times 10^5$	0.2473(93)
$^{5,6}F_{xy} \times 10^3$	0.895(84)	$^{5,6}F_{Jxy} \times 10^6$	-0.951(71)

Приложение В

(обязательное)

Раздел 4

Результаты проведенного исследования

Студент:

Группа	ФИО	Подпись	Дата
ОБМ41	Каширина Надежда Владимировна		

Консультант кафедры ОФ:

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Профессор	Бехтерева Е.С.	Д.ф.-м.н.		

Консультант – лингвист кафедры ИЯ ФТИ:

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Старший преподаватель	Демьяненко Н.В.			

RESULTS OF THE RESEARCH

Experimental Details

The spectrum of $\text{CH}_2=\text{CD}_2$ in the $950 - 1300 \text{ cm}^{-1}$ region was recorded using the Bruker IFS 125 HR Michelson Fourier transform spectrometer located at the Nanyang Technological University in Singapore at resolution of 0.0063 cm^{-1} . The $\text{CH}_2=\text{CD}_2$ gas samples used in the experiments were supplied by Cambridge Isotope Laboratories in Massachusetts, USA and had a chemical purity better than 98%. All spectral measurements were carried out at an ambient temperature of about $296 \pm 0.5 \text{ K}$ with a Globar infrared source, a high-sensitivity liquid-nitrogen cooled Hg-Cd-Te detector, KBr beamsplitter, and aperture size of 1.5 mm. A capacitance pressure gauge measured the vapor pressure to be about 800 Pa in the gas cell. A multiple-pass absorption cell with a total absorption length of 0.80 m was used. A total of 970 scans with scanning time of about 16 hours were co-added to produce the final spectrum. The absorption lines of N_2O in the $1238 - 1322 \text{ cm}^{-1}$ range, Ref. [31], were used to calibrate the $\text{CH}_2=\text{CD}_2$ spectrum. With systematic errors arising from the limitation due to the resolution of 0.0063 cm^{-1} of the spectra recorded, calibration and the noise level in the spectrum, the absolute accuracy of the measured $\text{CH}_2=\text{CD}_2$ lines can be approximated to be 0.00065 cm^{-1} .

In the Braunschweig Infrared Laboratory two spectra in the $600 - 1200 \text{ cm}^{-1}$ region have been recorded using an IFS 120HR Fourier Transform infrared spectrometer (FTIR) in a stainless steel White cell with a base length of one meter and a maximum path-length of up to 50 m. A Globar IR source, a KBr beamsplitters, a mercury-cadmium-telluride semiconductor detector and the sample, ethylene-1,1-d₂ (gas) with a chemical purity of better than 99% purchased from CDN Isotopes have been used. Measuring time (14.8 and 19 h), number of scans (310 and 400), optical path-length (4 m) and sample gas pressure (7 and 150 Pa) have been varied to get lines with stronger and weaker line intensities. The sample temperature was $296 \pm 0.5 \text{ K}$. The resolution of 0.0021 cm^{-1} was constant for all spectra. For details compare Table 1.

Table 1 – Experimental setup for the regions 600 – 1300 cm⁻¹ of the infrared spectrum of CH₂=CD₂

	Region, cm ⁻¹	Resolution, cm ⁻¹	Measuring time, h	No. of scans	<i>T</i> , K	<i>P</i> , Pa
I	600 – 1200	0.0021	14,8	310	296±0.5	7.0
II	600 – 1200	0.0021	19	400	296±0.5	150
III	950 – 1300	0.0063	16	970	296±0.5	800
	Source	Beam-splitter	Opt. Path-length, m	Aperture, mm	Calibr. gas	
I	Globar	KBr	4	1.5	N ₂ O, H ₂ O	
II	Globar	KBr	4	1.5	N ₂ O, H ₂ O	
III	Globar	KBr	0.8	1.5	N ₂ O	

The final spectral resolution was mainly limited by Doppler broadening and resulted in 0.0022 cm⁻¹ at 600 cm⁻¹ and 0.0032 cm⁻¹ at 1200 cm⁻¹. The contribution of the pressure broadening to the final spectral resolution is marginal for sample pressures up to a few hundred Pa.

Description of the spectrum and assignment of transitions

The studied bands ν_6 and ν_{10} are of b-type, ν_3 is of a-type, ν_7 and ν_8 are of c-type, and ν_4 is forbidden in absorption by the symmetry of the molecule, and its transitions can appear in experimental spectra only because of the intensity transfer from the other bands caused by different Coriolis interactions.

The survey spectra I and II in the region of 600 – 1100 cm⁻¹, where the ν_{10} , ν_7 , ν_4 , ν_8 and ν_3 bands of the CH₂=CD₂ molecule are located, are shown in Fig. 1. Analogously, the survey spectrum III in the region of 950 – 1300 cm⁻¹ in Fig. 3. Also one presents some small parts of the high resolution spectrums in these regions (Figs. 2 and 4).

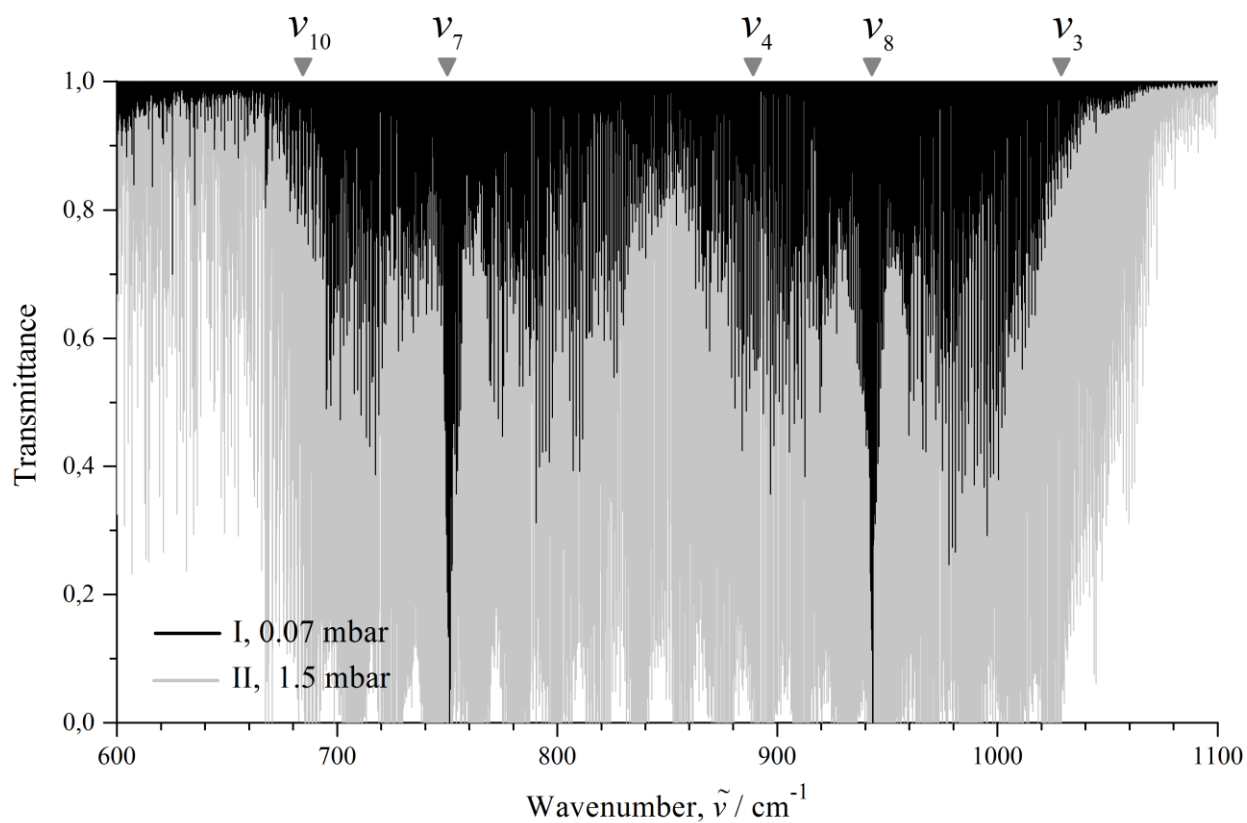


Fig. 1 — Survey spectrum of $\text{CH}_2=\text{CD}_2$ in the region of 600 — 1100 cm^{-1}

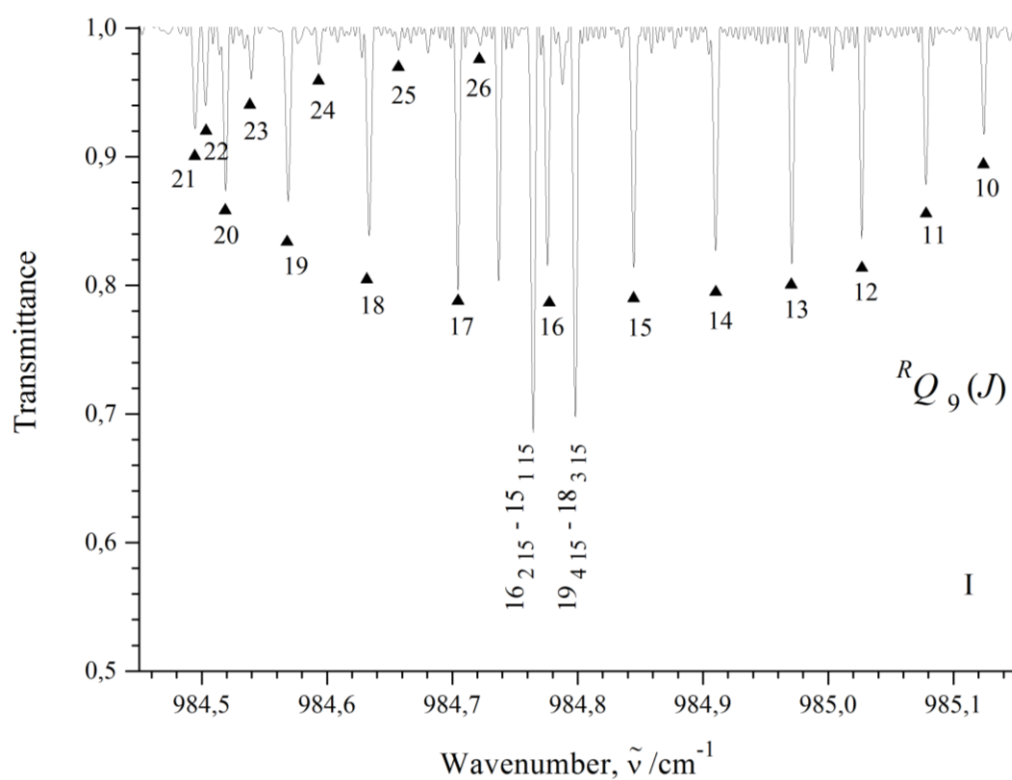


Fig. 2 — Detail of the high resolution experimental spectrum of $\text{CH}_2=\text{CD}_2$ in the Q-branch region of the ν_8 band

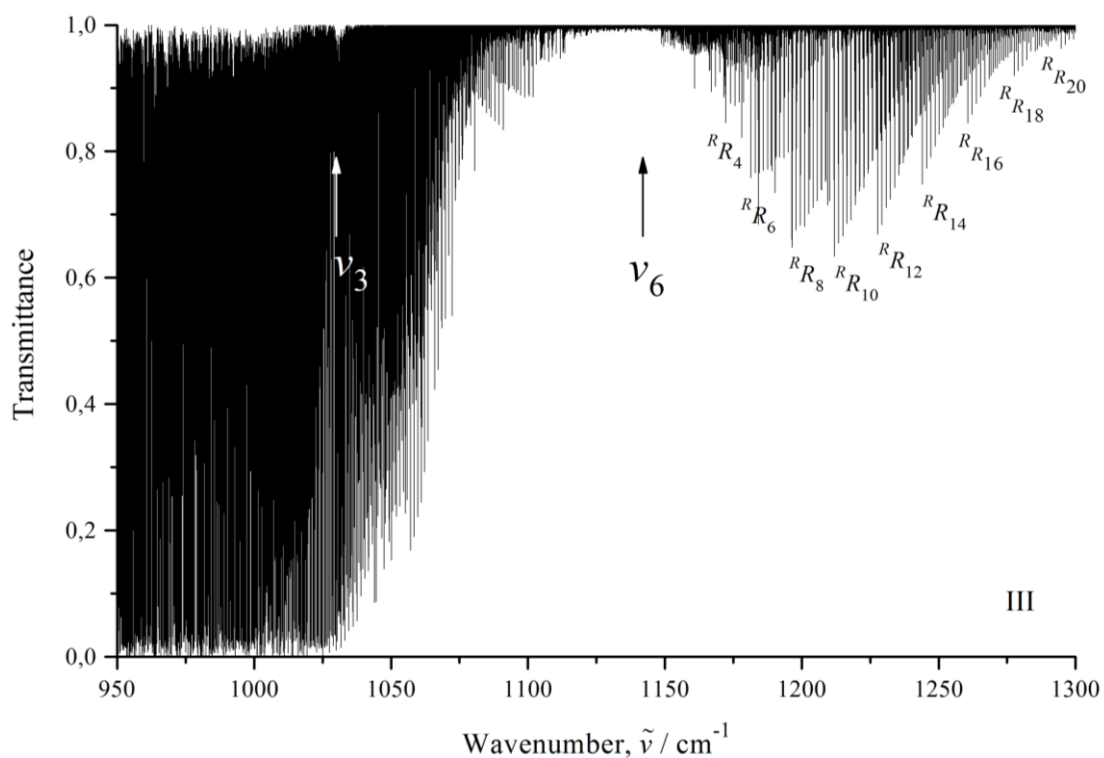


Fig. 3 — Survey spectrum of $\text{CH}_2=\text{CD}_2$ in the region of $950 - 1300 \text{ cm}^{-1}$

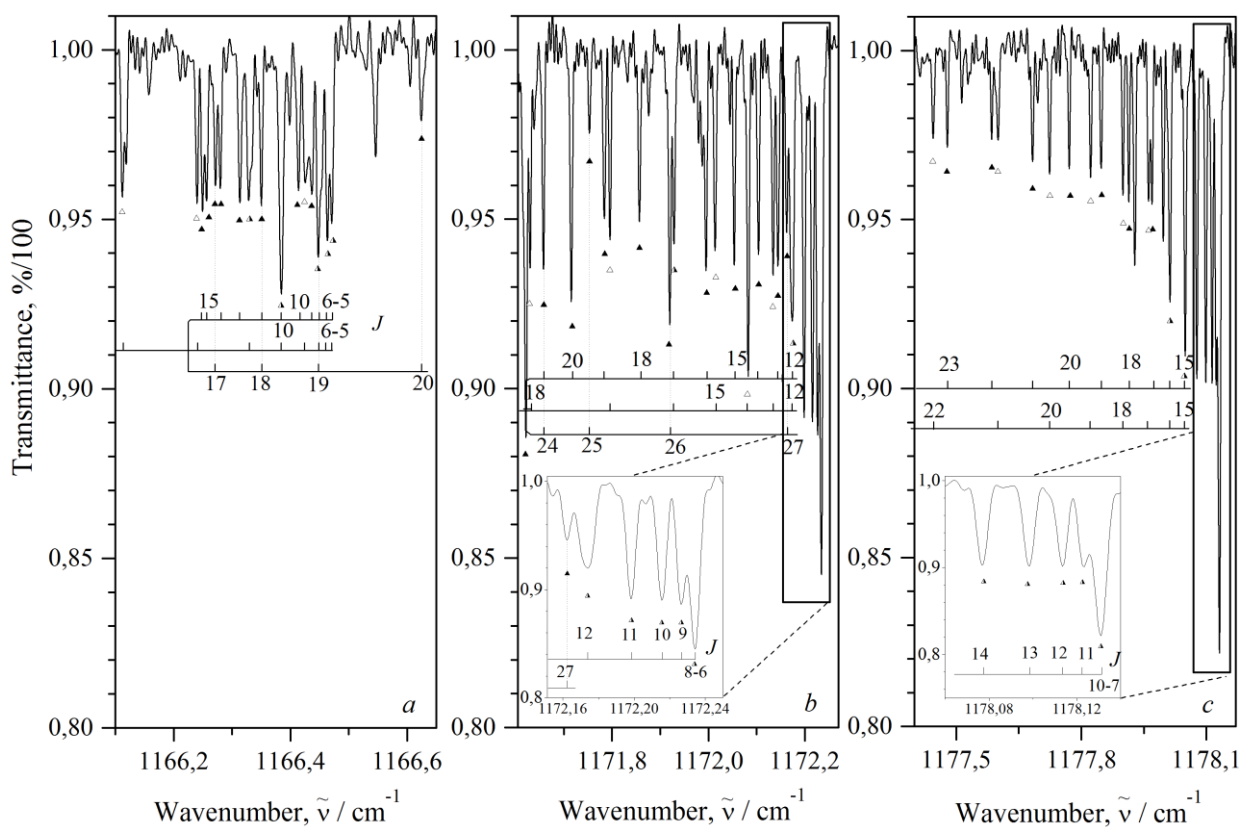


Fig. 4 — Some small fragments of the Q-branch of the ν_6 band (spectrum III). Couples of sets of the ${}^RQ_4(J)$ (a), ${}^RQ_5(J)$ (b), and ${}^RQ_6(J)$ (c) transitions are marked by dark and open triangles

The R-branch of the ν_6 band is clearly pronounced in Fig. 3. From comparison of Figs. 1 and 3 one gets an impression of the relative strengths of the bands ν_6 and ν_8 . As can be seen in Fig. 1, the bands ν_7 and ν_8 are the strongest absorption bands in the discussed region. The ν_{10} , ν_3 and ν_6 bands are considerably weaker than the ν_7 and ν_8 bands. Forbidden band ν_4 cannot be strong absorption band because depends from nearest bands.

Assignment of transitions was made on the basis of the Ground State Combination Differences method. In this case, the ground state rotational energies have been calculated with the parameters from Ref. [21] (parameters of the ground vibrational state from Ref. [21] are reproduced in column 2 of Table 4). As the result of assignment, about 1450, 3170, 3980, 1500 and 1900 transitions with the values of quantum numbers $J^{max.}/K_a^{max.}$ equal to 31/20, 46/18, 50/26, 44/20 and 42/21 were assigned to the bands ν_{10} , ν_7 , ν_8 , ν_3 and ν_6 , which is two times more than in the preceding paper, Ref. [23], where corresponding bands have been considered for the last time (1990) (for more details, see statistical information in Table 2).

Table 2 - Statistical information for the ν_{10} , ν_7 , ν_4 , ν_8 , ν_3 and ν_6 bands of $\text{CH}_2=\text{CD}_2$

Band	Center, cm^{-1}	J^{max}	K_a^{max}	N_{tr}	N_l	m_1	m_2	m_3
1	2	3	4	5	6	7	8	9
ν_{10} (B_1), [23]	684.6418	26	16					
ν_{10} (B_1), this work	684.6410	31	20	1450	519	71.2	17.9	10.9
ν_7 (B_2), [23]	750.5674	37	17					
ν_7 (B_2), this work	750.5677	46	18	3170	798	62.3	30.1	7.6
ν_4 (A_2), [23]	888.71							
ν_4 (A_2), this work	890.4378	33	11	186	39	68.3	9.8	21.9
ν_8 (B_2), [23]	943.4059	35	18					
ν_8 (B_2), this work	943.4057	50	26	3980	1070	82.4	12.9	4.7
ν_3 (A_1), [23]	1029.8560	40	11					
ν_3 (A_1), this work	1029.8555	44	20	1500	714	71.2	20.7	8.1
ν_6 (B_1), [23]	1142.2742	39	18					
ν_6 (B_1), this work	1142.2742	42	21	1900	780	62.4	23.0	14.6
Total, [23]				6308				
Total, this work				12200	3920			
d_{rms} , [23]	$9.3 \times 10^{-4} \text{ cm}^{-1}$							

d_{rms} , this work	$2.3 \times 10^{-4} \text{ cm}^{-1}$					
------------------------------	--------------------------------------	--	--	--	--	--

where N_{tr} is the number of assigned transitions, N_l is the number of obtained upper-state energies, $m_i = n_i / N_l \times 100\%$ ($i=1,2,3$) and n_i are the numbers of upper-state energies for which the differences $\delta = E^{\text{exp}} - E^{\text{calc}}$ satisfy the conditions

$$\delta_1 \leq 2 \times 10^{-4} \text{ cm}^{-1}, 2 \times 10^{-4} \text{ cm}^{-1} < \delta_2 \leq 4 \times 10^{-4} \text{ cm}^{-1} \text{ и } \delta_3 > 4 \times 10^{-4} \text{ cm}^{-1}.$$

The presence of strong resonance interactions between the states ($\nu_4 = 1$) and ($\nu_8 = 1$) allowed us to assign without doubt 186 transitions to the weak band ν_4 for the first time. It is important, that the validity of the assignment is confirmed by the presence of ground state combination differences for all transitions.

The list of assigned transitions is presented in the Supplementary Materials I. From these transitions we obtained 3881 upper ro-vibrational energies for the vibrational states ($\nu_{10} = 1$), ($\nu_7 = 1$), ($\nu_8 = 1$), ($\nu_3 = 1$), ($\nu_6 = 1$). As an illustration, small fragments of the list of obtained energy values are presented in columns 2 of Table 4.

Table 3 - An excerpt of experimental ro-vibrational term values for the ($\nu_{10} = 1$), ($\nu_7 = 1$), ($\nu_8 = 1$), ($\nu_3 = 1$), and ($\nu_6 = 1$) vibrational state of the $\text{CH}_2=\text{CD}_2$ molecule (in cm^{-1}).

Band			ν_{10}		ν_7		ν_8		ν_3		ν_6	
J	K_a	K_c	E	δ	E	δ	E	δ	E	δ	E	δ
1			2	3	2	3	2	3	2	3	2	3
8	0	8			804.0037	0	996.7184	-1	1083.2686	-1	1195.7045	-4
8	1	8			804.7160	1	997.3274	2	1083.8675	1	1196.3543	7
8	1	7			810.8261	-1	1003.4894	1	1090.4735	-1		
8	2	7			815.7030	1	1007.9012	-1	1094.9430	-1	1207.4563	0
8	2	6	750.3856	1	817.3028	0	1009.6137	0	1096.8328	-2	1209.2319	3
8	3	6	761.1428	-1	829.0634	0	1020.5473	0	1108.0673	0	1220.7596	0
8	3	5	761.2821	2	829.1857	0	1020.6900	0	1108.2316	0	1220.9060	0
8	4	5	777.8209	-1	847.0549	0	1037.5023	1	1125.6085	0	1238.6022	-2
8	4	4	777.8251	-1	847.0584	1	1037.5065	-1	1125.6138	0	1238.6067	-2
8	5	4	799.2957	0	870.1829	1	1059.3186	0	1148.1712	0	1261.5540	7
8	5	3	799.2957	0	870.1829	0	1059.3186	-1	1148.1712	0	1261.5540	7
8	6	3	825.5942	1	898.4446	2	1086.0147	0	1175.7724	2	1289.6241	1
8	6	2	825.5942	1	898.4446	2	1086.0147	0	1175.7724	2	1289.6241	1
8	7	2	856.7133	1	931.8091	0	1117.5778	0	1208.3918	1	1322.7942	1
8	7	1	856.7133	1	931.8091	0	1117.5778	0	1208.3918	1	1322.7942	1
8	8	1	892.6555	-2	970.2532	0	1154.0010	1	1246.0154	1	1361.0481	0
8	8	0	892.6555	-2	970.2532	0	1154.0010	1	1246.0154	1	1361.0481	0
9	0	9			816.9826	0	1009.6529	0	1096.1951	1	1208.6519	-7

9	1	9			817.5015	1	1010.0875	0	1096.6178	0	1209.1168	-1
9	1	8			825.0510	0	1017.6879	0	1104.7583	0	1217.0549	-3
9	2	8	762.2422	3	829.3075	1	1021.4896	-1	1108.5828	2	1221.0844	2
9	2	7	764.7084	-6	831.6817	1	1024.0167	0	1111.3635	2	1223.7051	-6
9	3	7			842.9091	1	1034.3951	0	1121.9932	0	1234.6564	2
9	3	6	775.1968	1	843.1495	0	1034.6749	1	1122.3149	1	1234.9433	1
9	4	6	791.5981	5	860.8905	1	1051.3444	0	1139.5305	1	1252.4924	-1
9	4	5	791.6084	-2	860.8994	0	1051.3556	-1	1139.5440	0	1252.5043	3
9	5	5	813.0473	1	883.9915	0	1073.1340	0	1162.0637	1	1275.4154	1
9	5	4	813.0473	-1	883.9915	0	1073.1340	-2	1162.0637	-2	1275.4154	-1
9	6	4	839.3308	1	912.2364	1	1099.8138	0	1189.6468	0	1303.4688	0
9	6	3	839.3308	1	912.2364	1	1099.8138	0	1189.6468	0	1303.4688	0
9	7	3	870.4406	-1	945.5835	-1	1131.3665	0	1222.2551	0	1336.6278	0
9	7	2	870.4406	-1	945.5835	-1	1131.3665	0	1222.2551	0	1336.6278	0
9	8	2	906.3764	0	984.0210	-1	1167.7821	-1	1259.8710	2	1374.8736	-1
9	8	1	906.3764	0	984.0210	-1	1167.7821	-1	1259.8710	2	1374.8736	-1
9	9	1	947.1476	0	1027.5121	2	1209.0549	-1	1302.4799	0	1418.1911	0
9	9	0	947.1476	0	1027.5121	2	1209.0549	-1	1302.4799	0	1418.1911	0

where δ is the difference $E^{exp} - E^{calc}$ in units of 10^{-4} cm^{-1}

The list of the assigned transitions for ($\nu_4 = 1$) is presented in columns 3 of Appendix I together with line transmittances in column 4. The values of upper ro-vibrational energies, which have been obtained from experimental line positions, and corresponding mean values are shown in columns 6 and 7 of Appendix II.

Ro-vibrational analysis of the interacting bands ($\nu_{10} = 1$), ($\nu_7 = 1$), ($\nu_4 = 1$), ($\nu_8 = 1$), ($\nu_3 = 1$) and ($\nu_6 = 1$)

The energy values obtained from the experimental infrared transitions were used then in the weighted fit of parameters of the Hamiltonian. In this case, the initial values of the band centers and the main Coriolis interaction parameters have been estimated on the basis of discussion of Section 2.2. The initial values of the rotational and centrifugal distortion coefficients of all studied vibrational states have been set equal to the values of the corresponding parameters of the ground vibrational state. Of course, it would be reasonable to fix initial values of rotational and centrifugal

distortion parameters to the values known from the literature, Ref. [23]; however, as one can see from the same work (1990) [23] many of the identical parameters belonging to the vibrational states ν_3 , ν_6 , ν_7 , ν_8 and ν_{10} strongly differ from each other (for parameters H_J , H_{JK} and H_{KJ} , even the sign is modified). This means that the parameters are physically unreasonable. As to the state ν_4 , its lines have not been assigned before at all. In such conditions we preferred to fix the initial values of all centrifugal distortion parameters of all vibrational states to the values of corresponding parameters of the ground vibrational state.

Following the statements of the general vibration-rotation theory (that the diagonal block's parameters can differ from corresponding parameters of the ground vibrational state no more than a few percent, see, *e.g.*, Ref. [28]), we varied only band centers, rotational and some of the most important (quartic) centrifugal distortion parameters. If a value of a varied centrifugal distortion parameter was less or even comparable with its 1σ statistical confidence interval, such parameter was constrained to its initial value. To achieve a satisfactory correspondence between theoretical and experimental results, the number of varied resonance interaction parameters is larger than usually used in analogous fits.

Results of the fit with the Hamiltonian are presented in columns 3, 5, 7, 9, 11, and 13 of Table 4 and in Appendix II (values in parentheses are 1σ statistical confidence intervals). The parameters presented without confidence intervals have been constrained to their initially estimated values, as was discussed above. To compare our results with those of the earlier study, columns 4, 6, 8, 10, 12, and 14 of Table 4 present values of spectroscopic parameters reproduced from Ref. [23]. One can see good correlation between parameters obtained in the present study. At the same time, correlation between parameters from Ref. [23] is considerably worse. In this case, our set of varied parameters (36 parameters of the six diagonal blocks and 97 resonance interaction parameters) reproduces the initial experimental data (3920 upper ro-vibrational energy values; about 12200 experimental transitions) with a $d_{rms} = 2.3 \times 10^{-4}$ which is considerably better than the analogous value in Ref. [23]. We would like to note that the relatively large number of resonance interaction

parameters in the model can be explained by the complicated picture of ro-vibrational structures of vibrational states considered in the present study. As an illustration, a small part of ro-vibrational energy levels diagram is shown in Fig. 5.

Table 4 - Spectroscopic parameters of the ($\nu_{10} = 1$), ($\nu_7 = 1$), ($\nu_4 = 1$), ($\nu_8 = 1$), ($\nu_3 = 1$), and ($\nu_6 = 1$) vibrational states of $\text{CH}_2=\text{CD}_2$ (in cm^{-1})

Parameter	(000)	ν_{10}	ν_{10}	ν_7	ν_7
1	2	3	4	5	6
E		684.640950(59)	684.6418	750.567673(32)	750.56743
A	3.2521275	3.2435531(24)	3.263299	3.2687046(19)	3.247939
B	0.856434612	0.8563392(24)	0.856545	0.85576718(81)	0.8557117
C	0.676094350	0.6753319(37)	0.674959	0.6775356(17)	0.6775781
$\Delta_K \times 10^4$	0.406308	0.40143(68)	0.293	0.41324(42)	0.5818
$\Delta_{KJ} \times 10^4$	0.064568	0.064568	0.0097	0.064568	0.1139
$\Delta_J \times 10^4$	0.0109715	0.009843(78)	0.01123	0.011774(66)	0.010770
$\delta_K \times 10^4$	0.069199	0.069199	0.06856	0.069199	0.0709
$\delta_J \times 10^4$	0.00262819	0.00262819	0.0026213	0.002514(34)	0.002398
$H_K \times 10^8$	0.2024	0.2024	0.2024	0.2024	-0.99
$H_{KJ} \times 10^8$	0.00547	0.00547	-0.0067	0.00547	0.134
$H_{JK} \times 10^8$			0.0045		0.0539
$H_J \times 10^8$	0.000050	0.000050	0.00025	.000050	0.00025
$h_K \times 10^8$	-0.1258	-0.1258		-0.1258	
Parameter	ν_4	ν_4	ν_8	ν_8	
1	7	8	9	10	
E	890.4378(36)	888.71	943.405668(27)	943.40593	
A	3.215965(29)	3.2379	3.22494471(78)	3.237216	
B	0.855161(19)	0.860153	0.8521823(11)	0.8520728	
C	0.676866(25)	0.668873	0.67671366(83)	0.6767220	
$\Delta_K \times 10^4$	0.406308	0.40606	0.406308	0.2761	
$\Delta_{KJ} \times 10^4$	0.064568	0.06473	0.06575(55)	0.06091	
$\Delta_J \times 10^4$	0.0109715	0.010967	0.010297(66)	0.010938	
$\delta_K \times 10^4$	0.069199	0.06856	0.069199	0.0607	
$\delta_J \times 10^4$	0.00262819	0.0026213	0.002168(34)	0.002539	
$H_K \times 10^8$	0.2024	0.2054	0.2024	0.338	
$H_{KJ} \times 10^8$	0.00547	-0.0067	0.00547	-0.298	
$H_{JK} \times 10^8$		0.0045		0.0173	
$H_J \times 10^8$	0.000050	0.00025	0.000050	0.00025	
$h_K \times 10^8$	-0.1258		-0.1258		
Parameter	ν_3	ν_3	ν_6	ν_6	
1	11	12	13	14	
E	1029.855466(28)	1029.8560	1124.274186(45)	1142.2742	
A	3.2671044(14)	3.261844	3.2841008(13)	3.273350	
B	0.8578872(17)	0.8580725	0.8569726(11)	0.8569949	
C	0.6754484(23)	0.6749199	0.67393609(98)	0.6743671	

Continue Table 4

$\Delta_K \times 10^4$	0.406308	0.5247	0.406308	0.4546
$\Delta_{KJ} \times 10^4$	0.064568	0.0257	0.07709(15)	0.09884
$\Delta_J \times 10^4$	0.0109715	0.011985	0.011604(55)	0.010788
$\delta_K \times 10^4$	0.069199	0.0883	0.077586(78)	0.0702
$\delta_J \times 10^4$	0.00262819	0.002466	0.002266(19)	0.003133
$H_K \times 10^8$	0.2024	0.2054	0.2024	0.750
$H_{KJ} \times 10^8$	0.00547	0.54	0.00547	-0.551
$H_{JK} \times 10^8$		-0.005		0.0045
$H_J \times 10^8$	0.000050	0.00025	0.000050	0.00025
$h_K \times 10^8$	-0.1258		-0.1258	

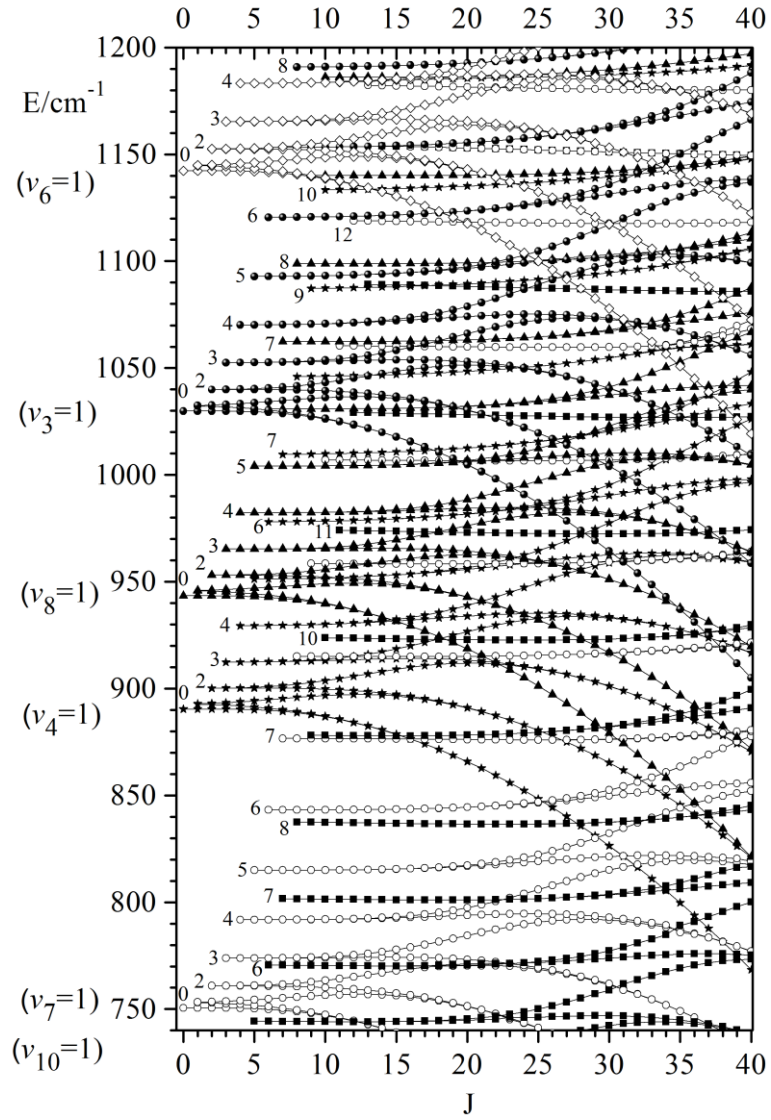


Fig. 5 - Diagram of ro-vibrational energy levels

As it can be seen from Appendix II, the main resonance interaction parameters, ${}^{\nu\tilde{}}C^1$, are presented without confidence intervals. That means, these parameters have not been varied in the fit procedure, but have been constrained to the values theoretically estimated on the basis of the isotopic substitution relations. It has been made because an attempts to vary the ${}^{\nu\tilde{}}C^1$ parameters led to large physically unsuitable changes of their values, but, at the same time, to negligible improvement of the d_{rms} value. In this regard, it would be interesting to compare the values of the $\zeta_{\lambda\mu}^\alpha$ -constants extracted from the ${}^{\nu\tilde{}}C^1$ parameters of the present paper with those calculated from *ab initio* methods [33]. Results of such a comparison are presented in Table 5. One can see more than satisfactory correspondence of both sets of data.

Table 5 - Values of some $\zeta_{\lambda\mu}^\alpha$ Coriolis coefficients of $\text{CH}_2=\text{CD}_2$.

α	λ, μ	^a	[33] ^b	α	λ, μ	^a	[33] ^b	α	λ, μ	^a	[33] ^b
1	2	3	4	1	2	3	4	1	2	3	4
z	7, 10	0.37	0.41	x	4, 10	-0.82	0.82	y	4, 7	0.0	0.0
z	8, 10	0.21	0.19	x	4, 6	0.35	0.34	y	4, 8	0.0	0.0
z	6, 7	-0.25	0.24	x	3, 7	0.64	0.64	y	3, 10	-0.15	0.19
z	6, 8	0.42	0.47	x	3, 8	0.06	0.02	y	3, 6	-0.30	0.25
z	3, 4	-0.25	0.28								

It is denoted, $z \equiv A$, $x \equiv B$, $y \equiv C$. ^a – Estimated on the basis of isotopic relations, ^b – Estimated on the basis of *ab initio* methods.

To illustrate the quality of the analysis, values of differences between experimental and calculated values of the individual ro-vibrational energy values are shown in columns 3 of Tables 3 and column 8 of Appendix I. One can see good correspondence between the experimental and calculated values. To give more possibility to judge the quality of the results, Fig. 6 shows the fit residuals for line positions as a function of the quantum number J which demonstrates a good agreement between the experimental and calculated results.

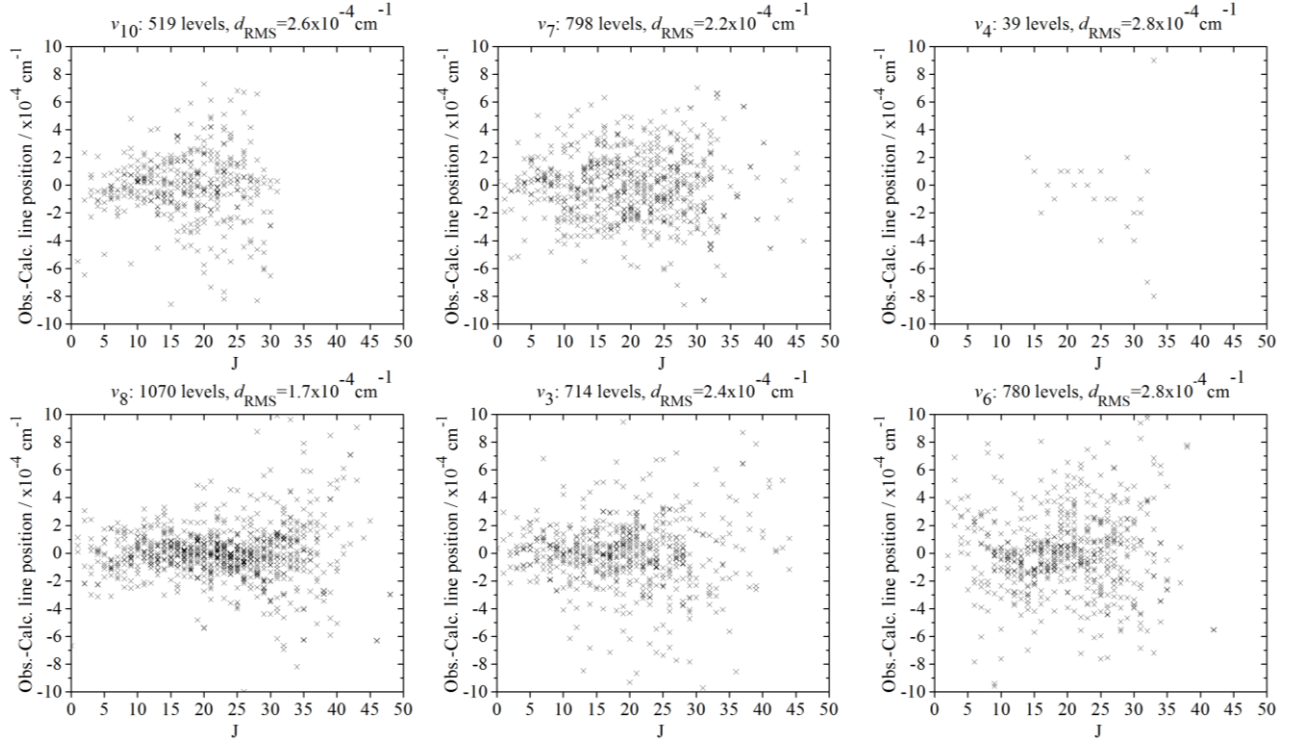


Fig. 6 - Observed – calculated line positions and fit statistics for the ($\nu_{10} = 1$), ($\nu_7 = 1$), ($\nu_4 = 1$), ($\nu_8 = 1$), ($\nu_3 = 1$), and ($\nu_6 = 1$) vibrational states of $\text{CH}_2=\text{CD}_2$

As was mentioned above, the lines of the ν_4 band are appeared in the experimental spectrum only because of strong Coriolis interaction between the ($\nu_4 = 1$) and ($\nu_8 = 1$) vibrational states. In this case, extent of borrowing of intensity by the lines of the ν_4 band from the lines of the ν_8 band can be estimated on the basis of an analysis of mixing coefficients in the wave-functions of ro-vibrational states:

$$[J \ K_a \ K_c](\nu_4 = 1) = \sum_{\tilde{K}} C_{J\tilde{K}}^4 |\nu_4 = 1\rangle |J\tilde{K}\rangle + \sum_{\tilde{K}} C_{J\tilde{K}}^8 |\nu_8 = 1\rangle |J\tilde{K}\rangle$$

As an illustration, Table 8 presents the values of $C^4 = \sum_{\tilde{K}} (C_{J\tilde{K}}^4)^2$ and $C^8 = \sum_{\tilde{K}} (C_{J\tilde{K}}^8)^2$, which characterize contribution of the vibrational states ($\nu_4 = 1$) and ($\nu_8 = 1$), respectively, to the concrete ro-vibrational function. From comparison of values in the 3 and 4 columns of Table 6 one can see large mixing of the states and, as the consequence, large borrowing of intensity by the lines of the ν_4 band from the ν_8 band.

Table 6 - Distribution coefficients, C^4 and C^8 , of some ro-vibrational wave functions of the ($\nu_4 = 1$) vibrational state of $\text{CH}_2=\text{CD}_2$ on the interacting vibrational states ($\nu_4 = 1$) and ($\nu_8 = 1$)

J	K_a	K_c	E	C^4	C^8	J	K_a	K_c	E	C^4	C^8
1			2	3	4	1			2	3	4
14	11	d	1345.5229	0.97	0.03	24	11	d	1645.9313	0.78	0.22
15	11	d	1368.6580	0.96	0.04	25	11	d	1684.3696	0.82	0.18
16	11	d	1393.3371	0.95	0.05	26	11	d	1724.3526	0.84	0.16
17	11	d	1419.5603	0.93	0.07	27	11	d	1765.8846	0.86	0.14
18	11	d	1447.3241	0.89	0.11	29	11	d	1853.6121	0.88	0.12
19	11	d	1476.6246	0.82	0.18	30	11	d	1899.8134	0.89	0.11
20	11	d	1507.4530	0.72	0.28	31	11	d	1947.5772	0.91	0.09
21	11	d	1539.7987	0.57	0.43	32	11	d	1996.9057	0.94	0.06
22	11	d	1573.6563	0.59	0.41	33	11	d	2047.8034	0.96	0.04
23	11	d	1609.0300	0.72	0.28	25	5	21	1457.7041	0.69	0.31

where index d denotes couple of the K_c quantum numbers, $K_c=J-K_a$ and $K_c=J-K_a+1$

Appendix I. List of transitions belonging to the ν_4 band of the $\text{CH}_2=\text{CD}_2$ molecule

Upper			Lower			Line position	I , %	Upper energy, cm^{-1}	Mean value, cm^{-1}	δ
J	K_a	K_c	J'	K'_a	K'_c					
1			2			3	4	5	6	7
14	11	d	14	11	d	884.4530	88.2	1345.5227	1345.5229	2
			13	11	d	905.9335	96.0	1345.5226		
			14	9	d	983.3832	89.9	1345.5234		
15	11	d	15	11	d	884.5692	80.2	1368.6580	1368.6580	1
			14	11	d	907.5888	85.6	1368.6585		
			15	9	d	983.4670	90.7	1368.6579		
			14	9	d	1006.5173	71.9	1368.6576		
16	11	d	16	9	d	766.1432	80.8	1393.3368	1393.3371	-2
			16	11	d	884.6905	69.6	1393.3378		
			15	11	d	909.2481	77.3	1393.3369		
			17	9	d	957.4082	78.3	1393.3367		
			15	9	d	1008.1465	55.6	1393.3374		
17	11	d	18	11	d	857.1741	79.0	1419.5603	1419.5603	0
			17	11	d	884.8149	77.6	1419.5610		
			16	11	d	910.9129	86.0	1419.5602		
			16	9	d	1009.7734	46.2	1419.5598		
18	11	d	18	11	d	884.9380	66.6	1447.3242	1447.3241	-1
			17	11	d	912.5775	80.4	1447.3236		
			17	9	d	1011.3960	35.9	1447.3244		
19	11	d	20	11	d	854.3302	51.6	1476.6246	1476.6246	1
			19	11	d	885.0562	53.0	1476.6248		
			18	11	d	914.2383	79.7	1476.6245		
			19	9	d	983.7661	42.0	1476.6246		
			18	9	d	1013.0063	94.0	1476.6248		
20	11	d	21	11	d	852.8886	36.6	1507.4533	1507.4530	1
			20	11	d	885.1582	50.7	1507.4526		
			19	11	d	915.8843	65.2	1507.4529		
			21	9	d	951.4573	76.6	1507.4533		
			19	9	d	1014.5946	89.3	1507.4530		
21	11	d	22	13	d	733.1275	94.9	1539.7979	1539.7987	-1
			22	11	d	851.4180	40.9	1539.7989		
			21	11	d	885.2340	31.9	1539.7987		
			20	11	d	917.5041	69.8	1539.7985		
			22	9	d	949.9013	69.2	1539.7990		
			21	9	d	983.8026	91.0	1539.7986		
			20	9	d	1016.1484	87.0	1539.7987		
22	11	d	23	11	d	849.9125	92.7	1573.6565	1573.6563	1
			22	11	d	885.2758	86.9	1573.6567		
			21	11	d	919.0913	61.9	1573.6560		
			23	9	d	948.2988	64.8	1573.6565		
			22	9	d	983.7583	92.4	1573.6560		
			21	9	d	1017.6602	84.9	1573.6563		

23	11	d	24	11	d	848.3745	93.8	1609.0300	1609.0300	-2
			23	11	d	885.2859	92.9	1609.0299		
			23	9	d	983.6722	91.2	1609.0297		
			22	9	d	1019.1327	83.8	1609.0303		
24	11	d	23	13	d	803.9606	90.7	1645.9311	1645.9313	-1
			25	11	d	846.8142	93.9	1645.9312		
			24	11	d	885.2759	86.9	1645.9315		
			23	11	d	922.1872	70.0	1645.9313		
			24	9	d	983.5533	87.8	1645.9313		
			23	9	d	1020.5737	86.2	1645.9313		
25	11	d	26	11	d	845.2399	36.1	1684.3695	1684.3696	-3
			25	11	d	885.2528	92.7	1684.3697		
			24	11	d	923.7137	67.2	1684.3694		
			25	9	d	983.4079	90.4	1684.3696		
			24	9	d	1021.9915	86.6	1684.3696		
26	11	d	27	11	d	843.6576	44.1	1724.3525	1724.3526	-1
			26	11	d	885.2233	93.1	1724.3528		
			26	9	d	983.2412	91.8	1724.3522		
			25	9	d	1023.3909	87.7	1724.3527		
27	11	d	28	13	d	724.2786	68.9	1765.8850	1765.8846	-2
			28	11	d	842.0700	45.8	1765.8846		
			27	11	d	885.1897	42.9	1765.8846		
			26	11	d	926.7546	72.0	1765.8842		
			27	9	d	983.0554	19.1	1765.8847		
			26	9	d	1024.7730	90.6	1765.8842		
29	11	19	30	11	19	838.8880	50.4	1853.6122	1853.6121	-3
			29	11	19	885.1215	49.9	1853.6118		
			28	11	17	929.7973	69.4	1853.6120		
			28	9	19	1027.4932	92.6	1853.6125		
29	11	18	30	11	20	838.8880	50.4	1853.6122	1853.6119	0
			29	11	18	885.1215	49.9	1853.6118		
			28	11	18	929.7973	69.4	1853.6120		
			28	9	20	1027.4932	92.6	1853.6115		
30	11	20	31	11	20	837.2959	51.4	1899.8133	1899.8134	-2
			30	11	20	885.0885	57.3	1899.8127		
			29	11	18	931.3225	60.4	1899.8130		
			31	9	22	934.3608	81.9	1899.8134		
			30	9	22	982.3899	67.3	1899.8138		
			29	9	20	1028.8299	94.8	1899.8139		
30	11	19	31	11	21	837.2959	51.4	1899.8133	1899.8127	-4
			30	11	19	885.0885	57.3	1899.8127		
			29	11	19	931.3225	60.4	1899.8130		
			31	9	23	934.3666	81.9	1899.8132		
			30	9	21	982.3846	50.9	1899.8118		
			29	9	21	1028.8299	94.8	1899.8121		
31	11	21	32	13	19	718.4457	86.9	1947.5780	1947.5772	-2

			32	11	21	835.7043	50.8	1947.5766		
			32	9	23	932.5125	91.0	1947.5769		
			30	11	19	932.8527	80.7	1947.5769		
			30	9	21	1030.1505	40.3	1947.5777		
31	11	20	32	13	20	718.4457	86.9	1947.5780	1947.5769	2
			32	11	22	835.7043	50.8	1947.5766		
			30	11	20	932.8527	80.7	1947.5769		
			31	9	22	982.1236	65.9	1947.5762		
32	11	22	31	13	18	816.9769	95.9	1996.9057	1996.9057	-9
			33	11	22	834.1146	77.4	1996.9053		
			32	11	22	885.0329	69.6	1996.9051		
			31	11	20	934.3891	54.1	1996.9065		
			32	9	24	981.8517	70.2	1996.9057		
32	11	21	31	13	19	816.9769	95.9	1996.9057	1996.9056	1
			33	11	23	834.1146	77.4	1996.9053		
			32	11	21	885.0329	69.6	1996.9052		
			31	11	21	934.3891	54.1	1996.9065		
			32	9	23	981.8412	68.3	1996.9056		
33	11	23	34	11	23	832.5287	81.3	2047.8036	2047.8034	-9
			33	11	23	885.0126	14.3	2047.8032		
			32	11	21	935.9314	87.9	2047.8037		
			33	9	25	981.5534	74.4	2047.8030		
33	11	22	34	11	24	832.5287	81.3	2047.8035	2047.8035	9
			33	11	22	885.0126	14.4	2047.8033		
			32	11	22	935.9314	87.9	2047.8037		
25	5	21	26	3	23	878.7354	30.0	1457.7040	1457.7041	1
			26	1	25	932.9476	52.2	1457.7041		
			25	3	23	941.6049	8.9	1457.7043		
			24	3	21	958.2741	54.7	1457.7042		
			24	1	23	1005.9384	12	1457.7040		

The notation $[J K_a d]$ means the couple of degenerated or almost degenerated states $[J K_a K_c = J - K_a]$ and $[J K_a K_c = J - K_a + 1]$. $\delta = E^{exp} - E^{calc}$ (10^{-4} cm^{-1}) – is the difference between the experimental value of upper energy from column 7 and corresponding value calculated with the parameters from Tables 4 and Appendix II.

Appendix II. Resonance interaction parameters for the states ($v_3 = 1$), ($v_7 = 1$), ($v_8 = 1$), ($v_4 = 1$), ($v_{10} = 1$) and ($v_6 = 1$) of $\text{CH}_2=\text{CD}_2$ obtained from the fit (in cm^{-1})

Parameter	Value	Parameter	Value
$^{1,2}C^1 \equiv (2B\zeta^*)^{1,2}$	1.1	$^{1,2}C_K^1 \times 10^3$	-0.1100(35)
$^{1,2}C_J^1 \times 10^4$	-0.3132(86)	$^{1,2}C_{KJ}^1 \times 10^6$	-0.1332(54)
$^{1,2}C_{JJ}^1 \times 10^8$	0.232(22)	$^{1,2}C_{KKJ}^1 \times 10^9$	0.450(21)
$^{1,2}C_{KJJ}^1 \times 10^{10}$	0.330(33)		
$^{1,2}C^2 \times 10^2$	-0.2936(86)	$^{1,2}C_J^2 \times 10^4$	-0.923(24)
$^{1,2}C_{KK}^2 \times 10^8$	-0.772(41)	$^{1,2}C_{KJ}^2 \times 10^8$	0.746(36)
$^{1,2}C_{JJ}^2 \times 10^8$	0.2457(86)		
$^{1,3}C^1 \equiv (2B\zeta^*)^{1,3}$	0.1	$^{1,3}C_J^1 \times 10^4$	0.612(44)
$^{1,3}C_{JJ}^1 \times 10^7$	-0.232(10)	$^{1,3}C_{JJJ}^1 \times 10^{11}$	0.732(25)
$^{1,3}C^2 \times 10^3$	0.8410(77)	$^{1,3}C_J^2 \times 10^5$	0.2999(83)
$^{1,3}C_{KJ}^2 \times 10^8$	0.101(10)	$^{1,3}C_{JJ}^2 \times 10^9$	-0.487(31)
$^{1,3}C_{KJJ}^2 \times 10^{11}$	-0.1118(73)		
$^{2,3}F_J \times 10^2$	0.1948(88)	$^{2,3}F_{xy} \times 10^2$	0.3148(44)
$^{2,3}F_{Kxy} \times 10^5$	-0.2213(84)	$^{2,3}F_{Jxy} \times 10^5$	-0.1121(71)
$^{2,3}F_{KJxy} \times 10^8$	0.401(20)	$^{2,3}F_{JJxy} \times 10^9$	0.338(23)
$^{2,3}F_{KKJxy} \times 10^{11}$	-0.823(27)	$^{2,3}F_{KJJxy} \times 10^{12}$	-0.964(52)
$^{1,4}C^1 \equiv (2A\zeta^z)^{1,4}$	-1.6	$^{1,4}C_K^1 \times 10^3$	0.19252(72)
$^{1,4}C_J^1 \times 10^4$	-0.892(19)	$^{1,4}C_{KKK}^1 \times 10^{10}$	-0.831(72)
$^{1,4}C_{KKJ}^1 \times 10^{10}$	0.917(68)		
$^{1,4}C^2 \times 10^3$	0.7636(95)	$^{1,4}C_K^2 \times 10^5$	-0.1365(85)
$^{2,4}C_{KK}^1 \times 10^6$	0.7249(87)	$^{2,4}C_{JJ}^1 \times 10^7$	0.1863(54)
$^{2,4}C_{KKJ}^1 \times 10^9$	-0.464(22)	$^{2,4}C_{KJJ}^1 \times 10^{10}$	0.639(49)
$^{2,4}C^2 \times 10^2$	1.2517(59)	$^{2,4}C_{KJ}^2 \times 10^8$	-0.534(32)
$^{2,4}C_{KJJ}^2 \times 10^{11}$	0.227(18)	$^{2,4}C_{JJJ}^2 \times 10^{12}$	0.782(44)
$^{3,4}C_K^1 \times 10^4$	0.379(31)	$^{3,4}C_J^1 \times 10^4$	-0.1850(84)

${}^{3,4}C^1_{KK}\times 10^6$	-0.1145(86)	${}^{3,4}C^1_{KJ}\times 10^7$	-0.346(29)
${}^{3,4}C^1_{JJ}\times 10^8$	-0.125(25)	${}^{3,4}C^1_{KKK}\times 10^9$	-0.334(26)
${}^{3,4}C^2\times 10^3$	-0.276(22)	${}^{3,4}C^2_{KKK}\times 10^{11}$	-0.353(20)
${}^{3,4}C^2_{KJJ}\times 10^{12}$	0.755(43)		
${}^{1,5}C^I\equiv(2C\zeta^y)^{1,5}$	-0.2		
${}^{2,5}C^I\equiv(2A\zeta^z)^{2,5}$	2.4	${}^{2,5}C^I_J\times 10^3$	-0.11402(99)
${}^{2,5}C^1_{KK}\times 10^7$	-0.2016(94)	${}^{2,5}C^1_{KJ}\times 10^7$	0.2151(94)
${}^{2,5}C^1_{JJ}\times 10^7$	0.1095(70)	${}^{2,5}C^1_{JJJ}\times 10^{11}$	-0.947(52)
${}^{2,5}C^2\times 10^2$	0.7069(81)	${}^{2,5}C^2_K\times 10^5$	0.5279(85)
${}^{2,5}C^2_J\times 10^6$	0.6654(84)	${}^{2,5}C^2_{KK}\times 10^7$	-0.196(11)
${}^{2,5}C^2_{KJ}\times 10^8$	-0.765(18)	${}^{2,5}C^2_{KKK}\times 10^{10}$	0.244(49)
${}^{2,5}C^2_{KKJ}\times 10^{10}$	0.349(13)	${}^{2,5}C^2_{KJJ}\times 10^{11}$	0.1008(37)
${}^{3,5}C^I\equiv(2A\zeta^z)^{3,5}$			
${}^{4,5}C^I\equiv(2B\zeta^x)^{4,5}$	-1.4	${}^{4,5}C^I_K\times 10^3$	0.2105(35)
${}^{4,5}C^1_{KK}\times 10^6$	0.1656(81)	${}^{4,5}C^1_{KJ}\times 10^8$	-0.1526(44)
${}^{4,5}C^1_{JJ}\times 10^7$	0.367(38)	${}^{4,5}C^1_{KKK}\times 10^9$	0.312(18)
${}^{4,5}C^1_{KKJ}\times 10^9$	0.305(17)		
${}^{4,5}C^2\times 10^1$	-0.3925(15)	${}^{4,5}C^2_J\times 10^5$	0.8650(89)
${}^{4,5}C^2_{KJ}\times 10^7$	-0.1161(27)	${}^{4,5}C^2_{JJ}\times 10^9$	0.316(94)
${}^{4,5}C^2_{KKK}\times 10^{10}$	0.1493(62)	${}^{4,5}C^2_{JJJ}\times 10^{12}$	0.647(54)
${}^{1,6}C^I\equiv(2C\zeta^y)^{1,6}$	-0.4	${}^{1,6}C^I_J\times 10^5$	-0.592(31)
${}^{1,6}C^1_{KK}\times 10^6$	-0.780(67)	${}^{1,6}C^1_{KJ}\times 10^7$	-0.942(27)
${}^{1,6}C^1_{JJ}\times 10^8$	0.309(14)		
${}^{1,6}C^2\times 10^2$	-0.3089(51)	${}^{1,6}C^2_K\times 10^5$	-0.2170(89)
${}^{1,6}C^2_J\times 10^5$	0.2931(80)		
${}^{2,6}C^I\equiv(2A\zeta^z)^{2,6}$	1.6	${}^{2,6}C^I_{KJ}\times 10^7$	0.258(12)
${}^{2,6}C^1_{JJ}\times 10^7$	-0.786(26)		

${}^{2,6}C^2 \times 10^6$	-0.33(59)	${}^{2,6}C^2_{KJ} \times 10^7$	0.1458(36)
${}^{2,6}C^2_{KKJ} \times 10^{10}$	-0.159(10)		
${}^{3,6}C^I \equiv (2A\zeta^*)^{3,6}$	-2.7	${}^{3,6}C^I_K \times 10^3$	0.158232(99)
${}^{3,6}C^I_{JJ} \times 10^8$	-0.517(36)		
${}^{3,6}C^2 \times 10^3$	0.496(10)	${}^{3,6}C^2_J \times 10^6$	0.583(25)
${}^{3,6}C^2_{KJJ} \times 10^{12}$	-0.343(22)	${}^{3,6}C^2_{JJJ} \times 10^{12}$	-0.1078(48)
${}^{4,6}C^I \equiv (2B\zeta^*)^{4,6}$	0.6		
${}^{5,6}F_J \times 10^2$	0.5426(95)	${}^{5,6}F_{KJ} \times 10^5$	0.2473(93)
${}^{5,6}F_{xy} \times 10^3$	0.895(84)	${}^{5,6}F_{Jxy} \times 10^6$	-0.951(71)