

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

Физико-технический институт
Направление подготовки 03.03.02 «Физика»
Кафедра общей физики

БАКАЛАВРСКАЯ РАБОТА

Тема работы
Анализ полос $\nu_1 + \nu_2$, $\nu_2 + \nu_3$ колебательно-вращательного спектра молекулы $^{32}\text{S}^{16}\text{O}^{18}\text{O}$ в диапазоне 1550-1950 cm^{-1}

УДК 539.194:661.811:544.17

Студент

Группа	ФИО	Подпись	Дата
ОБЗ1	Васильев К.С.		

Руководитель

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Профессор каф. ОФ ФТИ	Бехтерева Е.С.	д.ф.-м.н., профессор		

КОНСУЛЬТАНТЫ:

По разделу «Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение»

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Доцент каф. Мен.	Меньшикова Е.В.	к.ф.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 – 2017 г.

ПЛАНИРУЕМЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ ОБУЧЕНИЯ ПО ООП

Код результата	Результат обучения (компетенции выпускника)
Общекультурные (универсальные) компетенции	
P1	Способен самостоятельно приобретать новые знания, использовать современные образовательные и информационные технологии, совершенствовать и развивать свой профессиональный уровень, поддерживать здоровый образ жизни
P2	Способен к поиску, обработке и интерпретации с использованием современных информационных технологий данных, необходимых для формирования суждений по соответствующим социальным, научным и этическим проблемам как в коллективе, так и индивидуально (на родном и иностранном языке)
P3	Способен критически переосмысливать свой накопленный социальный и профессиональный опыт, изменять при необходимости профиль своей профессиональной деятельности, следовать этическим и правовым нормам и нести ответственность за последствия своей инженерной деятельности
Профессиональные компетенции	
P4	Способен к овладению и применению базовых знаний в области естественных наук и математики для решения профессиональных задач, к усвоению основных педагогических моделей, форм и приемов педагогического воздействия на личность; закономерностей педагогического мастерства
P5	Способен применить в проектах по тематике, заданной заинтересованными организациями, экспериментальные методы исследования конденсированного состояния вещества, методы анализа поверхности твердых тел и тонких пленок
P6	Способен применить в проектах по тематике, заданной заинтересованными организациями, современную электронику в электрофизических и плазменных установках, а также учесть взаимодействие излучения и плазмы с веществом, современные достижения водородной энергетики и плазменных технологий
P7	Способен применить в проектах по тематике, заданной заинтересованными организациями, базовые естественнонаучные и математические знания при получении и исследовании наноматериалов
P8	Способен понимать сущность и значение информации в развитии современного информационного общества, к применению на практике полученных знаний при обработке, анализе и синтезе полученных физических данных в соответствии с профилем профессиональной деятельности

Код результата	Результат обучения (компетенции выпускника)
Р9	Способен понимать и использовать на практике теоретические основы планирования и организации физических исследований, представлять результаты и применять на практике методы управления в сфере природопользования
Р10	Способен формировать суждения о значении и последствиях своей профессиональной деятельности с учетом социальных, правовых, этических и природоохранных аспектов, при необходимости применить ресурсо- и энергосберегающие технологии

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

Физико-технический институт
 Направление подготовки 03.03.02 «Физика»
 Кафедра общей физики

УТВЕРЖДАЮ:
 Зав. кафедрой

 (Подпись) _____
 (Дата) Лидер А.М.
 (Ф.И.О.)

ЗАДАНИЕ
на выполнение выпускной квалификационной работы

В форме:

Бакалаврской работы

Студенту:

Группа	ФИО
ОБ31	Васильеву Кириллу Сергеевичу

Тема работы:

Анализ полос $\nu_1 + \nu_2$, $\nu_2 + \nu_3$ колебательно-вращательного спектра молекулы $^{32}\text{S}^{16}\text{O}^{18}\text{O}$ в диапазоне $1550\text{-}1950\text{ см}^{-1}$	
Утверждена приказом директора (дата, номер)	

Срок сдачи студентом выполненной работы:	
--	--

ТЕХНИЧЕСКОЕ ЗАДАНИЕ:

Исходные данные к работе	Объект исследования: Изотополог молекулы диоксида серы
Перечень подлежащих исследованию, проектированию и разработке вопросов	Обзор литературы. Интерпретация спектра молекулы $^{32}\text{S}^{16}\text{O}^{18}\text{O}$. Решение обратной спектроскопической задачи, получение спектроскопических постоянных.

	Раздел «Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение». Раздел «Социальная ответственность».
Перечень графического материала	
Консультанты по разделам выпускной квалификационной работы	
Раздел	Консультант
Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение	Меньшикова Е.В.
Социальная ответственность	Федорчук Ю.М.
Названия разделов, которые должны быть написаны на русском и иностранном языках:	

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

Задание выдал руководитель:

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

Задание принял к исполнению студент:

Группа	ФИО	Подпись	Дата
0Б31	Васильев К.С.		

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

Физико-технический институт
Направление подготовки (специальность) 03.03.02 «Физика»
Уровень образования бакалавриат
Кафедра общей физики
Период выполнения осенний / весенний семестр 2016/2017 учебного года

Форма представления работы:

Бакалаврская работа

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

Срок сдачи студентом выполненной работы:

Дата контроля	Название раздела (модуля) / вид работы (исследования)	Максимальный балл раздела (модуля)
01.03.17	Обзор литературы	10
15.03.17	Объект и методы исследования; Расчеты и аналитика	20/20
20.04.17	Результаты проведенного исследования	30
29.05.17	Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение	10
30.05.17	Социальная ответственность	10

Составил преподаватель:

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Профессор каф. ОФ	Бехтерева Е.С.	д.ф.-м.н., профессор		

СОГЛАСОВАНО:

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

**ЗАДАНИЕ ДЛЯ РАЗДЕЛА
«СОЦИАЛЬНАЯ ОТВЕТСТВЕННОСТЬ»**

Студенту:

Группа	ФИО
0БЗ1	Васильеву Кириллу Сергеевичу

Тема дипломной работы: Анализ полос $\nu_1 + \nu_2$, $\nu_2 + \nu_3$ колебательно-вращательного спектра молекулы $^{32}\text{S}^{16}\text{O}^{18}\text{O}$ в диапазоне 1550-1950 cm^{-1}

Институт	Физико-технический	Кафедра	Общей физики
Уровень образования	бакалавр	Направление/специальность	Физика / Физика конденсированного состояния вещества

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
(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 потребного 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).
4. 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
5. 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
0Б31	Васильев К.С.		

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

Студенту:

Группа 0Б31	ФИО Васильеву Кириллу Сергеевичу
----------------	-------------------------------------

Институт	Физико-технический	Кафедра	Общей физики
Уровень образования	бакалавр	Направление/специальность	Физика / Физика конденсированного состояния вещества

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

1. Стоимость ресурсов научного исследования (НИ): материально-технических, энергетических, финансовых, информационных и человеческих	Амортизационные отчисления – 5335 руб., стоимость электроэнергии – 1096 руб., заработная плата – 221 898 руб. и отчисления на социальные нужды – 60 135 руб.
2. Нормы и нормативы расходования ресурсов	Нормы амортизации – 20%, нормы премии по счету заработной платы – 0,3; коэффициент доплат и надбавок – 0,2; районный коэффициент – 1,3; коэффициент дополнительной зарплаты – 12%
3. Используемая система налогообложения, ставки налогов, отчислений, дисконтирования и кредитования	Отчисления во внебюджетные фонды – 27,1%

Перечень вопросов, подлежащих исследованию, проектированию и разработке:

1. Оценка коммерческого потенциала, перспективности и альтернатив проведения НИ с позиции ресурсоэффективности и ресурсосбережения	Потенциальные потребители результатов исследования Разработка анализа конкурентоспособности Выполнение SWOT-анализа проекта.
2. Планирование и формирование бюджета научных исследований	Составление календарного плана проекта. Определение бюджета НИ
3. Определение ресурсной (ресурсосберегающей), финансовой, бюджетной, социальной и экономической эффективности исследования	Проведение оценки ресурсной и финансовой эффективности исследования.

Перечень графического материала (с точным указанием обязательных чертежей):

1. Оценка конкурентоспособности технических решений
2. Матрица SWOT
3. График проведения и бюджет НИ
4. Оценка ресурсной, финансовой эффективности НИ

Дата выдачи задания для раздела по линейному графику

Задание выдал консультант:

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Доцент каф. МЕН	Меньшикова Е.В.	канд. филос. наук		

Задание принял к исполнению студент:

Группа	ФИО	Подпись	Дата
0Б31	Васильев К. С.		

РЕФЕРАТ

Выпускная квалификационная работа содержит 78 страниц, 10 рисунков, 20 таблиц, 56 источников, 1 приложение.

Ключевые слова: Молекулярная спектроскопия, спектры высокого разрешения, спектроскопические параметры, молекула $^{32}\text{S}^{16}\text{O}^{18}\text{O}$.

Объектом исследования является изотополог молекулы диоксида серы.

Целью работы является исследование экспериментального спектра высокого разрешения молекулы $^{32}\text{S}^{16}\text{O}^{18}\text{O}$ в диапазоне 1550-1950 cm^{-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 1050 и 1570 колебательно-вращательных переходов для $\nu_1 + \nu_2$ и $\nu_2 + \nu_3$ соответственно. По итогам решения обратной спектроскопической задачи был получен набор из 16 параметров (колебательных, вращательных и параметров центробежного искажения различных порядков). Данный набор параметров воспроизводит исходные экспериментальные колебательно-вращательные энергии с ошибкой $d_{rms} = 3.7 \times 10^{-4} \text{ cm}^{-1}$.

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.....	13
1 Обзор литературы	15
1.1 Предыдущие исследования.....	15
1.2 Математическая формулировка задачи	16
1.2.1 Теория возмущений	16
1.2.2 Метод эффективных операторов.....	17
1.3 Описание и принцип работы Фурье-спектрометра	20
2 Объект и методы исследования.....	26
2.1 Общая информация о молекуле.....	26
2.2 Экспериментальный спектр	27
2.3 Метод комбинационных разностей.....	30
2.4 Модель эффективного гамильтониана	31
3 Расчеты и аналитика	34
3.1 Определение спектроскопических параметров	34
4 Результаты проведенного исследования	37
4.1 Определение энергий и спектроскопических параметров	37
5 Социальная ответственность	39
5.1 Анализ выявленных вредных факторов проектируемой производственной среды	39
5.2 Анализ выявленных опасных факторов производственной среды .	48
6 Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение	55
6.1 Потенциальные потребители результатов исследования	55

6.2 Анализ конкурентных технических решений.....	56
6.3 Оценка коммерческого и инновационного потенциала НТИ	57
6.4 Планирование процесса управления НТИ: структура и график проведения, бюджет, риски и организация закупок.....	59
6.4.1 Планирование научно-исследовательских работ	59
6.4.2 Организационная структура проекта.....	60
6.4.3 Составление календарного плана проекта	61
6.4.4 Бюджет научного исследования.....	62
6.5 Оценка сравнительной эффективности исследования.....	66
Заключение	70
Список используемой литературы	71
Приложение А	77

Введение

Спектроскопия является основным источником количественной информации о квантово-механических характеристиках объектов микромира. В частности, методы молекулярной спектроскопии дают возможность изучить структуру и внутреннюю динамику молекул. В последнее время в связи с развитием и внедрением в технику эксперимента лазерных и Фурье-спектрометров увеличился поток новой высокоточной спектроскопической информации, что позволяет в свою очередь более детально изучать физические процессы и явления, происходящие в молекуле. В связи с этим, использование спектроскопических данных широко распространено для решения задач атмосферной оптики, астрофизики и ряда других научных и технических проблем. Исследование спектров имеет большое значение для ученых в области химии, которые занимаются вопросами изучения структуры молекул, кинетики химических реакций, природы химических связей и пр.

Достаточно полные сведения о молекулах возможно получить, к примеру, решив соответствующее уравнение Шредингера. Но в настоящее время решение полного колебательно-вращательного уравнения Шредингера для многоатомной молекулы невозможно. В силу этого возникает необходимость поиска других путей количественного определения параметров потенциальных функций, характеризующих внутреннюю динамику молекул. Одним из эффективных способов решения этой задачи является интерпретация экспериментальных спектроскопических данных на основе представлений о процессах, протекающих в молекуле. Как следствие, понимание этих механизмов является наиважнейшим условием получения корректной количественной информации.

Данная работа посвящена анализу спектров высокого разрешения молекулы диоксида серы SO_2 .

Диоксид серы относится к веществам, загрязняющим атмосферу. SO_2 – газ, образующийся при сгорании серосодержащих видов топлива, а так же при различных производственных процессах [1]. В атмосфере диоксид серы

реагирует с водным паром, в следствие чего образуется вторичный загрязнитель – серная кислота H_2SO_4 [2,3]. В общем, SO_2 является одним из самых важных веществ в атмосферном цикле Земли [4]. Детальное знание тонкой структуры спектра поглощения диоксида серы в инфракрасной области необходимо для решения таких проблем, как, например, дистанционный контроль, лазерное зондирование и пр. [5]. Изучение спектров высокого разрешения молекулы SO_2 также важно и для планетологии, например, для исследования химического состава атмосферы Венеры, где содержание диоксида серы в сотни тысяч раз выше, чем в атмосфере Земли [6,7]. В связи с этим, становится понятна актуальность спектроскопических исследований молекулы SO_2 во всевозможных областях, включающих микроволновую, инфракрасную и субмиллиметровую [8,5].

Для более полного изучения молекулы становится необходимым исследование как можно большего количества изотопологов данной молекулы, так как их изучение позволяет получать еще более точные значения спектроскопических параметров с помощью теории изотопозамещения.

Целью настоящей работы является исследование колебательно-вращательного спектра высокого разрешения молекулы $^{32}\text{S}^{16}\text{O}^{18}\text{O}$ в диапазоне 1550-1950 cm^{-1} .

В соответствии с целью были поставлены следующие задачи:

- интерпретация колебательно-вращательного спектра молекулы $^{32}\text{S}^{16}\text{O}^{18}\text{O}$ в диапазоне 1550-1950 cm^{-1} ;
- определение параметров модели и решение обратной спектроскопической задачи.

1 Обзор литературы

1.1 Предыдущие исследования

Исследование диоксида серы и всевозможных изотопологов проводилось во всем мире с момента начала развития Фурье-спектроскопии. Современные технологии способны регистрировать спектры высокого разрешения и обладают точностью до 10^{-5} см⁻¹. Это значение на несколько порядков выше того, что было в начале развития спектроскопии. Экспериментальная точность важна, так как она влияет напрямую на точность определения энергетических структур молекулы.

Наиболее распространенная модификация диоксида серы, SO₂, исследовалась гораздо чаще её изотопологов. Ежегодно международная база пополняется информацией об этой молекуле [9-11,13,14]. Тем не менее, ввиду необходимости уточнения поверхности потенциальной энергии, нужна как можно более полная информация обо всех возможных изотопологах.

В продолжение предшествующим исследованиям [9-19], акцент был сделан на спектральный диапазон 1550-1950 см⁻¹, где расположены полосы колебательных состояний $\nu_1 + \nu_2$ и $\nu_2 + \nu_3$. Ранее, спектры высокого разрешения в данном диапазоне обсуждались в работах [20-24] для изотополога ³²S¹⁶O₂. Затем, в работе [25] был проведен анализ для молекулы ³⁴S¹⁶O₂. Наконец, в работе [26] исследование проводилось для ³²S¹⁸O₂. Исследуемый в данной работе изотополог ³²S¹⁶O¹⁸O занимает третье место по распространенности среди изотопологов диоксида серы, сразу после ³²S¹⁶O₂ и ³⁴S¹⁶O₂. Следовательно, наблюдать его в спектре атмосфер планет вполне ожидаемо. Несмотря на это, до этого момента изотополог ³²S¹⁶O¹⁸O изучали крайне редко [27-33]. Колебательные состояния $\nu_1 + \nu_2$ и $\nu_2 + \nu_3$ ранее не рассматривались вообще, что отражает актуальность и новизну исследования.

1.2 Математическая формулировка задачи

1.2.1 Теория возмущений

Получение точного решения уравнения Шредингера представляется возможным только для простых систем молекул [34], например, водорода H_2^+ . При решении задач для сложных молекул появляется необходимость в использовании теории возмущения.

Выбирается гамильтониан системы в виде

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

где $H_0(a)$ – оператор, с которым известно решение уравнения Шредингера; $h(a)$ – малая добавка к оператору; a – переменные, от которых гамильтониан зависит. Однако, колебательно-вращательный гамильтониан возможно представить и другим образом

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

где $H_n(k^n)$ – оператор порядка малости k^n в отношении оператора H_0 .

Формально возможно отождествить операторы $\sum_{n=1}^{\infty} H_n(k^n)$ и h , а затем решать уравнение Шредингера с использованием традиционной теории возмущений. Но у данных операторов есть важное отличие, которое не дает так поступить. Суть в том, что оператор h должен являться функцией таких же координат, что и оператор начального приближения. Одновременно, операторы $H_n(k^n)$, рассматриваемые в теории молекул, являются функциями дополнительных переменных, помимо тех, от которых зависит оператор начального приближения H_0 .

В качестве H_0 для решения колебательно-вращательной задачи стоит выбрать в чистом виде колебательный оператор. Следовательно, оператор h должен будет зависеть не только от колебательных, но и от вращательных координат. Тогда выражение (1) примет вид

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

В теории возмущений Рэлея-Шредингера, поправки к собственным энергиям и волновым функциям находятся в виде суммы комбинаций матричных элементов. Вместе с этим, элементы матриц операторов возмущения на собственных функциях оператора представляют собой операторы, а не числа. При этом, эти операторы не коммутируют, следовательно, появляются неэрмитовы вклады в оператор энергии. Поэтому неприемлемо использование результатов классической теории возмущений для данных молекулярных задач. В связи с этим, используется метод эффективных операторов [35].

1.2.2 Метод эффективных операторов

Вкратце, суть метода может быть выражена следующим образом.

Пусть уравнение Шредингера с данным гамильтонианом невозможно решить. Следовательно, нужно построить эрмитов оператор H' , такой что:

- можно определить решение уравнения Шредингера в явном виде;
- множество B' всех решений с оператором H' совпадет с подмножеством B множества A всех решений с исходным оператором H .

Такой оператор H' называется эффективным гамильтонианом на подмножестве B .

Для рассмотрения возьмем гамильтониан вида (3). Предположим E_α и $|\alpha\rangle$ – собственные функции и значения оператора H_0 . При этом, $|\alpha\rangle$ – полный ортонормированный набор функций в зависимости от переменных a . Возьмем произвольный набор функций $|i\rangle$ в зависимости от переменных b и соответствующий условиям ортонормированности и полноты. Следовательно функции $|\alpha, i\rangle = |\alpha\rangle |i\rangle$ будут образовывать полный набор ортонормированных функций в гильбертовом пространстве. Так как в этом пространстве действует оператор (2), то функции можно рассматривать как базис данного пространства. Тогда задача определения собственных функций и значений оператора (2) решается таким образом: строится матрица эрмитова

оператора H на функциях $|\alpha\rangle |i\rangle$, и далее она диагонализируется с помощью унитарного преобразования

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

Элементы диагонализированной матрицы H' будут являться собственными значениями оператора H , а собственные функции $|\beta\rangle$ будут заданы следующим соотношением

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

где $U_{\beta,\alpha i}$ – элементы унитарной матрицы U , которая диагонализует исходную. Как следствие, при выборе соответственного набора функций $|i\rangle$, задача может быть разрешена. Тем не менее, решение задач в спектроскопии молекул по данной схеме не представляется возможным ввиду образования бесконечномерного базиса собственными функциями оператора начального приближения $|\alpha\rangle$. Ввиду этого, все остальные матрицы становятся бесконечномерными. В результате этого нет возможности диагонализировать матрицу H с помощью вышеописанной процедуры.

Построение и диагонализацию матрицы H возможно разбить на следующие этапы:

- построение матрицы $\langle \alpha | H | \beta \rangle$ на функциях $|\alpha\rangle$, где величины $\langle \alpha | H | \beta \rangle$ – операторы, зависящие от переменных b ;
- последующее построение и диагонализация матрицы $\langle i | \langle \alpha | H | \beta \rangle | j \rangle$.

Исходя из этого, можно сказать, что все элементы операторной матрицы $\langle \alpha | H | \beta \rangle$, в общем случае, будут отличны от нуля. Тогда, если построить матрицу $\langle i | \langle \alpha | H | \beta \rangle | j \rangle$, то определение собственных функций и значений оператора H будет сведено к описанной ранее (4), (5) процедуре обыкновенной диагонализации.

Так же есть другой путь – использовать вместо H оператор

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

где G – произвольный унитарный оператор, выбранный таким образом, чтобы он был мал по сравнению с единичным оператором. Данное условие легко выполняется, если

$$G = \exp(i \sum_{n=1}^{\infty} g_n(k^n)),$$

где $g_n = g_n(a, b)$ – малые эрмитовы операторы порядка k^n . Затем происходит построение матрицы $\langle \alpha | H' | \beta \rangle$. Так как оператор G произвольный, имеет смысл взять его в виде, таком что некоторые элементы $\langle \alpha | H' | \beta \rangle$ будут обращены в ноль. Для этого необходимо разбить пространство L_α волновых функций $|\alpha\rangle$ на два подпространства L_{α_0} и $L_{\alpha'}$ таким образом, что $L_\alpha = L_{\alpha_0} + L_{\alpha'}$.

При этом важным моментом является конечномерность пространства L_{α_0} .

Следовательно, все множество элементов матрицы $\langle \alpha | H' | \beta \rangle$ будет разбито на четыре совокупности: $\langle \alpha^0 | H' | \beta^0 \rangle$, $\langle \alpha^0 | H' | \beta' \rangle$, $\langle \alpha' | H' | \beta^0 \rangle$, $\langle \alpha' | H' | \beta' \rangle$.

Оператор следует выбрать так, чтобы элементы типа $\langle \alpha^0 | H' | \beta' \rangle$ или $\langle \alpha' | H' | \beta^0 \rangle$ были обращены в ноль.

$$\langle \alpha | H' | \beta \rangle = \begin{pmatrix} \widetilde{H_{\text{эфф}}} & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & \dots & x & x & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & \dots & x & x & \dots \end{pmatrix}.$$

Теперь, если построить матрицу чисел $\langle i | \langle \alpha | H' | \beta \rangle | j \rangle$, она будет иметь такой же вид. Собственные значения оператора H' , а, как следствие, и H , могут быть определены путем диагонализации данной матрицы.

Собственные значения являются корнями уравнения вида $\det(A - Ex) = 0$, где E – единичная матрица, A – произвольная матрица. Поскольку определитель при перестановке строк и столбцов не меняется, матрица $\langle \alpha | H' | \beta \rangle$ может быть приведена к блочно-диагональному виду. Следовательно, вся матрица $\langle i | \langle \alpha | H' | \beta \rangle | j \rangle$ разбивается на две независимые подматрицы. Их последующая диагонализация проводится независимо. Главным моментом

является то, что подматрица $\langle i | H'_{эфф} | j \rangle$ – конечномерна по индексам $|\alpha \rangle$ и $|\beta \rangle$. В таком случае, интерес к уровням энергии, порождаемым состояниями $|\alpha^0 \rangle$ не вызывает необходимости проводить диагонализацию всей матрицы $\langle i | \langle \alpha | H' | \beta \rangle | j \rangle$. Достаточным является рассмотрение подматрицы $\langle i | H'_{эфф} | j \rangle$, где $H'_{эфф} = \langle \alpha^0 | H' | \beta^0 \rangle$.

Оператор $H'_{эфф}$ называется эффективным оператором системы N состояний $|\alpha^0_1 \rangle, |\alpha^0_2 \rangle, \dots, |\alpha^0_N \rangle$.

$$H^{кол-вращ} = \sum_{\nu, \tilde{\nu}}^2 |\nu \rangle \langle \tilde{\nu} | H^{\tilde{\nu}\nu},$$

где суммирование ведется по всем колебательным состояниям.

1.3 Описание и принцип работы Фурье-спектрометра

Фурье-спектрометр представляет из себя интерферометр Майкельсона, который освещается исследуемым излучением. Одно из двух зеркал движется с постоянной скоростью. На выходе получается кривая зависимости отсчета детектора от разности хода лучей в плечах интерферометра. Полученная кривая затем подвергается Фурье-анализу [36], посредством которого она преобразуется в распределение интенсивности по частотам.

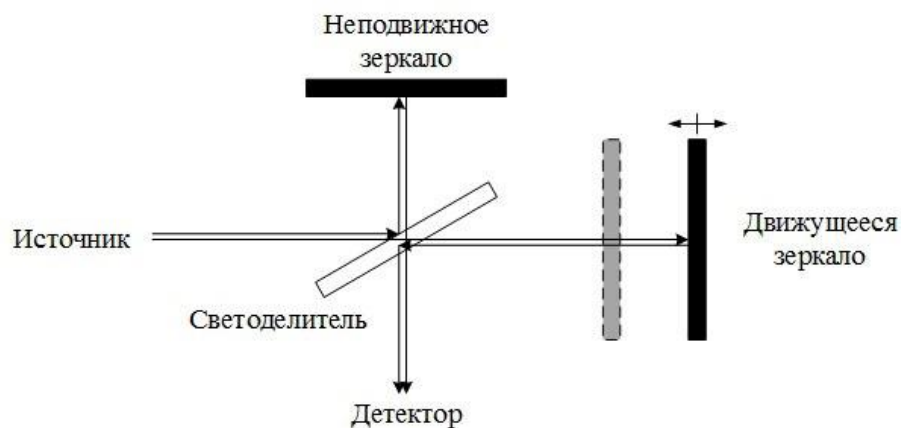


Рисунок 1 – Основа Фурье-спектрометра – интерферометр Майкельсона

При отражении обеих лучей от зеркал происходит их последующее наложение и, как следствие, интерференция. Положение плоскости локализации картины интерференции, а также результат интерференции зависят от того, каковы были условия освещения светоделителя, как располагались зеркала относительно друг друга и прочих факторов.

Чтобы зарегистрировать интенсивность, необходимо направить сигнал на детектор, который связан с аналого-цифровым преобразователем (АЦП) через усилитель. АЦП затем преобразует сигнал в цифровой код. На выходе получается массив, являющийся интерферограммой источника. Данный массив впоследствии обрабатывается при помощи Фурье-преобразования.

Для получения спектра необходимо пройти через два этапа. В первую очередь нужно зарегистрировать интерферограмму исследуемого излучения. Далее, при помощи Фурье-преобразования интерферограммы, можно вычислить спектр. Одним из основных отличий Фурье-спектрометра от иных спектрометров является возможность одновременной регистрации сразу всего исследуемого спектра. Модуляция интенсивности монохроматических частей излучения в Фурье-спектрометрии происходит в силу изменения разности хода интерферирующих пучков. Частота модуляции однозначно определяется длиной волны [37]. При этом, на приемнике возникает сигнал, представляющий собой Фурье-преобразование от функции распределения энергии по частотам, т.е. от спектра. Чтобы получить обычный спектр, нужно произвести обратное преобразование Фурье.

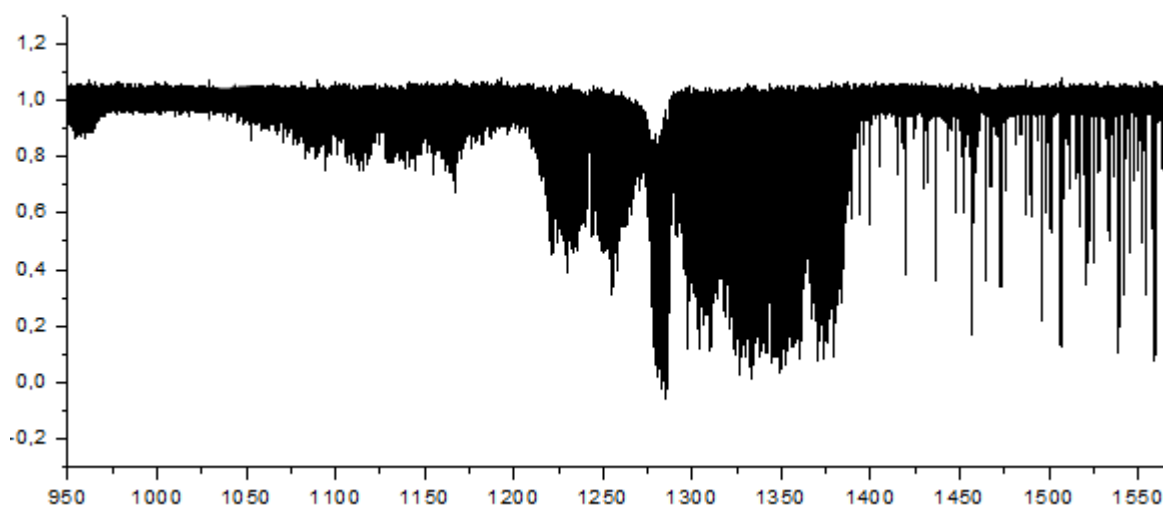


Рисунок 2 – Пример спектра молекулы SO_2 получаемого при помощи Фурье-спектрометра

Если интерферометр Майкельсона освещается монохроматическим излучением на частоте ν_0 , электрическое поле на плоскости светоделителя запишется как [38]:

$$E_1 = E_0 \cos \omega t, \quad (7)$$

где $\omega = 2\pi \nu$.

Светоделитель разделяет падающий свет на два луча с одинаковой интенсивностью, после чего обе волны отражаются от зеркал (зафиксированного и подвижного) и при смещении волн на компенсирующей пластине образуется временная задержка t_0 одной волны относительно другой.

Результирующее электрическое поле:

$$E_2 = \frac{E_0}{2} [\cos \omega t + \cos \omega(t + t_0)], \quad (8)$$

где

$$\omega t_0 = 2\pi \nu_0 \delta \quad (9)$$

– набег фазы второго луча, δ – разность хода.

Детектор, помещенный на выходе интерферометра, будет регистрировать сигнал $I(\nu_0, \delta)$, пропорциональный квадрату амплитуды электрической волны:

$$I(\nu_0, \delta) = \frac{1}{2} I_0 [1 + \cos(2\pi \nu_0 \delta)]. \quad (10)$$

Он состоит из постоянной и переменной частей, последняя часть и представляет собой интерферограмму. Таким образом, при облучении интерферометра монохроматическим излучением на выходе приемника имеем синусоидальный электрический сигнал с постоянной амплитудой, которая пропорциональна яркости падающего излучения. Если интерферометр осветить несколькими монохроматическими волнами, каждая из них будет распространяться в интерферометре аналогично и результирующий сигнал будет представлять собой суперпозицию отдельных сигналов от каждой волны. Анализ этого сигнала позволит выделить частоту каждого падающего сигнала ν_0 .

В случае произвольного спектра $B(\nu)$, лежащего в диапазоне между ν_1 и ν_2 , ограниченного либо самим спектром излучения, либо фильтром, либо чувствительностью детектора, интерферограмма будет иметь вид:

$$I(\delta) = \int_{\nu_1}^{\nu_2} B(\nu) \cos(2\pi\nu\delta) d\nu, \quad (11)$$

что представляет собой сумму интенсивностей $dI(\nu_1, \delta) = B(\nu) \cos(2\pi\nu\delta)$ для каждого спектрального элемента в спектре.

Если $B(\nu)$ – спектр излучения точечного источника, то интерферограмма выражается соотношением:

$$I(\delta) = \int_0^{\infty} B(\nu) \cos(2\pi\nu\delta) d\nu = \int_{-\infty}^{\infty} B_q(\nu) \cos(2\pi\nu\delta) d\nu, \quad (12)$$

где $B_q(\nu)$ – четная часть функции $B(\nu)$ – определяется выражением:

$$B_q(\nu) = \frac{1}{2}(B(\nu) + B(-\nu)). \quad (13)$$

Для восстановления спектра по интерферограмме необходимо осуществить обратное преобразование Фурье

$$B(\nu) = \int_{-\infty}^{\infty} I(\delta) \cos(2\pi\nu\delta) d\delta. \quad (14)$$

Для того, чтобы получить спектр пробы, нужно зарегистрировать при одинаковых условиях интерферограмму эталона $B_{\text{эт.}}(\nu)$ и интерферограмму с пробой $B_{\text{проба}}(\nu)$. Спектром пропускания пробы (T) будет являться отношение их Фурье-образов:

$$T = \frac{B_{\text{проба}}(\nu)}{B_{\text{эт.}}(\nu)}. \quad (15)$$

Спектр, который регистрируется в отсутствие пробы называется спектром сравнения или эталонным. Следует отметить, что Фурье-спектрометр является однолучевым прибором. Поэтому, спектр сравнения представляет из себя спектр излучения теплового источника, на который наложен спектр поглощения паров воды, углекислого газа или других веществ, которые возможно находятся в атмосфере [39]. Эти же полосы регистрируются и в спектре пробы, но при делении спектра пробы на эталонный, в результате остается только поглощение пробы.

В наше время изготавливаются Фурье-спектрометры быстрого сканирования. В них точное положение оптических параметров (оптическая разность хода, положение подвижного зеркала и скорость перемещения) контролируется при помощи гелий-неонового лазера. Применение технологий нашего века позволяет делать Фурье-спектрометры компактными и недорогими.

Преимуществами Фурье-спектрометра являются [40]:

1. Выигрыш Фелжета – в Фурье-спектрометре за каждый момент времени информация регистрируется сразу на всем интервале. Исходя из этого, Фурье-спектрометр имеет более высокую величину соотношения сигнал/шум;

2. Выигрыш Жакино - в Фурье-спектрометре допускается использование больших телесных углов у источника и приемника. Это позволяет увеличить пропускание энергии при высоком разрешении;

3. Постоянное разрешение во всем исследуемом диапазоне. Разрешение обычного спектрометра определяется шириной щели и дифракцией на ней световых волн. В интерферометре разрешение равно величине, обратной максимальной разности хода в интерферограмме;

4. Высокая точность определения волновых чисел. В Фурье-спектрометрии нет необходимости во внешних стандартах для градуировки шкалы волновых чисел. Вместо этого, в них используется внутренний стандарт. Например, им может быть одночастотный газовый лазер, используемый для калибровки разности хода по счету полос интерференции при регистрации интерферограммы. Точность определения, достигаемая при это, крайне высока;

5. Широкий диапазон спектра. За один проход зеркала получается интерферограмма, содержащая информацию о всем коротковолновом (5000 – 400 см^{-1}) диапазоне для используемого светодетектора. Чтобы перейти в длинноволновую область (менее 400 см^{-1}), достаточно сменить светодетектор, источник излучения и приёмник;

6. Способность регистрировать слабые сигналы. Высокая величина пропускания энергии и возможность улучшения отношения сигнал/шум при помощи накопления интерферограмм дает возможность получать спектры отличного качества.

2 Объект и методы исследования

2.1 Общая информация о молекуле

Молекула $^{32}\text{S}^{16}\text{O}^{18}\text{O}$ является изотопологом молекулы диоксида серы SO_2 . Как говорилось ранее, изучение изотопологов необходимо для уточнения спектроскопических параметров материнской молекулы. Данный изотополог представляет особый интерес ввиду его низкой симметрии, а, следовательно, большего количества разрешенных переходов.

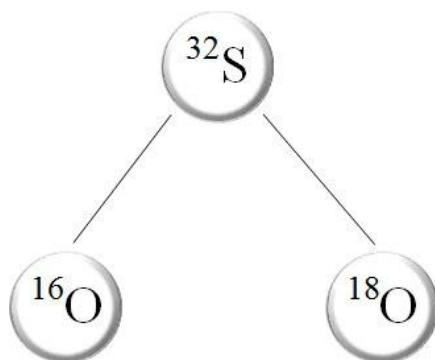


Рисунок 3 – Модель молекулы

Молекула представляет из себя асимметричный волчок со значениями параметра асимметрии

$$k = \frac{2B - A - C}{A - C} \cong -0.945$$

Молекула принадлежит точечной группе симметрии C_s , как следствие:

– все три колебательные координаты q_1, q_2, q_3 симметричны и все колебательные состояния молекулы $^{32}\text{S}^{16}\text{O}^{18}\text{O}$ являются состояниями симметрии A' ;

– в A -редукции и I^r представлении [41-44], три компоненты оператора углового момента, J_x, J_y , и J_z , преобразуются в соответствии с неприводимыми представлениями, A'', A' и A'' соответственно. В соответствии с этими же неприводимыми представлениями, A'', A' и A'' , преобразованы величины k_{zx}, k_{zy}, k_{zz} .

– следовательно, как в любой молекуле данного типа [45-47], любое колебательное состояние молекулы $^{32}\text{S}^{16}\text{O}^{18}\text{O}$ является гибридным состоянием. Симметрией молекулы разрешены переходы как a –, так и b – типа.

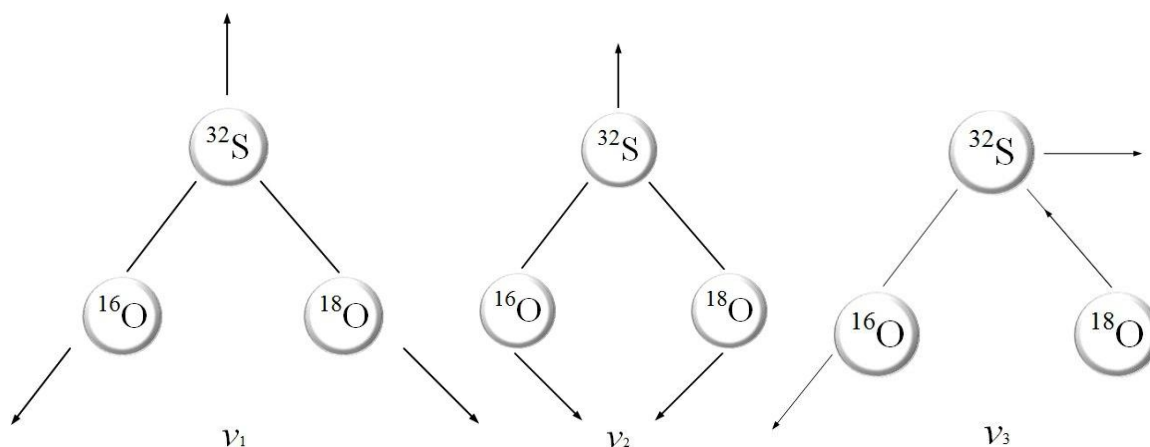


Рисунок 4 – Нормальные колебания, рассматриваемые в работе

Правила отбора для любого колебательного состояния молекулы в данном случае следующие:

$$dJ = 0, \pm 1;$$

$$dK_a = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3, \dots;$$

$$dK_c = \pm 1, \pm 3, \dots$$

2.2 Экспериментальный спектр

Исследуемый спектр был впервые получен при помощи Фурье-спектрометра Брюкер ИКФС 120 ВР в лаборатории Брауншвейга, Германия. Регистрация проводилась в течение 39 часов при температуре $25 \pm 0.5^\circ\text{C}$ и давлении 450 паскалей. Оптическая длина пути составляла 24 метра. В качестве калибровочного газа был использован оксид азота. Для регистрации спектра использовались окна и светоделитель из бромида калия и полупроводниковый детектор ртуть-кадмий-теллур. В качестве источника использовался глобар. Глобар представляет из себя стержень, изготовленный из карбида кремния.

Спектр поглощения был получен делением высокоразрешенного одноканального спектра на калибровочный спектр с более низким разрешением, составляющим 0.1 см^{-1} . Оптическое разрешение спектра составило 0.0025 см^{-1} . Определено оно было выражением $0.9 \times \frac{1}{d_{\text{МОПП}}}$, где $d_{\text{МОПП}}$ – максимальная оптическая разность хода. Доплеровское уширение пика при 298.15 градусах Кельвина имело величину между 0.0023 см^{-1} (в районе 1500 см^{-1}) и 0.0030 см^{-1} (в районе 2000 см^{-1}). Уширение пика под влиянием давления в 450 паскалей составило 0.0015 см^{-1} . Приведенная величина свидетельствует о том, что давление оказало приемлемое влияние на форму и ширину пиков. Следовательно, данное уширение должно быть учтено. Исходя из вышесказанного, общая ширина пиков имеет значение в интервале между 0.0034 см^{-1} и 0.0040 см^{-1} .

Спектр в области $1550\text{-}1950 \text{ см}^{-1}$ представлен на рисунке 5.

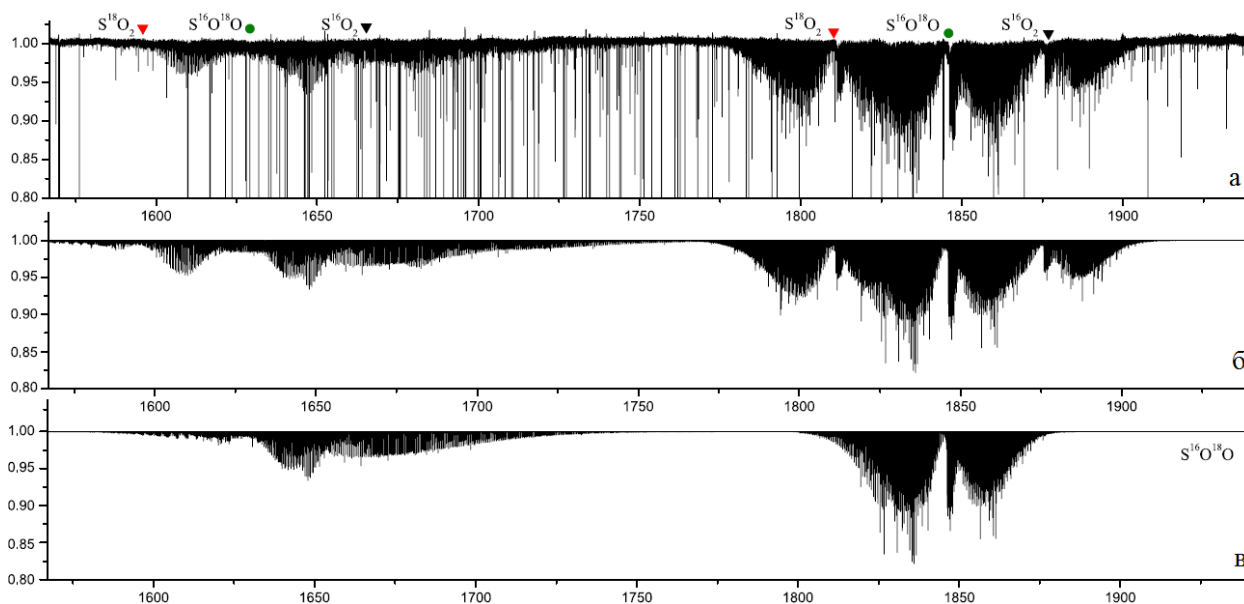


Рисунок 5 – а) экспериментальный спектр; б) моделированный спектр; в) моделированные полосы $\nu_1 + \nu_2$ и $\nu_2 + \nu_3$ изотополога $^{32}\text{S}^{16}\text{O}^{18}\text{O}$. По оси абсцисс отложено волновое число, по оси ординат – пропускание

Отмечены состояния трех изотопологов: $^{32}\text{S}^{16}\text{O}_2$, $^{32}\text{S}^{18}\text{O}_2$ и $^{32}\text{S}^{16}\text{O}^{18}\text{O}$. Четко видны P –, Q –, R – ветки состояния $\nu_2 + \nu_3$ в районе 1850 см^{-1} и Q –, R – ветки

состояния $\nu_1 + \nu_2$ в области 1650 см^{-1} . P – ветка состояния $\nu_1 + \nu_2$ видна плохо. Для демонстрации качества экспериментального спектра представлен рисунок б, отображающий малый фрагмент Q – ветки состояния $\nu_2 + \nu_3$.

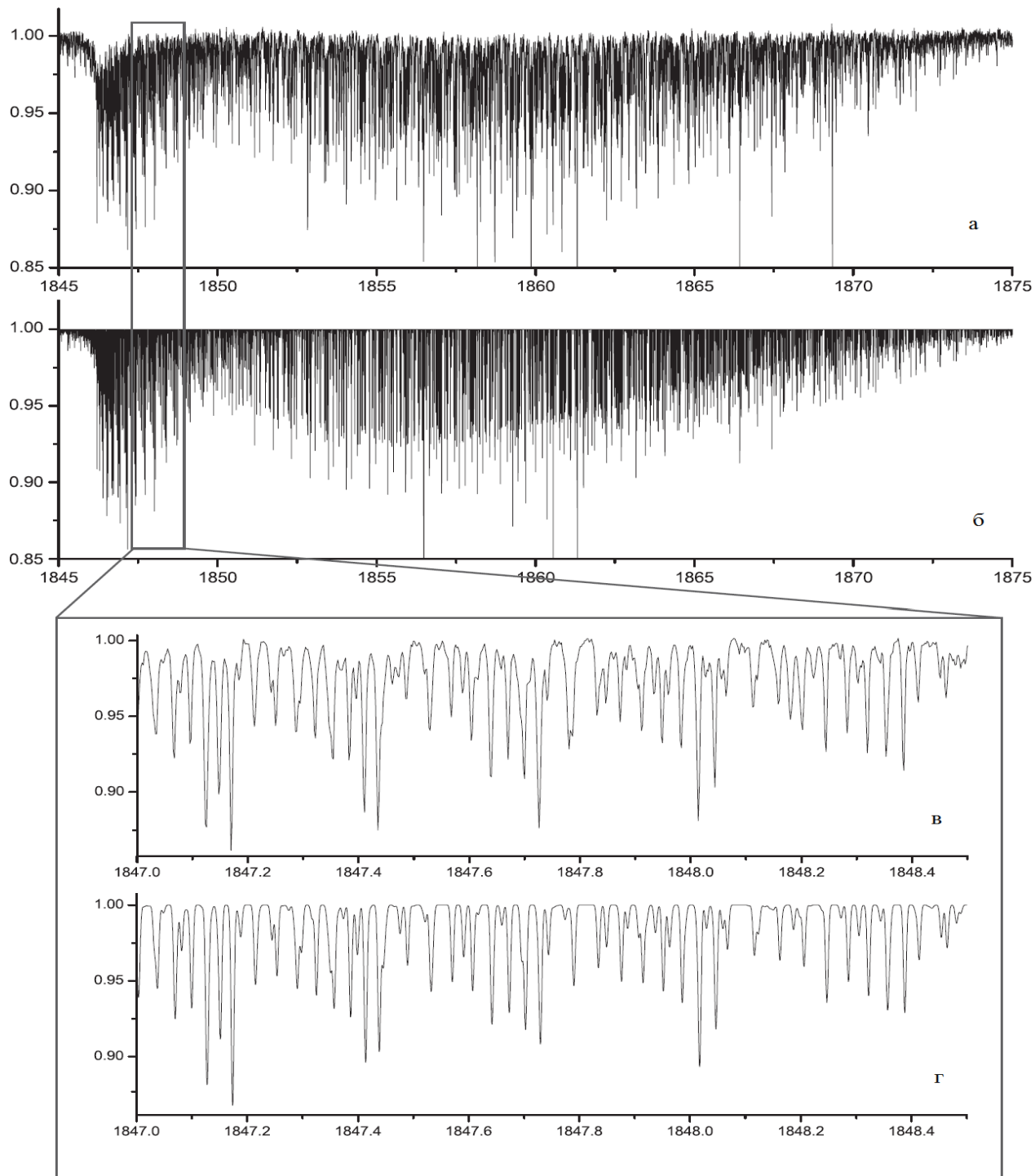


Рисунок б – Инфракрасный спектр Q – и R – веток состояния $\nu_2 + \nu_3$ молекулы $^{32}\text{S}^{16}\text{O}^{18}\text{O}$. По оси абсцисс отложено волновое число, по оси ординат – пропускание

Под а) и в) обозначены экспериментальные спектры, б) и г) обозначают моделированные спектры. Так же в) и г) демонстрируют высокое разрешение Q – ветки как для экспериментального, так и для моделированного спектра.

2.3 Метод комбинационных разностей

Для того, чтобы определить колебательные уровни энергии возбужденных состояний, необходимо использовать метод комбинационных разностей [48]. Данный метод описан ниже.

На один вращательный уровень возбужденного колебательного состояния возможны переходы со сразу нескольких уровней основного состояния (рис. 7). Предположим, что структура основного колебательного состояния предварительно изучена и известна с достаточно высокой точностью. Она может быть определена с помощью анализа микроволновых спектров, отражающих вращательные переходы внутри основного колебательного состояния, или инфракрасных спектров.

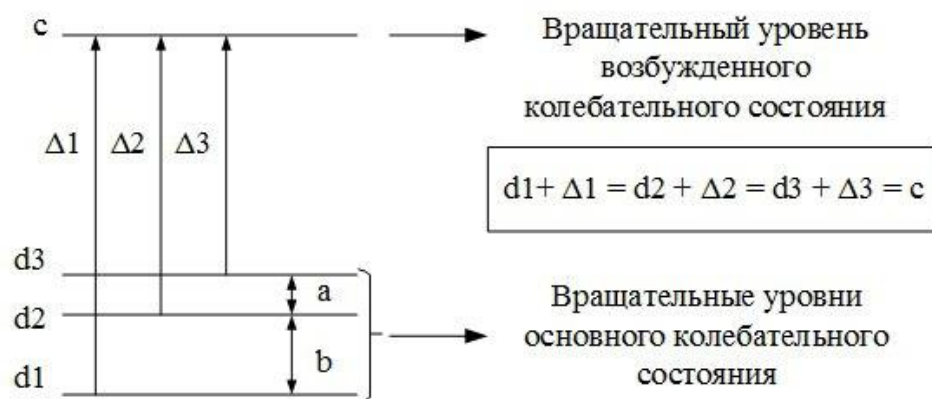


Рисунок 7 – Переходы с вращательных уровней основного колебательного состояния на вращательный уровень возбужденного колебательного состояния

Зная структуру энергетических уровней основного колебательного состояния с высокой точностью, можно создать «линейку». Расстояние между делениями будет эквивалентно энергетической структуре основного состояния,

то есть расстоянию между его вращательными уровнями. Перемещая полученную «линейку» по спектру, можно зарегистрировать линии, совпадающие сразу с несколькими её делениями. (рис. 8).

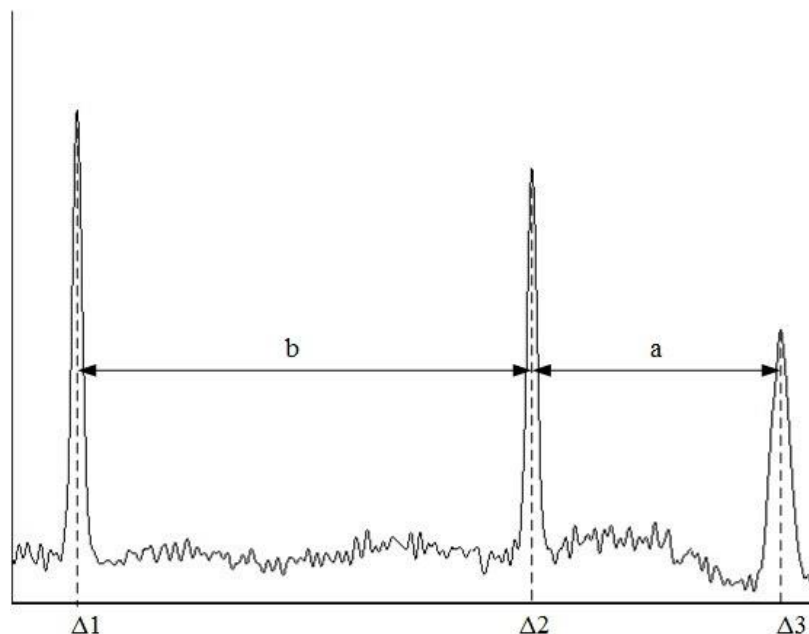


Рисунок 8 – Линии, совпадающие с «линейкой»

Таким образом, результатом анализа будут являться данные об энергетических переходах между основным и возбужденным колебательными состояниями. Суммируя ранее известные данные об энергетических положениях нижнего колебательного уровня и экспериментальные энергетические переходы, можно получить энергии возбужденных состояний. Корректным будет набор линий, у которого энергия верхнего состояния будет одинакова для всех возможных переходов. Абсолютной точности совпадения энергий достичь невозможно из-за наличия в спектре перекрывающихся линий. Как следствие, необходимо задавать определенную точность поиска.

2.4 Модель эффективного гамильтониана

Модель эффективного гамильтониана, которая была использована для теоретического анализа экспериментальных данных, была рассмотрена в

предыдущих исследованиях [49-52]. Для колебательных состояний (110) и (011) молекулы $^{32}\text{S}^{16}\text{O}^{18}\text{O}$ возможно показать, что Кориолисовыми резонансами между данными состояниями нельзя пренебречь. Следовательно, нужно принять их во внимание для анализа колебательно-вращательной структуры данных колебательных состояний.

В итоге, эффективный гамильтониан примет форму

$$H^{\text{кол.-вращ.}} = \sum_{\nu, \tilde{\nu}} |\nu\rangle\langle \tilde{\nu}| H^{\nu\tilde{\nu}}. \quad (16)$$

В данном виде, гамильтониан может быть использован для теоретического анализа экспериментальных данных. Суммирование будет проводиться от 1 до 2 для обоих параметров ν и $\tilde{\nu}$, где $|1\rangle = (110)$, $|2\rangle = (011)$. Диагональные блоки $H^{\nu\nu}(\nu = 1, 2)$ в выражении (16) описывают невозмущенные вращательные структуры соответствующих колебательных состояний. Следовательно, в A -редукции и I^r представлении, они примут следующую форму приближенного эффективного гамильтониана [53-55]:

$$\begin{aligned} H^{\nu\nu} = E^{\nu} + \left[A^{\nu} - \frac{1}{2}(B^{\nu} + C^{\nu}) \right] J_Z^2 + \frac{1}{2}(B^{\nu} + C^{\nu}) J^2 + \frac{1}{2}(B^{\nu} - C^{\nu}) J_{xy}^2 - \\ \Delta_K^{\nu} J_Z^4 - \Delta_{JK}^{\nu} J_Z^2 J^2 - \Delta_J^{\nu} J^2 - \delta_K^{\nu} [J_Z^2, J_{xy}^2]_+ - 2\delta_J^{\nu} J^2 J_{xy}^2 + H_{KK}^{\nu} J_Z^6 + H_{KJ}^{\nu} J_Z^4 J^2 + \\ H_{JK}^{\nu} J_Z^2 J^4 + H_J^{\nu} J^6 + [J_{xy}^2, h_K^{\nu} J_Z^4 + h_{JK}^{\nu} J^2 J_Z^2 + h_J^{\nu} J^4]_+ + L_{KK}^{\nu} J_Z^8 + L_{KKJ}^{\nu} J_Z^6 J^2 + \\ L_{JK}^{\nu} J_Z^4 J^4 + L_{KJJ}^{\nu} J_Z^2 J^6 + L_J^{\nu} J^8 + [J_{xy}^2, l_K^{\nu} J_Z^6 + l_{KJ}^{\nu} J^2 J_Z^4 + l_{JK}^{\nu} J^4 J_Z^2 + l_J^{\nu} J^6]_+ + P_{KK}^{\nu} J_Z^{10} + \\ P_{KKKJ}^{\nu} J_Z^8 J^2 + P_{KKKJJ}^{\nu} J_Z^6 J^4 + \dots, \end{aligned} \quad (17)$$

где $J_{xy}^2 = J_x^2 - J_y^2$; $[\dots, \dots]_+$ обозначает антикоммутатор; A^{ν}, B^{ν} и C^{ν} - эффективные вращательные константы, связанные с колебательным состоянием (ν), а остальные параметры - коэффициенты центробежного искажения различных порядков. Недиагональный блок H^{12} описывает резонансные взаимодействия между состояниями (110) и (011) и имеет форму

$$H^{12} = H_F^{12} + H_{C_y}^{12}. \quad (18)$$

Операторы в правой части (17) описывают Ферми- и Кориолисовы резонансные взаимодействия [56]:

$$H_F^{12} = {}^{12}F_0 + {}^{12}F_K J_Z^2 + {}^{12}F_J J^2 + \dots + {}^{12}F_{xy} (J_x^2 - J_y^2) + \dots \quad (19)$$

и

$$H_{Cy}^{12} = iJ_x H_{12}^{(1)} + H_{12}^{(1)} iJ_x + [J_y, J_z]_+ H_{12}^{(2)} + H_{12}^{(2)} [J_y, J_z]_+ + \dots, \quad (20)$$

где

$$H_{12}^{(i)} = \frac{1}{2} {}^{12}C^i + {}^{12}C_K^i J_z^2 + \frac{1}{2} {}^{12}C_J^i J^2 + {}^{12}C_{KK}^i J_z^4 + {}^{12}C_{KJ}^i J_z^2 J^2 + \frac{1}{2} {}^{12}C_{JJ}^i J^4 + \dots \quad (21)$$

3 Расчеты и аналитика

3.1 Определение спектроскопических параметров

На основе присвоенных переходов экспериментального спектра, были получены верхние колебательно-вращательные энергии для колебательных состояний (110) и (011). Затем, эти энергии были использованы для варьирования параметров гамильтониана (16)-(21). Так как полное число параметров гамильтониана велико для варьирования, большую часть параметров ограничили теоретически оцененными значениями. Описанная в [32] процедура варьирования крайне эффективна для такого типа оценки, но, к сожалению, для экспериментально определенных значений спектроскопических параметров для колебательных состояний молекулы $^{32}\text{S}^{16}\text{O}^{18}\text{O}$ ранее не было получено. Следовательно, использование процедуры, представленной в [32], для колебательных состояний (110) и (011) не представлялось возможным. По этой причине, теоретические оценки спектроскопических параметров были сделаны по следующей схеме:

1. Невозмущенные колебательные энергии состояний (110) и (011), как и главный Кориолисов параметр взаимодействия $^{12}\text{C}^1$ были оценены на основе результатов и формул теории изотопозамещения, а параметры внутримолекулярной потенциальной функции были взяты из [10].

2. При использовании теории изотопозамещения и теории возмущения [37-39], можно показать, что вращательные параметры A , B , C и наибольшие коэффициенты центробежного искажения Δ_K , Δ_{JK} , Δ_J , δ_K , δ_J молекулы $^{32}\text{S}^{16}\text{O}^{18}\text{O}$ могут быть оценены в соответствии с формулой

$$2^{(16,32,18)}P_{(v_1 v_2 v_3)} = {}^{(16,32,16)}P_{(v_1 v_2 v_3)} - {}^{(16,32,16)}P_{(000)} + {}^{(18,32,18)}P_{(v_1 v_2 v_3)} - {}^{(18,32,18)}P_{(000)} + 2^{(16,32,18)}P_{(000)}. \quad (22)$$

Здесь $(\dots)P(\dots)$ является любым из упомянутых выше восьми вращательных параметров или параметров центробежного искажения. (16,32,16) и (18,32,18) обозначают $^{32}\text{S}^{16}\text{O}_2$ и $^{32}\text{S}^{18}\text{O}_2$ соответственно. Подразумевается, что для коэффициентов центробежного искажения более высоких порядков выражение (22) так же выполняется. Чтобы проверить эффективность выражения (22), была проведена оценка значений вращательных коэффициентов и коэффициентов центробежного искажения для колебательных состояний (100) и (001) молекулы $^{32}\text{S}^{16}\text{O}^{18}\text{O}$ на основании известных значений соответствующих параметров для молекул $^{32}\text{S}^{16}\text{O}_2$ [8] и $^{32}\text{S}^{18}\text{O}_2$ [15]. Величины энергии основного состояния молекул $^{32}\text{S}^{16}\text{O}_2$, $^{32}\text{S}^{18}\text{O}_2$ и $^{32}\text{S}^{16}\text{O}^{18}\text{O}$ были взяты из [8], [15] и [30] соответственно. Результаты оценок представлены в колонках 2 и 4 таблицы 1. Для сравнения, в колонках 3 и 5 указаны значения соответствующих параметров, полученные при варьировании на основе экспериментальных данных [31]. Соответствие рассчитанных и экспериментальных параметров более чем удовлетворительное. Этот пример может служить хорошим подтверждением эффективности формулы (22).

Таблица 1 – Список спектроскопических параметров для колебательных состояний ν_1 и ν_3

Параметр	(100) _{расч}	(100) _{эксп}	(001) _{расч}	(001) _{эксп}
E	1124.64	1123.9302660	1342.12	1342.812057
A	1.9730	1.97285823	1.9514	1.95147660
B	0.3228	0.32283364	0.3233	0.32330228
C	0.2767	0.27672382	0.2768	0.27676014
$\Delta_K \times 10^4$	0.8286	0.82670	0.8002	0.80220
$\Delta_{JK} \times 10^5$	-0.3634	-0.34657	-0.3618	-0.37942
$\Delta_J \times 10^6$	0.1959	0.18398	0.1995	0.21161
$\delta_K \times 10^7$	0.7687	0.7886	0.7875	0.7741
$\delta_J \times 10^7$	0.4971	0.5562	0.4999	0.4416
$H_K \times 10^7$	0.1120	0.11221	0.1063	0.10686

Продолжение таблицы 1

$H_{KJ} \times 10^9$	-0.5677	-0.5606275	-0.5659	-0.5549
$H_{JK} \times 10^{12}$	0.242	0.242	0.242	0.242
$H_J \times 10^{12}$	0.2974	0.30118	0.2984	0.30118
$h_K \times 10^9$	0.4397	0.442889	0.4520	0.442889
$h_{JK} \times 10^{13}$	-0.3813	-0.3813	-0.3813	-0.3813
$h_J \times 10^{12}$	0.1509	0.149629	0.1516	0.149629
$L_K \times 10^{12}$	-0.648	-1.00	-0.433	-0.54591
$L_{KKJ} \times 10^{13}$	0.642	0.58154	0.523	0.58154
$L_{JK} \times 10^{14}$	-0.148	-0.1410	-0.141	-0.1410
$L_{KJJ} \times 10^{17}$	-0.688	-0.6878	-0.688	-0.6878
$L_J \times 10^{18}$	-0.325	-0.325	-0.238	-0.325
$P_K \times 10^{15}$	0.638	0.62209	0.592	0.62209
$P_{KKKJ} \times 10^{16}$	-0.507	-0.50742	-0.507	-0.50742
$P_{KKJ} \times 10^{17}$	0.133	0.1331	0.133	0.1331

Наконец, были совершены аналогичные численные оценки параметров колебательных состояний (110) и (011) молекулы $^{32}\text{S}^{16}\text{O}^{18}\text{O}$. Как и в предыдущем случае, исходная информация об экспериментальных значениях параметров основного состояния, а также состояния (110) и (011) молекул $^{32}\text{S}^{16}\text{O}_2$ и $^{32}\text{S}^{18}\text{O}_2$, были взяты из [8] и [15] соответственно. Результаты представлены в колонках 2 и 4 таблицы 2. Данные значения параметров в дальнейшем использовались для варьирования предполагаемых значений энергии возбужденного колебательного состояния при интерпретации экспериментального спектра.

4 Результаты проведенного исследования

4.1 Определение энергий и спектроскопических параметров

Из списка экспериментальных переходов были определены 644 и 798 колебательно-вращательных энергий соответственно для колебательных состояний (110) и (011) молекулы $^{32}\text{S}^{16}\text{O}^{18}\text{O}$. Эти 1452 значения энергии были затем использованы при варьировании параметров гамильтониана (16)-(21). Полученные при варьировании 16 параметров, включающих центр полосы, вращательные постоянные, коэффициенты центробежного искажения и Кориолисовых взаимодействий, учитывая 1σ доверительный интервал (в скобках), представлены в колонках 3 и 5 таблицы 2. Значения коэффициентов центробежного отклонения без скобок не были варьированы и были фиксированы предсказанными в колонках 2 и 4. Наблюдается более чем удовлетворительное соответствие приближенных и экспериментальных значений. Наконец, набор из 16 варьированных параметров воспроизводит 1452 исходных энергетических значения колебательных состояний (110) и (011) молекулы $^{32}\text{S}^{16}\text{O}^{18}\text{O}$ ($J^{max.} = 64$, $K_a^{max.} = 19$) с величиной среднеквадратичного отклонения $d_{rms} = 3.7 \times 10^{-4} \text{ см}^{-1}$. Данное значение подразумевает высокую корректность используемой модели и подтверждает хорошую теоретическую оценку параметров.

Таблица 2 – Список спектроскопических параметров для колебательных состояний $\nu_1 + \nu_2$ и $\nu_2 + \nu_3$

Параметр	(110) _{расч}	(110) _{фит}	(011) _{расч}	(011) _{фит}
E	1629.50	1628.186942(51)	1845.53	1846.149452(27)
A	2.0094	2.01016454(77)	1.9879	1.98700762(52)
B	0.3229	0.32291319(19)	0.3234	0.32337318(14)
C	0.2762	0.276260917(94)	0.2763	0.27626904(11)
$\Delta_K \times 10^4$	0.9650	0.915302(85)	0.8875	0.886838(91)

Продолжение таблицы 2

$\Delta_{JK} \times 10^5$	-0.3716	-0.36439(81)	-0.3998	-0.39245(86)
$\Delta_J \times 10^6$	0.1976	0.19657(12)	0.1996	0.19926(11)
$\delta_K \times 10^6$	1.0004	1.0004	0.9351	0.9351
$\delta_J \times 10^7$	0.4924	0.4924	0.5055	0.5055
$H_K \times 10^7$	0.1401	0.1401	0.1329	0.1329
$H_{KJ} \times 10^9$	-0.7057	-0.7057	-0.6401	-0.6401
$H_{JK} \times 10^{11}$	0.3736	0.3736	0.7818	0.7818
$H_J \times 10^{12}$	0.3174	0.3174	0.3257	0.3257
$h_K \times 10^9$	0.6042	0.6042	0.7699	0.7699
$h_{JK} \times 10^{12}$	-0.6393	-0.6393	-0.6393	-0.6393
$h_J \times 10^{12}$	0.1484	0.1484	0.1546	0.1546
$L_K \times 10^{11}$	-0.189	-0.189	-0.162	-0.162
$L_{KKJ} \times 10^{13}$	0.914	0.914	1.059	1.059
$L_{JK} \times 10^{16}$	-0.472	-0.472	-0.172	-0.172
$L_{KJJ} \times 10^{16}$	-0.930	-0.930	-1.275	-1.275
$L_J \times 10^{17}$	-0.125	-0.125	-0.111	-0.111
$P_K \times 10^{14}$	0.110	0.110	0.110	0.110
$P_{KKKJ} \times 10^{16}$	-0.621	-0.621	-0.621	-0.621
$P_{KKJ} \times 10^{17}$	0.146	0.146	0.146	0.146
$^{12}C^1$		-0.171		
$^{12}C_K^1 \times 10^4$		0.228(56)		
$^{12}C_J^1 \times 10^6$		0.382(79)		

Разница δ между экспериментальными и рассчитанными колебательно-вращательными энергиями и позициями линий имеет размерность 10^{-4} см^{-1} .

5 Социальная ответственность

5.1 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.

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 3 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 3 – Оптимально допустимые показатели для рабочей зоны

Период года	Температура, ОС					Относительная влажность, %		Скорость движения, м/с	
	Оптим.	Допустимая				Оптим.	Допуст., не более	Оптим., не более	Допуст.
		Верхняя граница		Нижняя граница					
		Пост оян.	Неп ост оян.	Пост оян.	Непост оян.				
Холод	22-23	21	23	19	17	40-60	15-75	0,2	0,1-0,3
Тепло	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 ($\varphi > 85\%$) затрудняет терморегуляцию организма, т.к. происходит снижение испарения пота, а пониженная влажность ($\varphi < 20\%$) 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 также 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.

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 4 приведены допустимые уровни звукового давления на рабочем месте.

Таблица 4 – 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.

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 света) 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 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 5. 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 5 – Нормирование значения освещенности на рабочих местах производственных помещений при искусственном освещении

Характер зрительной работы	Наименьший размер объекта, мм	Подразряд зрительной работы	Контраст различия объекта с фоном	Характер фона	Освещенность, лк		
					Комбинированное	Общее	
Средняя точность (4 разряд зрительной работы)	0,5 - 1,0	а	Малый	Темный	750	300	
			Малый	Средний	500	200	
		б	Средний	Темный	500	200	
			Малый	Светлый	400	200	
			Средний	Светлый	400	200	
		в	Большой	Темный	400	200	
			Средний	Светлый	300	150	
			Большой	Светлый	300	150	
			г	Большой	Средний	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 $A = 5300$ мм, ширина $B = 4700$ мм, высота 3500 мм. Высота рабочей поверхности над полом $h_p = 800$ мм. 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 свежепобеленных стен с окнами, без штор $\rho_{\text{П}} = 50\%$ свежепобеленного потолка $\rho_{\text{П}} = 70\%$. Коэффициент запаса, соответствующий помещению с малым выделением пыли равен $K_3 = 1,5$. Коэффициент неравномерности для люминесцентных ламп $Z = 1,5$.

Для освещения комнаты, с представленным выше параметрами, выбираем лампу дневного света ЛД-40, световой поток которой равен $\Phi_{\text{ЛД}} = 2300$ 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:
 $h = H - h_p - h_c = 2,4$ м.

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

Число рядов светильников в помещении: $N_b = \frac{B}{L} = 1,74 = 2$

Число светильников в ряду: $N_a = \frac{A}{L} = 2,01 = 2$

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: $l = \frac{L}{3} = 0,88$ м.

На рисунке 9 изображен план помещения и размещения светильников с люминесцентными лампами.

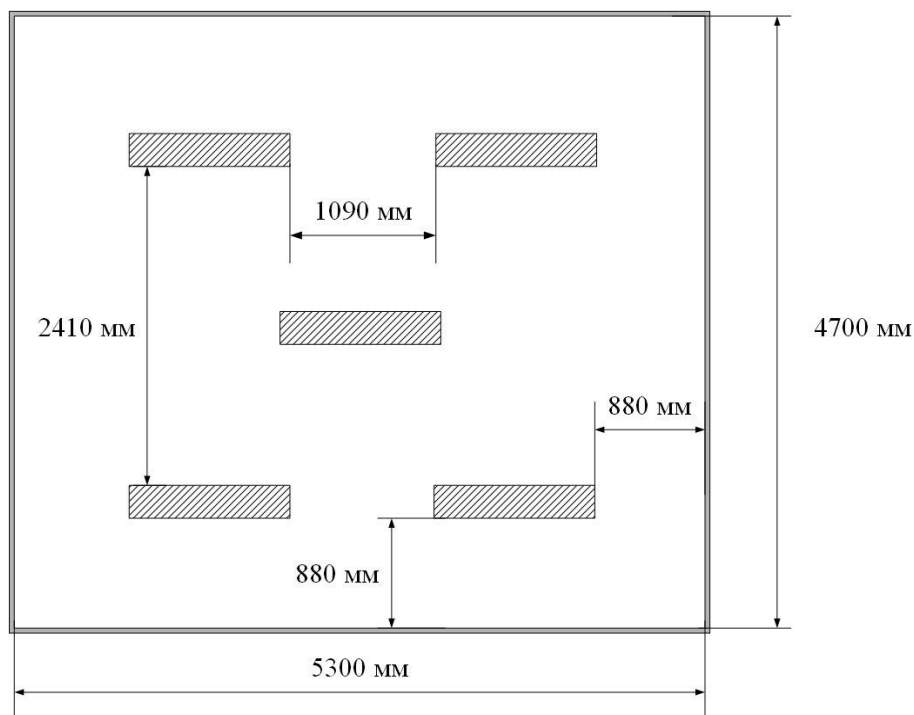


Рисунок 9 – План помещения и размещения светильников с люминесцентными лампами

Индекс помещения определяется по формуле:

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

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:

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

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

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

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 6 приведены диапазоны возможных значений ЭМП.

Таблица 6 - Диапазоны возможных значений ЭМП, измеренных на рабочих местах пользователей ПК

	5 Гц - 2кГц	2-40 кГц
Напряженность переменного электрического поля, В/м	1 - 35	0.1 – 1,1
Индукция переменного магнитного поля, Тл	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 7.

Таблица 7 - 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 и снижает его излучение в направлении пользователя.

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

– защитные фильтры улучшающие эргономические параметры дисплея, ослабляющие инфракрасное, ультрафиолетовое излучения, ослабляющие электростатическое поле и переменное электрическое поле.

– защитные фильтры улучшающие эргономические параметры дисплея и ослабляющие инфракрасное, ультрафиолетовое излучения, но не влияющие на электромагнитные параметры.

5.2 Анализ выявленных опасных факторов производственной среды

Электробезопасность

Лаборатория относится к помещению без повешенной 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 нетоковедущим частям, от шагового напряжения.

Преднамеренное соединение с землей металлических нетоковедущих 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 нетоковедущим 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 секунд – 6 мА.

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 10).

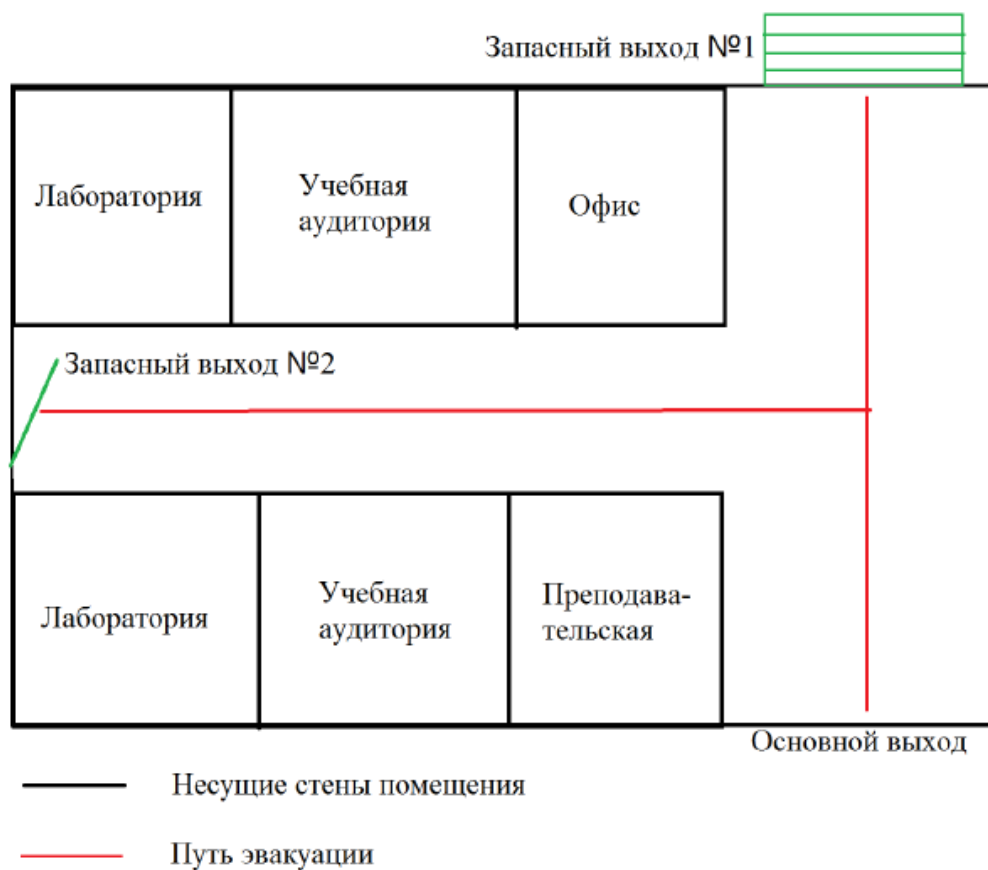


Рисунок 10 – План эвакуации из лаборатории

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.

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.

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

6 Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение

При разработке любого технического или программного решения необходимо учитывать коммерческую ценность разработки, так как определить перспективность разработки на первых этапах жизненного цикла, с точки зрения её ресурсоэффективности и уровня технологий, трудности. Оценка коммерческой ценности разработки важна для поиска источников финансирования и коммерциализации результатов. Таким образом, целью данного раздела является определение перспективности и успешности проекта, разработка механизма управления и сопровождения конкретных проектных решений на этапе реализации.

6.1 Потенциальные потребители результатов исследования

Для того, чтобы проанализировать потенциальные потребители результатов исследования, следует рассмотреть целевой рынок и выявить его сегментирование.

Целевой рынок представляет собой определенную группу потребителей, на которую в будущем таргетируется предложение разработки. Сегментацией рынка является процесс выделения рынка на различные группы (или сегменты), в рамках которых потребители имеют определенные общие признаки.

В данной работе результатами разработки являются набор энергетических переходов, полученных в ходе интерпретации спектра высокого разрешения. Помимо этого, результатом является набор спектроскопических параметров, соответствующих конкретным колебательным состояниям молекулы. Результаты могут быть полезны ученым в таких областях науки, как астрофизика, химия, молекулярная спектроскопия и т.д.

6.2 Анализ конкурентных технических решений

Для успешного выхода на рынок, необходимо проводить систематический анализ конкурирующих товаров, т.к. новые разработки постоянно пребывают с течением определенного промежутка времени. Этот анализ важен, так как проводится оценка сравнительной эффективности научной разработки и определяются направления для последующего повышения эффективности. В связи с тем, что существует ряд методов определения приближенных значений спектроскопических параметров, был проведен анализ конкурирующих разработок. В ходе анализа были рассмотрены конкурентные методы, используемые в настоящее время.

Анализ конкурентных технических решений определяется по формуле:

$$K = \sum V_i \cdot B_i, \quad (22)$$

где: K – конкурентоспособность научной разработки или конкурента; V_i – вес показателя (в долях единицы); B_i – балл i -го показателя.

Результаты сравнения представлены в таблице 8.

Таблица 8 – Оценочная карта для сравнения конкурентных технических решений

Критерии оценки	Вес критерия	Баллы			Конкурентоспособность		
		B_ϕ	B_{k1}	B_{k2}	K_ϕ	K_{k1}	K_{k2}
1	2	3	4	5	6	7	8
Технические критерии оценки ресурсоэффективности							
1. Производительность	0,06	5	4	4	0,3	0,24	0,24
2. Потребление ресурсов ЭВМ	0,06	5	4	3	0,3	0,24	0,18
3. Экспорт данных в различных форматах	0,13	5	4	5	0,65	0,52	0,65
4. Многозадачность	0,09	5	4	3	0,45	0,36	0,27
5. Точность	0,18	5	4	3	0,9	0,72	0,54
6. Простота и удобство	0,08	5	4	3	0,4	0,32	0,24
7. Скорость работы	0,13	5	4	4	0,65	0,52	0,52

Продолжение таблицы 8

Экономические критерии оценки эффективности							
1. Конкурентоспособность метода	0,11	5	4	5	0,55	0,44	0,55
2. Уровень проникновения на рынок	0,06	5	4	5	0,3	0,24	0,3
3. Стоимость используемых данных	0,05	4	3	5	0,2	0,15	0,25
4. Стоимость программного обеспечения	0,05	4	5	3	0,2	0,25	0,15
Итого	1	53	44	38	4,9	4	3,89

где: Ф – с использованием теории изотопозамещения, К1 – с использованием экспериментальных данных из микроволновых спектров, К2 – первопринципный метод.

При обобщении результатов проведенного анализа оказалось, что теория изотопозамещения имеет преимущество над конкурирующими методами благодаря высокой точности и скорости работы, простоте и удобству использования и способности экспорта результатов в различных форматах. Основываясь на знаниях о конкурентах, можно утверждать, что разработка является конкурентоспособной и может быть востребована на рынке.

6.3 Оценка коммерческого и инновационного потенциала НТИ

SWOT-анализ

SWOT-анализ предполагает возможность оценки фактического положения и стратегических перспектив научно-исследовательского проекта, получаемого в результате изучения сильных и слабых сторон проекта, ее возможностей и факторов риска. S и W – факторы внутренней среды проекта, О и Т – факторы внешней среды, которые влияют на проект извне и не поддаются его контролю. Чтобы провести SWOT- анализ необходимо последовательно рассмотреть различные парные сочетания факторов внешней и внутренней среды и выделить те, которые оказывают наибольшее влияние.

В ходе анализа, были определены и описаны сильные и слабые стороны проекта, выявлены возможности и угрозы для его реализации, которые проявились или могут появиться. По проведенному анализу была составлена итоговая матрица SWOT-анализа, которая приведена в таблице 9.

Таблица 9 - SWOT-анализ

	<p>Сильные стороны научно-исследовательского проекта:</p> <p>С1. Применимость для любой молекулы. С2. Низкая стоимость оборудования. С3. Относительная простота в использовании метода</p>	<p>Слабые стороны научно-исследовательского проекта:</p> <p>Сл1. Большая времязатратность при некоторых видах исследований. Сл2. Зависимость от стороннего программного обеспечения Сл3. Большой срок поставки экспериментальных данных</p>
<p>Возможности:</p> <p>В1. Использование инновационной инфраструктуры ТПУ В2. Большое количество потенциальных потребителей В3. Широкий выбор программного обеспечения</p>	<p>Наличие широкого выбора программного обеспечения позволяет расширить функционал метода и увеличить производительность. Проект может получить серьезное развитие, итогами которого станут повсеместное использование в лабораториях спектроскопии.</p>	<p>Нужно выбрать оптимальное программное обеспечение для сокращения времени расчета и получения более точных результатов.</p>
<p>Угрозы:</p> <p>У1. Высокая конкуренция с другими методами У2. Зависимость исследования от данных, полученных из других расчетов У3. Несвоевременное финансовое обеспечение научного исследования со стороны государства</p>	<p>Заявленная эффективность метода может быть не оправдана при задержках в поставке данных или финансировании. Необходимо постоянное эффективное использование ресурсов для повышения конкурентоспособности проекта.</p>	<p>Существуют риск потери конкурентоспособности из-за большого времени исследования или независимых задержках экспериментальных данных.</p>

6.4 Планирование процесса управления НИИ: структура и график проведения, бюджет, риски и организация закупок

6.4.1 Планирование научно-исследовательских работ

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

Таблица 10 - Календарный план ВКР

№ работы	Название	Длительность, дни	Дата начала работ	Дата окончания работ	Состав участников
1	Разработка технического задания на ВКР	2	18.01.2017	19.01.2017	Руководитель
2	Составление и утверждение технического задания	3	20.01.2017	23.01.2017	Руководитель
3	Выбор направления исследования и способов решения задач	5	25.01.2017	30.01.2017	Руководитель, студент
4	Подбор и изучение научно-технической литературы по теме	34	31.01.2017	11.03.2017	Студент
5	Разработка методики экспериментальных исследований	4	13.03.2017	16.03.2017	Руководитель, студент

Продолжение таблицы 10

6	Проведение полуэмпирических исследований	42	17.03.2017	05.05.2017	Студент
7	Анализ и обработка полученных результатов	9	06.05.2017	17.05.2017	Руководитель, студент
8	Оформление пояснительной записки	9	18.05.2017	27.05.2017	Студент
9	Подготовка к защите ВКР	18	29.05.2017	17.06.2017	Руководитель, студент

6.4.2 Организационная структура проекта

В данном подразделе была рассмотрена организационная структура проекта, были указаны участники проекта, а также определены роли участников, их функции и их трудозатраты. По результатам была составлена сводная таблица результатов – таблица 11.

Таблица 11 – Рабочая группа проекта

№ п/п	ФИО, основное место работы, должность	Роль в проекте	Функции	Трудо- затраты, час.
1	Бехтерева Е.С., кафедра общей физики, профессор	Руководитель проекта	Организация работ, координация деятельности проекта	205
2	Васильев К.С., кафедра общей физики, студент	Исполнитель проекта	Выполнение ВКР	605
ИТОГО:				810

6.4.3 Составление календарного плана проекта

В рамках планирования научного проекта был построен календарный график проекта, который представлен в таблице 12.

Таблица 12 – Календарный план-график

Код работы (ИСР)	Вид работ	Исполнители	Тк, кал , дн.	Продолжительность выполнения работ																			
				Янв.			Фев.			Март			Апр.			Май			Июнь				
				1	2	3	1	2	3	1	2	3	1	2	3	1	2	3	1	2	3		
1	Разработка технического задания на ВКР	Руководитель	2			█																	
2	Составление и утверждение технического задания	Руководитель	3			█																	
3	Выбор направления исследования и способов решения задач	Руководитель студент	5			█																	
4	Подбор и изучение научно-технической литературы по теме	Студент	34				█	█	█	█													
5	Разработка методики экспериментальных исследований	Руководитель студент	4								█												
6	Проведение полуэмпирических исследований	Студент	42								█	█	█	█	█								
7	Анализ и обработка полученных результатов	Руководитель студент	9														█						
8	Оформление пояснительной записки	Студент	9														█						
9	Подготовка к защите ВКР	Руководитель студент	18																	█			

█ – руководитель

█ – студент

Проделанная студентом и научным руководителем работа была распределена равномерно в течение всей работы. Большая часть времени ушла на изучение литературы, связанной с темой ВКР, интерпретацию экспериментальных данных и анализ результатов.

6.4.4 Бюджет научного исследования

В процессе планирования бюджета научного исследования должно обеспечивать полное и достоверное отражение всех видов планируемых расходов, которые необходимы для выполнения проекта. В настоящей разработке планируемые расходы включают в себе затраты на спецоборудование и электроэнергию; основную и дополнительную заработную плату исполнителей работы; отчисления во внебюджетные фонды (страховые отчисления).

Расчет затрат на спецоборудование для научных работ

При расчете бюджета были учтены затраты, связанные с приобретением специального оборудования необходимого для проведения работ по теме проекта.

Таблица 13 – Расчет затрат по статье «Спецоборудование для научных работ»

Наименование оборудования	Количество единиц оборудования	Цена единицы оборудования, тыс.руб.	Общая стоимость оборудования, тыс.руб.
Персональный компьютер	2	32	64

Средства на приобретение компьютера не затрачивались, т.к. он уже был в наличии. Необходимо рассчитать амортизационные отчисления для данного оборудования

Так как, срок полезного использования персонального компьютера составляет 5 лет, поэтому норма амортизации равна:

$$H_a = \frac{1}{n} * 100 = \frac{1}{5} * 100 = 20\%$$

где H_a – норма амортизации в процентах; n – срок полезного использования в годах.

Первоначальная стоимость оборудования - 64 000 руб. Следовательно, годовая сумма амортизации составит:

$$A_{\Gamma} = \frac{F_{\Pi} * H_a}{100} = \frac{64000 * 20}{100} = 12800 \text{ (руб.)}$$

где F_{Π} – первоначальная стоимость.

Сумма ежемесячных амортизационных отчислений составит :

$$A_{\text{м}} = \frac{A_{\Gamma}}{12} = \frac{12800}{12} = 1067 \text{ (руб.)}$$

С учетом календарного план-графика проекта (таблица 4) было принято, что на работы по проекту с использованием компьютера было затрачено 5 месяцев. За все время разработки сумма амортизации равна:

$$A = A_{\text{м}} * 5 = 5335 \text{ (руб.)}$$

Расчет затрат на электроэнергию

При расчете затрат на электроэнергию были приняты следующие допущения: с учетом календарного план-графика проекта, было принято, что на работу было затрачено 126 дней. Средняя мощность компьютера составляет около 300 Вт/час. Длительность работы с компьютером средней мощности – 5 часов/день. Для выполнения дипломной работы время использования компьютеров составляет 630 часов. Стоимость электроэнергии в Томске равна 5,8 руб. за 1 кВт/час. Следовательно, потребление электроэнергии компьютером в течение работы составляет:

$$300 \text{ Вт/час} * 630 \text{ час} = 189 \text{ (кВт)}$$

Таким образом, затрат на электроэнергию был:

$$189 * 5,8 = 1096 \text{ (руб.)}$$

Расчет заработной платы

Для расчета заработной платы необходимо определить основную и дополнительную заработную плату руководителя и дипломника, которые непосредственно участвуют в процессе выполнения дипломной работы. Расходы по заработной плате рассчитываются на основе трудоемкости выполняемых работ и действующей системы оплаты труда.

Основная заработная плата ($Z_{\text{осн}}$) руководителя (инженера) определяется следующей формулой:

$$Z_{\text{осн}} = Z_{\text{дн}} \cdot T_{\text{раб}}, \quad (23)$$

где: $Z_{\text{осн}}$ – основная заработная плата одного работника; $T_{\text{р}}$ – продолжительность работ; $Z_{\text{дн}}$ – среднедневная заработная плата работника.

Среднедневная заработная плата определяется по выражению:

$$Z_{\text{дн}} = \frac{Z_{\text{м}} \cdot M}{F_{\text{д}}}, \quad (24)$$

где: $Z_{\text{м}}$ – месячный должностной оклад работника, руб.; M – количество месяцев работы без отпуска в течение года: 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 14).

Таблица 14 – Баланс рабочего времени

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

Месячный должностной оклад работника:

$$Z_m = Z_b * (1 + k_{пр} + k_d) * k_p \quad (25)$$

где Z_b – базовый оклад, руб.; $k_{пр}$ – премиальный коэффициент, (определяется Положением об оплате труда $k_{пр}=0,3$); k_d – коэффициент доплат и надбавок (определяется Положением об оплате труда $k_d=0,2$); k_p – районный коэффициент, равный 1,3 (для Томска).

Базовый оклад профессора со степенью доктора наук в ТПУ составляет 36 800 рублей, а оклад инженера составляет 7800 рублей. По полученным данным были определены месячные должностные оклады руководителя – 71 760 руб. и инженера (дипломника) – 15 210 руб.

В итоге, расходы на заработную плату руководителя и дипломника сформированы в таблице 15.

Таблица 15 – Расчёт заработной платы

Исполнители	Зб, руб.	кпр	кд	кп	Зм, руб	Здн, руб.	Тр, раб. дн.	Зосн, руб.
Руководитель	36 800	0,3	0,2	1,3	71 760	2973	41	121 893
Инженер	7 800				15 210	630	121	76 230
Итого								198 123

Отчисления на социальные нужды

В настоящую статью включается отчисления во внебюджетные фонды.

$$C_{внеб} = k_{внеб} \cdot Z_{осн}, \quad (26)$$

где $k_{внеб}$ – коэффициент отчислений на уплату во внебюджетные фонды. $k_{внеб} = 0,271$

Таблица 16 – Отчисления на социальные нужды

	Руководитель	Студент	Сумма
Зосн	121 893	76 230	198 123
Отчисления на социальные нужды	33 033	20 658	53 691

Накладные расходы

Накладные расходы представляют собой затраты, сопровождающие основное производство. В накладные расходы включаются затраты на содержание, эксплуатацию, ремонт оборудования, на управление, организацию, обслуживание, на командировки, которые могут быть отнесены непосредственно на конкретную тему. В данной квалификационной работе накладные расходы относятся стоимость электроэнергии за период выполнения проектных работ, затраты на амортизацию оборудования.

Формирование бюджета затрат научно-исследовательского проекта

Формирование бюджета затрат проекта приводится на основе расчета всех расходов, которые необходимо оплачиваться в процессе выполнения научно-исследовательской работы. Затраты на научно-исследовательский проект представлены в таблице 17.

Таблица 17 – Затраты на научно- исследовательский проект

№	Наименование статьи	Сумма, руб.
1	Специальное оборудование для научных работ	5 335
2	Расчет затрат на электроэнергию	1096
3	Основная заработная плата	198 123
4	Отчисления на социальные нужды	53 691
	Итого плановая себестоимость	258 245

Из таблицы 17 видно, что большая часть средств затрачивается на основную заработную плату исполнителям темы.

6.5 Оценка сравнительной эффективности исследования

Определение эффективности происходит на основе расчета интегрального показателя эффективности научного исследования. Его нахождение связано с

вычислением двух величин: интегрального показателя финансовой эффективности и интегрального показателя ресурсоэффективности.

Интегральный показатель финансовой эффективности научного исследования получают в ходе оценки бюджета затрат представляемой разработки и двух аналогов исполнения научного исследования (таблица 12). Интегральный финансовый показатель разработки определяется как:

$$I_{\Phi}^p = \frac{\Phi_{pi}}{\Phi_{max}} \quad (27)$$

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

$$I_{\Phi}^p = \frac{258\ 245}{276\ 213} = 0,94 \quad I_{\Phi}^{a1} = \frac{267\ 279}{276\ 213} = 0,97 \quad I_{\Phi}^{a2} = \frac{276\ 213}{276\ 213} = 1,00$$

Вычисленные интегральные финансовые показатели разработки отражают соответствующее численное удешевление стоимости разработки в разгах.

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

$$I_m^a = \sum_{i=1}^n a_i b_i^a \quad I_m^p = \sum_{i=1}^n a_i b_i^p \quad (28)$$

где I_m – интегральный показатель ресурсоэффективности вариантов; a_i – весовой коэффициент i -го параметра; b_i^a , b_i^p – бальная оценка i -го параметра для аналога и разработки, устанавливается экспертным путем по выбранной шкале оценивания; n – число параметров сравнения.

Таблица 18 – Сравнительная оценка характеристик вариантов исполнения проекта

Показатель ресурсоэффективности	Весовой коэффициент параметра	Текущий проект	Аналог 1	Аналог 2
1. Производительность	0,12	5	4	4
2. Потребление ресурсов ЭВМ	0,1	5	4	3
3. Экспорт данных в различных форматах	0,16	5	4	5

Продолжение таблицы 18

4. Многозадачность	0,1	5	4	3
5. Точность метода	0,24	5	4	3
6. Простота и удобство	0,12	5	4	3
7. Скорость работы	0,16	5	4	4
ИТОГО	1	5	4	3,6

здесь: аналог 1 – первоначальное приближение, основанное на данных из микроволновых спектров; аналог 2 – первоначальное приближение с использованием первопринципного метода.

Интегральный показатель эффективности разработки ($I_{\text{финр}}^p$) и аналога ($I_{\text{финр}}^a$) определяется на основании интегрального показателя ресурсоэффективности и интегрального финансового показателя по формуле:

$$I_{\text{финр}}^p = \frac{I_M^p}{I_{\Phi}^p} = \frac{5}{0,94} = 5,32 \quad I_{\text{финр}}^{a1} = \frac{I_M^{a1}}{I_{\Phi}^{a1}} = \frac{4}{0,97} = 4,12 \quad I_{\text{финр}}^{a2} = \frac{I_M^{a2}}{I_{\Phi}^{a2}} = \frac{3,6}{1,00} = 3,6$$

Сравнение интегрального показателя эффективности текущего проекта и аналогов позволит определить сравнительную эффективность проекта.

Сравнительная эффективность проекта:

$$\mathcal{E}_{\text{ср1}} = \frac{I_{\text{финр}}^p}{I_{\text{финр}}^{a1}} = \frac{5,32}{4,12} = 1,29 \quad \mathcal{E}_{\text{ср2}} = \frac{I_{\text{финр}}^p}{I_{\text{финр}}^{a2}} = \frac{5,32}{3,6} = 1,48$$

Результаты анализа сравнительной эффективности проекта приведены в таблице 19.

Таблица 19 – Сравнительная эффективность разработки

Показатели	Разработка	Аналог 1	Аналог 2
Интегральный финансовый показатель разработки	0,94	0,97	1,00
Интегральный показатель ресурсоэффективности разработки	5	4	3,6
Интегральный показатель эффективности	5,32	4,12	3,6
Сравнительная эффективность вариантов исполнения		1,29	1,48

По оценке сравнительной эффективности разработки, было определено, что анализ спектров высокого разрешения с первоначальным приближением

спектроскопических параметров на основе теории изотопозамещения является наиболее эффективным вариантом решения поставленной задачи с позиции финансовой и ресурсной эффективности.

Таблица 20 – Затраты на аналоги научно- исследовательского проекта

№	Вариант исполнения аналога		Аналог 1	Аналог 2
	Наименование статьи			
1	Специальное оборудование для научных работ		5 869	6 402
2	Расчет затрат на электроэнергию		1 206	1 316
3	Основная заработная плата		204 724	211 247
4	Отчисления на социальные нужды		55 480	57 248
	Итого плановая себестоимость		267 279	276 213

Заключение

В результате проделанной работы впервые был проанализирован инфракрасный спектр высокого разрешения молекулы $^{32}\text{S}^{16}\text{O}^{18}\text{O}$ в диапазоне , где расположены колебательные состояния $\nu_1 + \nu_2$ и $\nu_2 + \nu_3$. Было проинтерпретировано около 1050 и 1570 переходов экспериментального спектра с максимальными значениями квантовых чисел равными $J^{max.} = 64$, $K_a^{max.} = 19$. Данные переходы были присвоены соответствующим колебательным состояниям $\nu_1 + \nu_2$ и $\nu_2 + \nu_3$. Последующее варьирование экспериментально найденных переходов было произведено с помощью модели эффективного гамильтониана, с учетом резонансных взаимодействий между рассматриваемыми состояниями. В результате, был получен набор из 16 параметров. В результате, при помощи данных параметров воспроизведены 1442 колебательно-вращательные энергии. Отличие от экспериментальных значений составило $d_{rms} = 3.7 \times 10^{-4} \text{ см}^{-1}$.

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

Список используемой литературы

1. Wallace P.J. Volcanic SO₂ emissions and the abundance and distribution of exsolved gas in magma bodies. // J Volcanol Geotherm Res 2001;108:85-106.
2. Self S., Rampino M.R., Barbera J.J. The possible effects of large 19th and 20th century volcanic eruptions on Zonal and hemispheric surface temperatures. // J Volcanol Geotherm Res 1981;11:41-60.
3. McCormic M.P., Thompson L.W., Trepte C.R., Atmospheric effects of the Mount Pinatubo eruption. // Nature 1995;373:399-404.
4. Charlson R.J., Anderson T.L., McDuff R.E. The Sulfur Cycle. In: Butcher S.S., Charlson R.J., Orian G.H., Wilfe G.V., editors. Global biogeochemical cycles. // Academic, San Diego, 285-99.
5. Huang X., Schwenke D.W., Lee T.J. Empirical infrared line lists for five SO₂ isotopologues: ^{32/33/34/36}S¹⁶O₂ and ³²S¹⁸O₂. // J Mol Spectrosc 2015;311(19):19-24.
6. Bezdard B., DeBergh C., Fegley B., Maillard J.-P., Crips D., Owen T., Pollack J.B., Grinspoon D. The abundance of sulfur dioxide below the clouds of Venus. // Geophys Res Lett 1993;20:1587-90.
7. Marcq E., Betraux J.-L., Montmessin F., Belyaev D. Variations of sulfur dioxide at the cloud top of Venus's dynamic atmosphere. // Nature Geoscience 2013;6:25-28.
8. Ulenikov O.N., Onopenko G.A., Gromova O.V., Bekhtereva E.S., Horneman V.-M. Re-analysis of the (100), (001), and (020) rotational structure of SO₂ on the basis of high-resolution FTIR spectra. // JQSRT 2013;130:220-32.
9. Ulenikov O.N., Bekhtereva E.S., Horneman V.M., Alanko S., Gromova O.V. High resolution study of the 3ν₁ band of SO₂. // J Mol Spectrosc 2009;255:111-21.
10. Ulenikov O.N., Bekhtereva E.S., Horneman V.M., Alanko S., Gromova O.V., Leroy C. On the high-resolution spectroscopy and intramolecular potential function of SO₂. // J Mol Spectrosc 2009;257:137-56.

11. Ulenikov O.N., Bekhtereva E.S., Gromova O.V., Alanko S., Horneman V.M., Leroy C. Analysis of highly excited "hot" bands in the SO₂ molecule: $\nu_2 + 3\nu_3 - \nu_2$ and $2\nu_1 + \nu_2 + \nu_3 - \nu_2$. // *Molec Phys* 2010;108:1253-1261.
12. Guelachvili G., Ulenikov O.N., Ushakova G.A. Analysis of the ν_1 and ν_3 absorption bands of ³²S¹⁶O₂. // *J Mol Spectrosc* 1984;108:1-5.
13. Ulenikov O.N., Gromova O.V., Bekhtereva E.S., Bolotova I.B., Konov I.A., Horneman V.-M., Leroy C. High resolution analysis of the SO₂ spectrum in the 2600 – 2900 cm⁻¹ region: $2\nu_3$, $\nu_2 + 2\nu_3 - \nu_2$ and $2\nu_1 + \nu_2$ bands. // *J Quant Spectrosc Radiat Transf* 2012;113:500-517.
14. Ulenikov O.N., Gromova O.V., Bekhtereva E.S., Belova A.S., Bauerecker S, Maul C, Sydow C, Horneman V-M. High resolution analysis of the (111) vibrational state of SO₂. // *J Quant Spectrosc Radiat Transf* 2014;144:1-10.
15. Ulenikov O.N., Bekhtereva E.S., Krivchikova Yu.V., Morzhikova Yu.B., Buttersack T., Sydow C., Bauerecker S. High resolution analysis of ³²S¹⁸O₂ spectra: The ν_1 and ν_3 interacting bands. // *J Quant Spectrosc Radiat Transf* 2015;166:13-22.
16. Ulenikov O.N., Gromova O.V., Bekhtereva E.S., Krivchikova Yu.V., Sklyarova E.A., Buttersack T., Sydow C., Bauerecker S. High resolution FTIR study of ³⁴S¹⁶O₂: The bands $2\nu_3$, $2\nu_1 + \nu_2$ and $2\nu_1 + \nu_2 - \nu_2$. // *J Mol Spectrosc* 2015;318:26-33.
17. Ulenikov O.N., Gromova O.V., Bekhtereva E.S., Fomchenko A.L., Sydow C., Bauerecker S. First high resolution analysis of the $3\nu_1$ band of ³⁴S¹⁶O₂. // *J Mol Spectrosc* 2016;319:50-54.
18. Ulenikov O.N., Bekhtereva E.S., Gromova O.V., Buttersack T., Sydow C., Bauerecker S. High resolution FTIR study of ³⁴S¹⁶O₂: The bands $2\nu_1$, $\nu_1 + \nu_3$, $\nu_1 + \nu_2 + \nu_3 - \nu_2$ and $\nu_1 + \nu_2 + \nu_3$. // *J Quant Spectrosc Radiat Transf* 2016;169:49-57.

19. Ulenikov O.N., Bekhtereva E.S., Gromova O.V., Zamotaeva V.A., Sklyarova E.A., Sydow C., Maul C., Bauerecker S. First high resolution analysis of the $2\nu_1$, $2\nu_3$, and $\nu_1 + \nu_3$ bands of $S^{18}O_2$. // *J Quant Spectrosc Radiat Transf* 2016;185:12-21.
20. Shelton R.D., Nielsen A.H., Fletcher W.H. The infrared spectrum and molecular constants of sulfur dioxide. // *J Mol Spectrosc* 1953;21:2178-2183.
21. Guelachvili G., Naumenko O.V., Ulenikov O.N. Analysis of the SO_2 absorption Fourier spectrum in regions 1055 to 2000 and 2200 to 2550 cm^{-1} . // *J Mol Spectrosc* 1987;125:128-139.
22. Guelachvili G., Naumenko O.V., Ulenikov O.N. On the analysis of some hyperweak absorption bands of SO_2 in the regions 1055-2000 and 2200-2550 cm^{-1} . // *J Mol Spectrosc* 1988;131:400-402.
23. Lafferty W.J., Flaud J.-M., Sams R.L., Ngom E.H.A. High resolution analysis of the rotational levels of the (000), (010), (100), (001), (020), (110) and (011) vibrational states of $^{34}S^{16}O_2$. // *J Mol Spectrosc*, 2008;252:72-76.
24. Ulenikov O.N., Gromova O.V., Bekhtereva E.S., Bolotova I.B., Leroy C., Horneman V.M., Alanko S. High resolution study of the $\nu_1 + 2\nu_2 - \nu_2$ and $2\nu_2 + \nu_3 - \nu_2$ "hot" bands and ro-vibrational re-analysis of the $\nu_1 + \nu_2/\nu_2 + \nu_3/3\nu_2$ polyad of the $^{32}SO_2$ molecule. // *J Quant Spectrosc Radiat Transf* 2011;112:486-512.
25. Ulenikov O.N., Bekhtereva E.S., Gromova O.V., Buttersack T., Sydow C., Bauerecker S. High resolution FTIR study of $^{34}S^{16}O_2$: Re-analysis of the bands $\nu_1 + \nu_2$, $\nu_2 + \nu_3$, and first analysis of the hot band $2\nu_2 + \nu_3 - \nu_2$. // *J Mol Spectrosc* 2016;319:17-25.
26. Ulenikov O.N., Bekhtereva E.S., Gromova O.V., Zamotaeva V.A., Kuznetsov S.I., Sydow C., Maul C., Bauerecker S. First high resolution analysis of the $\nu_1 + \nu_2$, $\nu_2 + \nu_3$ bands of $S^{18}O_2$. // *J Quant Spectrosc Radiat Transf* 2016;179:187-197.
27. Lovas F.J. Microwave spectral tables. II. Triatomic molecules. // *J Phys Chem Ref Data* 1978;7:1445-1750.

28. Van Riet R., Steenbeckeliers G. Spectre de rotation de la molecule $^{32}\text{S}^{16}\text{O}^{18}\text{O}$. // Ann Soc Sc Brux 1984;97(3):117-153.
29. Lindenmayer J., Jones H. Laser spectroscopy of sulfur dioxide: The ν_1 band of $^{32}\text{S}^{16}\text{O}^{18}\text{O}$ and the ν_3 Band of $^{32}\text{S}^{18}\text{O}_2$. // J Mol Spectrosc 1987;126:58-62.
30. Belov S.P., Tretyakov M.Y., Kozin I.N., Klisch E., Winnewisser G., Lafferty W.J., Flaud J.-M. High frequency transitions in the rotational spectrum of SO_2 . // J Mol Spectrosc 1998;191:17-27.
31. Ulenikov O.N., Bekhtereva E.S., Krivchikova Yu.V., Zamotaeva V.A., Buttersack T., Sydow C., Bauerecker S. Study of the high resolution spectrum of $^{32}\text{S}^{16}\text{O}^{18}\text{O}$: The ν_1 and ν_1 bands. // J Quant Spectrosc Radiat Transf 2016;168:29-39.
32. Ulenikov O.N., Bekhtereva E.S., Gromova O.V., Zamotaeva V.A., Kuznetsov S.I., Sydow C., Bauerecker S. High resolution study of the rotational structure of doubly excited vibrational states of $^{32}\text{S}^{16}\text{O}^{18}\text{O}$: The 1rst analysis of the $2\nu_1$, $\nu_1 + \nu_3$, and $2\nu_3$ bands. // J Quant Spectrosc Radiat Transf 2017;189:344-350.
33. Huang X., Schwenke D.W., Lee T.J. Ames $^{32}\text{S}^{16}\text{O}^{18}\text{O}$ line list for high-resolution experimental IR analysis. // J Mol Spectrosc 2016;330:101-111.
34. Давыдов А. С. Квантовая механика / А. С. Давыдов. – М.: Наука, 1975. – С. 703.
35. 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.
36. Ferraro, J. R. and Krishnan, K. K. (Eds.). Practical Fourier Transform Infrared Spectroscopy: Industrial and Laboratory Chemical Analysis. San Diego, CA: Academic Press, 1990.
37. Griffiths, P. R. Chemical Infrared Fourier Transform Spectroscopy. New York: Wiley, 1975.
38. Griffiths, P. R. and De Haseth, J. A. Fourier Transform Infrared Spectrometry. New York: Wiley, 1986.

39. Vanasse, G. A.; and Sakai, H. "Fourier Spectroscopy." Ch. 7 in Progress in Optics, Volume VI (Ed. E. Wolf). Amsterdam, Netherlands: North-Holland, pp. 260-330, 1967.
40. Смит А., Прикладная ИК спектроскопия, «Мир», М., 1982.
41. Antipov A.B., Bykov A.D., Kapitanov V.A., Lopasov V.P., Makushkin Yu.S., Tolmachev V.I., et al. Water-vapor absorption spectrum in the $0.59 - \mu m$ region. // J Mol Spectrosc 1981;89:449-459.
42. Ulenikov O.N., Ushakova G.A. Analysis of the H₂O molecule second-hexade interacting vibrational states. // J Mol Spectrosc 1986;117:195-205.
43. Ulenikov O.N., Onopenko G.A., Hai-Lin, Zhang J.-H., Zhou Z.-Y., Zhu Q.S., Tolchenov R.N. Joint Rotational Analysis of 24 Bands of the H₂Se Molecule. // J Mol Spectrosc 1998;189:29-39.
44. Hu S.-M., Ulenikov O.N., Bekhtereva E.S., Onopenko G.A., He S.-G., Lin H., Cheng J.-X., Zhu Q.-S. High-resolution Fourier-transform intracavity laser absorption spectroscopy of D₂O in the region of the $4\nu_1 + \nu_3$ band. // J Mol Spectrosc 2002;212:89-95.
45. Ulenikov O.N., Burger H., Jerzembeck W., Onopenko G.A., Bekhtereva E.S., Petrunina O.L. The ground vibrational states of PH₂D and PHD₂. // J Mol Struct 2001;599:225-237.
46. Hu S.-M., Ulenikov O.N., Onopenko G.A., Bekhtereva E.S., He S.-G., Wang X.-H., Lin H., Zhu Q.-S.. High-resolution study of strongly interacting vibrational bands of HDO in the region $7600-8100 \text{ cm}^{-1}$. // J Mol Spectrosc 2000;203:228-234.
47. Ulenikov O.N., Hu S.-M., Bekhtereva E.S., Onopenko G.A., Wang X.-H., He S.-G., Zheng J.-J., Zhu Q.-S.. High-resolution Fourier transform spectrum of HDO in the region $6140-7040 \text{ cm}^{-1}$. // J Mol Spectrosc 2001;208:224-235.
48. Ulenikov O.N., He S.-G., Onopenko G.A., Bekhtereva E.S., Wang X.-H., Hu S.-M., Lin H., Zhu Q.-S. High-resolution study of the $(\nu_1 + \frac{1}{2}\nu_2 + \nu_3 = 3)$ polyad of strongly interacting vibrational bands of D₂O. // J Mol Spectrosc 2000;204:216-225.

49. Ulenikov O.N., Tolchenov R.N., Koivusaari M., Alanko S., Anttila R. High-resolution Fourier transform spectra of CH₂D₂: Pentade of the lowest interacting vibrational bands $\nu_4(A_1)$, $\nu_7(B_1)$, $\nu_9(B_2)$, $\nu_5(A_2)$ and $\nu_3(A_1)$. // J Mol Spectrosc 1994;167:109-130.
50. Bykov A.D., Lopasov V.P., Makushkin Yu.S., Sinitsa L.N., Ulenikov O.N., Zuev V.E. Rotation-vibration spectra of deuterated water vapor in the 9160-9390 cm⁻¹ region. // J Mol Spectrosc 1982;94:1-27.
51. He S.-G., Ulenikov O.N., Onopenko G.A., Bekhtereva E.S., Wang X.-H., Hu S.-M., Lin H., Zhu Q.-S. High-resolution Fourier transform spectrum of the D₂O molecule in the region of the second triad of interacting vibrational states. // J Mol Spectrosc 2000;200:34-39.
52. Watson J.K.G. Determination of centrifugal distortion coefficients of asymmetric-top molecules. // J Chem Phys 1967;46:1935-1949.
53. Wang X.-H., Ulenikov O.N., Onopenko G.A., Bekhtereva E.S., He S.-G., Hu S.-M., Lin H., Zhu Q.-S.. High-resolution study of the 1st hexad of D₂O. // J Mol Spectrosc 2000;200:25-33.
54. Ulenikov O.N., Gromova O.V., Bekhtereva E.S., Kashirina N.V., Bauerecker S., Horneman V.-M. Precise ro-vibrational analysis of molecular bands forbidden in absorption: The $\nu_8 + \nu_{10}$ band of the ¹²C₂H₄ molecule. // J Mol Spectrosc 2015;313:4-13.
55. Ulenikov O.N., Tolchenov R.N., Melekhina E.N., Koivusaari M., Alanko S., Anttila R. High resolution study of deuterated hydrogen sulfide in the region 2400-3000 cm⁻¹. // J Mol Spectrosc 1995;170:397-416.
56. Bykov A.D., Makushkin Yu.S., Ulenikov O.N. On the displacements of centers of vibration-rotation bands under isotope substitution in polyatomic molecules. // J Mol Spectrosc 1982;93:46-54.

Приложение А

Глава 1 Обзор литературы

Студент:

Группа	ФИО	Подпись	Дата
0Б31	Васильев Кирилл Сергеевич		

Консультант кафедры ОФ:

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

Консультант – лингвист кафедры иностраннных языков:

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Старший преподаватель кафедры иностраннных языков	Кабрышева Оксана Павловна			

1 Literature overview

1.1 Previous studies

Research of sulfur dioxide and all possible isotopologues takes place in laboratories all over the world since invention of Fourier-spectroscopy. Modern technologies are able to register high-resolution spectrums and have up to 10^{-5} cm^{-1} . This value is couple times higher than the one that was in beginning of the development of spectroscopy. Experimental accuracy is important because it affects accuracy of determining of molecule's energy structures.

Most common modification of sulfur dioxide, SO_2 , was subject of research more often than its isotopologues. Every year, international database is filled with information about this molecule [9-11, 13, 14]. Nevertheless, because of need of elaboration of surface of potential function, there is need in as full as possible information of all possible isotopologues.

In continuation to previous studies [9-19], the accent was made on spectral range of $1550\text{-}1950$ cm^{-1} , where the bands $\nu_1 + \nu_2$ and $\nu_2 + \nu_3$ are located. Earlier, high-resolution spectrums in this range were discussed in studies [20-24] for $^{32}\text{S}^{16}\text{O}_2$ isotopologue. After, in study [25] analysis for $^{34}\text{S}^{16}\text{O}_2$ molecule has been done. Finally, in study [26] research has been done for $^{32}\text{S}^{18}\text{O}_2$. $^{32}\text{S}^{16}\text{O}^{18}\text{O}$ isotopologue, which is considered in this work, holds third place in prevalence among all sulfur dioxide isotopologues, right after $^{32}\text{S}^{16}\text{O}_2$ and $^{34}\text{S}^{16}\text{O}_2$. Therefore, it is quite expectable to observe it in atmosphere's spectrum. Despite this, $^{32}\text{S}^{16}\text{O}^{18}\text{O}$ isotopologue was rarely investigated before [27-33]. Vibrational states $\nu_1 + \nu_2$ and $\nu_2 + \nu_3$ were not discussed before at all, which shows relevance and novelty of the research.

1.2 Mathematical formulation of problem

1.2.1 Perturbation theory

Acquiring of exact solution of Schrodinger equation is possible for simple systems only [34], for example, hydrogen H_2^+ . When solving problem for complex systems there is need in using the perturbation theory.

Hamiltonian of system is being chosen as following:

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

where $H_0(a)$ is operator, using which one may solve the Schrodinger equation; $h(a)$ is small increment to operator; a are variables. However, ro-vibrational Hamiltonian can be shown in other form:

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

where $H_n(k^n)$ is operator of smallness degree k^n in relation to operator H_0 .

Formally, it is possible to equalize operators $\sum_{n=1}^{\infty} H_n(k^n)$ and h , and after that to solve Schrodinger equation using traditional perturbation theory. However, it is not possible due to single difference of those operators. The point is that operator h must be function dependent on the same coordinates, such as operator of initial approximation. At the same time, operators $H_n(k^n)$ are functions of extra variables apart from those of operator of initial approximation H_0 .

Pure ro-vibrational operator should be chosen for ro-vibrational problem as operator H_0 . Therefore, operator h will be dependent not only on vibrational, but also on rotational coordinates. Expression (1) will look like:

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

In traditional perturbation theory, modifications to intrinsic energies and wave functions are calculated as the sum of combinations of matrix elements. At the same time, matrix elements of perturbation operators on intrinsic functions are operators, not numbers. Also, those operators do not commute, therefore, non-Hermitian contributions

appear. So it is unacceptable to use the results of traditional perturbation theory for such molecular problems. It is advisable to use method of effective operators [35].

1.2.2 Method of effective operators

The essence of the method can be explained in the following way. Let's say that Schrodinger equation cannot be solved with given Hamiltonian. Therefore, there is need in Hermitian operator H' such as:

- solution o Schrodinger equation can be determined explicitly;
- set B' of solutions with operator H' coincides with subset B of set A of all solutions with initial operator H .

Such operator H' is called effective Hamiltonian in subset B .

Let's take Hamiltonian (3) as an example. Suppose E_α and $|\alpha\rangle$ - intrinsic functions and values of operator H_0 . Wherein, $|\alpha\rangle$ is full orthonormal set of functions in dependence on variables a . Let's take random set of functions $|i\rangle$ in dependence on variables b and corresponding to rules of orthonormality and completeness. Therefore, functions $|\alpha, i\rangle = |\alpha\rangle |i\rangle$ will form full set of orthonormal functions on Hilbert space. Functions could be considered as bases of this space since operator (2) works in this space. Problem of determining of intrinsic functions and operator (2) values is solvable in the following way. Firstly, Hermitian matrix of operator H on functions $|\alpha\rangle |i\rangle$ should be built. Then this matrix must be diagonalized with use of unitary transformation

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

Elements of diagonalized matrix H' are intrinsic values of operator H , and intrinsic functions $|\beta\rangle$ are characterized by the following equation

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

where $U_{\beta, \alpha i}$ are elements of unitary matrix U , which diagonalize initial matrix. Therefore, the problem could be solved when choosing appropriate set of functions $|i\rangle$. Nevertheless, solving molecular spectroscopy problems with this method is not

possible because of formation of basis of infinite dimension by intrinsic functions of initial approximation operator $|\alpha\rangle$. Rest matrixes become of infinite dimension. As a result it is impossible to diagonalize matrix H using this method.

The construction and diagonalization of the matrix H can be divided into the following stages:

- creating matrix $\langle \alpha|H|\beta\rangle$ on functions $|\alpha\rangle$, where $\langle \alpha|H|\beta\rangle$ are operators in dependence on variables b ;
- creation and diagonalization of matrix $\langle i|\langle \alpha|H|\beta\rangle|j\rangle$.

All elements of operator matrix $\langle \alpha|H|\beta\rangle$ will differ from zero. If matrix $\langle i|\langle \alpha|H|\beta\rangle|j\rangle$ is created, then determination of intrinsic functions and values of operator H will be reduced to simple diagonalization procedure, described before (4), (5).

Also, instead of using H , there is way to use

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

where G is random unitary operator, which should be less than unit operator. This task is easily achieved if

$$G = \exp(i \sum_{n=1}^{\infty} g_n(k^n)),$$

where $g_n = g_n(a, b)$ are small Hermitian operators of k^n degree. Then creation of matrix $\langle \alpha|H'|\beta\rangle$ takes place. Since the operator G is arbitrary, it makes sense to take it in a form such that some elements of $\langle \alpha|H'|\beta\rangle$ will be zero. To do that it is necessary to partition the space L_α of wave functions $|\alpha\rangle$ into two subspaces L_{α_0} and $L_{\alpha'}$ in such way that $L_\alpha = L_{\alpha_0} + L_{\alpha'}$. The important point here is the finite dimensionality of the space L_{α_0} .

Therefore, the whole set of matrix $\langle \alpha|H'|\beta\rangle$ elements would be divided into four subsets: $\langle \alpha^0|H'|\beta^0\rangle$, $\langle \alpha^0|H'|\beta'\rangle$, $\langle \alpha'|H'|\beta^0\rangle$, $\langle \alpha'|H'|\beta'\rangle$.

The operator should be chosen so that elements of the type $\langle \alpha^0|H'|\beta'\rangle$ or $\langle \alpha'|H'|\beta^0\rangle$ are zero.

$$\langle \alpha | H' | \beta \rangle = \begin{pmatrix} \widetilde{H}_{eff} & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & 0 & \cdots & x & x & \cdots \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ 0 & 0 & \cdots & x & x & \cdots \end{pmatrix}$$

Now, created matrix of numbers $\langle i | \langle \alpha | H' | \beta \rangle | j \rangle$ will look the same. Intrinsic values of operators H' and H could be determined by diagonalization of this matrix.

The goal of diagonalization could be achieved by solving equation $\det(A - Ex) = 0$, where E is unit matrix, A is random matrix. Since determinant does not change when replacing rows and columns, matrix $\langle \alpha | H' | \beta \rangle$ could be reduced to block-diagonal form. Therefore, whole matrix $\langle i | \langle \alpha | H' | \beta \rangle | j \rangle$ is divided into two independent submatrices. Their following diagonalization takes place independently. Main point is that submatrix $\langle i | H'_{eff} | j \rangle$ has finite dimension by indices $|\alpha \rangle$ and $|\beta \rangle$. In this case, interest in the energy levels does not make us diagonalize whole matrix $\langle i | \langle \alpha | H' | \beta \rangle | j \rangle$. It is enough to consider submatrix $\langle i | H'_{eff} | j \rangle$, where $H'_{eff} = \langle \alpha^0 | H' | \beta^0 \rangle$.

Operator H'_{eff} is called effective operator of system of N conditions $|\alpha^0_1 \rangle$, $|\alpha^0_2 \rangle \dots |\alpha^0_N \rangle$.

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

where sum takes place on all vibrational states.

1.3 Description and principle of operation of Fourier-spectrometer

The Fourier spectrometer is a Michelson interferometer, which is illuminated by the investigated radiation. One of the two mirrors moves at a constant speed. At the output, a curve is obtained for the dependence of the detector reading on the difference in the path of the beams in the arms of the interferometer. The resulting curve is then subjected to a Fourier analysis [36], by means of which it is converted into an intensity distribution over frequencies.

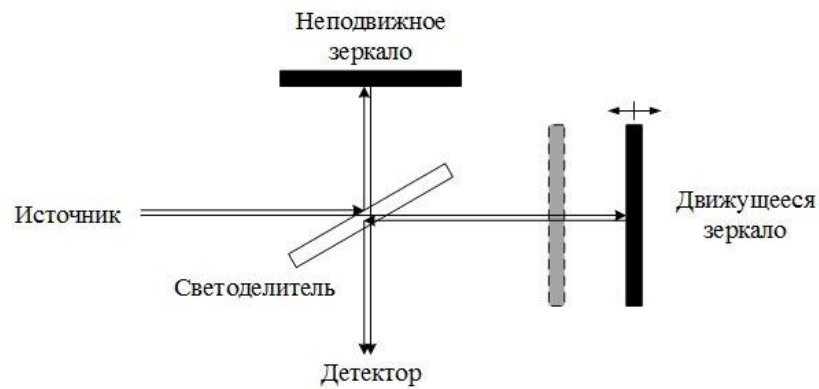


Figure 1 - Fourier spectrometer base - Michelson interferometer

When both rays are reflected from the mirrors, they are subsequently superimposed and, as a consequence, interference takes place. The position of the plane of localization of the interference pattern, as well as the result of the interference, depends on what the conditions for the beam splitter illumination were, how the mirrors were arranged relative to each other and other factors.

To register the intensity, it is necessary to send a signal to the detector, which is connected to the analog-to-digital converter (ADC) through the amplifier. The ADC then converts the signal into a digital code. The output is an array, which is an interferogram of the source. This array is subsequently computed using the Fourier transform.

To obtain the spectrum, it is necessary to go through two stages. First of all, you need to record the interferogram of the radiation being studied. Further, using the Fourier transform of the interferogram, it is possible to calculate the spectrum. One of the main differences between the Fourier spectrometer and other spectrometers is the possibility of simultaneously registering the entire spectrum under study at once. Modulation of the intensity of monochromatic parts of radiation in Fourier spectrometry occurs due to a change in the path difference of the interfering beams. The frequency of modulation is uniquely determined by the wavelength [37]. At the same time, a signal appears at the receiver, which is a Fourier transform from the energy distribution function with respect to frequencies, i.e. from the spectrum. To obtain the ordinary spectrum, it is necessary to perform the inverse Fourier transform.

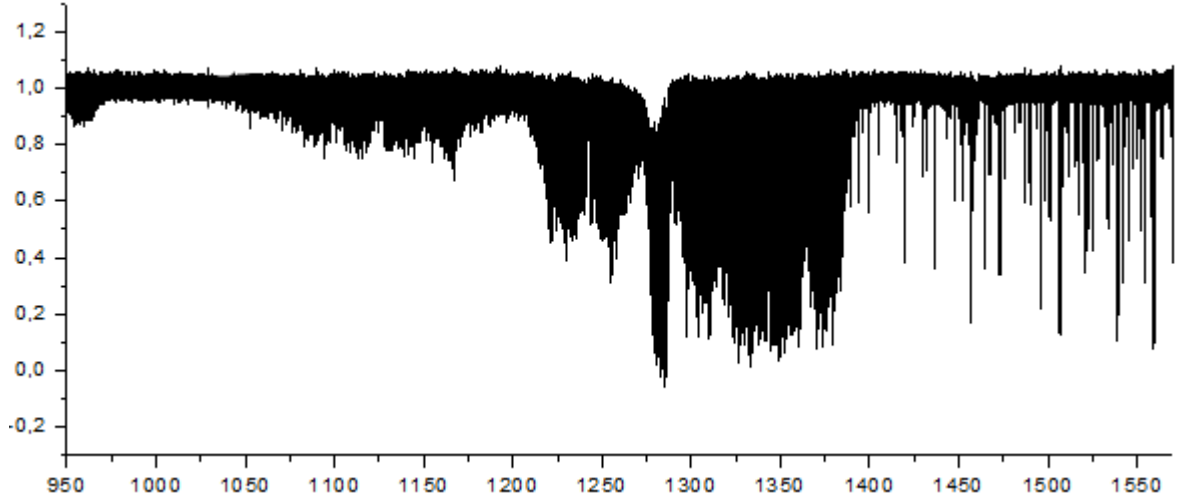


Figure 2 - Example of spectrum of an SO₂ molecule obtained by means of a Fourier spectrometer

If the Michelson interferometer is illuminated by monochromatic radiation at a frequency of ν_0 , the electric field on the beamsplitter plane will be written as [38]:

$$E_1 = E_0 \cos \omega t, \quad (1)$$

where $\omega = 2\pi c\nu$.

The beam splitter separates the incident light into two beams with the same intensity, after which both waves are reflected from the mirrors (fixed and movable) and when the waves are shifted on the compensating plate, a time delay t_0 of one wave relative to the other is formed.

Resulting electric field:

$$E_2 = \frac{E_0}{2} [\cos \omega t + \cos \omega(t + t_0)], \quad (2)$$

where

$$\omega t_0 = 2\pi \nu_0 \delta \quad (3)$$

– phase shift of the second ray, δ - path difference.

A detector placed at the output of the interferometer will record the signal $I(\nu_0, \delta)$ proportional to the square of the amplitude of the electric wave:

$$I(\nu_0, \delta) = \frac{1}{2} I_0 [1 + \cos(2\pi \nu_0 \delta)]. \quad (4)$$

It consists of a constant and a variable part, the last part is an interferogram. Thus, when the interferometer is irradiated with monochromatic radiation at the output

of the receiver, we have a sinusoidal electric signal with a constant amplitude, which is proportional to the brightness of the incident radiation. If the interferometer is illuminated by several monochromatic waves, each of them will propagate in the interferometer similarly, and the resulting signal will be a superposition of the individual signals from each wave. An analysis of this signal will allow us to isolate the frequency of each incident signal ν_0 .

In the case of an arbitrary spectrum $B(\nu)$ lying in the range between ν_1 and ν_2 , bounded either by the radiation spectrum itself, or by a filter, or by the sensitivity of the detector, the interferogram will have the form:

$$I(\delta) = \int_{\nu_1}^{\nu_2} B(\nu) \cos(2\pi\nu\delta) d\nu, \quad (5)$$

which is the sum of the intensities $dI(\nu_1, \delta) = B(\nu) \cos(2\pi\nu\delta)$ for each spectral element in the spectrum.

If $B(\nu)$ is the emission spectrum of a point source, then the interferogram is expressed by the relation:

$$I(\delta) = \int_0^{\infty} B(\nu) \cos(2\pi\nu\delta) d\nu = \int_{-\infty}^{\infty} B_e(\nu) \cos(2\pi\nu\delta) d\nu, \quad (6)$$

where $B_e(\nu)$ - even part of the function $B(\nu)$ - is defined by the expression:

$$B_e(\nu) = \frac{1}{2}(B(\nu) + B(-\nu)). \quad (7)$$

To reconstruct the spectrum from the interferogram, it is necessary to perform the inverse Fourier transformation

$$B(\nu) = \int_{-\infty}^{\infty} I(\delta) \cos(2\pi\nu\delta) d\delta. \quad (8)$$

In order to obtain the sample spectrum, the interferogram of the standard $B_{st}(\nu)$ and the interferogram with the sample $B_{sample}(\nu)$ should be registered under the same conditions. The transmission spectrum of the sample (T) will be the ratio of their Fourier transforms:

$$T = \frac{B_{sample}(\nu)}{B_{st}(\nu)}. \quad (9)$$

The spectrum that is recorded in the absence of a sample is called a reference spectrum or a reference spectrum. It should be noted that the Fourier spectrometer is a single-beam instrument. Therefore, the comparison spectrum is a radiation spectrum

of a thermal source on which the absorption spectrum of water vapor, carbon dioxide or other substances that are possibly located in the atmosphere is imposed [39]. The same bands are also recorded in the spectrum of the sample, but when the spectrum of the sample is divided into a standard one, only the absorption of the sample remains.

Nowadays Fourier spectrometers of fast scanning are manufactured. In them, the exact position of the optical parameters (optical path difference, position of the movable mirror and speed of movement) is controlled by means of a helium-neon laser. The application of the technologies of our century makes it possible to make Fourier spectrometers compact and inexpensive.

The advantages of the Fourier spectrometer are [40]:

1. Winning of Felzhet - in the Fourier spectrometer for each moment of time, the information is registered immediately on the whole interval. On this basis, the Fourier spectrometer has a higher signal-to-noise ratio;

2. Winning of Jacquino - in the Fourier spectrometer it is allowed to use large solid angles at the source and receiver. This allows to increase the transmission of energy at high resolution;

3. Constant resolution throughout the investigated range. The resolution of an ordinary spectrometer is determined by the width of the slit and the diffraction of light waves on it. In the interferometer, the resolution is equal to the reciprocal of the maximum path difference in the interferogram;

4. High accuracy in determining wave numbers. In Fourier spectrometry, there is no need for external standards for the calibration of the scale of wave numbers. Instead, they use an internal standard. For example, it can be a single-frequency gas laser, used to calibrate the path difference in the count of interference bands when recording an interferogram. The accuracy of the determination achieved with this is extremely high;

5. Wide spectrum range. In one pass of the mirror, an interferogram is obtained, containing information on the entire short-wave ($5000\text{-}400\text{ cm}^{-1}$) range for the beam splitter used. To go to the long-wavelength region (less than 400 cm^{-1}), it is sufficient to change the beam splitter, the radiation source and the receiver;

6. Ability to record weak signals. A high transmission of energy and the possibility of improving the signal-to-noise ratio by accumulating interferograms makes it possible to obtain spectra of excellent quality.