

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

---

Школа Инженерная школа ядерных технологий  
Направление подготовки 03.03.02 «Физика»  
Отделение школы (НОЦ) Отделение экспериментальной физики

**БАКАЛАВРСКАЯ РАБОТА**

Тема работы
Получение высокоточной информации об уровнях энергий фундаментального состояния $\nu_2$ молекулы $^{34}\text{SO}_2$

УДК 539.189:539.194

Студент

Группа	ФИО	Подпись	Дата
150Б41	Инь Ифэй		

Руководитель

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Ассистент	Аслаповская Ю.С.			

**КОНСУЛЬТАНТЫ:**

По разделу «Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение»

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Доцент ШИП	Черепанова Н.В.	к.ф.н.		

По разделу «Социальная ответственность»

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Доцент ОКД	Ларионова Е.В.	к.х.н.		

**ДОПУСТИТЬ К ЗАЩИТЕ:**

Руководитель ООП	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Доцент ОЭФ	Лидер А.М.	к.т.н.		

Томск – 2018 г.

## Запланированные результаты обучения по программе

Код результата	Результат обучения (выпускник способен)	Требования ФГОС, критериев и/или заинтересованных сторон
<i>Общекультурные компетенции</i>		
Р1	Понимает необходимость самостоятельного обучения и повышения квалификации в течение всего периода профессиональной деятельности.	Требования ФГОС (ОК-7), критерий 5 АИОР
Р2	К самоорганизации и самообразованию, работать в коллективе, к коммуникации в устной и письменной формах, в том числе на иностранном языке, толерантно воспринимать социальные, этические и культурные различия, использовать методы и средства физической культуры, приёмы первой помощи и методы защиты в условиях ЧС.	Требования ФГОС3+ (ОК-5, ОК-6, ОК-7, ОК-8, ОК-9)
<i>Общепрофессиональные компетенции</i>		
Р3	Умеет находить зарубежных и отечественных партнеров, владеет иностранным языком, позволяющим работать с зарубежными партнерами с учетом культурных, языковых и социально-экономических условий.	Требования ФГОС (ОК-2, ОК-4), критерий 5 АИОР
Р4	Понимать сущность и значение информации, соблюдать основные требования информационной безопасности, использовать методы, способы, средства получения и хранения информации, решать стандартные задачи на основе информационной и библиографической культуры.	Требования ФГОС3+ (ОПК-4, ОПК-5, ОПК-6)
Р5	Получить организационно-управленческие навыки при работе в научных группах, критически переосмысливать накопленный опыт, изменять при необходимости профиль своей профессиональной деятельности, нести ответственность за последствия своей инженерной деятельности.	Требования ФГОС3+ (ОПК-8, ОПК-9)
<i>Профессиональные компетенции</i>		
Р6	Проявляет глубокие естественнонаучные, математические профессиональные знания в проведении научных исследований в перспективных областях профессиональной деятельности.	Требования ФГОС (ОК-1, ПК-1), критерий 5 АИОР
Р7	Принимает участие в фундаментальных исследованиях и проектах в области физики низких температур, конденсированного состояния и материаловедения, а также в модернизации современных и создании новых методов изучения механических, электрических, магнитных и тепловых свойств твердых, жидких и газообразных веществ.	Требования ФГОС (ПК-2), критерий 5 АИОР

Р8	Способен планировать проведение аналитических имитационных исследований по профессиональной деятельности с применением современных достижений науки и техники, передового отечественного и зарубежного опыта в области научных исследований, умеет критически оценивать полученные теоретические и экспериментальные данные и делает выводы, знает правовые основы в области интеллектуальной собственности.	Требования ФГОС (ОК-4, ПК-6, ПК7, ПК-8, ПК-9), критерий 5 АИОР
Р9	Умеет интегрировать знания в различных и смежных областях научных исследований и решает задачи, требующие абстрактного и креативного мышления и оригинальности в разработке	Требования ФГОС3+ (ПК-9)

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

---

Школа базовой инженерной подготовки  
Направление подготовки 03.03.02 «Физика»  
Отделение школы (НОЦ) экспериментальной физики

УТВЕРЖДАЮ:  
Руководитель ООП  
\_\_\_\_\_ Лидер А.М.  
(Подпись) (Дата)  
(Ф.И.О.)

**ЗАДАНИЕ**  
**на выполнение выпускной квалификационной работы**

В форме:

Бакалаврской работы
---------------------

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

Студенту:

Группа	ФИО
150Б41	Инь Ифэй

Тема работы:

Получение высокоточной информации об уровнях энергий фундамертального состояния $\nu_2$ молекулы $^{34}\text{SO}_2$	
Утверждена приказом директора (дата, номер)	

Срок сдачи студентом выполненной работы:

--	--

**ТЕХНИЧЕСКОЕ ЗАДАНИЕ:**

<p><b>Исходные данные к работе</b> (наименование объекта исследования или проектирования; производительность или нагрузка; режим работы (непрерывный, периодический, циклический и т. д.); вид сырья или материал изделия; требования к продукту, изделию или процессу; особые требования к особенностям функционирования (эксплуатации) объекта или изделия в плане безопасности эксплуатации, влияния на окружающую среду, энергозатратам; экономический анализ и т. д.).</p>	<p>Объект исследования: Изотополог молекулы <math>^{34}\text{SO}_2</math></p>
---	---

<p><b>Перечень подлежащих исследованию, проектированию и разработке вопросов</b> (аналитический обзор по литературным источникам с целью выяснения достижений мировой науки техники в рассматриваемой области; постановка задачи исследования, проектирования, конструирования; содержание процедуры исследования, проектирования, конструирования; обсуждение результатов выполненной работы; наименование дополнительных разделов, подлежащих разработке; заключение по работе).</p>	<ol style="list-style-type: none"> <li>1. Общая характеристика молекулы SO<sub>2</sub></li> <li>2. Теоретическая основа</li> <li>3. Принцип работы Фурье–спектрометра</li> <li>4. Результаты и анализ</li> </ol>
<p><b>Перечень графического материала</b> (с точным указанием обязательных чертежей)</p>	

<p><b>Консультанты по разделам выпускной квалификационной работы</b> (с указанием разделов)</p>	
<p><b>Раздел</b></p>	<p><b>Консультант</b></p>
<p><b>Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение</b></p>	<p>Доцент ШИП Черепанова Н.В.</p>
<p><b>Социальная ответственность</b></p>	<p>Доцент ОКД Ларионова Е.В.</p>

<p><b>Дата выдачи задания на выполнение выпускной квалификационной работы по линейному графику</b></p>	
--	--

**Задание выдал руководитель:**

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Ассистент	Аслаповская Ю.С.			

**Задание принял к исполнению студент:**

Группа	ФИО	Подпись	Дата
150Б41	Инь Ифэй		

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

Студенту:

Группа 150Б41	ФИО Инь Ифэй
------------------	-----------------

Школа	ИШЯТ	Кафедра	Экспериментальная физика
Уровень образования	Бакалавр	Направление/специальность	03.03.02Физика

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

1. Стоимость ресурсов научного исследования (НИ): материально-технических, энергетических, финансовых, информационных и человеческих	Стоимость материалов и оборудования Окладу участников проекта
2. Нормы и нормативы расходования ресурсов	Нормы рабочего времени
3. Используемая система налогообложения, ставки налогов, отчислений, дисконтирования и кредитования	Отчисления по страховым взносам составляют 30,2 % от ФОТ на 2018 год

### Перечень вопросов, подлежащих исследованию, проектированию и разработке:

1. Оценка коммерческого и инновационного потенциала НТИ	SWOT-анализ
2. Планирование процесса управления НТИ: структура и график проведения, бюджет, риски и организация закупок	Формирование плана и графика разработки: - определение структуры работ; - определение трудоемкости работ; - разработка графика Ганта; - расчет сметы затрат: - материальные затраты; - оплата труда; - отчисления во внебюджетные фонды; - накладные расходы
3. Определение ресурсной, финансовой, экономической эффективности	Определение интегрального показателя ресурсоэффективности

### Перечень графического материала (с точным указанием обязательных чертежей):

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

### Дата выдачи задания для раздела по линейному графику

#### Задание выдал руководитель:

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Доцент ШИП	Черепанова Н.В	к.ф.н.		

#### Задание принял к исполнению студент:

Группа	ФИО	Подпись	Дата
150Б41	Инь Ифэй		

## ЗАДАНИЕ ДЛЯ РАЗДЕЛА «СОЦИАЛЬНАЯ ОТВЕТСТВЕННОСТЬ»

Студенту:

Группа	ФИО
150Б41	Инь Ифэй

Школа	ИШЯТ	Кафедра	Экспериментальная физика
Уровень образования	Бакалавр	Направление/специальность	03.03.02 Физика

**Тема дипломной работы: Получение высокоточной информации об уровнях энергий фундаментального состояния  $\nu_2$  молекулы  $^{34}\text{SO}_2$**

<p><b>Исходные данные к разделу «Социальная ответственность»:</b></p>	<p>1. Описание рабочего места (рабочей зоны ,технологического процесса, механического оборудования) на предмет возникновения:          -вредных проявлений факторов производственной среды ( метеоусловия, вредные вещества,– освещение, шумы, вибрации, электромагнитные поля)          -опасных проявлений факторов производственной среды(механической природы, термического          –характера, электрической, пожарной и взрывной природы) негативного воздействия на окружающую природную среду          – чрезвычайных ситуаций (в основном опасность пожара)</p>
<p><b>Перечень вопросов, подлежащих исследованию, проектированию и разработке:</b></p>	<p>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 нормативотехнический документ);          предлагаемые средства защиты ( сначала коллективной защиты, затем – индивидуальные защитные средства)          2 Анализ выявленных опасных факторов при разработке и эксплуатации проектируемого решения в следующей последовательности:          а)механические опасности (источники, средства защиты);          б) термические опасности (источники, средства защиты);          в) электробезопасность (в т.ч. статическое электричество, молниезащита-источники–средства защиты);          г)пожаровзрывобезопасность (причины, профилактические мероприятия, первичные средства– пожаротушения).          3Охрана 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);</p>

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

**Задание выдал руководитель:**

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Доцент ОКД	Ларионова Е.К	к.х.н.		

**Задание принял к исполнению студент:**

Группа	ФИО	Подпись	Дата
150Б41	Инь Ифэй		



## РЕФЕРАТ

Выпускная квалификационная работа состоит из 62 страницы, 9 рисунков, 19 таблиц и 17 источников.

Ключевые слова: Спектр высокого разрешения, молекулярная спектроскопия, молекула  $^{34}\text{SO}_2$ , колебательно-вращательный спектр.

Объектом исследования является молекула  $^{34}\text{SO}_2$ .

Цель работы: получение высокоточной информации об уровнях энергий стационарного состояния  $\nu_2$  молекулы  $^{34}\text{SO}_2$  и получение набора спектроскопических параметров.

В данной работе была впервые проинтерпретированна полоса  $\nu_2$  молекулы  $^{34}\text{SO}_2$ . В результате интерпритации было получено более 1500 переходов с максимальными значениями квантовых чисел  $J_{\max} = 40$  и  $K_{\max} = 15$ . На этой основе было определено порядка 600 уровней энергий. Решена обратная спектроскопическая задача и получен набор спектроскопических параметров.

Полученные результаты используются для пополнения российских и международных спектроскопических баз данных.

Область применения: астрофизика, планетология и атмосферная оптика.

В будущем планируется изучение интенсивностей линий в спектре поглощения и, исходя из полученных результатов, определить параметры дипольного момента.

## ОГЛАВЛЕНИЕ

Введение.....	12
1. Общая характеристика молекулы SO <sub>2</sub> .....	14
2. Теоретическая основа.....	16
2.1. Решение уравнения Шредингера.....	16
2.2. Теория возмущений в вырожденном случае.....	17
2.3. Молекулярные спектры.....	18
2.4. Симметрия. Операции симметрии.....	24
2.5. Математическое описание операций симметрии.....	25
3. Принцип работы Фурье–спектрометра.....	26
4. Результаты и анализ.....	27
4.1. Метод комбинационных разностей.....	27
4.2. Экспериментальные данные.....	29
4.3. Результаты анализа спектра молекулы <sup>34</sup> SO <sub>2</sub> .....	31
5. Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение.....	33
5.1. Swot-анализ работы.....	33
5.2. Планирование научно-исследовательской работы.....	36
5.2.1 Структура работ в рамках научного исследования.....	36
5.2.2. Определение трудоемкости выполнения работ.....	38
5.2.3. Разработка графика проведения технического проекта.....	40
5.2.4 Сырье, материалы, покупные изделия и полуфабрикаты.....	41
5.2.5. Расчет полной заработной платы исполнителей.....	43
5.2.6 Дополнительная заработная плата научно-производственного персонала.....	45
5.2.7 Отчисления на социальные нужды.....	46
5.2.8 Накладные расходы.....	46
5.3. Определение ресурсоэффективности проекта.....	46

6. Социальная ответственность.....	48
6.1 Анализ выявленных вредных факторов проектируемой производственной среды.....	49
6.1.1 Метеоусловия .....	50
6.1.2 Шум .....	52
6.2. Защита человека от вредных факторов рабочего места.....	52
6.3. Охрана окружающей среды.....	56
6.4. Защита в ЧС.....	57
6.5. Правовые и организационные вопросы обеспечения безопасности.....	58
Заключение.....	60
Список литературы.....	61

## **Введение**

Данная работа посвящена исследованию колебательно-вращательного спектра высокого разрешения молекулы  $^{34}\text{SO}_2$ .

С помощью колебательно-вращательной молекулярной спектроскопии можно получать информацию путем интерпретации спектра, зарегистрированного в ходе эксперимента. Колебательно-вращательная спектроскопия – это раздел молекулярной спектроскопии, который изучает физические свойства молекул посредством исследования их спектров. В частности, методами колебательно-вращательной спектроскопии можно определять различные параметры молекулы, а именно, равновесные параметры, дипольный момент, моменты инерции, с помощью исследования тонкой структуры спектров. Также колебательно-вращательные спектры высокого разрешения позволяют получать наиболее полную информацию о характере внутримолекулярных взаимодействий состояний и свойствах молекул.

**Объектом** настоящего исследования является колебательно-вращательный спектр высокого разрешения молекулы  $^{34}\text{SO}_2$ , полосы  $\nu_2$ . Интерес в изучении данной молекулы мотивирован как прикладными, так и академическими приложениями. Оксид серы в изобилии присутствует во Вселенной. Эта молекула и её различные изотопологи были идентифицированы в межзвездном пространстве, в планетарных туманностях, в нашей Солнечной системе, в качестве примера, в атмосфере Венеры. Кроме того, изучение этой молекулы важно для решения задач распространения монохроматического излучения в атмосфере, лазерного зондирования, передачи информации, дистанционного обнаружения и мониторинга  $\text{SO}_2$ .

**Целью работы** данного исследования является получение высокоточной информации об уровнях энергий стационарного состояния  $\nu_2$  молекулы  $^{34}\text{SO}_2$  и получение набора спектроскопических параметров.

Для реализации поставленной цели, были сформулированы следующие **задачи**:

1. Изучить основные принципы колебательно-вращательной спектроскопии;
2. Ознакомиться с методами описания молекулярных спектров;
3. Проинтерпретировать спектр молекулы  $^{34}\text{SO}_2$  в районе полосы  $\nu_2$ ;
4. Решить обратную спектроскопическую задачу.

## 1. Общая характеристика молекулы SO<sub>2</sub>

Молекула <sup>34</sup>SO<sub>2</sub> является асимметричным волчком. Молекула <sup>34</sup>SO<sub>2</sub> имеет симметрию C<sub>2v</sub> и для неё характерны следующие три нормальных колебания: q<sub>1</sub>, q<sub>2</sub> – полносимметричные колебания A<sub>1</sub>; q<sub>3</sub> – антисимметричное колебание B<sub>1</sub>.

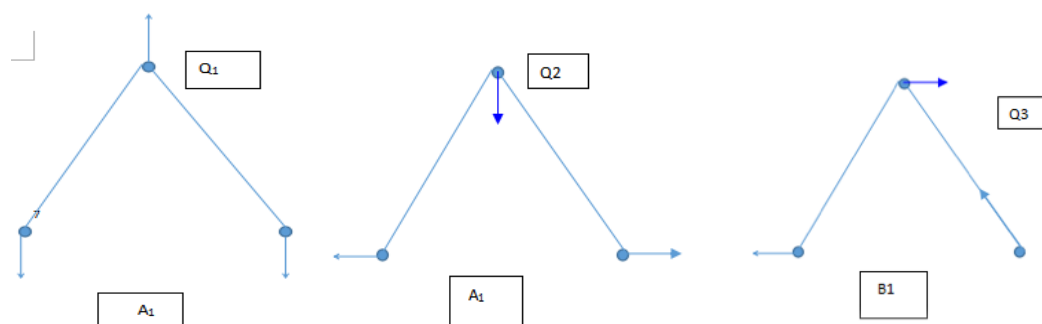


Рисунок 1 – Колебательные моды молекулы <sup>34</sup>SO<sub>2</sub>

Всего в группе симметрии C<sub>2v</sub> четыре неприводимых представления, а именно, A<sub>1</sub>, A<sub>2</sub>, B<sub>1</sub> и B<sub>2</sub>. Все неприводимые представления группы принято записывать в виде таблицы характеров, строки которой состоят из сумм диагональных элементов матриц неприводимых представлений (в нашем случае матрицы неприводимых представлений одномерные), а столбцы нумеруются элементами группы.

Таблица 1 – Таблица характеров

C <sub>2v</sub>	E	C <sub>2</sub>	σ (xz)	σ (yz)	Симметрия колебаний
A <sub>1</sub>	1	1	1	1	Q <sub>1</sub> , Q <sub>2</sub>
A <sub>2</sub>	1	1	-1	-1	
B <sub>1</sub>	1	-1	1	-1	Q <sub>3</sub>
B <sub>2</sub>	1	-1	-1	1	

Равновесная конфигурация диоксида серы (<sup>34</sup>SO<sub>2</sub>) представлена на рисунке 2, где равновесный угол между связями α=119°, равновесная длина связи O-S равна r<sub>e</sub>=1.431 Å.

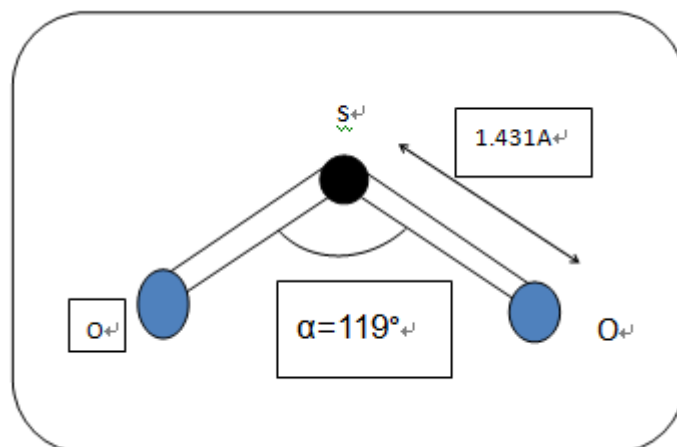


Рисунок 2 – Равновесная конфигурация  $^{34}\text{SO}_2$  молекулы

Диоксид серы является важным химическим веществом во многих областях, таких как синтетическая и аналитическая химия, астрофизика и лазерная техника. В Земной атмосфере диоксид серы является естественной составляющей, происходящей из вулканической эмиссии, а также является антропогенным загрязнителем. Например, вулканическое извержение вулкана Пинатубо на Филиппинах в июне 1991 года выпустило около 20 миллионов тонн серы в атмосферу. Будучи в стратосфере,  $\text{SO}_2$  превращается в сульфатные аэрозоли, которые влияют как на климат, так и на стратосферную химию [1-4].

Также,  $\text{SO}_2$  является одним из наиболее важных положений для изучения атмосферы и биосферы Земли [5-8], и особенно для химии облаков атмосферы Венеры, где обилие диоксида серы в миллион раз выше, чем в атмосфере Земли, например, [10-12]

Изотопологи двуоксида серы важны для астрофизических проблем (например, обнаружение горячего молекулярного ядра в большом Магеллановом Облаке [13], процессы образования массивных протозвезд [14], межзвездный диоксид серы был обнаружен в испускании из направления молекулярного облака туманности Ориона [15] и т. д.).

В настоящем исследовании мы сосредоточимся на анализе вращательной структуры полосы  $\nu_2$  молекулы  $^{32}\text{SO}_2$  (рисунок 1).

## 2. Теоретическая основа

### 2.1. Решение уравнения Шредингера

Точное решение уравнения Шредингера, определяющее энергию стационарных состояний систем, возможно только для некоторых простейших полей, соответствующих идеализированным системам. В этом параграфе рассматривается теория компенсации для стационарных задач с дискретным энергетическим спектром. В этом случае гамильтониан системы обычно выбирается в следующем виде

$$H(a) = H_0(a) + h(a).$$

где  $H_0(a)$  – это оператор Гамильтона, решения уравнения Шредингера с которым известны,  $h(a)$  – «малая» добавка к оператору  $H_0(a)$ . Символ  $a$  обозначает множество переменных, на которых оператор  $H$ . С другой стороны, колебательно-вращательный гамильтониан может быть представлен следующим образом:

$$H = H_0 + \sum_{n=1}^{\infty} H_n(\aleph^n)$$

Символ  $(\aleph^n)$  у  $H_n$  означает, что соответствующий оператор  $H_n$  является малым по сравнению с  $H_0$  и порядок малости определяется как  $\aleph^n$ , где  $\aleph$  – малый параметр  $\aleph \sim (m_e/\bar{M}_N)^{1/4}$ ;  $m_e$  – масса электрона;  $\bar{M}_N$  – средняя масса ядер молекулы; для не очень тяжелых молекул типа  $\text{SO}_2$ .

В то же время операторы  $H_n(\aleph^n)$ , которые рассматриваются в теории молекул, в дополнение к переменным, из которого оператор начального приближения  $H_0$ , обычно являются функциями других переменных. Однако, по своей природе, оператор возмущений  $\sum H_n(\aleph^n)$  должен, очевидно, зависеть от колебательной и вращательной координат. Аналогично, при рассмотрении колебательно-вращательной задачи удобно взять чисто колебательный  $H_0$  в качестве начального приближения, и в этом случае возмущение. Тогда гамильтониан можно записать в виде



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

В традиционной теории возмущений искомые величины получаются в виде суммы злисных-комбинаций матричных элементов  $\langle \psi | h_{(a)} | \psi' \rangle$ , т.е. чисел. В то же время матричные элементы операторов  $h(a,b)$  по собственным функциям оператора  $H_0(a)$  уже не являются числами, а операторами. В общем случае эти операторы не коммутируют. По этой причине формирование результатов обычной теории возмущений для рассматриваемых молекулярных задач неверно.

## 2.2. Теория возмущении в вырожденном случае

Однако для каждого значения  $\lambda \neq 0$  оператор Гамильтона с потенциальной энергией имеет непрерывные собственные значения энергии, так как при больших отрицательных значениях  $x$  потенциальная энергия становится меньше полной энергии частицы. В этом случае волновые функции и энергетические уровни, полученные на основе метода теории возмущений, описывают нестационарные состояния. Частица может пройти через потенциальный барьер в сторону отрицательных значаений  $x$  и удалиться в бесконечность. Однако при малых значениях  $\lambda$  вероятность такого процесса будет пренебрежимо мало, поэтому решения, найденные методом теории возмущений, будут практически совпадать со стационарными состояниями. Состояния такого типа называют квазистационарными состояниями.

В заключение этого параграфа выведем еще одно выражение для определения энергии во втором порядке возмущения. Пусть  $H = H_0 + V$  и  $H_0 \varphi_n = E_n^{(0)} \varphi_n$ . Тогда уравнение Шредингера  $(H - E)\Psi = 0$  подстановкой

$$\Psi = \sum_n \alpha_n \varphi_n \quad (1.2.1)$$

Сводится к бесконечной системе однородных алгебраических уравнений

$$\sum_n (H_{mn} - E\delta_{mn})\alpha_n = 0, \quad (1.2.2)$$

где

$$H_{mn} = \langle m|H|n\rangle = \begin{cases} E_n^{(0)} + V_{nn}, & \text{если } m = n \\ V_{mn}, & \text{если } m \neq n \end{cases} \quad (1.2.3)$$

Условие разрешимости системы уравнений (1.2.3) приводит к уравнению бесконечного порядка

$$\|H_{mn} - E\delta_{mn}\| = 0, \quad (1.2.4)$$

корни которого определяют точные собственные значения оператора  $H$ .

Предположим, что мы интересуемся изменением уровня  $E_1^0$  под влиянием возмущения  $V$ . Если для любого  $m \neq 1$  выполняется неравенство

$$|H_{tm}| \ll |E_1^0 - E_m^0|,$$

то, пренебрегая в детерминанте (1.2.4) всеми недиагональными матричными элементами  $H_{1m}$ , получим, по согласованию, энергию в первом приближении.[15]

$$E = H_{11} = E_1^0 + V_{11}$$

Чтобы получить энергию во втором приближении, пренебрежем в (1.2.4) всеми недиагональными элементами, не лежащими в первой строчке и в первом столбце детерминант:

$$\begin{vmatrix} H_{11} - E & H_{12} & H_{13} & \cdots \\ H_{21} & H_{22} - E & 0 & \cdots \\ H_{31} & \cdots & 0 & \cdots \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \end{vmatrix} = 0,$$

Умножая вторую строчку на  $\frac{H_{12}}{H_{22}-E}$  и вычитая из первой, находим новый детерминант, у которого первый элемент первой строчки будет равен

$$H_{11} - E - \frac{|H_{12}|^2}{H_{22}-E},$$

а на месте  $H_{12}$  будет стоять нуль. Умножая затем третью строчку нового детерминанта на  $H_{13}(H_{33} - E)^{-1}$  и вычитая из первой, мы уничтожим  $H_{13}$

и изменим первый элемент этой строчки. Продолжая этот процесс, можно получить:

$$\left( H_{11} - E - \sum_{m=2}^{\infty} \frac{|H_{1m}|^2}{H_{mm} - E} \right) (H_{22} - E)(H_{33} - E) \dots = 0 \quad (1.2.5)$$

Если уровень  $E_1^0$  не вырожден, то при энергии, близкой к этому уровню, в (1.2.5) может равняться нулю только первая скобка. Таким образом, получаем:

$$E = H_{11} - \sum_{m=2}^{\infty} \frac{|H_{1m}|^2}{H_{mm} - E}, \quad (1.2.6)$$

Это уравнение содержит неизвестное значение  $E$  и в правой части. Его решение можно получить методом последовательных приближений. В качестве первого приближения в правой части (1.2.6) можно положить

$$E = H_{11} = E_1^0 + V_{11}$$

Учитывая далее (1.2.3), находим

$$E = E_1^0 + V_{11} + \sum_{m=2}^{\infty} \frac{|v_{1m}|^2}{E_1 + V_{11} - (E_m^0 + V_{mn})} \quad (1.2.7)$$

### 2.3. Молекулярные спектры

Как уже было сказано во введении, молекулы – это объекты микромира и обычные микроскопические методы для их изучения не применимы. Например, геометрия молекулы, как правило, недоступна непосредственному изучению. В связи с этим возникает вопрос – как “разглядеть” молекулу? Ответить на него может структурный анализ, основными методами которого являются молекулярная спектроскопия. На современном этапе развития науки практически вся точная количественная и качественная информация о молекулах, как физических объектах, извлекается спектроскопическими методами из анализа электромагнитных

спектров молекул.

Электромагнитные спектры, или просто спектры молекул, возникают в результате взаимодействия электромагнитного излучения с молекулами. Это взаимодействие может приводить как к поглощению излучения, так и к его испусканию или рассеянию. Согласно принципу эквивалентности Эйнштейна, молекула, поглощая электромагнитное излучение частоты  $\nu$ , увеличивает или соответственно уменьшает свою энергию на величину [2]

$$\Delta E = 2\pi h\nu,$$

(1)

где  $h$  – постоянная Планка. Таким образом, молекула, взаимодействуя с излучением частоты  $\nu$ , может изменять свою энергию на величину  $2\pi h\nu$ . Это происходит потому, что внутренняя энергия объектов микромира не является непрерывной величиной, эта энергия имеет строго определенные значения, которые называются уровнями энергии. Причем квантованы все виды внутренней энергии молекул, например, энергия вращения молекулы как целого, электронная энергия и т.д.

Энергетические состояния молекулы удобно представить в виде диаграммы, на которой по вертикали откладываются энергии, уровни энергии – горизонтальными линиями (Рисунок 3).

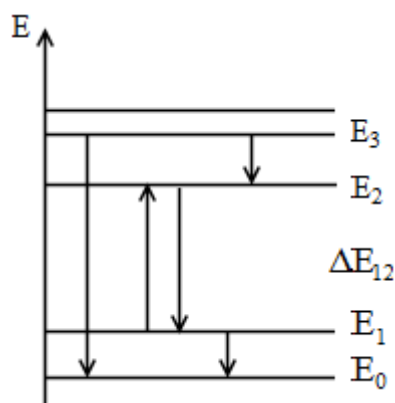


Рисунок 3 – Диаграмма уровней энергии

При переходе молекулы из одного энергетического состояния

(например, с уровня  $E_2$ ) в другое энергетическое состояние (на уровень  $E_1$ ) происходит изменение энергии молекулы на величину  $\Delta E_{21} = E_2 - E_1$ . При этом молекула испускает (или поглощает, если переход идет в обратном направлении) электромагнитное излучение частоты  $\nu_{21}$ .

Частота излучения  $\nu_{21}$  является характерной для рассматриваемой квантовой системы величиной и определяет линию в спектре испускания системы. Возможны и другие энергетические переходы в системе, например, с уровня  $E_3$  на уровень  $E_2$ , с уровня  $E_3$  на уровень  $E_0$ , с уровня  $E_1$  на уровень  $E_0$  и т. д. В процессе этих переходов система будет испускать излучение с частотами  $\nu_{32}$ ,  $\nu_{30}$  и  $\nu_{10}$  соответственно.

Интересно заметить, что частоты рассмотренных переходов удовлетворяют соотношению  $\nu_{30} = \nu_{32} + \nu_{21} + \nu_{10}$ , которое следует из (1). Существование подобной связи между частотами позволяет идентификацию спектров. Идентифицировать спектр – это значит объяснить происхождение каждой линии в спектре, т.е. указать между какими уровнями энергии происходит переход, соответствующий данной линии. Таким образом, регистрируя электромагнитные спектры молекулы, можно получать информацию о ее энергетических уровнях. Положение уровней энергии определяется, в свою очередь, внутренними физическими свойствами молекулы. Поэтому, анализируя спектры, можно извлекать разнообразную физическую информацию о внутренних свойствах молекул. Методами молекулярной спектроскопии определяются, например, такие важнейшие характеристики молекул, как параметры внутреннего силового поля, моменты инерции, дипольный момент. Причем извлекаемая информация из спектров отличается особой точностью [16].

В молекулярной спектроскопии выделяют различные типы спектров. Их различают как по типу взаимодействия с веществом, так и по типу внутримолекулярных процессов, которые сопровождают эти взаимодействия, а также по энергетическим областям. В зависимости от

типа взаимодействия излучения с веществом различаются спектры поглощения, испускания и рассеяния. Поглощение излучения, как и испускание, и рассеяние, может сопровождаться внутримолекулярными процессами. По типу этих процессов различают вращательные, колебательные и электронные спектры. Вращательные спектры возникают в следствии изменения ориентации молекулы в пространстве как целого. Колебательные спектры характеризуют изменение конфигурации молекул, т.е. колебания ядер, составляющих молекулу. Электронные спектры связаны с изменением электронной энергии молекулы.

В зависимости от энергии излучения различают следующие спектральные области: радиочастотную, видимую, ультрафиолетовую, рентгеновскую. В этой работе интерес лежит к микроволновой, видимой и низкочастотной инфракрасной области спектра. Микроволновой и низкочастотной инфракрасной областям соответствуют вращательные спектры, инфракрасной и ближней видимой – колебательные.

Если не учитывать внутреннюю энергию ядер и электронов (спины частиц и деформацию ядер), то молекулярные спектры образуются в результате изменения электронной энергии  $E_{эл}$ , колебательной энергии  $E_{к}$  и вращательной энергии  $E_{вр}$ , причем

$$E_{эл} \gg E_{к} \gg E_{вр} .$$

Изменение электронного состояния молекулы почти всегда сопровождается изменением колебательного состояния, которое, в свою очередь, сопровождается изменением вращательного состояния молекулы. Поэтому частота испускаемого или поглощаемого молекулами излучения в общем случае можно записать в виде

$$\nu = h^{-1}(E_{эл} + E_{к} + E_{вр})_{нач} - h^{-1}(E_{эл} + E_{к} + E_{вр})_{кон} .$$

Регистрируемый в этом случае спектр называется электронно-колебательным-вращательным. При возбуждении колебаний образуются колебательно-вращательные спектры молекулы. Переходы в пределах

одного электронно-колебательного состояния образуют чисто вращательный спектр. На рисунке 4 приведена диаграмма электронно-колебательно-вращательных уровней энергии.

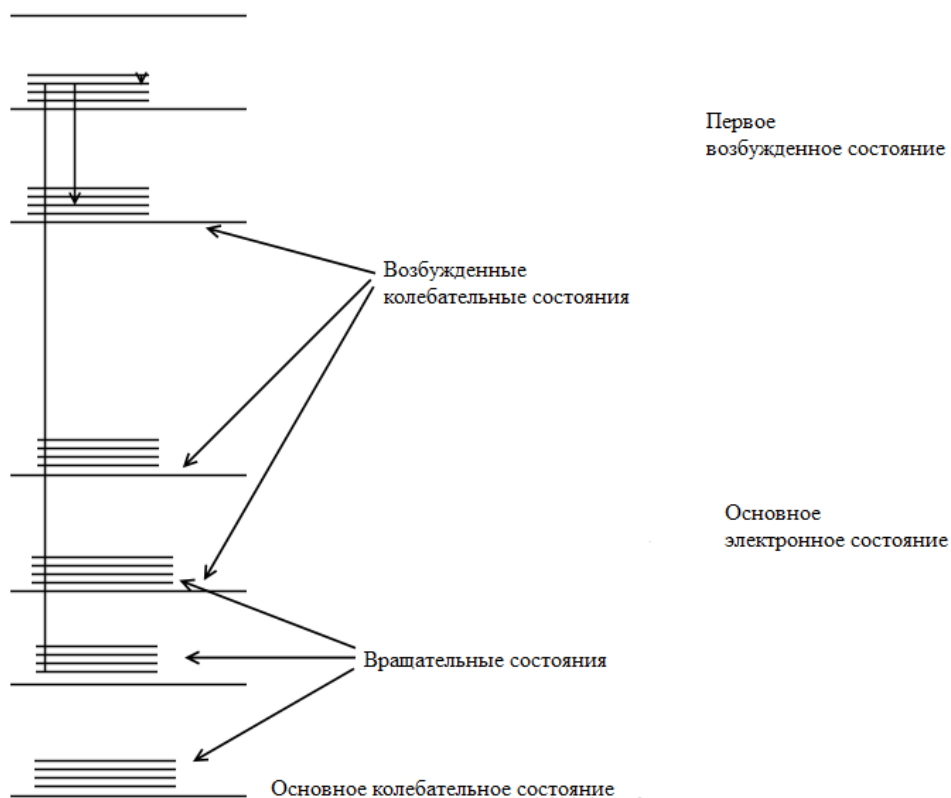


Рисунок4 – Электронно-колебательные-вращательные уровни энергии молекул

Заметим, что переходы внутри молекулы возможны не между любыми уровнями, а только между определенными. Эти возможные переходы определяются так называемыми правилами отбора. Дело в том, что молекула может поглотить электромагнитное излучение только в том случае, когда в ней произойдет работа. Эту работу выполняет электрическая составляющая электромагнитной волны – дипольный момент, изменяя положение электрических центров молекулы.

Молекула может только в том случае поглотить или испустить излучение, когда у нее меняется дипольный момент [4]. Правила отбора как раз и определяют те переходы, для которых выполняется данное условие. Если переход из одного энергетического состояния в другое не

сопровождается изменением дипольного момента, то такой переход называется запрещенным. Однако следует отметить, что некоторые запрещенные переходы на самом деле происходят. Причиной этого являются более тонкие электрические эффекты, которые не учитываются в простой модели.

## 2.4. Симметрия. Операции симметрии

Как было сказано в предыдущей главе, подробную информацию о структуре многоатомных молекул можно узнать, изучая их молекулярные спектры. Однако изучение спектров многоатомных молекул осложняется наличием нескольких силовых постоянных, нескольких межатомных расстояний и т.д. Однако если молекула обладает некоторой симметрией, то это весьма облегчает задачу исследования спектра. Поэтому очень важно изучить свойства симметрии многоатомных молекул.

Симметричными являются такие молекулы, которые имеют симметричную конфигурацию ядер, т.е. положение и тип ядер определяют эту симметрию.

Легко убедиться, что, например, структура молекулы  $^{34}\text{SO}_2$  (рисунок 5) совмещается сама с собой при вращении её на  $180^\circ$  вокруг оси, совпадающей с биссектрисой угла  $\text{OSO}$ , или отражении в плоскости перпендикулярной плоскости рисунка и проходящей через эту ось. Более подробное математическое описание теории симметрии представлено в главе 2.5.

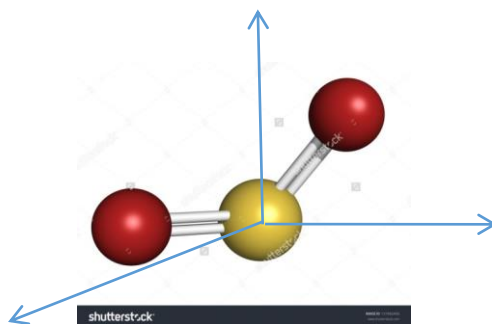




Рисунок 5 – Равновесная конфигурация молекулы  $^{34}\text{SO}_2$

## 2.5. Математическое описание операций симметрии

Выполнение  $n$  последовательных поворотов на угол  $2\pi/n$  вокруг одной и той же оси  $n$ -го порядка эквивалентно тождественному преобразованию  $E$ , поэтому

$$C_n^n = E$$

Необходимо отметить, что, например, ось 6-го порядка является в то же время осью 2-го и 3-го порядков. Если  $n$  делится на целое число  $m$  последовательных повороту на угол  $2\pi/(n/m)$ , следовательно

$$C_n^m = C_{n/m}$$

Поэтому ось всегда характеризуют наибольшим числом  $n$ , т.е. наименьшим углом поворота  $\varphi$ .

Для обозначения плоскостей отражение (плоскостей симметрии) используется символ  $\sigma$ . Отражение в плоскости, проходящей через ось симметрии, обозначается символом  $\sigma_v$ . Очевидно, что

$$\sigma^2 = E.$$

Совместное применение операции вращения  $C_n$  и отражения  $\sigma_h$  приводит к преобразованию симметрии, которая называется зеркально-поворотным преобразованием. Эта операция обозначается символом  $S_n$ . По определению

$$S_n = C_n \sigma_h = \sigma_h C_n.$$

И потом можно знать, что

$$S_n^n = C_n^n \sigma_h^n.$$

Откуда, учитывая (1.3.1) и (1.3.3), получаем, что при четном  $n$

$$S_n^n = E.$$

А при нечетном  $n$

$$S_n^n = \sigma_h.$$

Важным случаем зеркально-поворотных преобразований  $S_n$  является случай  $n=2$ , т.е. поворот на угол  $\pi$ . Такое преобразование называется инверсией  $I$ :

$$I = S_2 = C_2 \sigma_h.$$

Откуда

$$C_2 = I \sigma_h, \sigma_h = I C_2.$$

### 3. Принцип работы Фурье–спектрометра

Работа Фурье-спектрометра основана на интерферометре Майкельсона. Схематическое изображение принципа работы интерферометра Майкельсона представлено на рисунке 6.

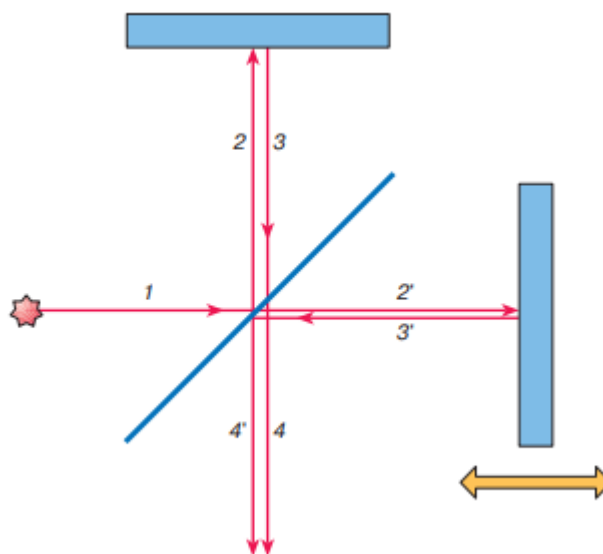


Рисунок 6 – Схема интерферометра Майкельсона

Параллельный луч излучения 1 падает на пластину расщепителя луча, после чего одна половина света 2 (отражается) попадает на одно плоское зеркало, а другая (2') (передается) - на другое плоское зеркало. После отражения от зеркал пучки 3, 3' снова разделяются на делитель луча пополам, одна половина возвращается назад, а другая (4, 4') направляется

на приемник излучения. Из разных частотных масштабов мы выбираем тот, в котором в качестве частоты используется обратная длина волны. Предположим, что освещаем интерферометр монохроматическим источником излучения с частотой  $\nu_0$ . Затем, в зависимости от оптической разности хода  $x$  между лучами, отраженными от разных зеркал, из-за интерференции волн излучение, излучаемое интерферометром, будет либо увеличиваться, либо уменьшаться. Когда одно из зеркал движется, подсветка приемника  $B(x)$  и, следовательно, регистрируемого сигнала изменяется синусоидально:

$$B(x) = \frac{1}{2} B_0 [1 + \cos \omega_0 x]$$

где  $\omega_0 = 2\pi\nu_0$ . Сигнал  $B(x)$  мы называем интерферограммой.

Пусть движущееся зеркало проходит некоторое расстояние от начального положения, которое мы предполагаем равным  $-L$ , до конечной позиции  $+L$ . Преобразуем переменную составляющую интерферограммы  $B(x)$  слепому ( $\omega = 2\pi\nu$ )

$$B(\omega, L) = \frac{B_0}{2\pi} \int_{-1}^L \cos \omega_0 x \cos \omega x dx$$

Поскольку

$$\cos \alpha \cdot \cos \beta = \frac{1}{2} [\cos(\alpha + \beta) + \cos(\alpha - \beta)]$$

интеграл  $B(\omega, L)$  сводится к следующему выражению:

$$B(\omega, L) = \frac{1}{2\pi} \left[ \frac{\sin(\omega - \omega_0)L}{(\omega - \omega_0)} + \frac{\sin(\omega + \omega_0)L}{(\omega + \omega_0)} \right].$$

## 4. Результаты и анализ

### 4.1. Метод комбинационных разностей

В данной работе интерпретация спектра проводилась на основе метода комбинационных разностей.

Для того чтобы облегчить определение энергетических уровней колебательных состояний, разработана компьютерная программа,

позволяющая определять энергетические состояния любого числа колебательных состояний молекулы, таких как асимметричная вершина.

В основе данной программы лежит метод комбинационных разностей, который наиболее подходит для нахождения энергетических уровней молекулы асимметричного верхнего типа.

Суть данного метода:

Рассмотрены вращательные уровни основного и возбужденного колебательных состояний. Обязательно имеется несколько переходов с вращательных уровней основного колебательного состояния на один и тот же уровень возбуждённого колебательного состояния (рисунок 7). Как правило, структура основного колебательного состояния известна с высокой точностью. Её можно определить из анализа микроволновых спектров (вращательные переходы внутри основного колебательного состояния) или из анализа их спектров, но для других полос. В нашем случае структура основного состояния известна из работы [4].

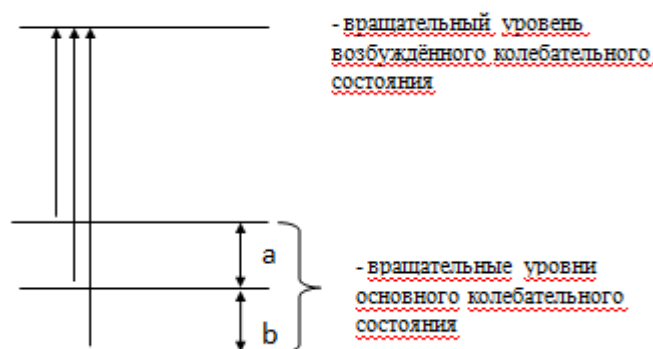


Рисунок7--энергетическая структура основного и возбуждённого состояния

Таким образом, достаточно точно известны расстояния между вращательными уровнями основного колебательного состояния. Можем сделать «линейку», расстояния между делениями которой будут соответствовать расстояниям между вращательными уровнями основного

колебательного состояния (рисунок-8а).

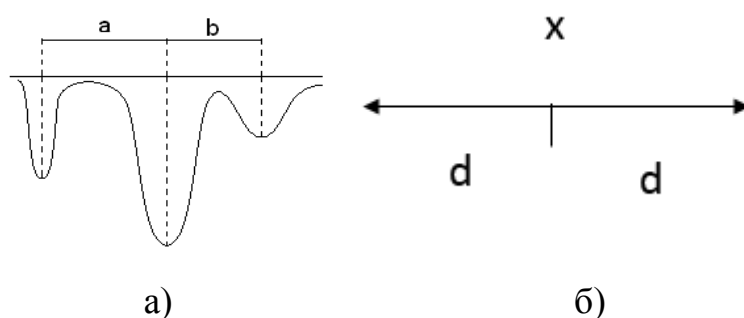


Рисунок 8 – Схематическое представление метода комбинационных разностей

Будем двигать «линейку» по спектру. В спектре необходимо найти такие три линии (если в «линейке» три деления), которые совпадут с делениями линейки. Зная положения нижних уровней, длины волн переходов, можно определить энергию верхнего уровня. Если будем «линейку» двигать по спектру, то можем обнаружить ещё три линии, которые совпадут с делениями «линейки». Затем выбирается наиболее вероятный вариант и находится среднее между полученными значениями энергетического уровня. Этот процесс называется идентификацией линий. Конечно, точное совпадение линий спектра с делениями линейки в процессе идентификации маловероятно. Поэтому задается точность поиска « $c$ ». Это значит, что при отклонении центра линии спектра от деления «линейки» на величину меньшую или равную « $c$ », результат принимают как верный (обычно  $c \approx 0,0015 \text{ см}^{-1}$ ), иначе отвергают. Ошибка, то есть отклонение центров линий, возникает из-за погрешности эксперимента.

Величина « $d$ » определяет диапазон отклонения значения энергии выбранного уровня от приблизительного значения « $x$ » (рисунок- 8б).

#### 4.2. Экспериментальные данные

Спектр молекулы в диапазоне  $1050\text{-}1250 \text{ см}^{-1}$  молекулы  $^{34}\text{SO}_2$  был зарегистрирован в лаборатории Технического университета города

Брауншвейга (Германия) на Фурье-спектрометре Bruker 120Н. Чистота образца составляла 99,9% (из Westfalen, AG). Поскольку в нашей работе мы нацелились на полосу  $\nu_2$  молекулы  $^{32}\text{SO}_2$  с центром зоны около  $[17] \text{ см}^{-1}$ , был использован жидкостно-гелиевый охлажденный детектор из германия-меди (Ge:Cu), который демонстрирует отличную чувствительность в этой области. Спектр снимался в ячейка Уайта при давлении 10 Па, при температуре 296К. Спектр, используемый в анализе имеет высокое разрешения, экспериментальные линии спектре хорошо разрешены, (экспериментальное разрешение –  $0,0025 \text{ см}^{-1}$ ). Для регистрации спектра был использован источник излучения Globar и разделить луча – KBr.

Исследуемый спектр представлен на рисунке 9

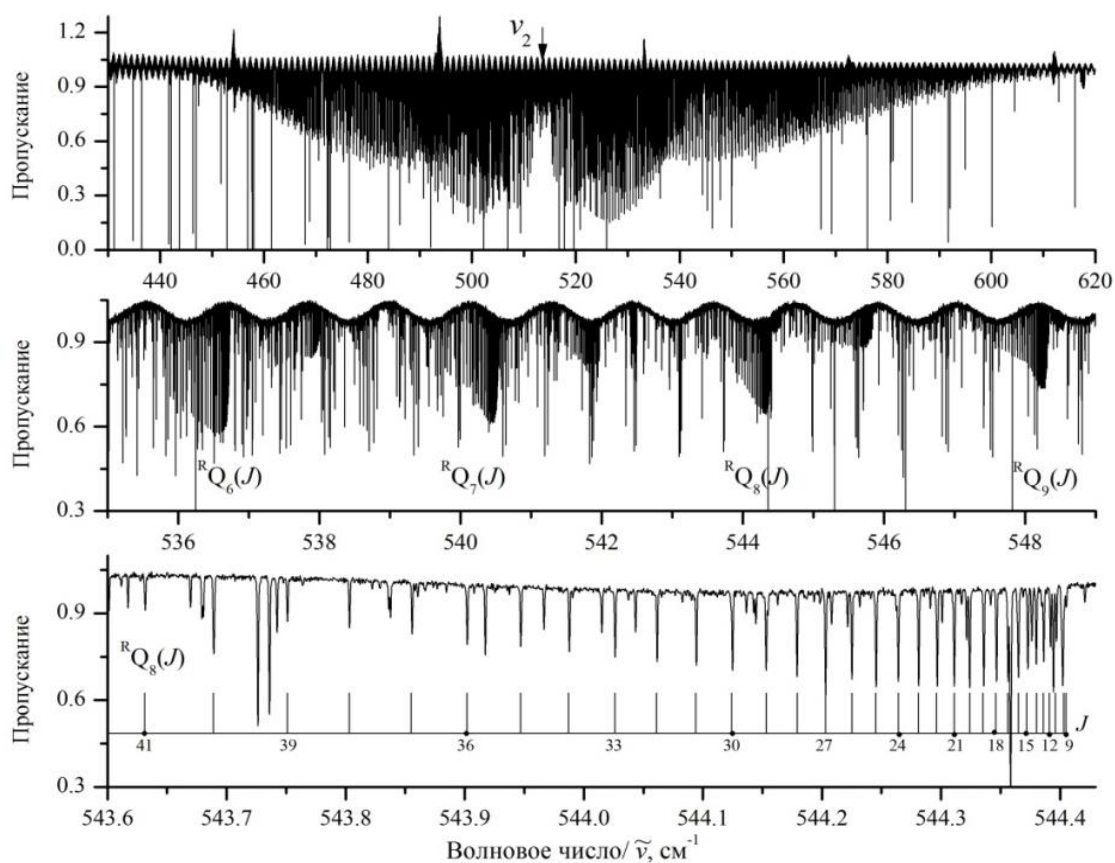


Рисунок 9–Колебательно-вращательный спектр молекулы  $^{34}\text{SO}_2$ , в диапазоне  $1050\text{-}1250 \text{ см}^{-1}$

### 4.3. Результаты анализа спектра молекулы $^{34}\text{SO}_2$

Полоса  $\nu_2$  спектра молекулы  $^{34}\text{SO}_2$  лежит в области 1050-1250  $\text{см}^{-1}$ . Зарегистрированный спектр молекулы  $^{34}\text{SO}_2$  приведен на рисунке 8. Анализ спектра проводился методом комбинационных разностей. В таблице 2 приведена статистическая информация об исследуемом спектре.

Таблица 2 – Статистическая информация

Полоса	Центр, $\text{см}^{-1}$	$J^{\text{Max}}$	$K_a^{\text{Max}}$	Кол-во переходов	Коли-во энергий
$\nu_2$	514,4786	40	15	1500	600

Для иллюстрации полученных результатов в таблице 3 приведена часть колебательно-вращательных энергии для полосы  $\nu_2$ .

Таблица 3 – Небольшая часть экспериментальных значений колебательно-вращательных энергия для (010) колебательных состояний  $^{34}\text{SO}_2$

$J'$	$K_a'$	$K_c'$	$J$	$K_a$	$K_c$	Энергия, $\text{см}^{-1}$	Ср. энергия, $\text{см}^{-1}$
2	0	2	1	1	1	1146.37653	1146.37667
			2	1	1	1146.37674	
			3	1	3	1146.37675	
4	0	4	3	1	3	1150.79362	1150.79362
			4	1	3	1150.79361	
			5	1	5	1150.79363	
6	0	6	5	1	5	1157.69511	1157.68513
			6	1	5	1157.69513	
			7	1	7	1157.69516	
8	0	8	7	1	7	1167.03323	1167.03322
			8	1	7	1167.03322	
			9	1	9	1167.03322	
10	0	10	9	1	9	1178.75492	1178.75493
			10	1	9	1178.75495	
			11	1	11	1178.75492	
1	1	1	0	0	0	1146.73670	1146.73674
			2	0	2	1146.73676	
			2	2	0	1146.73677	

2	1	1	2	0	2	1148.10963	1148.10830
			2	2	0	1148.10831	
			3	2	2	1148.10696	
3	1	3	2	0	2	1149.77385	1149.77388
			3	2	2	1149.77390	
			4	0	4	1149.77390	
			4	2	2	1149.77385	
4	1	3	3	2	2	1153.71837	1152.71841
			4	0	4	1152.71841	
			4	2	2	1152.71842	
			5	2	4	1152.71845	
5	1	5	4	0	4	1155.23447	1155.23356
			5	2	4	1155.23446	
			6	0	6	1155.23450	
			6	2	4	1155.23082	
6	1	5	5	2	4	1159.95423	1159.95427
			6	0	6	1159.95426	
			6	2	4	1159.95428	
			7	2	6	1159.95269	
7	1	7	6	0	6	1163.10862	1163.10864
			7	2	6	1163.10866	
			8	0	8	1163.10866	
			8	2	6	1163.10861	
8	1	7	7	2	6	1169.79847	1169.79866
			8	0	8	1169.79871	
			8	2	6	1169.79871	
			9	2	8	1169.79876	
9	1	9	8	0	8	1173.38384	1173.38365
			9	2	8	1173.38360	
			10	0	10	1173.38357	
			10	2	8	1173.38360	
10	1	9	9	2	8	1182.22808	1182.22809
			10	0	10	1182.22808	
			10	2	8	1182.22809	
			11	2	10	1182.22809	
11	1	11	10	0	10	1186.04565	1186.04523
			11	2	10	1186.04514	
			12	0	12	1186.04515	
			12	2	10	1186.04499	

где  $J', K'_a, K'_c$  – квантовые числа возбужденного вращательного состояния;

$J, K_a, K_c$  – квантовые числа основного состояния.

Значения энергии, полученные из экспериментальных переходов, затем использовались в процедуре изменения параметров гамильтониана. Результаты изменения параметров гамильтониана представлены в таблице



4 (значения в скобках являются доверительным интервалом).

Таблица 4 – Параметры гамильтониана

Параметры	$\nu_2, \text{см}^{-1}$
A	2.067232(22)
B	0.36323(47)
C	0.282926(72)
$\Delta_J \cdot 10^4$	0.95815(39)
$\Delta_{JK} \cdot 10^4$	-0.40716(22)
$\Delta_K \cdot 10^4$	0.221034(23)
$\delta_J \cdot 10^4$	.035361(37)
$\delta_K \cdot 10^4$	0 .5707378(38)
$H_J \cdot 10^8$	0.153773(50)
$H_{JK} \cdot 10^8$	-0 .75632(14)
$H_{KJ} \cdot 10^8$	4 .361(17)
$H_K \cdot 10^8$	0 .37901(63)

## 5. Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение

Целью данного раздела является обоснование целесообразного использования технического проекта, выполняемого в рамках выпускной квалификационной работы, при этом детально рассматриваются планово-временные и материальные показатели процесса проектирования.

Достижение цели обеспечивается решением следующих задач:

- Составление SWOT-анализа работы
- Планирование технико-конструкторских работ
- Определение ресурсной (ресурсосберегающей) эффективности проекта

### 5.1. SWOT-анализ работы для $^{34}\text{SO}_2$

SWOT-анализ представляет собой метод анализа планирования производственной или научной деятельности, разделяющий факторы или явления на следующие категории: strengths (сильные стороны), weaknesses (слабые стороны), opportunities (возможности) и threats (угрозы), и состоящий из нескольких этапов.

Первый этап заключается в описании сильных и слабых сторон проекта, в выявлении возможностей и угроз для реализации проекта, которые проявились или могут появиться в его внешней среде. Результаты первого этапа SWOT-анализа представлены в таблице 5

Таблица 5 – SWOT-матрица

	<p>Сильные стороны науч- но-исследовательского проекта:</p> <p>С1. Собственная научная и производственная база для исследований</p> <p>С2. Экологичность технологии.</p> <p>С3. Доработка недостающей Информациохарактеристиках исследуемого типа материала</p> <p>С4. Наличие бюджетного финансирования.</p> <p>С5. Квалифицированный персонал.</p>	<p>Слабые стороны научно-исследовательского проекта:</p> <p>Сл1. Затраты времени на проведение испытаний.</p> <p>Сл2. Отсутствие у потенциальных потребителей квалифицированных кадров по работе с научной разработкой</p> <p>Сл3. Необходимость сравнительного анализа характеристик.</p>
<p>Возможности:</p> <p>В1. Использование инновационной инфраструктуры ТПУ</p> <p>В2. Использование инфраструктуры ОЭЗ ТВТ Томск</p> <p>В3. Появление дополнительного спроса на новый продукт</p>		
<p>Угрозы:</p> <p>У1. Ограничения на экспорт технологии</p>		

У2. Развитая конкуренция технологий производства		
У3. Несвоевременное финансовое обеспечение научного исследования со стороны государства		

После того как сформулированы четыре области SWOT переходят к реализации второго этапа. Второй этап состоит в выявлении соответствия сильных и слабых сторон научно-исследовательского проекта внешним условиям окружающей среды. Это соответствие или несоответствие должны помочь выявить степень необходимости проведения стратегических изменений. В рамках данного этапа необходимо построить интерактивную матрицу проекта. Ее использование помогает разобраться с различными комбинациями взаимосвязей областей матрицы SWOT. Возможно использование этой матрицы в качестве одной из основ для оценки вариантов стратегического выбора. Каждый фактор помечается либо знаком «+» (означает сильное соответствие сильных сторон возможно- стям), либо знаком «-» (что означает слабое соответствие); «0» – если есть сомнения в том, что поставить «+» или «-». Пример интерактивной матрицы проекта представлен в табл.6.

Таблица 6 – Интерактивная матрица проекта

Сильные стороны проекта						
Возможности проекта		C1	C2	C3	C4	C5
	B1	-	-	+	+	+
	B2	+	-	-	+	-
	B3	+	+	+	-	-
		Сл1	Сл2	Сл3	Сл4	
	B1	+	-	+	+	
	B2	+	+	-	-	
	B3	+	+	-	+	

Таблица 7 – Интерактивная матрица угроз

Угрозы	Сильные стороны проекта				
		C1	C2	C3	C4
y1	-	+	+	-	0
y2	+	+	+	-	-
y3	+	+	-	-	+
Угрозы	Слабые стороны проекта				
		Сл1	Сл2	Сл3	Сл4
	y1	-	-	+	+
	y2	+	-	-	+
	y3	+	+	-	-

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

Анализ интерактивных матриц, приведенных в таблицах 6 и 7, показывает, что число сильных сторон у проекта количественно равно числу слабых. Аналогичная ситуация с количеством возможностей и угроз проведения исследований. Однако, если рассматривать возможности, то можно сделать вывод, что исследование будет эффективным, поскольку их влияние на сильные стороны проекта больше, чем на слабые. Что касается угроз, то влияние на сильные и слабые стороны одинаково.

## 5.2. Планирование научно-исследовательской работы

### 5.2.1 Структура работ в рамках научного исследования

Планирование комплекса работ по научному исследованию состоит из нескольких этапов:

- определение структуры работ в рамках научного исследования;
- определение участников каждой работы;
- установление продолжительности работ;
- построение графика проведения научного исследования.

В данном разделе необходимо составить перечень этапов и работ в

рамках проведения научного исследования, провести распределение исполнителей по видам работ. Примерный порядок составления этапов и 19 работ, распределение исполнителей по данным видам работ приведен в табл.8

Таблица 8 – Перечень этапов, работ и распределение исполнителей

Основные этапы	№ раб	Содержание работ	Должность исполнителя
Разработка техниче- ского задания	1	Составление и утверждение техни- ческого задания	Руководитель темы
Выбор направления исследований	2	Обзор научной и технической литературы	Студент- дипломник
Проведение испытаний исследуемого объекта	3	Выберите правильный инструмент и проанализируйте SO <sub>2</sub>	Студент- дипломник
	4	Определение условий испытания	Студент- дипломник, научный руководитель
	5	Календарное планирование работ по теме	Студент- дипломник , научный руководитель
Обобщение и оценка результатов	6	Оценка результатов исследования	Студент- дипломник , Научный руководитель
Оформление отчета по научному исследованию	7	Составление пояснительной записки	Студент- дипломник
	8	Проверка выпускной квалификационной работы	Научный руководитель
Сдача выпускной квалификационной работы	9	Подготовка к защите ВКР	Студент- дипломник , Научный

			руководитель
	10	Защита ВКР	Студент-дипломник

### 5.2.2. Определение трудоемкости выполнения работ

Трудовые затраты в большинстве случаев образуют основную часть стоимости разработки, поэтому важным моментом является определение трудоемкости работ каждого из участников научного исследования.

Трудоемкость выполнения научного исследования оценивается экспертным путем в человеко-днях и носит вероятностный характер, т.к. зависит от множества трудно учитываемых факторов. Для определения ожидаемого (среднего) значения трудоемкости  $t_{ож}$  используется следующая формула:

$$t_{ож} = \frac{3 \cdot t_{mini} + 2 \cdot t_{maxi}}{5}$$

где  $t_{ож}$  – ожидаемая трудоемкость выполнения  $i$ -ой работы чел.-дн.;

$t_{mini}$  – минимально возможная трудоемкость выполнения заданной  $i$ -ой работы (оптимистическая оценка: в предположении наиболее благоприятного стечения обстоятельств), чел.-дн.;

$t_{maxi}$  – максимально возможная трудоемкость выполнения заданной  $i$ -ой работы (пессимистическая оценка: в предположении наиболее неблагоприятного стечения обстоятельств), чел.-дн.

Исходя из ожидаемой трудоемкости работ, определяется продолжительность каждой работы в рабочих днях  $T_p$ , учитывающая параллельность выполнения работ несколькими исполнителями. Такое вычисление необходимо для обоснованного расчета заработной платы, так как удельный вес зарплаты в общей сметной стоимости научных исследований составляет около 65 %

$$T_{pi} = \frac{t_{ожі}}{Ч_i}$$

где  $T_{pi}$  – продолжительность одной работы, раб. дн.;

$t_{ожі}$  – ожидаемая трудоемкость выполнения одной работы, чел.-дн.

$Ч_i$  – численность исполнителей, выполняющих одновременно одну и ту же работу на данном этапе, чел.

Рассчитанные значения трудоемкости и продолжительности работы для выбранных исполнителей приведены в таблице 9.

таблице 9

№	Название работы	Трудоёмкость работ, чел.-дн.						Длительность работ в t <sub>min</sub> t <sub>max</sub> t <sub>ожі</sub> рабочих днях	
		t <sub>min</sub>		t <sub>max</sub>		t <sub>ожі</sub>			
		НР	СД	НР	СД	НР	СД	НР	СД
1	Составление и утверждение технического задания	1	-	3	-	1,7	-	1	-
2	Обзор научной и технической литературы	-	6	-	13	-	9,6	-	10
3	Выберите правильный инструмент и проанализируйте SO <sub>2</sub>	-	1	-	2	-	1,4	-	1
4	Определение условий испытания	1	1	2	2	2	1,7	2	2
5	Календарное планирование работ по теме	40	40	50	50	45,7	45,2	45	44
6	Оценка результатов исследования	1	3	4	4	1,8	3,8	2	5

7	Составление пояснительной записки	-	5	-	9	-	5,6	-	5
8	Проверка выпускной квалификационной работы	1	-	3	-	1,8	-	2	-
9	Подготовка к защите ВКР	1	2	5	5	3,2	3,1	2	3
10	Защита ВКР	1	1	-	1	-	1	-	2

Примечание: минимальное  $t_{\min}$  и максимальное время  $t_{\max}$  получены на основе экспертных оценок.

### 5.2.3. Разработка графика проведения технического проекта

Наиболее удобным и наглядным в данном случае является построение ленточного графика проведения научных работ в форме диаграммы Ганта.

Диаграмма Ганта – горизонтальный ленточный график, на котором работы по теме представляются протяженными во времени отрезками, характеризующимися датами начала и окончания выполнения данных работ [15].

График строится для ожидаемого по длительности исполнения работ в рамках технического проекта, с разбивкой по месяцам и декадам за период времени подготовки ВКР [15]. На основе таблицы 10 строим план-график проведения работ (таблица 11).

Таблица 11 – План-график работ



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

р – руководитель - □

м – магистрант - ■

Иллюстрацию календарного плана представляют в виде диаграммы Ганта таблица 11, представляющую собой тип столбчатых диаграмм (гистограмм). Они характеризуют начало даты и окончания выполнения работ, и представлены протяженными во времени отрезками с различной штриховкой (отвечающей за исполнителя работы).

#### 5.2.4 Сырье, материалы, покупные изделия и полуфабрикаты

В эту статью включаются затраты на приобретение всех видов

материалов, комплектующих изделий и полуфабрикатов, необходимых для выполнения работ по данной теме. Количество потребных материальных ценностей определяется по нормам расхода

В материальные затраты, помимо выше указанных, включаются дополнительно затраты на канцелярские принадлежности, диски, картриджи и т.п. Однако их учет ведется в данной статье только в том случае, если в научной организации их не включают в расходы на использование оборудования или накладные расходы. В первом случае на них определяются соответствующие нормы расхода от установленной базы. Во втором случае их величина учитывается как некая доля в коэффициенте накладных расходов.

Расчет материальных затрат осуществляется по следующей формуле:

$$Z_m = (1 + k_T) \cdot \sum_{i=1}^m \Pi_i \cdot N_{расхи}, \quad (6)$$

где  $m$  – количество видов материальных ресурсов, потребляемых при выполнении научного исследования;

$N_{расхи}$  – количество материальных ресурсов  $i$ -го вида, планируемых к использованию при выполнении научного исследования (шт., кг, м, м<sup>2</sup> и т.д.);

$\Pi_i$  – цена приобретения единицы  $i$ -го вида потребляемых материальных ресурсов (руб./шт., руб./кг, руб./м, руб./м<sup>2</sup> и т.д.);

$k_T$  – коэффициент, учитывающий транспортно-заготовительные расходы.

Значения цен на материальные ресурсы могут быть установлены по данным, размещенным на соответствующих сайтах в Интернете предприятиями-изготовителями (либо организациями-поставщиками).

Величина коэффициента ( $k_T$ ), отражающего соотношение затрат по доставке материальных ресурсов и цен на их приобретение, зависит от

условий договоров поставки, видов материальных ресурсов, территориальной удаленности поставщиков и т.д. Транспортные расходы принимаются в пределах 15-25% от стоимости материалов. Материальные затраты, необходимые для данной разработки, заносятся в таблицу 12.

Таблица 12 – Сырье, материалы, комплектующие изделия и покупные полуфабрикаты

Наименование	Кол-во	Цена за единицу, руб.	Сумма, руб.
$^{34}\text{SO}_2$	1	50,00	1500,00
Бумага	200	0,5	100
Пишущие предметы	50	4	200
Всего за материалы			1800
Транспортно-заготовительные расходы (15-25%)			400
Итого по статье $C_M$			2200

Из затрат на материальные ресурсы, включаемых в себестоимость продукции, исключается стоимость возвратных отходов.

### 5.2.5. Расчет полной заработной платы исполнителей темы

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

$$Z_{\text{полн}} = Z_{\text{осн}} + Z_{\text{доп}},$$

где  $Z_{\text{осн}}$  – основная заработная плата;  $Z_{\text{доп}}$  – дополнительная заработная плата. Основная заработная плата ( $Z_{\text{осн}}$ ) руководителя (лаборанта, инженера) от предприятия (при наличии руководителя от предприятия) рассчитывается по следующей формуле:

$$Z_{\text{осн}} = Z_{\text{дн}} \cdot T_{\text{раб}},$$

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

$$Z_{\text{дн}} = \frac{Z_{\text{м}} \cdot M}{F_{\text{д}}},$$

где  $Z_{\text{м}}$  – месячный должностной оклад работника, руб. (окладом магистранта выступает стипендия, 2200руб.);  $M$  – количество месяцев работы без отпуска в течение года: при отпуске в 24 раб.дня  $M = 11,2$  месяца, 5-дневная неделя; при отпуске в 48 раб.дней  $M = 10,4$  месяца, 6-дневная неделя;  $F_{\text{д}}$  – действительный годовой фонд рабочего времени научно-технического персонала, раб.дн.

Месячный должностной оклад

$$Z_{\text{м}} = Z_{\text{б}} k_{\text{р}} = 44974 \text{ руб.},$$

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

Таблица 13 – Баланс рабочего времени

Показатели рабочего времени	Руководитель	Магистр
Календарное число дней	368	368
Потери рабочего времени - отпуск - невыходы по болезни	96	104
Действительный годовой фонд рабочего времени	233	220

Таблица 14 – Расчет основной заработной платы

Исполните	$Z_{\text{б}}$ , руб	$k_{\text{р}}$	$Z_{\text{м}}$ ,	$Z_{\text{дн}}$ ,ру	$T_{\text{раб}}$ раб.	$Z_{\text{осн}}$ ,
-----------	----------------------	----------------	------------------	---------------------	-----------------------	--------------------

ли			руб	б	дн	руб.
Руководит ель	34590. 67	1.2	44973	2162	47	99443
Магистран т	-	-	2200	-	-	13200

### 5.2.6 Дополнительная заработная плата научно-производственного персонала

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

$$Z_{\text{доп}} = k_{\text{доп}} Z_{\text{осн}} = 0,1 * 99443 = 9944,3 \text{ руб.}$$

где  $Z_{\text{доп}}$  – дополнительная заработная плата, руб.;  $k_{\text{доп}}$  – коэффициент дополнительной зарплаты ( $k_{\text{доп}} = 0,1$ );  $Z_{\text{осн}}$  – основная заработная плата, руб. Расчёт основной и дополнительной заработной платы представлен в таблице 15.

Таблица 15 – Заработная плата исполнителей НИР

Заработная плата	Руководитель	Магистрант
Основная зарплата	99443	2100
Дополнительная зарплата	9944	-
Зарплата исполнителя	109387	13100
Итого по статье Сзп, руб	122489	

### 5.2.7 Отчисления на социальные нужды

Статья включает в себя отчисления во внебюджетные фонды:  
 $S_{\text{внеб}} = k_{\text{внеб}} \cdot (Z_{\text{осн}} + Z_{\text{доп}}) = 0,301 \cdot (99443 + 9944) = 32927$  руб.

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

### 5.2.8 Накладные расходы

В эту статью включаются затраты на управление и хозяйственное обслуживание, которые могут быть отнесены непосредственно на конкретную тему. Кроме того, сюда относятся расходы по содержанию, эксплуатации и ремонту оборудования, производственного инструмента и инвентаря, зданий, сооружений и др. В расчетах эти расходы принимаются в размере 70 - 90 % от суммы основной заработной платы научно-производственного персонала данной научно-технической организации. Накладные расходы составляют 80-100% от суммы основной и дополнительной заработной платы, работников, непосредственно участвующих в выполнении темы. Расчет накладных расходов ведется по следующей формуле на примере руководителя:

$$C_{\text{накл}} = k_{\text{накл}} \cdot (Z_{\text{осн}} + Z_{\text{доп}}) = 0,8 \cdot (99443 + 9944) = 87409 \text{ руб.}$$

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

### 5.3. Определение ресурсоэффективности проекта

Определение ресурсоэффективности проекта можно оценить с помощью интегрального критерия ресурсоэффективности по формуле [14]:

$$I_{\text{pi}} = \sum a_i \cdot b_i$$

где  $I_{\text{pi}}$  - интегральный показатель ресурсоэффективности;

$a_i$  - весовой коэффициент разработки;

$b_i$ - балльная оценка разработки, устанавливается экспертным путем по выбранной шкале оценивания

Оценку характеристик проекта проведем на основе критериев, соответствующих требованиям к исследуемому изоляционному материалу и готовому кабельному изделию:

1. Стойкость - одно из свойств полимера, характеризующее возможность изменения его характеристик при воздействии внешних факторов.

2. Безотказность - это свойство объекта непрерывно сохранять работоспособное состояние в течение некоторого времени или наработки.

3. Негорючесть - это комплексная характеристика материала или конструкции кабельного изделия противостоять возгоранию и распространению процесса горения.

4. Эластичность - это свойство полимерного тела восстанавливать свою форму и размеры после прекращения действия внешних сил.

5. Дешевизна - низкий уровень цен на используемые в конструкции материалы.

6. Экологичность - это свойство, характеризующее безопасное влияние на окружающую среду при обработке или переработке материала. Критерии ресурсоэффективности и их количественные характеристики приведены в таблице 16.

Таблица 16 - Сравнительная оценка характеристик проекта

Критерии	Весовой коэффициент	Балльная оценка
1. Стойкость	0.2	5
2. Безотказность	0.22	5
3. Негорючесть	0.15	4
4. Эластичность	0.18	3
5. Дешевизна	0.10	3
6. Экологичность	0.15	4
Итого	1.00	

Расчет интегрального показателя ресурсоэффективности

технического проекта составит :

$$I_p=5*0.20+5*0.22+4*0.15+3*0.18+4*0.15+3*0.1=4.14$$

Показатель ресурсоэффективности проекта имеет достаточно высокое значение (по 5-балльной шкале), что говорит об эффективности использования технического проекта. Высокие баллы стойкости и безотказности позволяют судить о надежности используемого материала.

В результате выполнения поставленных задач по данному разделу, можно сделать следующие выводы:

- в результате проведения SWOT-анализа были выявлены сильные и слабые стороны выбора технического проекта. Установлено , что технический проект будет эффективным, так как влияние возможностей на сильные стороны проекта больше, чем на слабые, когда количество сильных и слабых сторон одинаково;

- при планировании технических работ был разработан график занятости для двух исполнителей, составлена ленточная диаграмма Ганта, позволяющая оптимально скоординировать работу исполнителей;

- составление сметы технического проекта позволило оценить первоначальную сумму затрат на реализацию технического проекта в размере 150,6 тыс.рублей;

- оценка ресурсоэффективности проекта, проведенная по интегральному показателю, дала высокий результат (4,47 по 5-балльной шкале), что говорит об эффективности реализации технического проекта.

## **6. Социальная ответственность**

Существует два подхода к пониманию того, как надлежит вести себя организациям, чтобы они считались социально ответственными. По одной точке зрения, предприятие признается таковым, когда максимально повышает свою доходность, не нарушая при этом законов и требований



государственного регулирования. В этом случае организация должна ставить перед собой исключительно экономические цели. По другому подходу, предприятие дополнительно должно принимать во внимание социальные и человеческие аспекты влияния собственной деятельности на сотрудников, потребителей и местные объединения, вносить позитивный вклад в устранение проблем в обществе в целом.

Эта категория подразумевает определенную степень добровольного отклика на проблемы в обществе. Ответственность, по своей сути, - юридическое понятие. Оно достаточно широко используется в правоприменительной деятельности. При этом сам термин может употребляться в разных сферах. Например, бывает моральная, политическая, социальная и юридическая ответственность. Применительно к обществу эта категория выступает как обобщающая. Она включает в себя различные виды ответственности, существующие в обществе. К ним, в числе прочего, относят и моральную, и правовую категории. Социальная ответственность отличается определенными объективными и субъективными предпосылками. Первые отражают общественную природу людей и урегулированность взаимоотношений между ними определенными правилами. За действия, которые нарушают нормы социальной ответственности, предполагается наказание. Возникновение проступков обуславливается предъявлением к поведению людей требований, которые формулируются письменно либо устно.

### **6.1 Анализ выявленных вредных факторов проектируемой производственной среды**

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

электромагнитных полей.

### 6.1.1 Метеоусловия

Микроклимат на рабочем месте зависит от ряда многих факторов, в том числе таких, как теплофизические особенности технологического процесса и вида используемого оборудования, климат, сезон или период года, число работников, а также условий отопления и вентиляции, размеров и состояния производственного помещения и др. Микроклимат, особенно температура воздуха и тепловое излучение, может меняться на протяжении рабочего дня, быть различным на отдельных участках одного и того же помещения. Кроме этих параметров, являющихся основными, не следует забывать об атмосферном давлении, которое влияет на парциальное давление основных компонентов воздуха (кислорода и азота), а, следовательно, и на процесс дыхания. Требования, предъявленные к воздуху, т.е. оптимальные и допустимые значения показателей микроклимата в производственных помещениях для работ разной категории тяжести и в зависимости от периода года, представлены в санитарных нормах проектирования промышленных предприятий СН 245-71 и ГОСТ 12.11.005-88 ССБТ «Общие санитарно-технические требования к воздуху рабочей зоны». В таблице 17 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 17 - Оптимальные и допустимые параметры для рабочей зоны

Период года	Температура, °С		Относительная влажность, %		Скорость движения, м/с		
	Оптимальная	Допустимая		Оптимальная	Допустимая	Оптимальная	Допустимая
		верхняя граница	Нижняя граница				

		Постоя н.	Непосто ян	Постоя н.	Непосто ян		более	более	
Холод	22-24	21	24	20	18	40-60	15-75	0.3	0.2- 0.4
Тепл.	24-26	24	28	22	18	40-60	15-75	0.5	0.4- 0.6

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 ( $\varphi > 80\%$ ) затрудняет терморегуляцию организма, т.к. происходит снижения 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 так же необходимо установить отопительную систему. В теплый период года необходимо предусмотреть защиту от попадания прямых солнечных лучей. К средствам коллективной защиты можно отнести установки кондиционирования воздуха, основная задача которых поддерживать параметры воздуха в установленных пределах, для обеспечения надежной работы и комфортных условий для работников.

## 6.1.2 Шум

Для определения допустимого уровня шума на рабочих местах используется ГОСТ 12.1.003-83. ССБТ «Шум. Общие требования безопасности», СН 2.2.4/2.1.8.562-96 «Шум на рабочих местах, в помещениях жилых, общественных зданий и на территории жилой застройки». Согласно ГОСТ 12.1.003 – 83, нормируемой шумовой характеристикой рабочих мест при шуме являются уровни звуковых давлений в децибелах в октановых полосах. В таблице 18 приведены допустимые уровни звукового давления на рабочем месте.

Таблица 18 - Допустимы уровни звукового давления на рабочем месте

Вид деятельности	Частота, Гц							
	Уровень звукового давления, дБ							
	63	125	250	500	1000	2000	4000	8000
Научная деятельность, проектирование	73	60	52	47	44	41	40	36

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

## 6.2. Защита человека от вредных факторов

### *Защита от акустического шума*

Основными вредными факторами при работе являются шум и

вибрация. Источниками акустического шума являются вытяжки на производстве. Допустимый уровень шумов для лаборатории 75 дБ.

Нормируемые параметры постоянного шума являются уровнем звукового давления L, дБ, в октавных полосах со среднегеометрическими частотами: 31,5, 63, 125, 250, 500, 1000, 2000, 4000, 8000 Гц. Для ориентировочной оценки допускается использование уровня звука L<sub>a</sub>, дБ(А).

Защита от шумов – индивидуальное использование наушников или беруш. Шум возникающий при работе вытяжки достигает порядка 35 дБ, что также не превышает допустимого уровня шумов в рабочем помещении

#### *Защита от электрического тока*

Электробезопасность – это система организационных и технических мероприятий и средств, обеспечивающих защиту людей от вредного и опасного для жизни воздействия электрического тока, электрической дуги, электромагнитного поля и статического электричества.

К вредным факторам можно отнести наличие в помещении большого количества аппаратуры, использующей однофазный электрический ток напряжением 220 В и частотой 50 Гц. По опасности электропоражения комната относится к помещениям без повышенной опасности, так как отсутствует влажность, высокая температура, токопроводящая пыль и возможность одновременного соприкосновения с имеющимися соединениями с землей металлическими предметами и металлическими корпусами оборудования.

Во время нормального режима работы оборудования опасность электропоражения крайне мала, однако, возможны аварийные режимы работы, когда происходит случайное электрическое соединение частей оборудования, находящегося под напряжением с заземленными конструкциями. 61 Поражение человека электрическим током может произойти в следующих случаях:

- при однофазном (однополюсном) прикосновении неизолированного от земли человека к неизолированным токоведущим частям электроустановок, находящихся под напряжением;

- при прикосновении к нетоковедущим частям, находящимся под напряжением, то есть в случае нарушения изоляции;

- при соприкосновении с полом и стенами, оказавшимися под напряжением;

Основными мероприятиями по обеспечению электробезопасности являются :

- изолирование (ограждение) токоведущих частей, исключающее возможность случайного прикосновения к ним;

- установки защитного заземления;

- наличие общего рубильника;

- своевременный осмотр технического оборудования, изоляции.

Повышенный уровень электромагнитных излучений и его оценка проводится при выполнении работ с ПЭВМ. Источником электромагнитных полей промышленной частоты являются чаще всего токоведущие части действующих электроустановок.

Неблагоприятное воздействие токов промышленной частоты проявляются только при напряженности магнитного поля 160–200 А/м.

Практически при обслуживании и нахождении даже в зоне мощных электроустановок высокого напряжения магнитная напряженность поля не превышает 20–25 А/м, поэтому оценку потенциальной опасности воздействия электромагнитного поля промышленной частоты достаточно производить по величине электрической напряженности поля.

В соответствии с нормами допустимых уровней напряженности электрических полей зависят от времени пребывания человека в 62 контролируемой зоны . Работа в условиях облучения электрическим полем с напряженностью 20–25 кВ/м продолжается не более 10 минут. При

напряженности не выше 5 кВ/м присутствие людей в рабочей зоне разрешается в течение 8 часов.

При работе с ПЭВМ допустимые уровни электромагнитных полей указаны в таблице 19.

Таблица 19 – Временные допустимые уровни ЭМП, создаваемых ПЭВМ лабораторной установки

Наименование параметров		ВДУ ЭМП
Напряженность электрического поля	в диапазоне частот 5 Гц - 2 кГц	20 В/м
	в диапазоне частот 2 кГц – 400 кГц	2,5 В/м
Плотность магнитного потока	в диапазоне частот 5 Гц - 2 кГц	270 нТл
	в диапазоне частот 2 кГц – 400 кГц	27 нТл
Напряженность электростатического поля		10 кВ/м
Электростатический потенциал экрана видеомонитора		500

### *Пожароопасность*

Пожарная опасность электроустановок, обусловлена наличием в применяемом электрооборудовании горючих изоляционных материалов. Горючими являются изоляция обмоток машин, проводов и кабелей.

Согласно строительным нормам и правилам, в зависимости от характеристики вращающихся в производстве веществ и их количества, производства подразделяются по пожарной и взрывной опасности на категории А, Б, В, Г, Д.

Помещение лабораторного комплекса, согласно Техническому регламенту, можно классифицировать по пожарной опасности, как помещение категории В, т.к. оно содержит твердые и волокнистые горючие вещества, не выделяющие горючую пыль или волокна, переходящие во взвешенное состояние.

Пожар на производстве может возникнуть вследствие причин неэлектрического и электрического характера.

К причинам неэлектрического характера относятся:

- 1) неисправность производственного оборудования и нарушение технологического процесса;
- 2) халатное и неосторожное обращение с огнем;
- 3) неправильное устройство и неисправность вентиляционной системы;
- 4) самовоспламенение или самовозгорание веществ.

К причинам электрического характера относятся:

- 1) короткое замыкание;
- 2) перегрузка проводов;
- 3) большое переходное сопротивление;
- 4) искрение;
- 5) статическое электричество

Исходя из норм пожарной безопасности для помещений площадью до 100 м<sup>2</sup> в качестве первичного средства пожаротушения требуется один углекислотный огнетушитель типа ОУ-5, с помощью которого можно тушить возгорания различных материалов и установок напряжением до 1000 В, либо один хладоновый огнетушитель ОХЛ-10.

Комплекс организационных и технических мероприятий пожарной профилактики позволяет предотвратить пожар, а в случае его возникновения обеспечить безопасность людей, ограничить распространение огня, а также создать условия для успешного тушения пожара.

### **6.3 Охрана окружающей среды**

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



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

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

#### **6.4 Защита в ЧС**

Лаборатория расположена в городе Томск с континентальноциклоническим 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 разморозки труб должны быть предусмотрены запасные обогреватели. Их количества и мощности должно хватать для того, чтобы работа на производстве не прекратилась.

В последнее время, в связи с внешней политикой страны, возможны проявления диверсии. Угрозы могут быть как ложными, так и

действительными, поэтому необходимы меры предосторожности по этому поводу. В качестве мер безопасности могут быть приняты следующие действия – установка системы видеонаблюдения и круглосуточной охраны, сохранение конфиденциальной информации о охранной системе. Необходимо так же проводить информирование должностных лиц и тренировки по отработке действий на случай экстренной эвакуации.

## **6.5 Правовые и организационные вопросы обеспечения безопасности**

1. СН 245-71. Санитарные нормы проектирования промышленных предприятий.

2. ГОСТ 12.11.005-88. Общие санитарно-технические требования к воздуху рабочей зоны.

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

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

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

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

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

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

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

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

11. НПБ 105-03. Определение категорий помещений, зданий и

наружных установок по взрывопожарной и пожарной опасности.

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

**Заключение**

В работе была изучена стационарная теория возмущений Релея-Шредингера. Определены поправки к уровням энергий и в волновые функции для второго порядка теории возмущений. Определенные формулы могут быть использованы для решения задачи об определении поправок в колебательные энергии молекул.

В ходе работы были изучены базовые понятия и определения, которые используются в колебательно-вращательной спектроскопии. Там же был изучен метод комбинационных разностей, с помощью которого проведен анализ колебательно-вращательного спектра валентной полосы  $\nu_2$  молекулы  $^{34}\text{SO}_2$ .

В результате проведенного анализа на основе метода комбинационных разностей в спектре молекулы было проинтерпретировано более 432 переходов до  $J_{\text{max}} = 28$  и  $K_{\text{max}} = 4$  для полосы  $\nu_1$ . На этой основе нам удалось определить около 98 уровней энергий. Для иллюстрации некоторые из них представлены в таблице 3. С помощью которого проведен анализ колебательно-вращательного спектра валентной полосы  $\nu_2$  молекулы  $^{34}\text{SO}_2$ .

## Список литературы

1. Goldman A , Murcray FJ , Rinsland CP , Blatherwick RD , David SJ , Murcray FH , Murcray DG . Mt. pinatubo SO<sub>2</sub> column measurements from manua loa. *Geo- phys Res Lett* 1992; 19:183–6 .
2. Hansen J., Lacis A , Ruedy R , Sato M . Potential climate impact of mount pinatubo eruption. *Geophys Res Lett* 1992; 19:215–18 .
3. Wallace P.J. Volcanic SO<sub>2</sub> emissions and the abundance and distribution of exsolved gas in magma bodies. *J Volcanol Geotherm Res* 2001; 108: 85–106 .
4. 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.
5. 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*. San Diego: Academic; 1992. p. 285–99.
6. Kump L.R. Sulphur isotopes and the stepwise oxygenation of the biosphere. *Elements* 2012; 8: 410–11.
7. Farquhar J , Bao H , Thiemens M . Atmospheric influence of earth's earliest sulfur cycle. *Science* 20 0 0; 289: 756–8.
8. . Gordy M. and Cook R. L. // *Microwave Molecular Spectra*. – 1970. – Interscience Publ. – New-York – London – Sidney – Toronto.
9. Papousek D. and Aliev M.R. // *Molecular Vibrational–Rotational Spectra*. – 1982. – Elsevier. – Amsterdam.
10. Hilali A.El, Coudert L.H., Konov I., and Klee S. // *The Journal of Chemical Physics*. – 2011. – V. 135. – 194309(1-6).
11. Rusinek E., Fichoux H., Khelkhal M., Herlemont F., Legrand J., Fayt A. // *J. Mol. Spectrosc.* – 1998. – V. 189. – P. 64-73.
12. Ulenikov O.N., Gromova O.V., Aslapovskaya Yu.S., Horneman V.M. // *J. Quan. Spectrosc. Radiat. Transf.* – 2013. – V. 118. – P. 14-25.

13. Cernicharo J., Heras A.M., Pardo J.R., Tielens A.G.G.M., Guelin M., Dartois E., Neri R., Walters L.B.F.M.// *Astrophys .J.* – 2001. – V. 546. – P. L127-L130

14. F. Hegelund, *Journal of Molecular Spectroscopy*, vol. 126, no. 1, pp. 32 – 57, 1987

15. 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.

16. Макушкин Ю.С., Улеников О.Н., Чеглоков А. Е. Симметрия и ее применение к задачам колебательно-вращательной спектроскопии молекул, часть 2. – Томск: Изд-во ТГУ, 1990. – 222 с.F. Hegelund and F. M. Nicolaisen, *Journal of Molecular Spectroscopy*, vol. 128, no. 2, pp. 321– 333, 1988

17. Колебательные и вращательные спектры многоатомных молекул / Г. Герцберг; под ред. М. А. Ельяшевича. – М.: ИЛ, 1965. – 648 с.