

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

Темаработы
Исследование молекулы C_2H_4 методами спектроскопии высокого разрешения.

УДК: 539.194.001.5

Студент

Группа	ФИО	Подпись	Дата
150Б52	Тянь Ифань		

Руководитель

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Профессор	Бехтерева Елена Сергеевна	д.ф.-м.н.		

Консультант

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Ассистент	Аслаповская Юлия Сергеевна	к.ф.-м.н.		

КОНСУЛЬТАНТЫ ПО РАЗДЕЛАМ:

По разделу «Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение»

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Доцент	Конотопский Владимир Юрьевич	к.э.н.		

По разделу «Социальная ответственность»

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Старший преподаватель ШБИП	Скачкова Лариса Александровна			

ДОПУСТИТЬ К ЗАЩИТЕ:

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

Томск – 2019 г.

Запланированные результаты обучения по программе

Код результата	Результатобучения (выпускник способен)	Требования ФГОС, критериев и/или заинтересованных сторон
<i>Общекультурные компетенции</i>		
P1	Использовать основные этапы и закономерности исторического развития общества, основы философских, экономических, правовых знаний для формирования мировоззренческой, гражданской позиций и использования в различных сферах жизнедеятельности	Требования ФГОС3+ (ОК-1, ОК-2, ОК-3, ОК-4)
P2	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>		
P3	Использовать в профессиональной деятельности базовые естественнонаучные знания, современные концепции и ограничения естественных наук, использовать фундаментальные знания разделов общей и теоретической физики, математики для создания моделей и решения типовых профессиональных задач, в том числе с использованием знаний профессионального иностранного языка.	Требования ФГОС3+ (ОПК-1, ОПК-2, ОПК-3, ОПК-7)
P4	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)
P5	Получить организационно-управленческие навыки при работе в научных группах, критически переосмысливать накопленный опыт, изменять при необходимости профиль своей профессиональной деятельности, нести ответственность	Требования ФГОС3+ (ОПК-8, ОПК-9)

	за последствия своей инженерной деятельности.	
<i>Профессиональные компетенции</i>		
Р6	<u>Научно-исследовательская деятельность</u> Проводить научные теоретические и экспериментальные исследования в областях: материаловедения, атомной и ядерной физики, водородной энергетики, физики плазмы с помощью современной приборной базы с использованием специализированных знаний физики и освоенных профильных дисциплин.	Требования ФГОСЗ+ (ПК-1, ПК-2)
Р7	<u>Научно-инновационная деятельность</u> Применять на практике профессиональные знания теории и методов физических исследований, а также профессиональные знания и умения в результате освоения профильных дисциплин для проведения физических исследований в инновационных областях науки, используя современные методы обработки, анализа и синтеза информации.	Требования ФГОСЗ+ (ПК-3, ПК-4, ПК-5)
Р8	<u>Организационно-управленческая</u> Использовать на практике теоретические основы организации и планирования физических исследований, участвовать в подготовке и составлении научной документации по установленной форме, понимать и применять на практике методы управления в сфере природопользования	Требования ФГОСЗ+ (ПК-6, ПК-7, ПК-8)
Р9	<u>Педагогически-просветительская</u> Проектировать, организовывать, анализировать педагогическую деятельность, владеть последовательностью изложения материала с использованием междисциплинарных связей физики с другими дисциплинами, участвовать в информационно-образовательных мероприятиях по пропаганде и распространению научных знаний	Требования ФГОСЗ+ (ПК-9)

Министерство науки и высшего образования Российской Федерации
федеральное государственное автономное
образовательное учреждение высшего образования
«Национальный исследовательский Томский политехнический университет» (ТПУ)

Школа Инженерная школа ядерных технологий
Направление подготовки 03.03.02 «Физика»
Отделение школы (НОЦ) Отделение 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
150Б52	Тянь Ифань
Тема работы:	
Исследование молекулы C_2H_4 методами спектроскопии высокого разрешения.	
Утверждена приказом директора (дата, номер)	
Срок сдачи студентом выполненной работы:	

ТЕХНИЧЕСКОЕ ЗАДАНИЕ:

Исходные данные к работе (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.).	Объект исследования: спектры молекулы C_2H_4
---	--

Перечень подлежащих исследованию, проектированию и разработке вопросов <i>(аналитический обзор по литературным источникам с целью выяснения достижений мировой науки техники в рассматриваемой области; постановка задачи исследования, проектирования, конструирования; содержание процедуры исследования, проектирования, конструирования; обсуждение результатов выполненной работы; наименование дополнительных разделов, подлежащих разработке; заключение по работе).</i>	– Обзор литературных источников; – Анализ экспериментальных данных (спектров молекула C₂H₄) – Решение обратной спектроскопической задачи – Получение параметры гамильтониана – Анализ полученных результатов; – Заключение.
Консультанты по разделам выпускной квалификационной работы	
Раздел	Консультант
Социальная ответственность	Скачкова Лариса Александровна
Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение	Конотопский Владимир Юрьевич

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

Задание выдал руководитель:

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Профессор	Бехтерева Елена Сергеевна	д.ф.-м.н.		

Задание принял к исполнению студент:

Группа	ФИО	Подпись	Дата
150Б52	Тянь Ифань		

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

Студенту:

Студенту:			
Группа	ФИО		
150Б52	Тянь Ифань		
	Инженерная школа ядерных технологий		Отделение экспериментальной физики
Уровень образования	Бакалавр	Направление/специальность	Физика

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

1. Стоимость ресурсов научного исследования (НИ): материально-технических, энергетических, финансовых, информационных и человеческих	
2. Нормы и нормативы расходования ресурсов	
3. Используемая система налогообложения, ставки налогов, отчислений, дисконтирования и кредитования	

Перечень вопросов, подлежащих исследованию, проектированию и разработке:

1. Оценка коммерческого потенциала, перспективности и альтернатив проведения НИ с позиции ресурсоэффективности и ресурсосбережения	
2. Планирование и формирование бюджета научных исследований	Планирование процесса управления НИ: структура и график проведения, бюджет.
3. Определение ресурсной (ресурсосберегающей), финансовой, бюджетной, социальной и экономической эффективности исследования	

Перечень графического материала (с точным указанием обязательных чертежей):

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

Дата выдачи задания для раздела по линейному графику

Задание выдал консультант:

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
-----------	-----	---------------------------	---------	------

Доцент	Конотопский Владимир Юрьевич	к.э.н.		
--------	---------------------------------	--------	--	--

Задание принял к исполнению студент:

Группа	ФИО	Подпись	Дата
150Б52	Тянь Ифань		

ЗАДАНИЕ ДЛЯ РАЗДЕЛА «СОЦИАЛЬНАЯ ОТВЕТСТВЕННОСТЬ»

Студенту:

Группа	ФИО
150Б52	Тянь Ифань

	Инженерная школа ядерных технологий		Отделение экспериментальной физики
Уровень образования	Бакалавр	Направление/специальность	03.03.02 Физика

Тема ВКР:

Исследование молекулы C_2H_4 методами спектроскопии высокого разрешения.

Исходные данные к разделу «Социальная ответственность»:

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, ионизирующие излучения) – опасных проявлений факторов производственной среды (механической природы, термического характера, электрической, пожарной и взрывной природы) – негативного воздействия на окружающую природную среду (атмосферу, гидросферу, литосферу) – чрезвычайных ситуаций (техногенного, стихийного, экологического и социального характера)	Данная научно-исследовательская работа выполнялась в помещении кафедры общей физики третьего корпуса Томского Политехнического университета в кабинете 126. Техническим средством является ПЭВМ
2. Знакомство и отбор законодательных и нормативных документов по теме	По данной теме рассматриваются законодательный и нормативные документы: - СанПиН 2.2.2/2.4.1340-03.

	Гигиенические требования к персональным электронно-вычислительным машинам и организация работы; - СП 52.13330.2011 Естественное и искусственное освещение - ГОСТ 12.1.009 – 2009 Система стандартов безопасности труда. Электробезопасность. Термины и определения - ГОСТ 12.1.030 – 81 Электробезопасность. Защитное заземление. Зануление. - ГОСТ 12.1.038-82 Электробезопасность. Предельно допустимые значения прикосновения и токов. - СНиП 21-01-97 Пожарная безопасность зданий и сооружений.
Перечень вопросов, подлежащих исследованию, проектированию и разработке:	
1. Анализ выявленных вредных факторов проектируемой производственной среды в следующей последовательности: – физико-химическая природа вредности, её связь с разрабатываемой темой; – действие фактора на организм человека; – приведение допустимых норм с необходимой размерностью (со ссылкой на соответствующий нормативно-технический документ); – предлагаемые средства защиты (сначала коллективной защиты, затем – индивидуальные защитные средства)	1. Характеристика факторов изучаемой производственной среды, описывающих процесс взаимодействия человека с окружающей производственной средой: – Воздействие электрического напряжения на организм человека; – Воздействие высокой температуры на организм человека; – Воздействие химических веществ на дыхательные пути и организм человека в целом; – Утечка газа из баллона; – Микроклимат.
2. Анализ выявленных опасных факторов проектируемой производственной среды в следующей последовательности – механические опасности (источники, средства защиты); – термические опасности (источники, средства защиты); – электробезопасность (в т.ч. статическое электричество, молниезащита – источники, средства защиты); – пожаровзрывобезопасность (причины, профилактические мероприятия, первичные средства пожаротушения)	2. Анализ опасных факторов проектируемой производственной среды: – электробезопасность (непосредственное питание установки от сети постоянного тока 220 В; средства защиты, предусмотренные конструкцией установки, соблюдение правил и инструкций по электробезопасности при работе); – термическая опасность (печь нагрева образцов; защита специальной конструкцией установки, изолирующие

	слои, соблюдение правил безопасности и эксплуатации установки); – пожаровзрывобезопасность (баллоны с газом; соблюдение правил безопасности и эксплуатации установки).
3. Охрана окружающей среды: – защита селитебной зоны – анализ воздействия объекта на атмосферу (выбросы); – анализ воздействия объекта на гидросферу (сбросы); – анализ воздействия объекта на литосферу (отходы); – разработать решения по обеспечению экологической безопасности со ссылками на НТД по охране окружающей среды.	3. Факторы рабочего места, влияющие на окружающую среду: – Выброс в атмосферу рабочего газа; – Выброс в атмосферу химических веществ;
4. Защита в чрезвычайных ситуациях: – перечень возможных ЧС на объекте; – выбор наиболее типичной ЧС; – разработка превентивных мер по предупреждению ЧС; – разработка мер по повышению устойчивости объекта к данной ЧС; – разработка действий в результате возникшей ЧС и мер по ликвидации её последствий	4. Защита в чрезвычайных ситуациях: – Утечка газа из баллона; – Возникновение возгорания; – Поражение оператора установки электрическим током; – 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; – организационные мероприятия при компоновке рабочей зоны	5. Правовые вопросы обеспечения безопасности
Перечень графического материала:	
При необходимости представить эскизные графические материалы к расчётному заданию (обязательно для специалистов и магистров)	1. Схема расположения оборудования; 2. План размещения светильников на потолке рабочего помещения.

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

Задание выдал консультант:

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Старший преподаватель ООД	Скачкова Лариса Александровна			

ШБИП				
------	--	--	--	--

Задание принял к исполнению студент:

Группа	ФИО	Подпись	Дата
150Б52	Тянь Ифань		

Министерство науки и высшего образования Российской Федерации
 федеральное государственное автономное
 образовательное учреждение высшего образования
 «Национальный исследовательский Томский политехнический университет» (ТПУ)

Школа Инженерная школа ядерных технологий

Уровень образования бакалавриат

Направление подготовки 03.03.02 «Физика»

Отделение школы (НОЦ) Отделение экспериментальной физики

Период выполнения _____

Форма представления работы:

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

КАЛЕНДАРНЫЙ РЕЙТИНГ-ПЛАН выполнения выпускной квалификационной работы

Срок сдачи студентом выполненной работы:	
--	--

Дата контроля	Название раздела (модуля) / вид работы (исследования)	Максимальный балл/раздела (модуля)
01.05.2018	Аналитический обзор литературы	15
01.09.2018	Анализ экспериментальных данных (спектров молекулы C ₂ H ₄)	15
30.12.2018	Решение обратной спектроскопической задачи	20
30.04.2019	Анализ результатов	15
25.05.2019	Социальная ответственность	15
25.05.2019	Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение	15
25.05.2019	Заключение	5

Составил преподаватель:

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Профессор	Бехтерева Елена Сергеевна	д.ф.-м.н.		

СОГЛАСОВАНО:

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

РЕФЕРАТ

Выпускная квалификационная работа содержит 91 страницы, 26 рисунков, 16 таблиц, 26 литературных источников, 1 приложение.

Ключевые слова: молекула C_2H_4 , теории симметрии, уравнение Шредингера, метод комбинационных разностей, Фурье-инфракрасный спектрометр.

Объектом исследований является вращательная структура полос ν_{12} и $\nu_7+\nu_8$ молекулы C_2H_4 .

Цель работы: Изучение литературы по данной тематике, и исследование вращательной структуры полос ν_{12} и $\nu_7+\nu_8$ молекулы C_2H_4 с использованием колебательно-вращательного спектра высокого разрешения.

Задачи:

1. Изучить литературу по основам молекулярной спектроскопии, и теории симметрии.
2. Проинтерпретировать спектр молекулы этилена, а именно полос ν_{12} и $\nu_7+\nu_8$ до максимальных значений квантовых чисел J и K_a .
3. Решить обратную спектроскопическую задачу: определить параметры исследуемых полос ν_{12} и $\nu_7+\nu_8$ молекулы этилена

Область применения: методы молекулярной колебательно-вращательной спектроскопии являются основными инструментами для получения информации о внутримолекулярных свойствах молекул. С помощью колебательно-вращательных спектров возможно определить многие свойства молекулы, такие как момент инерции, длину и прочность связи и т.д. Результаты, полученные в настоящей научной работе имеют большое значение для астрофизики, атмосферной оптики, различных вопросов физической химии и др.

Оглавление

Введение.....	15
Глава 1. Основные сведения молекулярной спектроскопии.....	19
1.1 Обзор литературы.....	19
1.2 Классификация молекул.....	20
1.3 Общая характеристика молекулы C_2H_4	22
1.3 Основные сведения из Теории Симметрии.....	24
Глава 2. Теоретические основы колебательно- вращательной спектроскопии	
.....	27
2.1 Уравнение Шредингера для колебательно-вращательного спектра.....	27
2.2 Приближение Борна-Оппенгеймера.....	30
2.3 Основы Фурье-спектроскопии.....	33
Глава 3. Обработка экспериментальных данных.....	37
3.1 Метод интерпретации экспериментальных колебательно-вращательных спектров.....	37
3.2 Условия экспериментальной регистрации спектров.....	39
3.3 Результаты анализа тонкой структуры колебательно-вращательных спектров.....	41
3.4 Решение обратной спектроскопической задачи.....	49
Заключение.....	52
Список литературы.....	54
Приложение.....	57
Глава 4. Финансовый менеджмент ресурсоэффективность и ресурсосбережение.....	72
4.1 Организация и планирование работ.....	72
4.2 Расчет сметы затрат на выполнение проекта.....	75
4.2.1 Расчет затрат на материалы.....	75
4.2.2 Расчет заработной платы.....	76
4.2.3 Расчет затрат на социальный налог.....	77
4.2.4 Расчет затрат на электроэнергию.....	78
4.2.5 Расчет амортизационных расходов.....	79
4.2.6 Расчет расходов, учитываемых непосредственно на основе платежных (расчетных) документов (кроме суточных).....	80

4.2.7 Расчет прочих расходов.....	80
4.2.8 Расчет общей себестоимости разработки.....	81
4.2.9 Расчет прибыли.....	81
4.2.10 Расчет НДС.....	81
4.2.11 Цена разработки НИР.....	82
4.3 Оценка экономической эффективности проекта.....	82
Глава 5. Социальная ответственность.....	83
5.1. Правовые и организационные вопросы обеспечения безопасности....	83
5.2 Производственная безопасность.....	84
5.2.1 Микроклимат.....	84
5.2.2 Электромагнитное излучение.....	86
5.2.3 Недостаточная освещенность.....	87
5.2.4 Анализ опасных производных факторов окружающей работающей среды.....	88
5.2.5 Возникновения пожара.....	88
5.4 Безопасность в чрезвычайных ситуациях.....	89

Введение

Данный отчёт посвящен результатам проведенной работы по исследованию колебательно-вращательного спектра многоатомной молекулы C_2H_4 .

Актуальность работы заключается в том, что посредством исследования колебательно-вращательных спектров можно изучать строение и свойства молекул. Это важный способ, с помощью которого мы можем на основе анализа и интерпретации спектров получить большое количество информации, востребованной в различных разделах физики химии, астрофизики и т.д.. Например, изучая спектры, можно непосредственно определить отдельные уровни энергии молекулы. Причём, из спектра можно узнать конкретные особенности движения электронов в молекуле, вращательных и колебательных движений ядер. Из вышесказанного следует, что спектры являются очень точным инструментом для определения важных характеристик молекул [1].

Молекулярная колебательно-вращательная спектроскопия высокого разрешения играет ключевую роль в понимании свойств структуры материи и развития квантовой механики. В настоящее время достижения молекулярной спектроскопии имеют большое значение для астрофизики, плазменной и лазерной физики [2]. Быстрое развитие колебательно-вращательной спектроскопии оказывает значительное влияние на исследования в медицине, экологии, химии и энергетике, а в особенности на технологию электронной и лазерной спектроскопии [3].

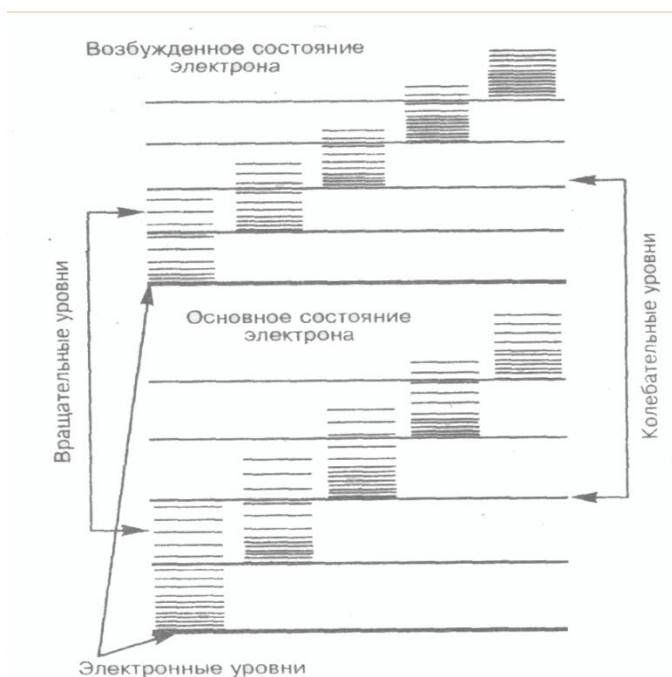


Рисунок 1 – Электронно-колебательно-вращательные уровни энергии.

Энергетическая структура молекулы имеет вид последовательно расположенных электронных, колебательных и вращательных уровней.

Энергия электронных колебательных, а также вращательных уровней отличается друг от друга в 50-100 раз. Каждый электронный энергетический уровень энергии молекулы содержит колебательную структуру подуровней, а каждый колебательный уровень включает в себя систему вращательных подуровней [4]. Более подробно электронно-колебательно-вращательная структура спектров молекул представлена на рисунке 1.

В молекуле типа асимметричного волчка переходы с энергетических уровней надругие уровни разрешаются исходя из правил отбора. Правила отбора для полосы ν_{12} :

$$\Delta J=0,\pm 1, \Delta K_a=0, \Delta K_c=\pm 1$$

Центр полосы находится вблизи 1442 см^{-1} . Для иллюстрации на картинке 2 представлен спектр высокого разрешения молекулы этилена в диапазоне от

1300 см^{-1} до 1550 см^{-1} , а также часть спектра, показывающая высокую точность эксперимента (см. Рисунок 3).

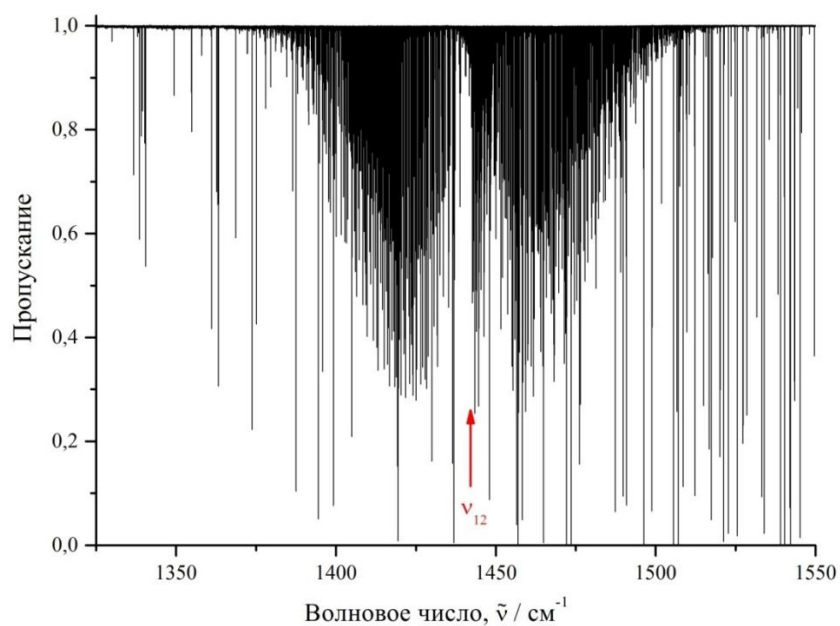


Рисунок 2 – Спектр высокого разрешения молекулы C_2H_4 в диапазоне 1300–1550 см^{-1} .

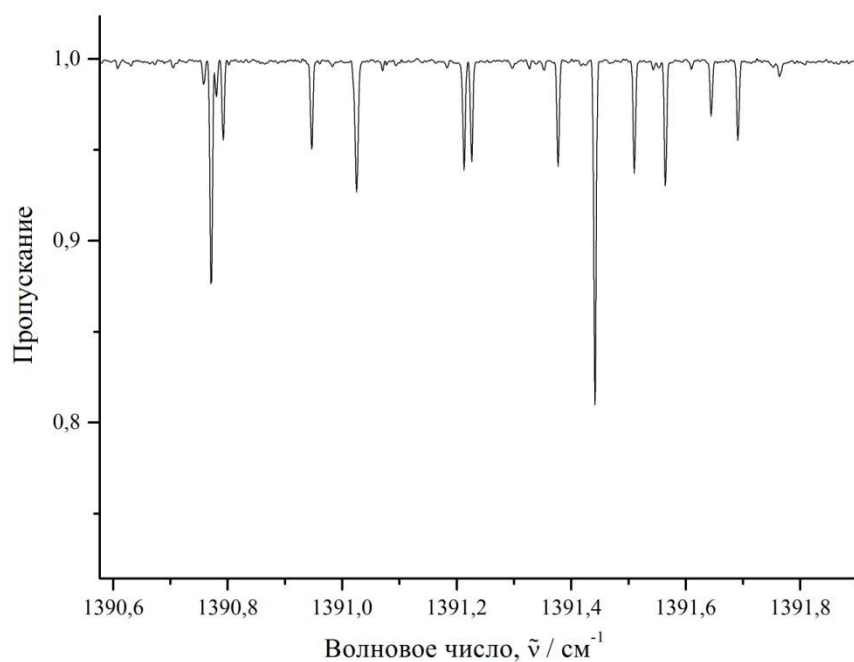


Рисунок 3 –Часть спектра, иллюстрирующая высокую точность эксперимента.

Данная научная работа посвящена исследованию колебательно-вращательных уровней энергии колебательных состояний ($\nu_{12}=1$) и ($\nu_7=\nu_8=1$).

Цель работы: Изучение литературы по данной тематике, и исследование вращательной структуры полос ν_{12} и $\nu_7+\nu_8$ молекулы C_2H_4 с использованием колебательно-вращательного спектра высокого разрешения.

Задачи:

1. Изучить литературу по основам молекулярной спектроскопии, и теории симметрии.
2. Проинтерпретировать спектр молекулы этилена, а именно полос ν_{12} и $\nu_7+\nu_8$ до максимальных значений квантовых чисел J и K_a .
3. Решить обратную спектроскопическую задачу, определить параметры исследуемых полос ν_{12} и $\nu_7+\nu_8$ молекулы этилена

Глава 1. Основные сведения молекулярной спектроскопии

1.1 Обзор литературы

Спектры высокого разрешения молекулы этилена, зарегистрированные на спектрометрах с Фурье преобразованием, были объектами исследований во множестве работ на протяжении многих лет. В 1996 году Оменс Д. с соавторами [5] впервые исследовали спектр горячей полосы $\nu_{10}+\nu_{11}-\nu_{10}$ и $\nu_7+\nu_{11}-\nu_7$ этилена в диапазоне 2970-3015 см^{-1} при температуре 275 К. В 2000 году Тан Т.Л. [6] с соавторами, проанализировали полосу ν_{12} молекулы этилена с разрешением 0,004 см^{-1} в диапазоне 1380-1500 см^{-1} . Также полоса ν_{12} исследовалась Ротгером М. с соавторами в работе [7]. В 2001 году Хартман Д. [8] проанализировал три полосы (зарегистрированные с разрешением 0,005 см^{-1}): ν_{12} (1442,44270 см^{-1}), $\nu_7+\nu_8$ (1888,978 23 см^{-1}) и $\nu_6+\nu_{10}$ (2047,775 832 см^{-1}). В 2011 году Лафферти В. Ж. представил результаты исследования области 4,3–5,6 мм, в том числе, полосы $\nu_7+\nu_8$ (зарегистрированной с разрешением 0,004 см^{-1}) до максимальных значений квантовых чисел $J/K_a = 13/31$. В 2010 и 2014 годах Улеников О.Н. с соавторами представили исследования комбинационной полосы $\nu_5+\nu_{12}$ и горячих полос $\nu_7+\nu_{10}-\nu_{10}$ и $\nu_{10}+\nu_{12}-\nu_{10}$ молекулы этилена, локализованных в диапазонах 4250-4650 см^{-1} , 800-1150 см^{-1} и 1350-1550 см^{-1} [10-11]. Основное состояние исследовалась в работе [12] на основе спектроскопической информации о четырех фундаментальных полос молекулы этилена.

В последние годы технология инфракрасной спектроскопии с преобразованием Фурье развивается очень быстро, и FTIR-спектрометр быстро модернизируются, поэтому точность экспериментальных данных становится все выше. Данное исследование представляет собой спектральный анализ полос ν_{12} и $\nu_7+\nu_8$ молекулы этилена с более высокой точностью, чем было известно ранее.

1.2 Классификация молекул

Поскольку в данной работе рассматриваются колебательно-вращательные спектры, то необходимо описать как, такая характеристика движения как, момент инерции влияет на классификацию молекул. Момент инерции молекулы I относительно любой оси расположенной в центре масс определяется выражением:

$$I = \sum m_i r_i^2,$$

где m_i и r_i — масса и расстояние атома i от оси инерции. Существует одна из этих осей, условно обозначенная осью c , относительно которой момент инерции имеет максимальное значение и вторая ось, обозначенная как ось a , относительно которой момент инерции имеет минимальное значение. Можно показать, что оси a и c должны быть взаимно перпендикулярны. Они вместе с третьей осью (ось b), перпендикулярной двум другим, называются главными осями инерции, а соответствующие моменты инерции I_a , I_b и I_c являются главными моментами инерции [13-14]. В целом, согласно конвенции:

$$I_c \geq I_b \geq I_a$$

Для линейной молекулы, такой как HCN(см. рисунок 4),

$$I_c = I_b > I_a = 0,$$

где оси b и c могут находиться в любом направлении, перпендикулярном к межъядерной оси a .

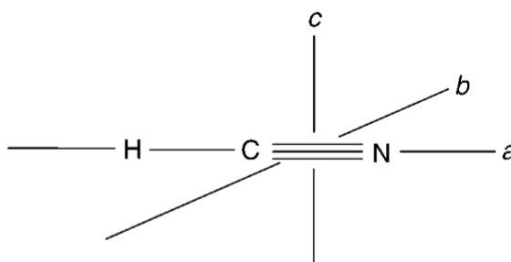


Рисунок 4 – Линейная молекула HCN.

Для симметричного ротора или симметричного волчка, как его иногда называют, два основных момента инерции равны, а третий – ненулевой. Если молекула представляет собой вытянутый симметричный ротор, то:

$$I_c = I_b > I_a.$$

На рисунке 5 изображен пример симметричного волчка – молекула метилиодида. Так как тяжелое иодное ядро не вносит вклад в момент инерции I_a , то I_a – очень малая величина, и молекула представляет собой вытянутый симметричный ротор.

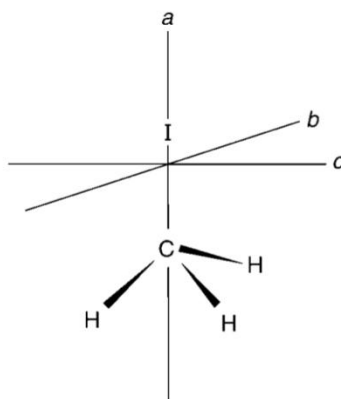


Рисунок 5 – Вытянутый симметричный ротор.

Молекула бензола, показанная на рисунке 6, представляет собой сплюснутый симметричный ротор, для которого:

$$I_c > I_b = I_a$$

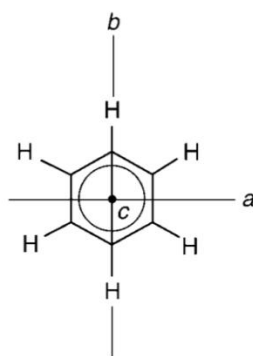


Рисунок 6 – Сплюснутый симметричный ротор.

Сферический ротор имеет все три разные основные моменты инерции:

$$I_c = I_b = I_a$$

Пример сферического волчка – молекула метана, показанного на рисунке 7.

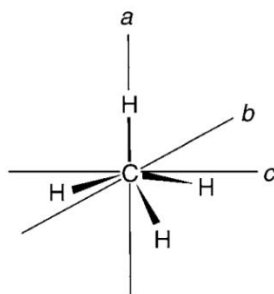
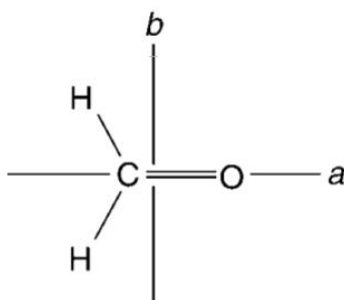


Рисунок 7 – Сферический ротор.

Асимметричный ротор имеет все различные основные моменты инерции:

$$I_c \neq I_b \neq I_a$$

Примером асимметричного ротора, (этот класс включает в себя большинство молекул), является формальдегид, показанный на рисунке 8.



Рисунке 8 – Асимметричный ротор.

1.3 Общая характеристика молекулы C₂H₄

Этилен является одним из крупнейших химических продуктов в мире и основой нефтехимической промышленности. Этиленовые продукты составляют более 75% от всей нефтехимической промышленности и занимают

значительное место в мировой экономике. Выработка этилена в мире является важным признаком развития нефтехимического производства.

Молекула C_2H_4 – основное химическое сырье для получения синтетических волокон, синтетического каучука, синтетических пластмасс (полиэтилен и поливинилхлорид) и синтетического этанола (спирта), а также винилхлорида, стирола, этилен оксида, уксусной кислоты, ацетальдегида. Этилен используется как гормон для овощных и фруктовых культур (в качестве созревающего средства). Он представляет собой природное соединение, присутствующее в атмосфере земли, которое влияет на химию атмосферы и формирование глобального климата. Такой вклад в атмосферную химию делает этилен важным газом для анализа климата, а его концентрация представляет интерес для атмосферной науки. Этилен является одним из наиболее актуальных объектов исследования в астрофизике т.к. он был обнаружен в атмосферах планет-гигантов. Молекула C_2H_4 также важна, как пример прототипа в развитии нашего понимания связанных спектров и динамики потенциальных гиперповерхностей многих органических молекул.

Этилен представляет собой соединение двух атомов углерода и четырех атомов водорода. Между атомами углерода существует двойная связь.

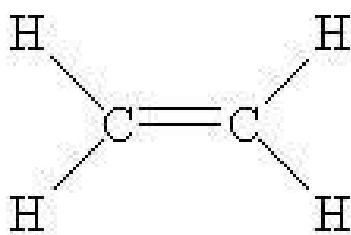


Рисунок 9 – Структурная формула этилена.

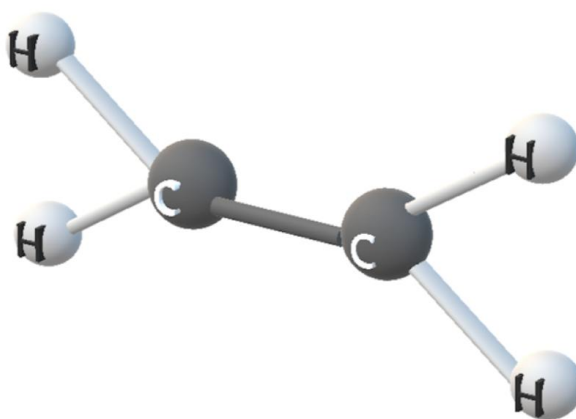


Рисунок 10 – Молекула этилена C_2H_4 .

На рисунке 10 изображена молекула этилена. Молекула C_2H_4 относится к молекулам типа асимметричного волчка [15]. Для подобных молекул, а именно, молекул типа асимметричного волчка, характерно наличие разных по величине главных моментов инерции. Соответственно, различны и равновесные вращательные постоянные A , B и C , выражающиеся следующими соотношениями:

$$A = \frac{h}{8\pi^2 c I_A},$$

$$B = \frac{h}{8\pi^2 c I_B},$$

$$C = \frac{h}{8\pi^2 c I_C}.$$

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

1.3 Основные сведения из Теории Симметрии

Группа симметрии молекулы этилена C_2H_4 изоморфна точечной группе симметрии D_{2h} . В эту группу содержится восемь неприводимых представлений.

В соответствии с общими принципами колебательно-вращательной теории молекуле C_2H_4 соответствуют 12 нормальных колебаний, которые

преобразуются по неприводимым представлениям группы D_{2h} (таблица 1, рисунок 11).

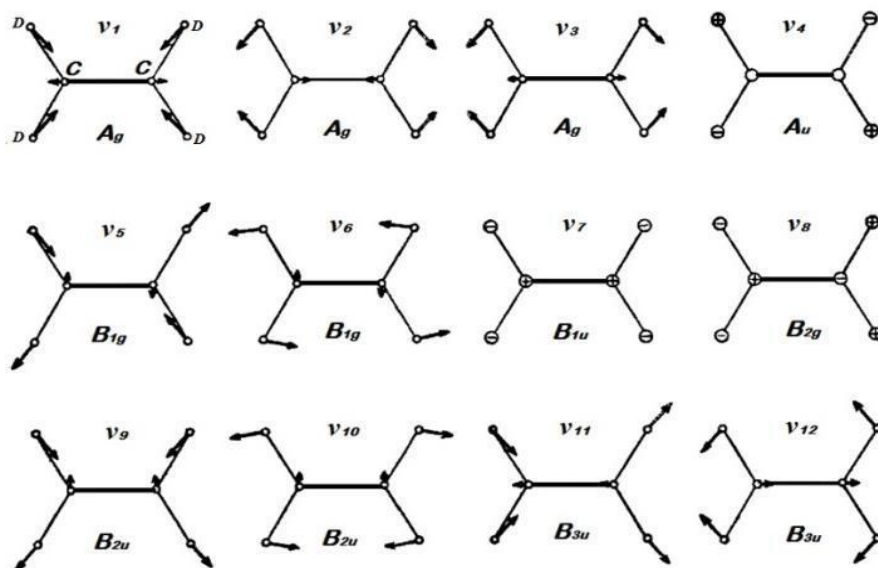


Рисунок 11 – Нормальные колебания молекулы C_2H_4 .

Таблица 1 – Типы симметрии и характеры неприводимых представлений молекулы C_2H_4

D_{2h}	E	σ_{xy}	σ_{xz}	σ_{yz}	I	$C_2(z)$	$C_2(y)$	$C_2(x)$	Колебания
A_g	1	1	1	1	1	1	1	1	ν_1, ν_2, ν_3
A_u	1	-1	-1	-1	-1	1	1	1	ν_4
B_{1g}	1	1	-1	-1	1	1	-1	-1	ν_5, ν_6
B_{1u}	1	-1	1	1	-1	1	-1	-1	ν_7
B_{2g}	1	1	1	-1	1	-1	1	-1	ν_8
B_{2u}	1	1	-1	1	1	-1	1	-1	ν_9, ν_{10}
B_{3g}	1	1	-1	1	1	-1	-1	1	
B_{3u}	1	1	1	-1	-1	-1	-1	1	ν_{11}, ν_{12}

В силу симметрии для молекулы C_2H_4 разрешены переходы только трёх типов: с основного колебательного состояния (симметрия A_g) на колебательные состояния симметрии B_{1u} , B_{2u} и B_{3u} . Другие переходы на возбужденные

колебательные состояния являются запрещенными. Запрещенные переходы могут проявляться в спектре только из-за резонансов типа Ферми или Кориолиса [16].

Исходя из вышесказанного выделяют следующие типы полос:

$B_{1u} \leftarrow A_g$ – полосы с-типа с правилами отбора $\Delta J = 0, \pm 1$, K_a – нечётные, K_c – чётные

$B_{2u} \leftarrow A_g$ это полосы b-типа с правилами отбора $\Delta J = 0, \pm 1$, K_a – нечётные, K_c – нечётные

$B_{3u} \leftarrow A_g$ это полосы a-типа с правилами отбора $\Delta J = 0, \pm 1$, K_a – чётные, K_c – нечётные.

Глава 2. Теоретические основы колебательно- вращательный спектроскопии

2.1 Уравнение Шредингера для колебательно-вращательного спектра

Уравнение Шредингера, также известное как волновое уравнение Шредингера, – это основное уравнение квантовой механики, предложенное австрийским физиком Эрвином Шрёдингером. Это дифференциальное уравнение для волновой функции (здесь в качестве иллюстрации приведено уравнение Шредингера для одной частицы):

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \Psi + U\Psi.$$

Уравнение Шредингера зависит от времени:

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \hat{H}\Psi,$$

где $\hat{H}$ – гамильтониан системы [17].

Стационарное уравнение Шредингера – это уравнение для стационарного состояния, когда полный гамильтониан системы не зависит от времени:

$$\hat{H}\psi(\vec{r}) = E\psi(\vec{r}).$$

Гамильтониан – это оператор полной энергии системы в квантовой теории. С помощью классической механики гамильтониан обычно выражается как кинетическая энергия плюс потенциальная энергия системы.

$$\hat{H} = \hat{E} + \hat{U},$$

где $\hat{E}$ – это кинетическая энергия, $\hat{U}$ – это потенциальная энергия.

Для того чтобы решить уравнение Шредингера, нужно знать гамильтониан молекулы. Поэтому целесообразно построить гамильтониан, описывающий движение атомных ядер и электронов данной молекулы. Для этого нужно учесть ряд важных условий [17].

Во-первых, гамильтониан должен соответствовать правильной математической модели. Эта модель должна быть не только качественно, но и количественно корректной. Причём, решения уравнения Шредингера будут непосредственно зависеть от вида оператора Гамильтона $\hat{H}$.

Во-вторых, гамильтониан должен учесть физические приближения. Построение гамильтониана, точно описывающего координаты и спины всех частиц молекулы, с учетом всех видов взаимодействий между этими частицами, является нелегкой физической задачей. Кроме того, определение конкретного решения является еще более сложной задачей. Поэтому, нам нужно использовать различные виды приближений для описания молекулярной модели. Ещё более важно учитывать физический смысл слагаемых, которые опускаются из-за применения приближений.

В нерелятивистском случае, гамильтониан имеет следующий вид:

$$\hat{H} = \hat{T}_{\text{яд}} + \hat{T}_{\text{эл}} + \hat{V},$$

где $\hat{T}_{\text{яд}}$ – оператор кинетической энергии ядер; $\hat{T}_{\text{эл}}$ – оператор кинетической энергии электронов; $\hat{V}$ – потенциальная функция, включающая энергию электрического притяжения электронов к ядрам и энергию отталкивания между электронами и ядрами. Соответственно, формулы имеют следующий вид [18]:

$$\begin{aligned} T_{\text{яд}} &= -\frac{\hbar^2}{2} \sum_N \frac{1}{m_N} \left(\frac{\partial^2}{\partial x_N^2} + \frac{\partial^2}{\partial y_N^2} + \frac{\partial^2}{\partial z_N^2} \right), \\ T_{\text{эл}} &= -\frac{\hbar^2}{2m_e} \sum_i \left(\frac{\partial^2}{\partial x_i^2} + \frac{\partial^2}{\partial y_i^2} + \frac{\partial^2}{\partial z_i^2} \right), \\ V &= \sum_{\substack{i,j \\ i>j}} \frac{e^2}{r_{ij}} + \sum_{\substack{N,N' \\ N>N'}} \frac{Z_N Z_{N'}}{r_{NN'}} - \sum_{i,N} \frac{e Z_N}{r_{iN}}, \end{aligned}$$

где m_N и m_e являются массами N-го ядра и электрона; z_N и e являются зарядами ядра и электрона; $r_{ab} = [(x_a - x_b)^2 + (y_a - y_b)^2 + (z_a - z_b)^2]^{\frac{1}{2}}$ является расстоянием между частицами а и b в декартовой пространственно-фиксированной системе (ПФС).

Однако, решение уравнения Шредингера с приведенным выше гамильтонианом невозможно. Поэтому, ключ решения проблемы в том, чтобы найти целесообразное координатное преобразование. В этом случае решение уравнения Шредингера станет возможным.

Для того чтобы найти удобную форму гамильтониана, попробуем построить лагранжиан в классическом виде. Следовательно, через использование преобразования координаты и производной выполним переход от классического гамильтониана к оператору Гамильтона.

Суть преобразования заключается в следующем. Допустим, что нам известен закон по которому преобразуются координаты и их производные:

$$x_n = f_n(q_1, q_2 \dots q_m, t),$$

$$\frac{\partial}{\partial x_n} = \Phi_n \left(q_1, q_2 \dots q_m, \frac{\partial}{\partial q_l} \right) \quad (3)$$

Если такое преобразование является невырожденным, т.е. Якобиан преобразования $\frac{D(x_1, \dots, x_n)}{D(q_1, \dots, q_n)}$ не равен нулю, то всегда существует единственное обратное преобразование. Нужно отметить, что такое условие не выполняется для линейных молекул.

Мы можем определить импульс p_{q_m} через обобщенные координаты q_m . Предположим, что координаты x_n и q_m являются некоторой функцией, зависящей от переменной t .

$$p_{q_m} = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_m}, p_{x_n} = \frac{\partial L}{\partial \dot{x}_n},$$

$$\dot{x}_n = \frac{dx_n}{dt}, \dot{q}_m = \frac{dq_m}{dt},$$

где L - Лагранжиан, в общем случае является полиномом переменных $\dot{x}_n$ или $\dot{q}_m$:

$$L = \sum_{i, \dots, j} \alpha_{i \dots j}(x_n) \dot{x}_i \dots \dot{x}_j + \dots + \sum_i \alpha_i(x_n) \dot{x}_i + \alpha(x_n).$$

Таким образом, всегда можно преобразовать гамильтониан молекулы в новую систему координат с помощью вышеуказанной формулы, причём, в общем случае формул перехода к новым координатам существует бесконечное множество, через которые полученные наборы собственных значений должны совпадать.

2.2 Приближение Борна-Оппенгеймера

Приближение Борна-Оппенгеймера – приближенный метод для решения уравнения Шредингера. Суть этого метода заключается в том, что в молекулярной системе можно рассматривать движения ядер атомов отдельно от движения электронов.

Если рассматривать движение электронов относительно ядер, то можно с уверенностью сказать, что скорость ядер много меньше по сравнению со скоростью электронов. Этот факт является следствием огромной разности масс. Поэтому "медленные" ядра образуют электростатическое поле, в котором движутся с большей скоростью электроны. Естественно электроны мгновенно реагируют на любые изменения координат ядер. Именно поэтому в данном приближении возможно считать ядра фиксированными и рассматривать лишь движение электронов. Полная энергия молекулярной системы в этом случае будет представлять собой сумму электронной энергии, рассчитанной при фиксированном положении ядер, и энергии колебательно-вращательного движения ядер [10].

Как и для одноатомной системы, гамильтониан H для двухатомной или многоатомной системы представляет собой сумму кинетической энергии T (или ее квантово-механического эквивалента) и потенциальную энергию V . В молекуле кинетическая энергия T состоит из вкладов T_e и T_n , зависящих от движений электронов и ядер соответственно. Потенциальная энергия состоит из двух членов: V_{ee} и V_{nn} – кулоновских сил отталкивания между электронами и ядрами, соответственно, и третьего члена V_{en} – кулоновских сил притяжения между электронами и ядрами. В итоге получаем:

$$H = T_e + T_n + V_{en} + V_{ee} + V_{nn}.$$

Для фиксированных ядер $T_n = 0$ и V_{nn} постоянна, и существует набор электронных волновых функций ψ_e , удовлетворяющих уравнению Шрёдингера

$$H_e \psi_e = E_e \psi_e,$$

где

$$H_e = T_e + V_{en} + V_{ee}.$$

Следственно H_e зависит от ядерных координат, из-за слагаемого V_{en} , так же как ψ_e и E_e . Однако в предложенном в 1927 году приближении Борна-Оппенгеймера предполагается, что колеблющиеся ядра движутся так медленно по сравнению с электронами, что ψ_e и E_e включают в себя координаты ядра только как параметры. Результат для двухатомной молекулы состоит в том, что зависимость (см. рисунок 12) потенциальной энергии от межъядерного расстояния r (или смещение от равновесия) может быть представлена для конкретного электронного состояния, в котором T_e и V_{ee} являются постоянными [19].

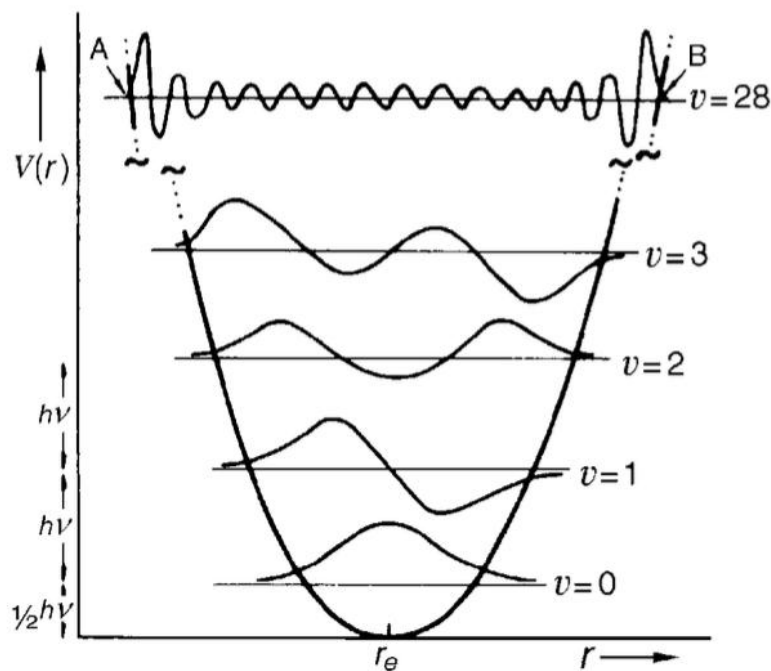


Рисунок 12 – Зависимость потенциальной энергии $V(r)$ от длины связи r для модели гармонического осциллятора; r_e – длина равновесной связи.

Приближение Борна-Оппенгеймера справедливо, поскольку электроны мгновенно подстраиваются под любое ядерное движение: говорят, что они следуют за ядрами. По этой причине E_e можно рассматривать как часть потенциального поля, в котором движутся ядра, так что:

$$H_n = T_n + V_{nn} + E_e,$$

и уравнение Шредингера для ядерного движения:

$$H_n \psi_n = E_n \psi_n.$$

Из приближения Борна-Оппенгеймера следует, что полная волновая функция может быть представлена как:

$$\psi = \psi_e(q, Q) \psi_n(Q),$$

где q – электронные координаты, а ψ_e – волновая функция ядерных координат Q , а также q . Из приведенной выше формулы можно видеть, что:

$$E = E_e + E_n.$$

Волновая функция ψ_n может быть разложена далее в колебательную часть ψ_v и вращательную часть ψ_r :

$$\psi_n = \psi_v \psi_r.$$

По тем же причинам, возможно, что волновая функция атома водорода $\psi(r, \theta, \varphi)$ может быть разложена на R_{nl} и $Y_{lm}(\theta, \varphi)$

$$E_n = E_v + E_r,$$

поэтому

$$\psi = \psi_e \psi_v \psi_r,$$

$$E = E_e + E_v + E_r.$$

Если любые атомы имеют ядерный спин, эта часть полной волновой функции может быть разложена и энергия обрабатывается аддитивно. Именно по этим причинам мы можем отдельно обрабатывать электронную, колебательную и вращательную структуру спектра [19].

2.3 Основы Фурье-спектроскопии

Давайте рассмотрим классический спектроскопический эксперимент, в котором входящее в призмный или решеточный монохроматор полихроматическое излучение (белый свет) разделяется на бесконечно большое число монохроматических пучков. На выходе получается спектр путем разделения выходящих из призмы пучков различных длин волн, за счет явления дисперсии [20].

Принцип работы монохроматора прост. Свет, идущий от источника (белый свет) пропускается через образец и затем разделяется на два параллельных пучка с помощью полупрозрачного зеркала. Один из пучков отражается от неподвижного зеркала, второй – от подвижного зеркала. Второе зеркало позволяет изменять разность хода между лучами двух пучков. Далее эти пучки соединяются светоделительным зеркалом и направляются на фотоприёмник,

где пучки интерферируют. Интерференционная картина на фотоприемнике для различных длин волн (ослабление или усиление интенсивности света) зависит от разности хода между лучами в двух пучках [21].

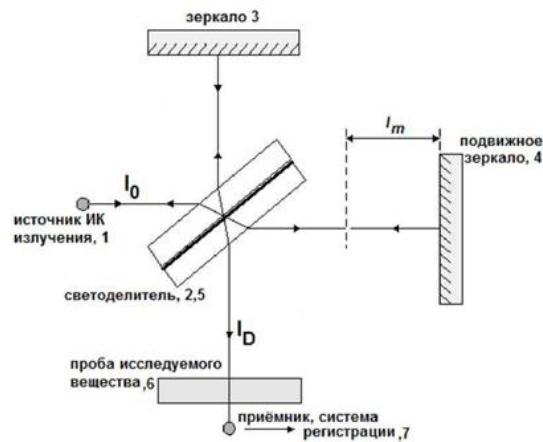


Рисунок 13 – Схема интерферометра Майкельсона.

Интенсивность света, которую мы получаем на выходе, связана с разностью оптической пути двух лучей. Когда движущееся зеркало перемещается с постоянной скоростью, получается связь между интенсивностью света и временем.

$$I(\delta)' = B \times \left(1 + \frac{\cos 2\pi\delta}{\lambda}\right),$$

$$I(t)' = B \times \left\{1 + \frac{\cos (2\pi \times 2v_0 t)}{\lambda}\right\} = B \times \{1 + \cos (2\pi \times 2v_0 t \times v)\},$$

где:

B – интенсивность источника света, соответствующая монохроматическому свету;

$v = \frac{1}{\lambda}$ – волновое число;

v_0 – скорость движущегося зеркала;

δ – оптическая разность путей.

Часть переменных в приведенном выше уравнении соответствует полученной интерферограмме.

$$I(\delta) = B \times \cos\left(\frac{2\pi\delta}{\lambda}\right),$$

$$I(t) = B \times \cos(2\pi \times 2\nu_0 t \times \nu).$$

Однако, фактический источник света не является монохроматическим, поэтому в реальной ситуации вклады различных частот складываются вместе.

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

Выполнив обратное преобразование Фурье, используя предыдущее уравнение, можно получить следующее соотношение между интенсивностью света и частотой.

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

Ордината спектра инфракрасного проецирования имеет два представления, а именно пропускание $T_{(\nu)}$ и поглощение $A_{(\nu)}$. Спектр с использованием коэффициента пропускания по ординате называется спектром пропускания, а спектр с использованием коэффициента поглощения называется спектром поглощения.

Коэффициент пропускания $T_{(\nu)}$ определенной длины волны света представляет собой отношение интенсивности света $I_{(\nu)}$, проходящего через образец, к интенсивности света $I_{0(\nu)}$, проходящего через фон [22].

$$T(\nu) = \frac{I_{(\nu)}}{I_{0(\nu)}} \times 100\%,$$

$$A(\nu) = \lg \frac{1}{T(\nu)}.$$

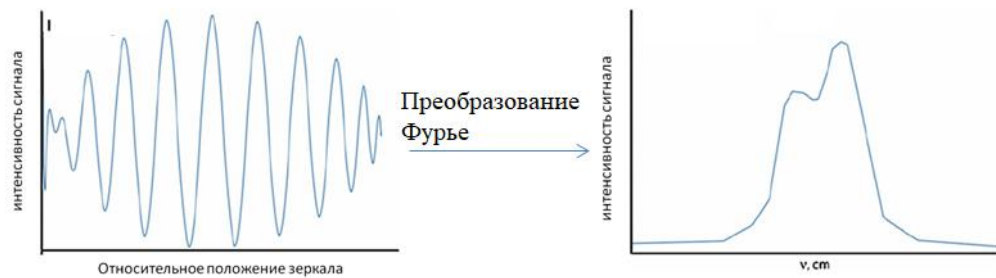


Рисунок 14 – Сравнение сигналов, получаемых перед преобразованием Фурье и после.

На левом рисунке представлен весь интерференционный свет, который проходит через интерферометр и отображает спектральную информацию путем кодирования. Очевидно, что трудно определить интенсивность сигнала глядя на левую картинку. Поэтому преобразование Фурье необходимо для получения спектра [23].

Глава 3. Обработка экспериментальных данных

3.1 Метод интерпретации экспериментальных колебательно-вращательных спектров

В современных научных спектроскопических исследованиях для определения энергетических колебательно-вращательных уровней молекул часто используется метод комбинаторных разностей [24]. Суть этого метода состоит в том, что рассматриваются вращательные энергетические уровни основного колебательного состояния и возбужденного состояния. Всегда есть переходы из вращательного энергетического уровня основного колебательного состояния на вращательный энергетический уровень возбужденного колебательного состояния. Если точно известна вращательная структура основного колебательного состояния и положение линии в спектре, то легко определить значение энергии вращательного уровня возбужденного колебательного состояния.

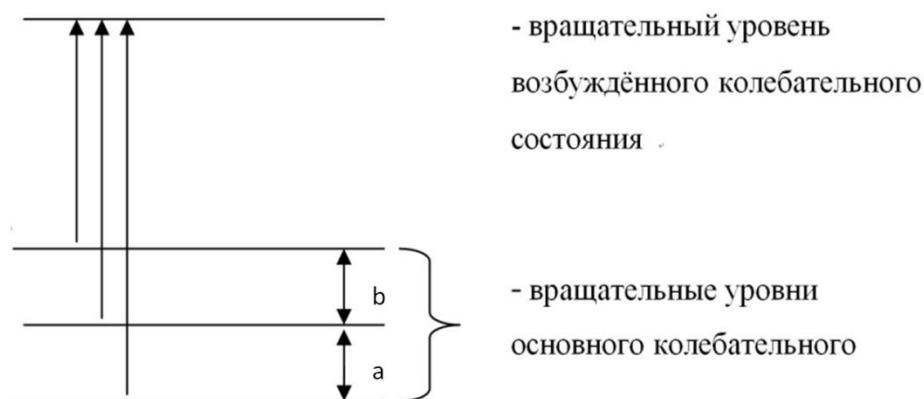


Рисунок 15 – Переход с вращательных уровней основного колебательного состояния на один вращательный уровень возбужденного состояния.

Обычно при решении спектроскопических задач известна вращательная структура основного колебательного состояния и, как следствие, для него известна разность энергий между вращательными уровнями с высокой точностью, т.е. a и b (расстояния между вращательными уровнями энергии

основного состояния) являются известными параметрами. Таким образом, на этой основе, можно сделать так называемую "расчёску", где расстояния между двумя прямыми a и b (см. рисунок 15) соответствуют расстояниям между вращательными энергетическими уровнями основного колебательного состояния a и b (см. рисунок 16).

Затем такая "расчёска" передвигается по экспериментальному спектру до тех пор, пока не найдутся положения линий, которые совпадут с зубчиками "расчёски". Поскольку в данной процедуре обрабатывается большой массив данных, для ее выполнения логично использовать специальную компьютерную программу.

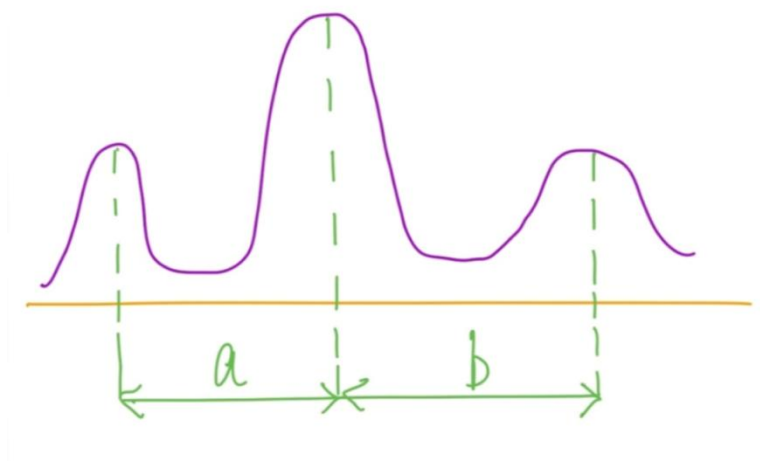


Рисунок 16 – Метод комбинационных разностей.

По мере дальнейшего изучения спектра можно обнаружить, что можно найти множество значений положений линий, соответствующих с различной точностью заданным положениям на "расчестке". В этом случае нужно выбрать наиболее вероятное значение положений линии из найденных вариантов, т.е. значение с лучшей точностью. Данный процесс называется процессом идентификации спектральных линий. Это сложный и утомительный процесс, но, как говорилось ранее, все это делается с помощью вычислительной программы. Маловероятно, что найдет значение, которое точно совпадает с

заданными условиями поиска, поэтому в программе задается точность поиска (например, $0,01 \text{ см}^{-1}$). Это означает, что результат принимается как истинный, если только центр линии отклоняется от зубов «расчески» на величину меньшую или равную указанной точности, в противном случае вариант отвергается (см. рисунок 17).

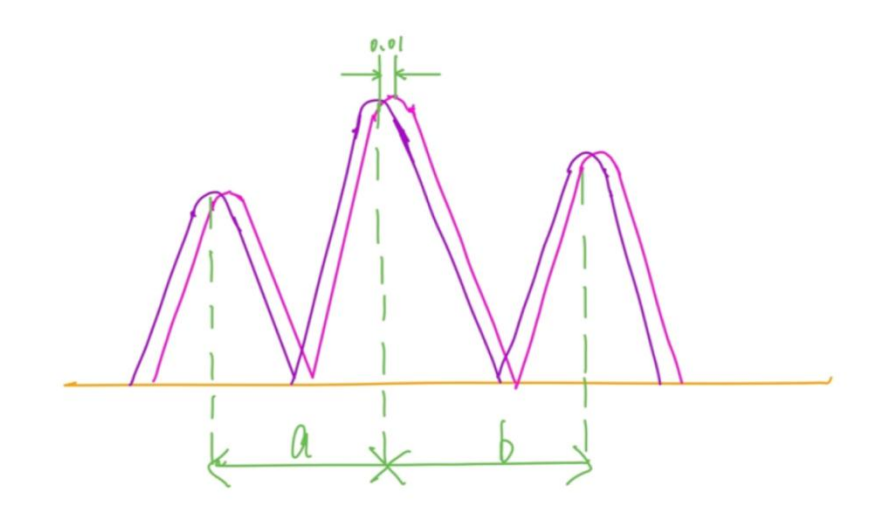


Рисунок 17 – Задание точность поиска линий по "расческе".

3.2 Условия экспериментальной регистрации спектров

Спектр молекулы C_2H_4 полосы ν_{12} (рисунок 18) был зарегистрирован в диапазоне волновых чисел от 1100 до 1550 см^{-1} с помощью Фурье-спектрометра инфракрасного излучения Bruker IFS 120 HR (FTIR) в сочетании с многоходовой ячейкой Уайта из нержавеющей стали длиной 1 м . В эксперименте использовался полупроводниковый детектор ртутий-кадмий-теллурид (МСТ). Образец C_2H_4 был приобретен в Cambridge Isotope Laboratories. Химическая и изотопная чистота образца более 99% . Номинальное инструментальное разрешение, определяемое как $1/d_{\text{MOPD}}$ (d_{MOPD} - максимальная разность оптических путей), составляло $0,0025 \text{ см}^{-1}$. Эксперимент проводился с длиной оптического пути 48 м при давлении образца $13,33 \text{ Па}$, количество

сканов – 1794. Уширение линий, возникающее из-за давления, может быть оценено в величину $0,0001 \text{ см}^{-1}$ при давлении 13,33 Па. Точность абсолютного волнового числа несмешанных, ненасыщенных и не слишком слабых линий может быть оценена как около 10^{-4} см^{-1} .

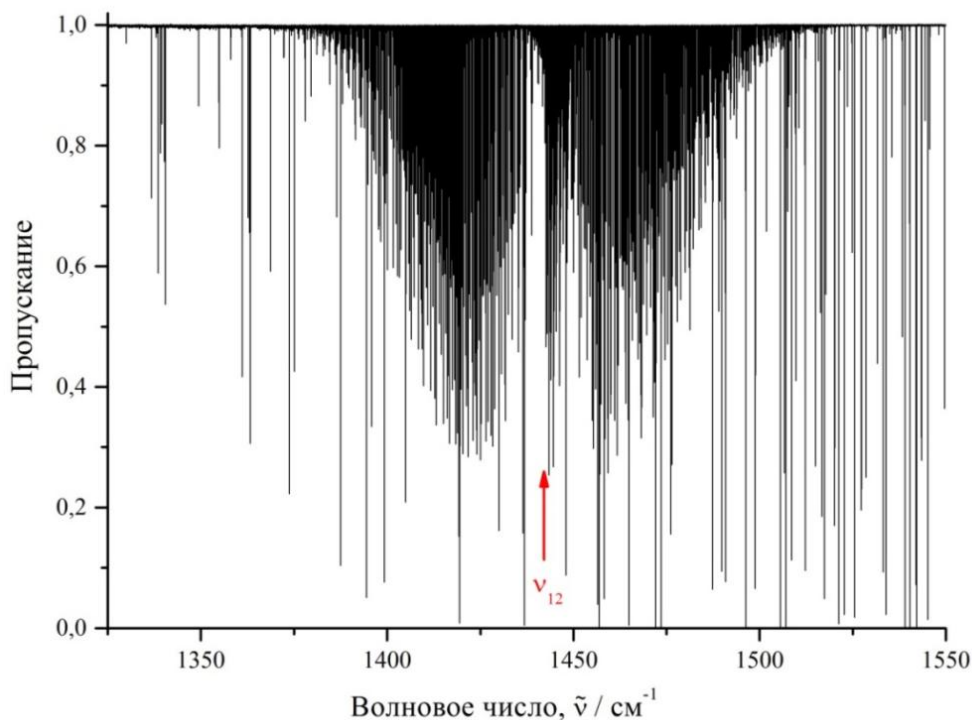


Рисунок 18 – Спектр молекулы C_2H_4 в диапазоне $1300\text{--}1550 \text{ см}^{-1}$.

Спектр молекулы C_2H_4 полосы $\nu_7+\nu_8$ (рисунок 18) был зарегистрирован в диапазоне волновых чисел от 1780 см^{-1} до 2000 см^{-1} на Фурье-спектрометре инфракрасного излучения Bruker IFS 125 HR (FTIR) в Брауншвейге, используемый образец этилена был изготовлен в компании Linde AG с чистотой 99,99%. Спектр регистрировался при давлении 200 Па с длиной оптического пути поглощения 8 м и числом сканов 1500. При этом номинальное инструментальное разрешение (определяемое как $1/d_{\text{MOPD}}$) составило $0,0020 \text{ см}^{-1}$. Экспериментальные условия регистрации для исследуемых колебательно-вращательных полос молекулы этилена

представлены в таблице 2. Точность абсолютного волнового числа, как и в предыдущем эксперименте, составляет 10^{-4} см^{-1} .

Таблица 2 – Экспериментальные условия

Полоса	Давление/ Па	Диапазон / см^{-1}	Длина пути / м	Количество сканов	Температура / К
ν_{12}	13,33	1300-1550	48	1794	298
$\nu_7+\nu_8$	200	1780-2000	8	1500	298

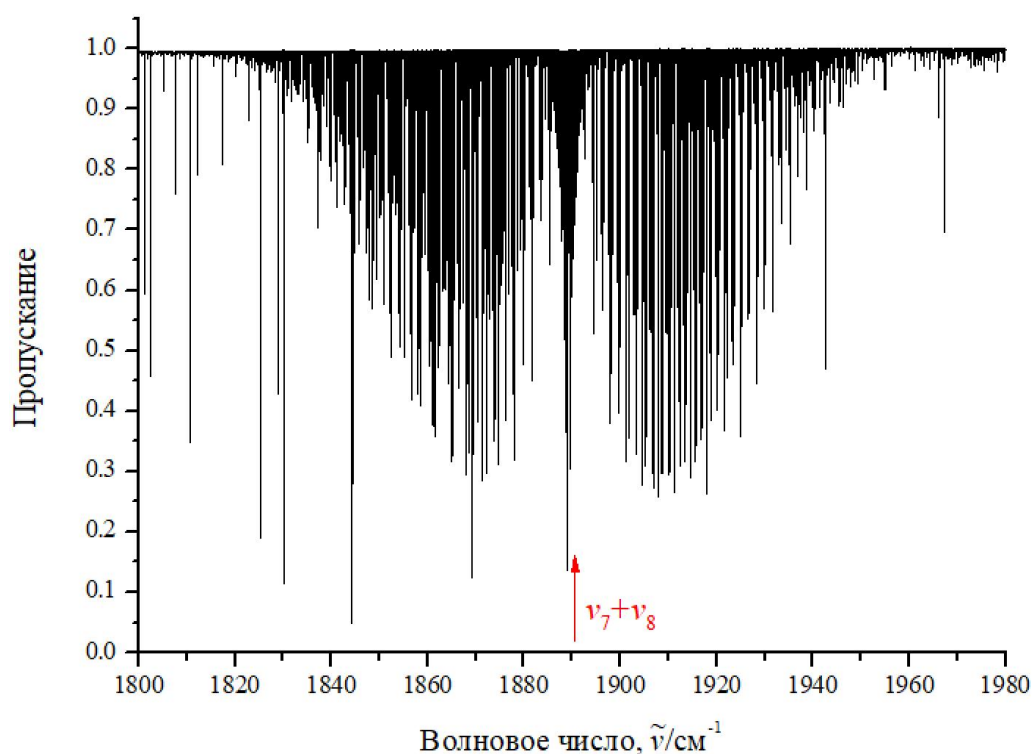


Рисунок 19 – Спектр молекулы C_2H_4 в диапазоне 1800-1980 см^{-1} .

3.3 Результаты анализа тонкой структуры колебательно-вращательных спектров

Анализ экспериментально зарегистрированных спектров молекулы этилена в районе полос $\nu_7+\nu_8$ и ν_{12} выполнялся на основе описанного выше метода комбинационных разностей. Для расчета энергетической структуры основного

колебательного состояния использовались спектроскопические параметры из работы [12].

Сначала анализ спектров проводился в районе полосы ν_{12} , по той простой причине, что она лежит в области меньших частот. Следует отметить, что ранее данная полоса уже исследовалась в ряде работ [6-7]. В результате настоящего анализа полосы ν_{12} всего было проанализировано около 820 переходов с максимальным значением квантовых чисел $J = 25$ и максимальным значением $K_a = 12$. Часть проинтерпретированных переходов серии $K_a = 7$, приведена в таблице 3.

Таблица 3 – Часть проинтерпретированных переходов полосы ν_{12}

J	K_a	K_c	J'	K_a'	K_c'	ν (см ⁻¹)	E (см ⁻¹)
7	7	1	7	7	0	1445,3550	1689,8907
			8	7	2	1430,7158	
8	7	2	7	7	1	1460,0361	1704,5718
			8	7	1	1445,3969	
			9	7	3	1428,9257	
9	7	3	8	7	2	1461,9156	1721,0905
			9	7	2	1445,4443	
			10	7	4	1427,1403	
10	7	4	9	7	3	1463,8014	1739,4475
			10	7	3	1445,4973	
			11	7	5	1425,3595	
11	7	5	10	7	4	1465,6937	1759,6439
			11	7	4	1445,5558	
			12	7	6	1423,5841	
12	7	6	11	7	5	1467,5926	1781,6806

			12	7	5	1445,6202	
			13	7	7	1421,8121	
13	7	7	12	7	6	1469,4983	1805,5587
			13	7	6	1445,6902	
			14	7	8	1420,0454	
14	7	8	13	7	7	1471,4816	1831,2795
			14	7	7	1445,7664	
			15	7	9	1418,2835	
15	7	9	14	7	8	1473,3310	1858,8442
			15	7	8	1445,8483	
			16	7	10	1416,5263	
16	7	10	15	7	9	1475,2583	1888,2543
			16	7	9	1445,9364	
			17	7	11	1414,7739	
17	7	11	16	7	10	1477,1934	1919,5113
			17	7	10	1446,0307	
			18	7	12	1413,0262	
18	7	12	17	7	11	1479,1363	1952,6168
			18	7	11	1446,1317	
			19	7	13	1411,2835	
19	7	13	18	7	12	1481,0874	1987,5727
			19	7	12	1446,2395	
			20	7	14	1409,5457	
20	7	14	19	7	13	1482,9334	2024,2667
			20	7	13	1446,2395	
			21	7	15	1407,7011	

Анализ колебательно-вращательного спектра полосы $\nu_7+\nu_8$ молекулы этилена частично проводился другими учеными в работах [8] и [9]. Важно, что полученные в этих работах данные были получены до максимальных значений квантовых чисел $J = 31$, $K_a = 9$ и $J = 35$, $K_a = 13$, соответственно. В результате проделанной мной работы было проанализировано более 1000 переходов, принадлежащих полосе $\nu_7+\nu_8$ с максимальными значениями квантовых чисел $J = 44$ и максимальным значением $K_a = 14$. Часть проанализированных переходов серии $K_a = 7$ полосы $\nu_7+\nu_8$ приведены, как пример, в таблице 4. Эти переходы относятся к 360 колебательно-вращательным энергиям верхнего колебательного состояния ($\nu_7 = \nu_8 = 1$). Статистическая информация по результатам анализа исследуемой полосы представлена в таблице 5.

Таблица 4 – Часть проанализированных переходов полосы $\nu_7+\nu_8$

J	K_a	K_c	J'	K_a'	K_c'	ν (см ⁻¹)	E (см ⁻¹)
7	7	0	7	7	1	1889,0123	2133,5498
			8	7	1	1874,3754	
8	7	1	7	7	0	1903,6026	2148,1372
			8	7	2	1888,9623	
			9	7	2	1872,4935	
9	7	2	8	7	1	1905,2956	2164,4713
			9	7	3	1888,8235	
			10	7	3	1870,5223	
10	7	3	9	7	2	1906,9724	2182,6253
			10	7	4	1888,6778	
			11	7	4	1868,5307	
11	7	4	10	7	3	1908,6565	2202,6002
			11	7	5	1888,5135	

			12	7	5	1866,5424	
12	7	5	11	7	4	1910,3103	2224,3990
			12	7	6	1888,3385	
			13	7	6	1888,3385	
13	7	6	12	7	5	1911,9614	2248,0219
			13	7	7	1888,1534	
			14	7	7	1862,5070	
14	7	7	13	7	6	1913,6024	2273,4708
			14	7	8	1887,9572	
			15	7	8	1860,4748	
15	7	8	14	7	7	1915,2340	2300,7472
			15	7	9	1887,7512	
			16	7	9	1858,4289	
16	7	9	15	7	8	1916, 8568	2329,8528
			16	7	10	1887,5348	
			17	7	10	1856,3723	
17	7	10	16	7	9	1918,4716	2360,7892
			17	7	11	1887,3085	
			18	7	11	1854,3040	
18	7	11	17	7	10	1920,0777	2393,5586
			18	7	12	1887,0735	
			19	7	12	1852,2249	
19	7	12	18	7	11	1921,6760	2428,1611
			19	7	13	1886,8278	
			20	7	13	1850,1354	

Таблица5 – Статистическая информация исследований полосы $\nu_7 + \nu_8$

Полоса	Центр полосы / см^{-1}	$J_{\text{макс}}$	$K_a_{\text{макс}}$	Число переходов
$\nu_7 + \nu_8$	1888,9782	44	14	1044
$\nu_7 + \nu_8, [8]$	1888,978223(3)	31	9	305
$\nu_7 + \nu_8, [9]$	1888,9783(20)	35	13	569

Чтобы подтвердить правильность спектрального анализа полос ν_{12} и $\nu_7 + \nu_8$, в экспериментальных спектрах мы отметили переходы серии $K_a = 7$. На рисунках отчетливо видно, что интенсивность переходов изменяется с изменением квантового числа J , сначала увеличивается, а затем убывает. Рисунки с 20 по 22 показывают переходы серии $K_a = 7$ полосы $\nu_7 + \nu_8$.

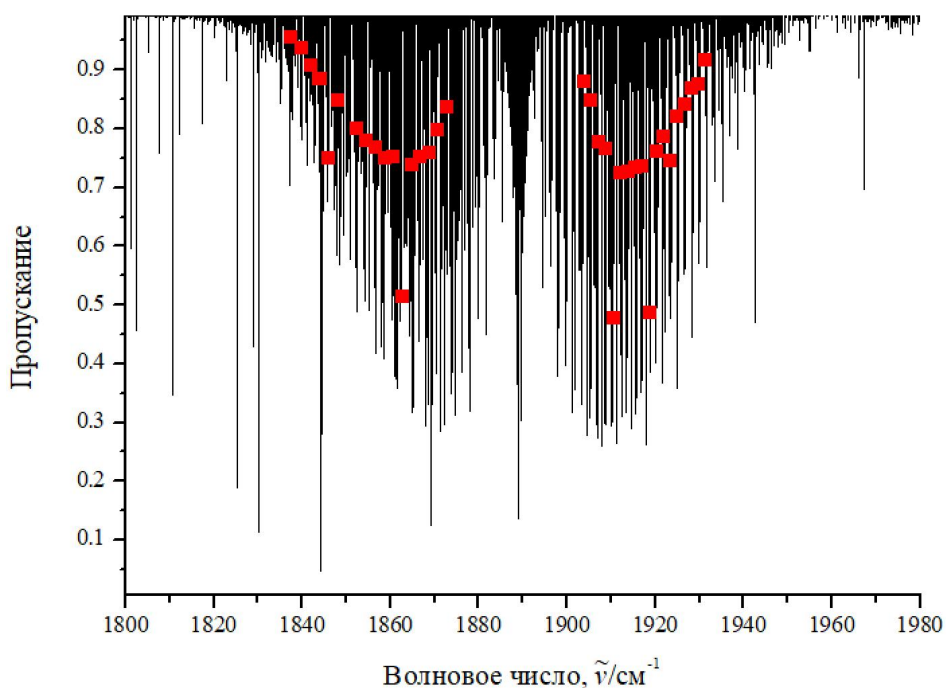


Рисунок 20 – Переходы серии $K_a = 7$ полосы $\nu_7 + \nu_8$ молекулы C_2H_4 .

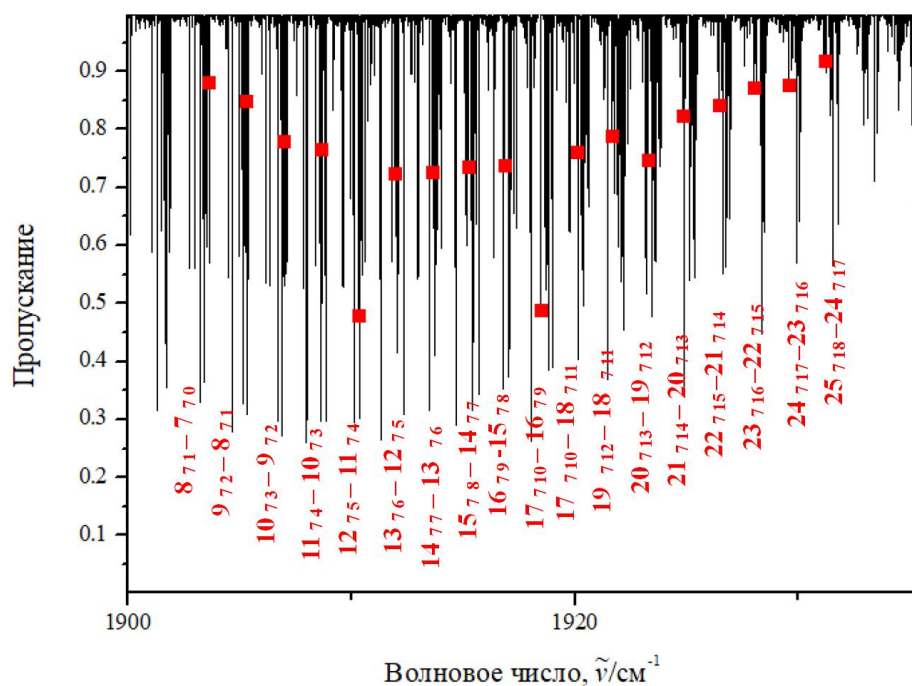


Рисунок 21 – Переходы серии $K_a = 7$ в районе R -ветви полосы $\nu_7+\nu_8$.

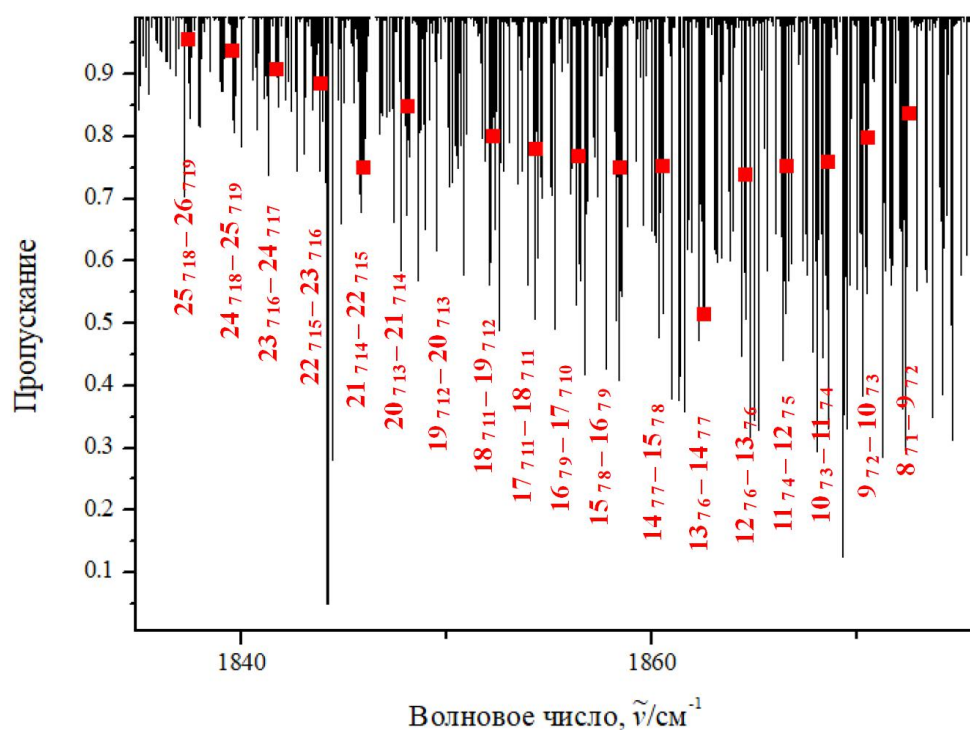


Рисунок 22 – Переходы серии $K_a=7$ в районе P -ветви полосы $\nu_7+\nu_8$.

Рисунки с 23 по 25 показывают переходы серии $K_a = 7$ полосы ν_{12} .

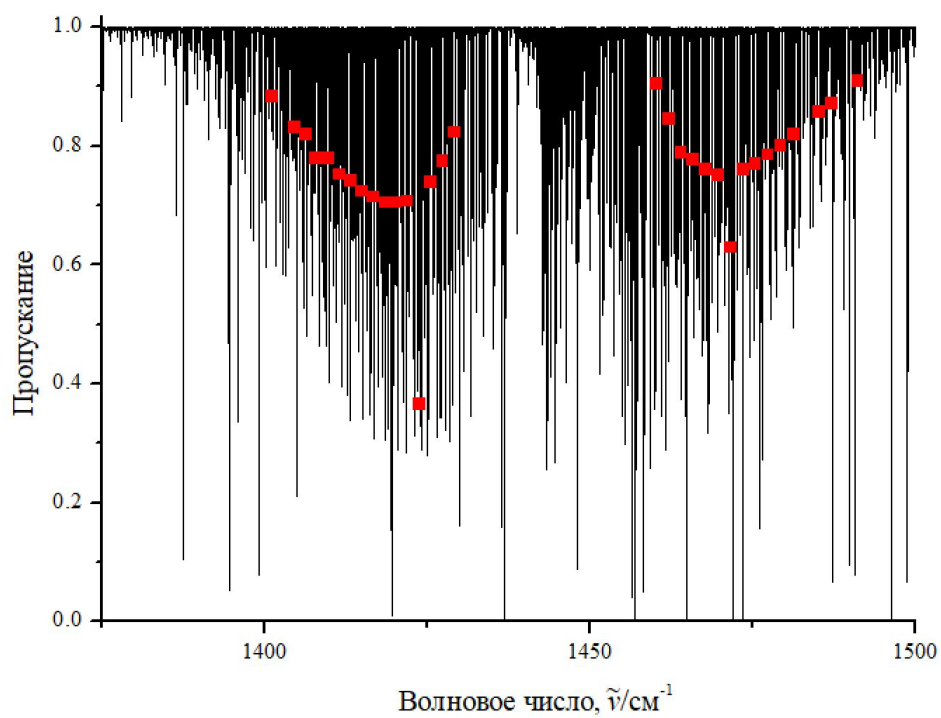


Рисунок 23 – Переходы серии $K_a=7$ полосы ν_{12} молекулы C_2H_4 .

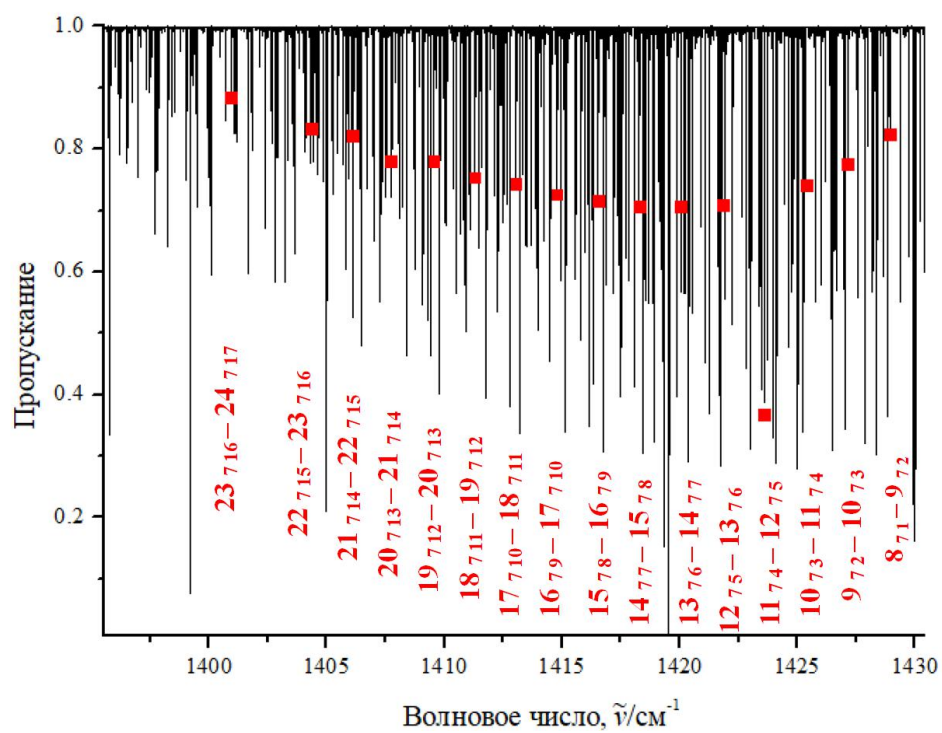


Рисунок 24 – Переходы серии $K_a=7$ в районе P -ветви полосы ν_{12} .

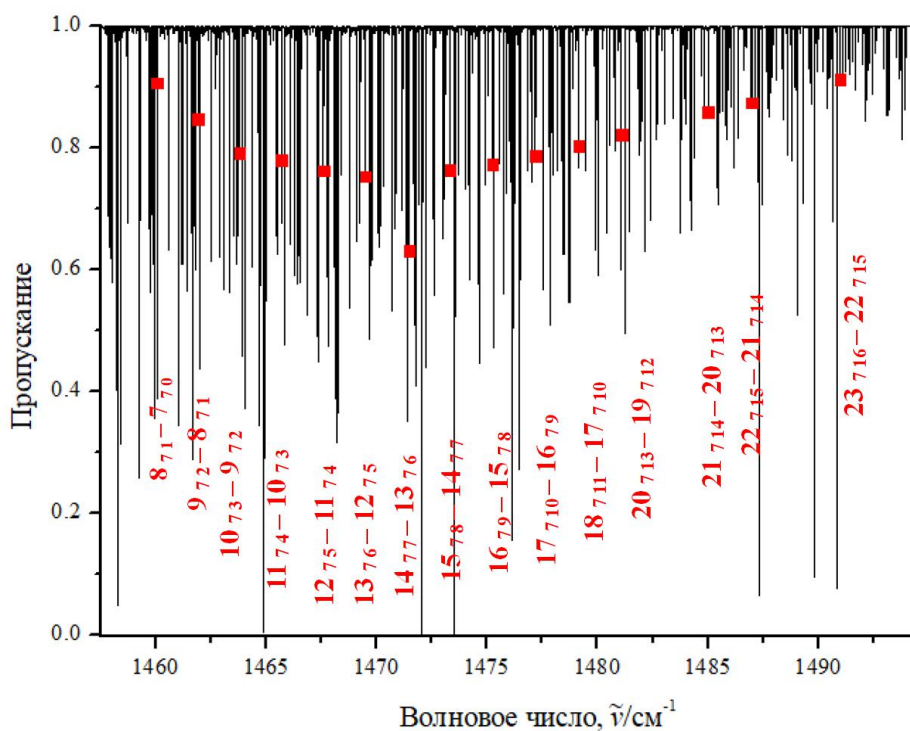


Рисунок 25 – Переходы серии $K_a=7$ в районе R -ветви полосы ν_{12} .

3.4 Решение обратной спектроскопической задачи

Решение обратной спектроскопической задачи для исследуемых в данной работе двух колебательных состояний выполнялось на основе модели эффективного колебательно-вращательного гамильтониана. Данная модель колебательно-вращательного гамильтониана описывает резонансные взаимодействия (резонансы типа Ферми и Кариолиса) и имеет следующий вид [25]:

$$\begin{aligned}
H^{v,\tilde{v}} = & E^v + \left[A^v - \frac{1}{2}(B^v + C^v) \right] J_z^2 + \frac{1}{2}(B^v + C^v) J^2 + \\
& + \frac{1}{2}(B^v - C^v) J_{xy}^2 - \Delta_K^v J_z^4 - \Delta_{JK}^v J_z^4 J^2 - \Delta_J^v J^4 - \\
& - \delta_K^v [J_z^2, J_{xy}^2] - 2\delta_J^v J^2 J_{xy}^2 + H_K^v J_z^6 + H_{KJ}^v J_z^4 J^2 + \\
& + H_{JK}^v J_z^2 J^4 + H_J^v J^6 + [J_{xy}^2, h_K^v J_z^4 + h_{JK}^v J^2 J_z^2 + h_J^v J^4] + \dots
\end{aligned}$$

В данном выражении $J_{xy}^2 = J_x^2 - J_y^2$ и $[A, B]_+ = AB + BA$, J_α ($\alpha = x, y, z$) – компоненты оператора углового момента, заданного в молекулярно-фиксированной системе координат; E – колебательная энергия состояния, A, B, C – вращательные постоянные, $\Delta_J, \Delta_{JK}, \Delta_K, \delta_K, \delta_{JK}$ – параметры центробежного искажения четвертой степени, $H_K, H_{KJ}, H_{JK}, H_J, h_K, h_{JK}, h_J$ – параметры центробежного искажения шестой степени.

Для того, чтобы приступить к решению обратной спектроскопической задачи нужно получить из анализа экспериментальных колебательно-вращательных спектров молекулы C_2H_4 значения энергий для верхних уровней, на основе которых и проводится варьирование параметров эффективного гамильтониана. Как уже говорилось ранее, в результате анализа идентифицировано порядка 1000 колебательно-вращательных переходов для полосы ν_{12} и более 1000 колебательно-вращательных переходов для полосы $\nu_7 + \nu_8$ в экспериментальном спектре при максимальных значениях квантовых чисел $J^{\max}/K_a^{\max} = 25/12$ и $J^{\max}/K_a^{\max} = 44/14$. Эти преходы относятся к 280 и 360 колебательно-вращательным энергиям верхних колебательных состояний ($\nu_{12}=1$) и ($\nu_7 = \nu_8 = 1$), соответственно. Как пример, небольшая часть полученных энергий представлена в последних столбцах таблицы 3 и таблицы 4. Все полученные значения энергий использовались в решении обратной спектроскопической задачи для того чтобы определить параметры

эффективного колебательно-вращательного гамильтониана исследуемых колебательных состояний ($\nu_{12} = 1$) и ($\nu_7 = \nu_8 = 1$).

Значения полученных параметров вместе со своими 1σ доверительными интервалами приведены в таблице 6. Параметры, представленные без 1σ доверительных интервалов, в процессе решения обратной спектроскопической задачи фиксировались значениями соответствующих параметров основного состояния, поскольку их добавление в процедуру варьирования не улучшало результат. Кроме этого в таблице 6 представлены параметры основного состояния, которые мы использовали в настоящей работе. Видно, что полученные нами параметры верхних колебательных состояний ($\nu_{12} = 1$) и ($\nu_7 = \nu_8 = 1$) не сильно отличаются от параметров основного состояния, что соответствует общей колебательно-вращательной теории [1], [26]. Этот факт можно рассматривать как подтверждение правильности полученных нами данных.

Полученные наборы параметров описывают исходные экспериментальные данные со среднеквадратичным отклонением $d_{\text{rms}} = 1.3 \times 10^{-4} \text{ см}^{-1}$ для полосы ν_{12} и $d_{\text{rms}} = 3.4 \times 10^{-3} \text{ см}^{-1}$ для полосы $\nu_7 + \nu_8$.

Таблица 6 – Спектроскопические параметры колебательных состояний ($\nu_{12}=1$) и ($\nu_7 = \nu_8 = 1$) молекулы C_2H_4

Параметры	Основное состояние, [17]	($\nu_{12} = 1$)	($\nu_7 = \nu_8 = 1$)
E		1442,44240(22)	1888,97818(27)
A	4,8646199782	4,852066(38)	4,874246(31)
B	1,00105650692	1,003926(81)	0,989682(25)
C	0,8280459560	0,826337(16)	0,831391(62)
$\Delta_K \times 10^4$	0,86470154	0,86664(13)	0,85533(44)

$\Delta_{JK} \times 10^4$	0,102336193	0,11163(24)	0.10236(28)
$\Delta_J \times 10^4$	0,01470108	0,01474(43)	0,01412(63)
$\delta_K \times 10^4$	0,10153494	0,10484(51)	0.10153(49)
$\delta_J \times 10^4$	0,002817902	0,00289 (37)	0,00291(73)
$H_K \times 10^8$	0,621279	0,621279	0,621279
$H_{KJ} \times 10^8$	-0,0414971	-0,0414971	-0,0414971
$H_{JK} \times 10^8$	0,018692	0,018692	0,018692
$H_J \times 10^8$	0,00023587	0,00023587	0,00023587

Заключение

В ходе данной работы была исследована литература по теме "молекулярная спектроскопия", в том числе изучена специфика структуры молекулярных спектров: разделение на электронную, колебательную и вращательную части. В работе исследуются: свойства симметрии молекулы этилена; решение уравнения Шредингера и принцип приближения Борна-Оппенгеймера. Затем были изучены основы Фурье-спектроскопии и принцип работы инфракрасного Фурье-спектрометра.

Чтобы исследовать тонкую энергетическую структуру экспериментально зарегистрированных спектров полос ν_{12} и $\nu_7+\nu_8$ молекулы C_2H_4 , был изучен метод комбинационных разностей. В результате проделанного анализа спектров получена спектроскопическая информация для полосы ν_{12} , проинтерпретировано порядка 820 переходов (см. Приложение, таблица 1.) с максимальным значением квантового числа $J = 25$ и максимальным значением $K_a = 12$, и для полосы $\nu_7+\nu_8$, порядка 1044 переходов (см. Приложение, таблица 2.) с максимальным значением $J = 44$ и максимальным значением $K_a = 14$.

Для того, чтобы приступить к решению обратной спектроскопической задачи необходимо определить значения вращательных энергий верхних колебательных состояний на основе анализа экспериментального спектра

молекулы C_2H_4 . Найденные значения энергий были включены в процедуру варьирования параметров эффективного гамильтониана. Из решения обратной задачи были определены наборы спектроскопических параметров эффективного колебательно-вращательного гамильтониана исследуемых колебательных состояний ($\nu_{12}=1$) и ($\nu_7 = \nu_8 = 1$). Полученные наборы параметров описывают исходные экспериментальные данные со среднеквадратичным отклонением $d_{rms} = 1.3 \times 10^{-4} \text{ см}^{-1}$ для полосы ν_{12} и $d_{rms} = 3.4 \times 10^{-3} \text{ см}^{-1}$ для полосы $\nu_7 + \nu_8$.

Список литературы

1. Банкер Ф. Симметрия молекул и молекулярная спектроскопия // Москва: Издательство Мир, 1981. – 451 с.
2. Mantsch H.H. Spectroscopy in the 21st century: The future of molecular spectroscopy // Journal of Molecular Structure. – 2019. – V. 1180. – P. 543-546.
3. Mantsch H.H. The evolution of biomedical vibrational spectroscopy: personal perspective // Biomed. Spectrosc. Imaging. – 2015. – V. 4. – P. 315-329.
4. Герцберг Г. Колебательные и вращательные спектры многоатомных молекул // Под ред. М. А. Ельяшевича. – М.: ИЛ, 1965. – 648 с.
5. Jos O. The Ethylene Hot Band Spectrum near 3000 cm^{-1} // Journal of Molecular Spectroscopy. – 1996. – V. 99. – Is. 5. – P. 236-248.
6. Tan T.L., Lau S.Y., Ong P.P., Goh K.L., Teo H.H. High-resolution Fourier transform infrared spectrum of the ν_{12} fundamental band of ethylene (C_2H_4) // Journal of molecular spectroscopy – 2000. – V. 203 – P. 310-313.
7. Rotger M., Boudon V., Vander Auwera J. Line positions and intensities in the ν_{12} band of ethylene near 1450 cm^{-1} : An experimental and theoretical study // Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer – 2008. – V. 109 – P. 952-962.
8. Hurtmans D., Rizopoulos A., Herman M., Hassan L.M.S., Perrin A. Vibration-rotation analysis of the jet-cooled ν_{12} , $\nu_7+\nu_8$ and $\nu_6+\nu_{10}$ absorption bands of $^{12}\text{C}_2\text{H}_4$ // Molecular Physics. – 2001. – V. 99. – Is. 5. – P. 455-461.
9. Lafferty W.J., Flaud J.-M., Tchana F.K. The high-resolution infrared spectrum of ethylene in the 1800–2350 cm^{-1} spectral region // Molecular Physics. – 2011. – V. 109. – Is. 21. – P. 2501-2510.
10. Ulenikov O.N., Onopenko G.A., Bekhtereva E.S., Petrova T.M., Solodov A.M., Solodov, A.A. High resolution study of the $\nu_5 + \nu_{12}$ band of C_2H_4 // Molecular Physics. – 2010. – V. 108. – Is. 5. – P. 637-647.

11. Ulenikov O.N., Gromova O.V., Bekhtereva E.S., Onopenko G.A., Aslapovskaya Y., Gericke K.H., Bauerecker S., Horneman V.-M. High resolution FTIR study of the $\nu_7+\nu_{10}-\nu_{10}$ and $\nu_{10}+\nu_{12}-\nu_{10}$ "hot" bands of C_2H_4 // Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer. – 2014. – V. 149. –P. 318-333.
12. Ulenikov O. N., Gromova, O.V., Aslapovskaya, Y.S., Horneman, V.M. High resolution spectroscopic study of C_2H_4 : Re-analysis of the ground state and ν_4 , ν_7 , ν_{10} , and ν_{12} vibrational bands // Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer – 2013. – V. 118 – P. 14-25.
13. Герцберг Г. Колебательные и вращательные спектры многоатомных молекул // М.: Издательство иностранной литературы, 1949. – P. 647.
14. Varshalovitch D.A., Moskalev A.N., Khersonsky V.K. Quantum theory of angular momentum. // Leningrad: Nauka, 1975. – P. 439.
15. Макушкин Ю.С. Симметрия и ее применение к задачам колебательно-вращательной спектроскопии молекул. Часть 1. // Улеников О. Н., Чеглогов А. Е. – Томск: Издательство ТГУ, 1990. – P. 224
16. Smith W.L, Mills I.M. Coriolis perturbation in the infrared spectrum of ethylene // J. Chem. Phys. – 1964. – Vol. 40. – P. 2095–2109.
17. Давыдов А.С. Квантовая механика // Издательство Наука, 1973. – P. 703.
18. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Квантовая механика. Нерелятивистская теория. // М.: Наука, 1969. – 767 с.
19. Бехтерева Е.С. Спектроскопия высокого разрешения и внутренняя динамика молекул // физ.-мат. наук, 2008. – P. 310.
20. Марков М.Н. Приёмники инфракрасного излучения // Издательство Наука, М., 1968.
21. Белл Р.Дж. Введение в Фурье – спектроскопию // Издательство Мир, М., 1975.

22. Смит А. Прикладная ИК спектроскопия //Издательство Мир, М., 1982.
23. Морозов А.Н., Светличный С.И. Основы фурье спектрометриии. // Ин-т энерг. пробл. хим. физики РАН. – М.: Наука, 2006. – 277 с.
24. Nielsen H.H. The vibration-rotation energies of molecules // Rev. Mod. Phys. – 1951. – Vol. 23. – P. 90–136.
25. Watson J.K.G. Determination of centrifugal distortion coefficients of asymmetric-top molecules // J. Chem. Phys. – 1967. – Vol. 46. – P. 1935–1949.
26. Papousek D., Aliev M.R. Molecular vibrational rotational spectra. // Prague: Academia, 1982. – 324 с.

Приложение

Таблица 1 – Экспериментальные колебательно-вращательные переходы
полосы $\nu_7+\nu_8$ молекулы C_2H_4

Квантовые числа верхнего состояния $J K_a K_c$	Квантовые числа нижнего состояния $J' K_a' K_c'$	Волновое число, cm^{-1}	Пропуск, %
1 0 1	0 0 0	1890.7979	79,2
2 0 2	1 0 1	1892.6036	81,7
3 0 3	2 0 2	1894.3916	52,4
4 0 4	3 0 3	1896.1585	69,2
5 0 5	4 0 4	1897.9030	37,8
6 0 6	5 0 5	1899.6249	60,4
7 0 7	6 0 6	1901.3259	30,3
8 0 8	7 0 7	1903.0096	55,2
9 0 9	8 0 8	1904.6807	26,6
10 0 10	9 0 9	1906.3447	53,1
11 0 11	10 0 10	1908.0068	25,5
12 0 12	11 0 11	1909.6708	53,1
13 0 13	12 0 12	1911.3391	26,7
14 0 14	13 0 13	1913.0134	54,5
15 0 15	14 0 14	1914.6937	28,9
16 0 16	15 0 15	1916.3805	57,9
17 0 17	16 0 16	1918.0737	33,3
18 0 18	17 0 17	1919.7716	62,5
19 0 19	18 0 18	1921.4745	36,3
20 0 20	19 0 19	1923.1815	51,8
21 0 21	20 0 20	1924.8966	34,8
22 0 22	21 0 21	1926.6147	55,2
23 0 23	22 0 22	1928.3374	45,1
24 0 24	23 0 23	1930.0643	73,5
25 0 25	24 0 24	1931.7928	63,6
26 0 26	25 0 25	1933.5255	79,3
27 0 27	26 0 26	1935.2656	67,2
28 0 28	27 0 27	1937.0073	82,8
29 0 29	28 0 28	1938.7568	76,5

30	0	30	29	0	29	1940.5079	90
31	0	31	30	0	30	1942.2689	85.7
32	0	32	31	0	31	1944.0236	95
33	0	33	32	0	32	1945.7956	95.9
34	0	34	33	0	33	1947.4584	96.8
35	0	35	34	0	34	1949.2762	94.4
36	0	36	35	0	35	1951.0573	97.4
37	0	37	36	0	36	1952.8423	94.8
38	0	38	37	0	37	1954.6234	97.9
39	0	39	38	0	38	1956.4094	97.3
40	0	40	39	0	39	1958.1973	98.8
3	2	1	2	2	0	1894.4693	71.1
4	2	2	3	2	1	1896.2817	77.2
5	2	3	4	2	2	1898.0951	46.2
6	2	4	5	2	3	1899.9157	50.1
7	2	5	6	2	4	1901.7233	35.6
8	2	6	7	2	5	1903.5326	59.7
9	2	7	8	2	6	1905.3329	31.0
10	2	8	9	2	7	1907.1191	57.0
11	2	9	10	2	8	1908.8865	29.0
12	2	10	11	2	9	1910.6317	56.4
13	2	11	12	2	10	1912.3528	30.5
14	2	12	13	2	11	1914.0494	59.0
15	2	13	14	2	12	1915.7219	33.8
16	2	14	15	2	13	1917.3718	62.6
17	2	15	16	2	14	1919.0001	38.8
18	2	16	17	2	15	1920.6101	66.7
19	2	17	18	2	16	1922.2034	45.4
20	2	18	19	2	17	1923.7206	78.1
3	2	2	2	2	1	1894.4513	85.8
4	2	3	3	2	2	1896.2392	55.9
5	2	4	4	2	3	1898.0144	70.7
6	2	5	5	2	4	1899.7772	39.7
7	2	6	6	2	5	1901.5285	62.4
8	2	7	7	2	6	1903.2675	32.5
9	2	8	8	2	7	1904.9944	58
10	2	9	9	2	8	1906.7125	29.5

11	2	10	10	2	9	1908.4152	56.5
12	2	11	11	2	10	1910.1176	29.6
13	2	12	12	2	11	1911.7960	57
14	2	13	13	2	12	1913.4749	31.3
15	2	14	14	2	13	1915.1458	60
16	2	15	15	2	14	1916.8118	35.1
17	2	16	16	2	15	1918.4729	49.6
18	2	17	17	2	16	1920.1310	40.3
19	2	18	18	2	17	1921.7887	68.8
20	2	19	19	2	18	1923.4495	47.6
21	2	20	20	2	19	1925.1515	54
22	2	21	21	2	20	1926.7558	76
23	2	22	22	2	21	1928.4146	79.9
24	2	23	23	2	22	1930.0757	80.1
25	2	24	24	2	23	1931.7523	99.5
2	1	1	1	1	0	1892.7716	86.5
3	1	2	2	1	1	1894.6358	78
4	1	3	3	1	2	1896.4795	71.3
5	1	4	4	1	3	1898.3037	66
6	1	5	5	1	4	1900.1066	63
7	1	6	6	1	5	1901.8889	58.8
8	1	7	7	1	6	1903.6480	56.8
9	1	8	8	1	7	1905.3853	54.1
10	1	9	9	1	8	1907.1012	54.5
11	1	10	10	1	9	1908.7963	54.3
12	1	11	11	1	10	1910.4714	55
13	1	12	12	1	11	1912.1274	54.5
14	1	13	13	1	12	1913.7685	58.5
15	1	14	14	1	13	1915.4246	67.9
16	1	15	15	1	14	1917.0173	60.7
17	1	16	16	1	15	1918.6346	63.2
18	1	17	17	1	16	1920.2517	65.5
19	1	18	18	1	17	1921.8719	68.3
20	1	19	19	1	18	1923.4974	71.3
21	1	20	20	1	19	1925.1297	72.5
22	1	21	21	1	20	1926.7686	76.8
23	1	22	22	1	21	1928.4144	79.9

24	1	23	23	1	22	1930.0648	73.5
25	1	24	24	1	23	1931.7259	84.5
2	1	2	1	1	1	1892.4673	88.2
3	1	3	2	1	2	1894.1997	77.9
4	1	4	3	1	3	1895.9279	71
5	1	5	4	1	4	1897.6486	65.9
6	1	6	5	1	5	1899.3647	61.6
7	1	7	6	1	6	1901.0759	58.5
8	1	8	7	1	7	1902.7867	56
9	1	9	8	1	8	1904.4829	54.5
10	1	10	9	1	9	1907.8764	52.5
11	1	11	10	1	10	1909.5712	52.9
12	1	12	11	1	11	1911.2664	53.5
13	1	13	12	1	12	1912.9616	53.7
14	1	14	13	1	13	1914.6575	56.2
15	1	15	14	1	14	1916.3564	57.5
16	1	16	15	1	15	1918.0573	60.4
17	1	17	16	1	16	1919.7612	62.7
18	1	18	17	1	17	1921.4742	36.3
19	1	19	18	1	18	1923.1813	51.8
20	1	20	19	1	19	1924.8963	34.8
21	1	21	20	1	20	1926.6147	55.2
22	1	22	21	1	21	1928.3378	45.1
23	1	23	22	1	22	1930.0539	64
24	1	24	23	1	23	1931.7829	81.6
4	3	2	3	3	1	1896.3078	76.6
5	3	3	4	3	2	1898.0869	63.3
6	3	4	5	3	3	1899.8636	60.3
7	3	5	6	3	4	1901.6288	68
8	3	6	7	3	5	1903.3862	64.5
9	3	7	8	3	6	1905.1331	62.8
10	3	8	9	3	7	1906.8747	61
11	3	9	10	3	8	1908.5968	60.3
12	3	10	11	3	9	1910.3166	46.7
13	3	11	12	3	10	1912.0124	61.3
14	3	12	13	3	11	1913.7026	62.2
15	3	13	14	3	12	1915.3797	63.4

16	3	14	15	3	13	1917.0468	36.7
17	3	15	16	3	14	1918.6986	67
18	3	16	17	3	15	1920.3415	69.9
19	3	17	18	3	16	1921.9724	72.2
20	3	18	19	3	17	1923.5946	74.1
21	3	19	20	3	18	1925.2068	77.1
22	3	20	21	3	19	1926.8065	80
23	3	21	22	3	20	1928.4148	79.9
24	3	22	23	3	21	1930.0045	88.9
25	3	23	24	3	22	1931.5884	98.7
4	3	1	3	3	1	1896.3856	76.6
5	3	2	4	3	2	1898.0867	63.3
6	3	3	5	3	3	1899.8637	60.3
7	3	4	6	3	4	1901.6379	68.6
8	3	5	7	3	5	1903.4029	65.7
9	3	6	8	3	6	1905.1621	63
10	3	7	9	3	7	1906.9114	26.8
11	3	8	10	3	8	1908.6365	29.2
12	3	9	11	3	9	1910.3836	48.3
13	3	10	12	3	10	1912.1377	61.2
14	3	11	13	3	11	1913.8644	62.4
15	3	12	14	3	12	1915.5745	63.8
16	3	13	15	3	13	1917.2658	65.3
17	3	14	16	3	14	1918.9417	67.8
18	3	15	17	3	15	1920.5956	70
19	3	16	18	3	16	1922.2267	71.9
20	3	17	19	3	17	1923.8318	75.2
21	3	18	20	3	18	1925.4139	77.9
22	3	19	21	3	19	1926.9728	80.4
23	3	20	22	3	20	1928.5097	83.1
24	3	21	23	3	21	1930.0265	73.8
25	3	22	24	3	22	1931.5257	87.7
26	3	23	25	3	23	1933.0028	89.2
27	3	24	26	3	24	1934.4396	91.7
5	4	1	4	4	0	1898.1446	67.7
6	4	2	5	4	1	1899.9157	50.1
7	4	3	6	4	2	1901.6788	42.4

8	4	4	7	4	3	1903.4319	36.6
9	4	5	8	4	4	1905.1760	32.9
10	4	6	9	4	5	1906.9109	26.8
11	4	7	10	4	6	1908.6350	29.5
12	4	8	11	4	7	1910.3482	29.2
13	4	9	12	4	8	1912.0432	41.0
14	4	10	13	4	9	1913.8132	69.3
15	4	11	14	4	10	1915.4648	43.6
16	4	12	15	4	11	1917.1372	70.2
17	4	13	16	4	12	1918.8020	38.6
18	4	14	17	4	13	1920.4549	73.8
19	4	15	18	4	14	1922.0952	60.3
20	4	16	19	4	15	1923.7206	78.1
21	4	17	20	4	16	1925.3288	60.3
22	4	18	21	4	17	1926.9156	64.6
23	4	19	22	4	18	1928.4843	68.7
24	4	20	23	4	19	1930.0260	73.8
25	4	21	24	4	20	1931.5448	55.9
26	4	22	25	4	21	1933.0357	90.9
27	4	23	26	4	22	1934.5018	83.0
28	4	24	27	4	23	1935.9437	93.9
29	4	25	28	4	24	1937.3632	88.7
30	4	26	29	4	25	1938.8000	96.1
5	4	1	4	4	1	1898.1446	67.7
6	4	2	5	4	2	1899.9157	50.1
7	4	3	6	4	3	1901.6788	42.4
8	4	4	7	4	4	1903.4319	36.6
9	4	5	8	4	5	1905.1760	32.9
10	4	6	9	4	6	1906.9109	26.8
11	4	7	10	4	7	1908.6350	29.5
12	4	8	11	4	8	1910.3482	29.2
13	4	9	12	4	9	1912.0432	43.1
14	4	10	13	4	10	1913.8132	41.1
15	4	11	14	4	11	1915.4648	67.9
16	4	12	15	4	12	1917.1372	42.2
17	4	13	16	4	13	1918.8020	56.7
18	4	14	17	4	14	1920.4549	49.8

19	4	15	18	4	15	1922.0200	76.0
20	4	16	19	4	16	1923.6347	57.5
21	4	17	20	4	17	1925.2346	80.7
22	4	18	21	4	18	1926.8188	64.9
23	4	19	22	4	19	1928.3886	61.7
24	4	20	23	4	20	1930.0260	73.8
25	4	21	24	4	21	1931.5247	87.7
26	4	22	25	4	22	1933.0606	94.6
27	4	23	26	4	23	1934.5857	93.7
28	4	24	27	4	24	1936.1204	95.1
29	4	25	28	4	25	1937.6162	99.7
8	7	1	7	7	0	1903.6015	89.5
9	7	2	8	7	1	1905.2960	83.3
10	7	3	9	7	2	1906.9789	78.9
11	7	4	10	7	3	1908.6502	76.2
12	7	5	11	7	4	1910.3103	46.7
13	7	6	12	7	5	1911.9614	72.0
14	7	7	13	7	6	1913.6024	72.8
15	7	8	14	7	7	1915.2340	73.2
16	7	9	15	7	8	1916.8568	73.9
17	7	10	16	7	9	1918.4716	49.6
18	7	11	17	7	10	1920.0777	76.7
19	7	12	18	7	11	1921.6760	78.7
20	7	13	19	7	12	1923.2681	74.7
21	7	14	20	7	13	1924.8496	82.6
22	7	15	21	7	14	1926.4249	85.0
23	7	16	22	7	15	1927.9927	87.7
24	7	17	23	7	16	1929.5531	88.1
25	7	18	24	7	17	1931.1014	92.2
8	7	2	7	7	1	1903.6015	89.5
9	7	3	8	7	2	1905.2960	83.3
10	7	4	9	7	3	1906.9789	78.9
11	7	5	10	7	4	1908.6502	76.2
12	7	6	11	7	5	1910.3103	46.7
13	7	7	12	7	6	1911.9614	72.0
14	7	8	13	7	7	1913.6024	72.8
15	7	9	14	7	8	1915.2340	73.2

16	7	10	15	7	9	1916.8568	73.9
17	7	11	16	7	10	1918.4716	49.6
18	7	12	17	7	11	1920.0777	76.7
19	7	13	18	7	12	1921.6760	78.7
20	7	14	19	7	13	1923.2681	74.7
21	7	15	20	7	14	1924.8496	82.6
22	7	16	21	7	15	1926.4249	85.0
23	7	17	22	7	16	1927.9927	87.7
24	7	18	23	7	17	1929.5531	88.1
25	7	19	24	7	18	1931.1014	92.2
9	8	1	8	8	0	1904.4611	94.1
10	8	2	9	8	1	1906.0039	89.5
11	8	3	10	8	2	1907.5720	85.8
12	8	4	11	8	3	1909.1545	83.3
13	8	5	12	8	4	1910.7460	81.4
14	8	6	13	8	5	1912.3433	79.9
15	8	7	14	8	6	1913.9438	79.8
16	8	8	15	8	7	1915.5465	79.3
17	8	9	16	8	8	1917.1501	79.7
19	8	11	18	8	10	1920.3558	82.6
20	8	12	19	8	11	1921.9562	83.7
21	8	13	20	8	12	1923.5539	57.5
9	8	2	8	8	1	1904.4611	94.1
10	8	3	9	8	2	1906.0039	89.5
11	8	4	10	8	3	1907.5720	85.8
12	8	5	11	8	4	1909.1545	83.3
13	8	6	12	8	5	1910.7460	81.4
14	8	7	13	8	6	1912.3433	79.9
15	8	8	14	8	7	1913.9438	79.8
16	8	9	15	8	8	1915.5465	79.3
17	8	10	16	8	9	1917.1501	79.7
19	8	12	18	8	11	1920.3558	82.6
20	8	13	19	8	12	1921.9562	83.7
21	8	14	20	8	13	1923.5539	57.5
10	9	2	9	9	1	1907.4567	95.4
11	9	3	10	9	2	1909.2554	92.1
12	9	4	11	9	3	1911.0513	89.4

13	9	5	12	9	4	1912.8445	88.2
14	9	6	13	9	5	1914.6337	87.4
15	9	7	14	9	6	1916.4190	87.3
16	9	8	15	9	7	1918.1991	87.0
17	9	9	16	9	8	1919.9722	88.3
18	9	10	17	9	9	1921.7358	89.3
19	9	11	18	9	10	1923.4855	89.5
20	9	12	19	9	11	1925.2145	90.5
10	9	1	9	9	0	1907.4567	95.4
11	9	2	10	9	1	1909.2554	92.1
12	9	3	11	9	2	1911.0513	89.4
13	9	4	12	9	3	1912.8445	88.2
14	9	5	13	9	4	1914.6337	87.4
15	9	6	14	9	5	1916.4190	87.3
16	9	7	15	9	6	1918.1991	87.0
17	9	8	16	9	7	1919.9722	88.3
18	9	9	17	9	8	1921.7358	89.3
19	9	10	18	9	9	1923.4855	89.5
20	9	11	19	9	10	1925.2145	90.5
11	10	1	10	10	0	1909.1867	63.3
12	10	2	11	10	1	1910.9391	43.6
13	10	3	12	10	2	1912.6857	37.5
14	10	4	13	10	3	1914.4252	34.5
15	10	5	14	10	4	1916.1579	29.7
16	10	6	15	10	5	1917.8835	34.9
17	10	7	16	10	6	1919.6027	23.2
18	10	8	17	10	7	1921.3135	31.6
19	10	9	18	10	8	1923.0167	33.7
20	10	10	19	10	9	1924.7125	35.0
21	10	11	20	10	10	1926.4003	39.2
22	10	12	21	10	11	1928.0793	44.2
23	10	13	22	10	12	1929.7495	47.3
24	10	14	23	10	13	1931.4102	52.9
25	10	15	24	10	14	1933.0605	60.0
26	10	16	25	10	15	1934.7002	63.7
27	10	17	26	10	16	1936.3277	67.4
28	10	18	27	10	17	1937.9421	73.0

11	10	2	10	10	1	1909.1867	63.3
12	10	3	11	10	2	1910.9391	43.6
13	10	4	12	10	3	1912.6857	37.5
14	10	5	13	10	4	1914.4252	34.5
15	10	6	14	10	5	1916.1579	29.7
16	10	7	15	10	6	1917.8835	34.9
17	10	8	16	10	7	1919.6027	23.2
18	10	9	17	10	8	1921.3135	31.6
19	10	10	18	10	9	1923.0167	33.7
20	10	11	19	10	10	1924.7125	35.0
21	10	12	20	10	11	1926.4003	39.2
22	10	13	21	10	12	1928.0793	44.2
23	10	14	22	10	13	1929.7495	47.3
24	10	15	23	10	14	1931.4102	52.9
25	10	16	24	10	15	1933.0605	60.0
26	10	17	25	10	16	1934.7002	63.7
27	10	18	26	10	17	1936.3277	67.4
28	10	19	27	10	18	1937.9421	73.0
13	11	2	12	11	1	1912.63567	88.7
14	11	3	13	11	2	1914.37735	75.5
15	11	4	14	11	3	1916.08902	65.2
16	11	5	15	11	4	1917.79293	61.6
17	11	6	16	11	5	1919.48776	65.7
18	11	7	17	11	6	1921.17439	59.8
19	11	8	18	11	7	1922.85152	65.7
20	11	9	19	11	8	1924.52042	65.3
21	11	10	20	11	9	1926.17976	69.8
22	11	11	21	11	10	1927.82980	72.2
23	11	12	22	11	11	1929.46968	74.4
25	11	14	24	11	13	1932.71963	80.5
26	11	15	25	11	14	1934.32903	82.5
27	11	16	26	11	15	1935.92725	85.9
28	11	17	27	11	16	1937.48895	88.7
29	11	18	28	11	17	1939.08944	90.4
30	11	19	29	11	18	1940.65248	91.3
13	11	3	12	11	2	1912.63567	88.7

Таблица 2 – Экспериментальные колебательно-вращательные переходы

полосы ν_{12} молекулы C_2H_4

Квантовые числа верхнего состояния $J \ K_a \ K_c$	Квантовые числа нижнего состояния $J' \ K_a' \ K_c'$	Переход, cm^{-1}	Пропуск, %	Средняя энергия, cm^{-1}
1 0 1	0 0 0	1444,2766	80,3	1441,5358
	2 0 2	1438,79502	64,9	
2 0 2	1 0 1	1446,10946	83,3	1441,5510
	3 0 3	1436,99247	75,6	
3 0 3	2 0 2	1447,93453	54,6	1441,57246
	4 0 4	1435,21039	44,9	
4 0 4	3 0 3	1449,74500	70,9	1441,59866
	5 0 5	1433,45232	65,2	
5 0 5	4 0 4	1451,53455	40,5	1441,627405
	6 0 6	1431,72026	34,1	
6 0 6	5 0 5	1453,29760	62,9	1441,65681
	7 0 7	1430,01602	26,5	
7 0 7	6 0 6	1455,03085	33,0	1441,680955
	8 0 8	1428,33106	28,8	
8 0 8	7 0 7	1456,73395	57,5	1441,700175
	9 0 9	1426,66640	55,3	
9 0 9	8 0 8	1458,40963	29,3	1441,711785
	10 0 10	1425,01394	26,8	
10 0 10	9 0 9	1460,06314	56,1	1441,715375
	11 0 11	1423,36761	54,4	
11 0 11	10 0 10	1461,70061	28,1	1441,7115
	12 0 12	1421,72239	27,1	
12 0 12	11 0 11	1463,32781	56,0	1441,701305
	13 0 13	1420,07480	55,8	
13 0 13	12 0 12	1464,94914	28,7	1441,686015
	14 0 14	1418,42289	29,2	
14 0 14	13 0 13	1466,56753	57,7	1441,66665
	15 0 15	1416,76577	58,0	
15 0 15	14 0 14	1468,18449	31,5	1441,643965
	16 0 16	1415,10344	33,2	

1 1 1	1 1 0	1442,32816	86,3	1440,672125
	2 1 2	1439,01609	87,2	
2 1 2	1 1 1	1445,98829	87,3	1441,750507
	2 1 1	1441,98427	92,0	
	3 1 3	1437,27896	78,7	
3 1 3	2 1 2	1447,72988	78,9	1441,58153
	3 1 2	1441,46810	94,6	
	4 1 4	1435,54661	72,2	
4 1 4	3 1 3	1449,46755	70,9	1441,355607
	4 1 3	1440,77941	95,2	
	5 1 5	1433,81986	67,1	
5 1 5	4 1 4	1451,20033	67,5	1441,073427
	5 1 4	1439,92081	96,8	
	6 1 6	1432,09914	63,1	
6 1 6	5 1 5	1452,92641	62,8	1440,734507
	6 1 5	1438,89236	96,8	
	7 1 7	1430,38475	59,9	
7 1 7	6 1 6	1454,64475	60,6	1440,339913
	7 1 6	1437,69845	97,1	
	8 1 8	1428,67654	57,7	
8 1 8	7 1 7	1456,35463	58,3	1439,891193
	8 1 7	1436,34476	97,7	,
	9 1 9	1426,97419	56,3	
9 1 9	8 1 8	1458,05546	56,4	1439,39096
	9 1 8	1434,84031	97,9	
	10 1 10	1425,27711	55,2	
10 1 10	9 1 9	1459,74701	56,0	1438,844807
	10 1 9	1433,20324	75,8	
	11 1 11	1423,58417	36,7	
11 1 11	10 1 10	1461,42930	55,8	1438.252477
	11 1 10	1431,43237	98,0	
	12 1 12	1421,89576	55,0	
12 1 12	11 1 11	1463,10259	55,9	1437,62568
	12 1 11	1429,56474	98,3	
	13 1 13	1420,20971	56,3	
13 1 13	12 1 12	1464,76730	56,5	1436,970237
	13 1 12	1427,61781	98,3	

	14 1 14	1418,52560	57,2	
14 1 14	13 1 13	1466,42404	57,6	1436,294437
	14 1 13	1425,61665	98,4	
	15 1 15	1416,84262	59,1	
15 1 15	14 1 14	1468,07334	59,3	1435.605827
	15 1 14	1423,58417	36,7	
	16 1 16	1415,15997	60,8	
16 1 16	15 1 15	1469,71588	60,5	1434,914017
	16 1 15	1421,54907	98,5	
	17 1 17	1413,47710	63,2	
2 1 1	1 1 0	1446,35809	87,2	1442,062833
	2 1 2	1443,04610	92	
	3 1 2	1436,78431	78,1	
3 1 2	2 1 1	1448,29674	79,4	1441,60022
	4 1 3	1434,90370	71,5	
4 1 3	3 1 2	1450,23889	73,6	1442,531367
	4 1 4	1444,31739	96,6	
	5 1 4	1433,03782	66,0	
5 1 4	4 1 3	1452,18238	69,4	1442,863697
	5 1 5	1445,22047	79,4	
	6 1 5	1431,18824	61,5	
6 1 5	5 1 4	1454,12451	65,8	1443,261457
	6 1 6	1446,30238	97,5	
	7 1 6	1429,35748	54,9	
7 1 6	6 1 5	1456,06197	63,5	1451,80811
	7 1 7	1447,55425	98,6	
8 1 7	7 1 6	1457,99094	61,7	1444,238037
	8 1 8	1448,96919	98,8	
	9 1 8	1425,75398	54,7	
9 1 8	8 1 7	1459,90698	60,8	1444.810177
	9 1 9	1450,5357	98,4	
	10 1 9	1423,98785	32,9	
10 1 9	9 1 8	1461,80507	60,0	1442,02494
	11 1 10	1422,24481	53,6	
11 1 10	10 1 9	1463,67982	60,7	1446,09291
	11 1 11	1454,06989	73,7	
	12 1 11	1420,52902	53,2	

12 1 11	11 1 10	1465,52597	61,6	1446,786003
	12 1 12	1455,99218	98,3	
	13 1 12	1418,83986	54,6	
13 1 12	12 1 11	1467,33960	44,5	1447,50231
	13 1 13	1457,99094	61,7	
	14 1 13	1417,17639	56,4	
14 1 13	13 1 12	1469,11555	64,1	1448,220607
	14 1 14	1460,01016	99,8	
	15 1 14	1415,53611	58,1	
15 1 14	14 1 13	1470,85540	65,8	1448,951983
	15 1 15	1462,08595	98,7	
	16 1 15	1413,91460	60,5	
3 2 2	2 2 1	1448,18994	87,2	1442,085467
	3 2 1	1442,67474	82,4	
	4 2 3	1435,39172	77,8	
4 2 3	3 2 2	1450,03385	58,2	1442,087463
	4 2 2	1442,63780	71,4	
	5 2 4	1433,59074	46,8	
5 2 4	4 2 3	1451,87817	73,1	1442,075697
	5 2 3	1442,54998	89,3	
	6 2 5	1431,79894	66,4	
6 2 5	5 2 4	1453,72157	42,9	1442,041107
	6 2 4	1442,38573	80,4	
	7 2 6	1430,01602	26,5	
7 2 6	6 2 5	1455,56264	65,6	1441,975187
	7 2 5	1442,11785	92,7	
	8 2 7	1428,24507	60,0	
8 2 7	7 2 6	1457,39997	35,9	1441,868053
	8 2 6	1441,72036	86,6	
	9 2 8	1426,48383	31,0	
9 2 8	8 2 7	1459,23214	61,8	1441,712217
	9 2 7	1441,17107	94,8	
	10 2 9	1424,73344	56,6	
10 2 9	9 2 8	1461,05768	33,5	1441.50164
	10 2 8	1440,45332	90,2	
	11 2 10	1422,99392	29,5	
11 2 10	10 2 9	1462,87529	61,1	1441,23255

	11 2 9	1439,55745	96,2	
	12 2 11	1421,26491	36,1	
12 2 11	11 2 10	1464,68365	33,7	1440,903267
	12 2 10	1438,47892	92,8	
	13 2 12	1419,54723	30,0	
13 2 12	12 2 11	1466,48164	62,1	1440,513637
	13 2 11	1437,21984	97,3	
	14 2 13	1417,83943	58,6	
14 2 13	13 2 12	1468,26837	36,5	1440,065127
	14 2 12	1435,78568	94,5	
	15 2 14	1416,14133	33,1	
15 2 14	14 2 13	1470,04309	65,0	1439,560307
	15 2 13	1434,18568	97,9	
	16 2 15	1414,45215	62,1	
16 2 15	15 2 14	1471,80529	40,8	1439,002773
	16 2 14	1432,43194	95,8	
	17 2 16	1412,77109	38,1	
5 3 3	4 3 2	1452.20121	70.5	1506.04791
	5 3 2	1443.03438	79.2	
	6 3 4	1432.03722	72.8	
6 3 4	5 3 3	1454.06989	73.7	1517.07876
	6 3 3	1443.06039	77.9	
	7 3 5	1430.22901	68.4	
7 3 5	6 3 4	1455.94792	71.1	1529.95709
	7 3 4	1443.08156	76.0	
	8 3 6	1428.42474	65.2	
8 3 6	7 3 5	1457.83355	68.4	1544.68329
	8 3 5	1443.09660	83.6	
	9 3 7	1426.62523	63.0	
9 3 7	8 3 6	1459.72610	66.7	1561.25845
	9 3 6	1443.09660	83.6	
	10 3 8	1424.83136	61.2	
10 3 8	9 3 7	1461.62455	65.9	1579.68262
	10 3 7	1443.06039	77.9	
	11 3 9	1423.04410	60.8	

Глава 4. ФИНАНСОВЫЙ МЕНЕДЖМЕНТ, РЕСУРСОЭФФЕКТИВНОСТЬ И РЕСУРСОСБЕРЕЖЕНИЕ

4.1 Организация и планирование работ

При организации процесса реализации конкретного проекта необходимо рационально планировать занятость каждого из его участников и сроки проведения отдельных работ.

В данном пункте составляется полный перечень проводимых работ, определяются их исполнители и рациональная продолжительность. Наглядным результатом планирования работ является сетевой, либо линейный график реализации проекта. Так как число исполнителей редко превышает двух (степень распараллеливания всего комплекса работ незначительна) в большинстве случаев предпочтительным является линейный график. Для его построения хронологически упорядоченные вышеуказанные данные должны быть сведены в таблицу типа приведенной ниже

табл. 4.1 Перечень работ и продолжительность их выполнения

Этапы работ	Исполнители	Загрузка исполнителей
Постановка целей и задач, получение исходных данных	НР	НР – 100%
Составление и утверждение ТЗ	НР, И	НР – 90% И – 10%
Подбор и изучение материалов по тематике	НР	НР – 100%
Разработка календарного плана	НР, И	НР – 90% И – 10%
Обсуждение литературы	НР, И	НР – 30% И – 70%
Выбор принципиальной схемы устройства	НР, И	НР – 100% И – 80%
Получение экспериментальных результатов	НР, И	НР – 10% И – 100%
Расчет принципиальной схемы устройства	НР, И	НР – 10% И – 90%
Оформление расчетно-пояснительной записки	И	И – 100%
Оформление графического материала	И	И – 100%
Подведение итогов	НР, И	НР – 60% И – 100%

Таблица 4.2

Трудозатраты на выполнение проекта

Этап	Исполнитель	Продолжительность работ, дни			Трудоемкость работ по исполнителям чел.-дн			
					$T_{РД}$		$T_{КД}$	
		t_{min}	t_{max}	$t_{ож}$	НР	И	НР	И
1	2	3	4	5	6	7	8	9
Постановка задачи	НР	3	4	3,4	3,36	–	4,032	–
Разработка и утверждение технического задания (ТЗ)	НР, И	2	4	2,8	2,52	0,28	3,024	0,3374
Подбор и изучение материалов по теме	НР, И	10	12	10,8	10,8	15,84	12,96	19,0872
Разработка календарного плана	НР, И	2	4	2,8	1,52	0,28	1,824	0,3374
Обсуждение литературы	НР, И	3	6	4,2	1,26	2,94	1,512	3,5427
Выбор принципиальной схемы устройства	НР, И	5	10	7	8,64	7	10,368	8,435
Получение экспериментальных результатов	И	50	70	58	5,8	58	6,96	69,89
Расчет принципиальной схемы устройства	И	15	20	17	1,7	15,3	2,04	18,4365
Оформление расчетно-пояснительной записки	И	7	10	8,2	–	8,2	–	9,881
Оформление графического материала	И	3	6	4,2	–	4,2	–	5,061
Подведение итогов	НР, И	5	8	6,2	3,72	6,2	4,464	7,471
Итого:				124,6	39,32	118,24	47,184	142,4792

Таблица 4.3 *Линейный график работ*

Этап	НР	И	ноябрь			декабрь			февраль			март			апрель		
			10	20	30	40	50	60	70	80	90	100	110	120	130	140	150
1	4,032	–															
2	3,024	0,3374	 														
3	12,96	19,087 2	 														
4	1,824	0,3374			 												
5	1,512	3,5427			 												
6	10,36	8,435				 											
7	6,96	69,89					 										
8	2,04	18,436											 				
9	–	9,881															
10	–	5,061															
11	4,464	7,471															

НР – ; И –

4.2 Расчет сметы затрат на выполнение проекта

В состав затрат на создание проекта включается величина всех расходов, необходимых для реализации комплекса работ, составляющих содержание данной разработки. Расчет сметной стоимости ее выполнения производится по следующим статьям затрат:

- материалы и покупные изделия;
- заработная плата;
- социальный налог;
- расходы на электроэнергию (без освещения);
- амортизационные отчисления;
- командировочные расходы;
- оплата услуг связи;
- арендная плата за пользование имуществом;
- прочие услуги (сторонних организаций);
- прочие (накладные расходы) расходы.

4.2.1 Расчет затрат на материалы

К данной статье расходов относится стоимость материалов, покупных изделий, полуфабрикатов и других материальных ценностей, расходуемых непосредственно в процессе выполнения работ над объектом проектирования. Сюда же относятся специально приобретенное оборудование, инструменты и прочие объекты, относимые к основным средствам, стоимостью до 40 000 руб. включительно. Цена материальных ресурсов определяется по соответствующим ценникам или договорам поставки. Кроме того статья включает так называемые транспортно-заготовительные расходы, связанные с транспортировкой от поставщика к потребителю, хранением и прочими процессами, обеспечивающими движение (доставку) материальных ресурсов от поставщиков к потребителю. Сюда же включаются расходы на совершение сделки купли-продажи (т.н. транзакции). Приблизительно они оцениваются в процентах к отпускной цене закупаемых материалов, как правило, это $5 \div 20 \%$. Исполнитель работы самостоятельно выбирает их величину в указанных границах. Пример см. в табл. 5.5

Таблица 5.5

Расчет затрат на материалы

п/п	Наименование оборудования	Кол-во единиц оборудования	Цена единицы оборудования, руб.	Общая стоимость оборудования, руб.
.	бумага	1	200	200
Итого:				200

Допустим, что ТЗР составляют 5 % от отпускной цены материалов, тогда расходы на материалы с учетом ТЗР равны $C_{\text{мат}} = 200 * 1,05 = 210 \text{руб.}$

4.2.2 Расчет заработной платы

Данная статья расходов включает заработную плату научного руководителя и инженера (в его роли выступает исполнитель проекта), а также премии, входящие в фонд заработной платы. Расчет основной заработной платы выполняется на основе трудоемкости выполнения каждого этапа и величины месячного оклада исполнителя. Величины месячных окладов (МО) для сотрудников ТПУ можно получить на его портале – «Главная → Структура ТПУ → Управление первого проректора → Бухгалтерия → Отдел учета расчетов по заработной плате, → Регламентирующие документы». Оклад инженера принимается равным окладу соответствующего специалиста низшей квалификации в организации, где исполнитель проходил преддипломную практику. При отсутствии такового берется оклад инженера собственной кафедры (лаборатории).

Среднедневная тарифная заработная плата ($ЗП_{\text{дн-т}}$) рассчитывается по формуле:

$$ЗП_{\text{дн-т}} = \text{МО} / 24,83 \quad (5.6)$$

учитывающей, что в году 298 рабочих дней и, следовательно, в месяце в среднем 24,83 рабочих дня (при шестидневной рабочей неделе)¹.

Расчеты затрат на полную заработную плату приведены в таблице 5.6. Затраты времени по каждому исполнителю в рабочих днях с округлением до целого взяты из таблицы 5.2. Для учета в ее составе премий, дополнительной зарплаты и районной надбавки используется следующий ряд коэффициентов: $K_{\text{ПР}} = 1,1$; $K_{\text{доп.ЗП}} = 1,188$; $K_{\text{р}} = 1,3$. Таким образом, для перехода от тарифной (базовой) суммы заработка исполнителя, связанной с участием в проекте, к соответствующему полному заработку (зарплатной части сметы) необходимо первую умножить на интегральный коэффициент $K_{\text{и}} = 1,1 * 1,188 * 1,3 = 1,699$. Вышеуказанное значение $K_{\text{доп.ЗП}}$ применяется при шестидневной рабочей неделе, при пятидневной оно равно 1,113, соответственно в этом случае $K_{\text{и}} = 1,62$.

Таблица 5.6

Заплаты на заработную плату

Исполнитель	Оклад, руб./мес.	Среднедневная ставка, руб./раб.день	Затраты времени, раб.дни	Коэффициент	Фонд з/платы, руб.
НР	33664	1355.8	47	1,699	63972.0672
И	15470	623.04	142	1,62	88770.2408
Итого:					152742.3079

4.2.3 Расчет затрат на социальный налог

Затраты на единый социальный налог (ЕСН), включающий в себя отчисления в пенсионный фонд, на социальное и медицинское страхование, составляют 30 % от полной заработной платы по проекту, т.е. $C_{\text{соц.}} = C_{\text{зп}} * 0,3$. Итак, в нашем случае $C_{\text{соц.}} = 152742.3079 * 0,3$

¹ В 2015 году, в другие годы эти цифры могут несущественно отличаться от указанных.

=45822.69237руб.

4.2.4 Расчет затрат на электроэнергию

Данный вид расходов включает в себя затраты на электроэнергию, потраченную в ходе выполнения проекта на работу используемого оборудования, рассчитываемые по формуле:

$$C_{\text{эл.об.}} = P_{\text{об}} \cdot t_{\text{об}} \cdot \text{Ц}_{\text{э}} \quad (5.7)$$

где $P_{\text{об}}$ – мощность, потребляемая оборудованием, кВт;

$\text{Ц}_{\text{э}}$ – тариф на 1 кВт·час;

$t_{\text{об}}$ – время работы оборудования, час.

Для ТПУ $\text{Ц}_{\text{э}} = 5,748$ руб./кВт.час (с НДС).

Время работы оборудования вычисляется на основе итоговых данных таблицы 5.2 для инженера ($T_{\text{рд}}$) из расчета, что продолжительность рабочего дня равна 8 часов.

$$t_{\text{об}} = T_{\text{рд}} \cdot K_t, \quad (5.8)$$

где $K_t \leq 1$ – коэффициент использования оборудования по времени, равный отношению времени его работы в процессе выполнения проекта к $T_{\text{рд}}$, определяется исполнителем самостоятельно. В ряде случаев возможно определение $t_{\text{об}}$ путем прямого учета, особенно при ограниченном использовании соответствующего оборудования.

Мощность, потребляемая оборудованием, определяется по формуле:

$$P_{\text{об}} = P_{\text{ном.}} \cdot K_c \quad (5.9)$$

где $P_{\text{ном.}}$ – номинальная мощность оборудования, кВт;

$K_c \leq 1$ – коэффициент загрузки, зависящий от средней степени использования номинальной мощности. Для технологического оборудования малой мощности $K_c = 1$.

Пример расчета затраты на электроэнергию для технологических целей приведен в таблице 5.7.

Затраты на электроэнергию технологическую

Наименование оборудования	Время работы оборудования $t_{\text{ОБ}}$, час	Потребляемая мощность $P_{\text{ОБ}}$, кВт	Затраты $\text{Э}_{\text{ОБ}}$, руб.
Персональный компьютер	301*8	0,3	4152,3552
Итого:			4152,3552

4.2.5 Расчет амортизационных расходов

В статье «Амортизационные отчисления» рассчитывается амортизация используемого оборудования за время выполнения проекта.

Используется формула

$$C_{\text{АМ}} = \frac{N_{\text{А}} * C_{\text{ОБ}} * t_{\text{рф}} * n}{F_{\text{д}}}, \quad (5.10)$$

где $N_{\text{А}}$ – годовая норма амортизации единицы оборудования;

$C_{\text{ОБ}}$ – балансовая стоимость единицы оборудования с учетом ТЗР. При невозможности получить соответствующие данные из бухгалтерии она может быть заменена действующей ценой, содержащейся в ценниках, прейскурантах и т.п.;

$F_{\text{д}}$ – действительный годовой фонд времени работы соответствующего оборудования, берется из специальных справочников или фактического режима его использования в текущем календарном году. При этом второй вариант позволяет получить более объективную оценку $C_{\text{АМ}}$. Например, для ПК в 2019 г. (301 рабочий дней при шестидневной рабочей неделе) можно принять $F_{\text{д}} = 301 * 24 = 7224$ часа;

$t_{pф}$ – фактическое время работы оборудования в ходе выполнения проекта, задается исполнителем проекта;

n – число задействованных однотипных единиц оборудования.

$$H_A = 1/5 = 0,2$$

$$C_{OB} = 40000 \text{ руб}$$

$$t_{pф} = 800 \text{ час}$$

$$n = 1$$

$$F_D = 301 * 8 = 2408 \text{ час}$$

$$C_{AM} = \frac{H_A * C_{OB} * t_{pф} * n}{F_D} = 2657,8 \text{ руб}$$

4.2.6 Расчет расходов, учитываемых непосредственно на основе платежных (расчетных) документов (кроме суточных)

Сюда относятся:

- командировочные расходы, в т.ч. расходы по оплате суточных, транспортные расходы, компенсация стоимости жилья;
- арендная плата за пользование имуществом;
- оплата услуг связи;
- услуги сторонних организаций.

Норма оплаты суточных – **200 руб./день**.

Время пребывания в командировке составило 10 календарных дней (с учетом дней приезда и отъезда); оплата проживания в общежитии 1000 руб./день*10 дней = 10000 руб. (основные расходы за счет принимающей стороны); оплата самолет по ж.д. в обе стороны – 8260 руб.; аренда специальных приборов – 4200 руб.. Итого по данному пункту $C_{нр} = (10 - 1) * 200 + 10000 + 8260 + 4200 = 24260$ руб.

4.2.7 Расчет прочих расходов

В статье «Прочие расходы» отражены расходы на выполнение проекта, которые не учтены в предыдущих статьях, их следует принять равными 10% от суммы всех предыдущих расходов, т.е.

$$C_{проч.} = (C_{мат} + C_{зп} + C_{соц} + C_{эл.об.} + C_{ам} + C_{нп}) \cdot 0,1$$

Для нашего примера это

$$C_{\text{проч.}} = (200 + 152742.3079 + 45822.69237 + 4152,3552 + 2657,8 + 24260) \cdot 0,1 \\ = 229835,2 \text{ руб.}$$

4.2.8 Расчет общей себестоимости разработки

Проведя расчет по всем статьям сметы затрат на разработку, можно определить общую себестоимость проекта «Макет демонстрационной модели принципов КТ»².

Таблица 5.8

Смета затрат на разработку проекта

Статья затрат	Условное обозначение	Сумма, руб.
Материалы и покупные изделия	$C_{\text{мат}}$	200
Основная заработная плата	$C_{\text{зп}}$	152742.3079
Отчисления в социальные фонды	$C_{\text{соц}}$	45822.69237
Расходы на электроэнергию	$C_{\text{эл.}}$	4152,3552
Амортизационные отчисления	$C_{\text{ам}}$	2657,8
Непосредственно учитываемые расходы	$C_{\text{нр}}$	24260
Прочие расходы	$C_{\text{проч}}$	22640.520027
Итого:		252818,7

Таким образом, затраты на разработку составили $C = 252818,7$ руб.

4.2.9 Расчет прибыли

Прибыль следует принять в размере $5 \div 20 \%$ от полной себестоимости проекта. В нашем случае она составляет руб. 25281,87 (10 %) от расходов на разработку проекта.

4.2.10 Расчет НДС

НДС составляет 20% от суммы затрат на разработку и прибыли. В нашем случае это $(252818,7 + 25281,87) \cdot 0,2 = 55620.1051$

4.2.11 Цена разработки НИР

Цена равна сумме полной себестоимости, прибыли и НДС, в нашем случае $C_{\text{НИР(КР)}} = 252818,7 + 25281,87 + 55620,1051 = 333720,6$ руб.

4.3 Оценка экономической эффективности проекта

Так как результаты эксперимента не имеют коммерческого применения и все еще находятся на стадии исследований и разработок, то оценка экономической эффективности не имеет смысла.

Глава 5. Социальная ответственность

5.1. Правовые и организационные вопросы обеспечения безопасности.

Социальная ответственность или корпоративная социальная ответственность (как морально-этический принцип) это ответственность перед людьми и данными им обещаниями, когда организация учитывает интересы коллектива и общества, возлагая на себя ответственность за влияние их деятельности на заказчиков, поставщиков, работников, акционеров (IC CSR 26000:2011).

Данная научно-исследовательская работа выполнялась в помещении кафедры общая физика третьего корпуса Томского Политехнического университета в кабинете 126. Помещение оснащено видео-дисплейными терминалами(ВДТ), персональными электронно-вычислительными машинами(ПЭВМ), компьютерными столами, стульями, кофе машиной и противопожарной сигнализацией.

Помещение относится к классу помещений без повышенной опасности, так как отсутствуют условия, создающие повышенную или особо повышенную опасность.

Для того, чтобы обеспечивать производственную безопасность необходимо проанализировать воздействия на человека вредных и опасных производственных факторов, которые возможно возникают при разработке или эксплуатации проекта.

Производственный фактор считается вредным, если воздействие этого фактора на работника может привести к его заболеванию. Производственный фактор считается опасным, если его воздействие на работника может привести к его травме.

Все производственные факторы классифицируются по группам элементов: физические, химические, биологические и психофизические. Для

данной работы целесообразно рассмотреть физические и психофизические вредные и опасные факторы производства, характерные как для рабочей зоны программиста, как разработчика рассматриваемой в данной работе системы, так и для рабочей зоны пользователя готового продукта – врача-оператора ПЭВМ.

5.2 Производственная безопасность

5.2.1 Микроклимат

Микроклиматические параметры – это сочетание температуры, относительной влажности и скорости движения воздуха. Эти параметры в значительной степени влияют на функциональную деятельность человека, его самочувствие здоровье, а также и на надежность работы вычислительной техники.

Микроклимат на рабочем месте прямо 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.

Оптимальные и допустимые значения параметров микроклимата приведены в таблице 5.1.

Период года	Температура, °С	Относительная влажность, %	Скорость движения воздуха, м/с
----------------	-----------------	-------------------------------	--------------------------------------

	Оптим альная	Допустимая на рабочих местах				Оптим альная	Допу стима я	Опти мальн ая, не более	Допус тимая, не более
		Верхняя		Нижняя					
		Пост.	Не пост.	Пост.	Не пост.				
Холодный	22 - 24	25	26	21	18	40 - 60	75	0,1	0,1
Теплый	23 – 25	28	30	22	20	40 - 60	70	0,1	0,1

Таблица 5.1 Оптимальные и допустимые нормы микроклимата

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

Повышенная влажность воздуха ($\phi > 85\%$) затрудняет терморегуляцию организма, т.к. происходит снижения испарения пота, а пониженная влажность ($\phi < 20\%$) вызывает пересыхание слизистых оболочек дыхательных путей.

Для обеспечения оптимальных и допустимых показателей микроклимата в холодный период года следует применять средства защиты рабочих мест от остекленных поверхностей оконных проемов, чтобы не было охлаждения, а 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.

5.2.2 Электромагнитное излучение

Основной вредный фактор при использовании ЭВМ заключается в электромагнитном излучении. Нормы вредных допустимых уровней (ВДУ) электромагнитного излучения ПЭВМ установлены в документе СанПиН 2.2.2/2.4.1340-03, как показаны в таблице 2.

Распространение электромагнитного поля происходит с помощью электромагнитных волн, которые в свою очередь излучают частицы заряда, молекулы, атомы и другие составляющие. Вред электромагнитного излучения официально доказан и подтвержден соответствующими исследованиями ученых, поэтому по мере возможности нужно ограничивать его влияние на организм человека.

Таблица 2 – Временные допустимые уровни ЭМП , создаваемых ПЭВМ

Наименование параметров		ВДУ
Напряжённость электрического поля	В диапазоне частот 5 Гц-2 кГц	25 В/м
	В диапазоне частот 2 кГц-400 кГц	2,5 В/м
Плотность магнитного потока	В диапазоне частот 5 Гц-2 кГц	250 нТл
	В диапазоне частот 2 кГц-400 кГц	25 нТл
Электростатический потенциал экрана видеомонитора		500 В

5.2.3 Недостаточная освещенность

Согласно ГОСТ 12.0.003.-86 недостаточная освещенность рабочей зоны является вредным производственным фактором, который может вызвать ослепленность или привести к быстрому утомлению и снижению работоспособности. Свет влияет на физиологическое состояние человека, правильно организованное освещение стимулирует протекание процессов высшей нервной деятельности и повышает работоспособность. При недостаточном освещении человек работает менее продуктивно, быстро устает, растет вероятность ошибочных действий, что может привести к травматизму. В зависимости от длины волны, свет может оказывать возбуждающее (оранжево-красный) или успокаивающее (желто-зеленый) действие.

Таблица 5.3 Требования к освещению помещений промышленных предприятий для операторов ПЭВМ

Характеристика зрительной работы	Наименьший или эквивалентный размер объекта различения, мм	Разряд зрительной работы	Подразряд зрительной работы	Контраст объекта с фоном	Характеристика фона	Искусственное освещение		
						Освещённость, лк		
						При системе комбинированного освещения	В том числе от общего	При системе общего освещения
Высокой точности	От 0,3 до 0,5	III	г	Средний, большой	Светлый, средний	400	200	200

5.2.4 Анализ опасных производных факторов окружающей рабочей среды

Для идентификации опасных и вредных производственных факторов определим работы и операции, связанные с выполнением ВКР. Основная работа велась на рабочем месте с использованием ПК и периферийного оборудования. Работа на ПЭВМ относится к категории работ, связанных с опасными и вредными условиями труда. Выделим опасные и вредные производственные факторы, в соответствии с и приведенными работами.

Для приведенных работ вредными являются следующие факторы:

- шум на рабочем месте от работы оборудования;
- электромагнитные излучения от мониторов;
- опасность поражения электрическим током.

5.2.5 Возникновения пожара

Возникновение пожара является опасным производственным фактором, т.к. пожар на предприятии наносит большой материальный ущерб, а также часто сопровождается травмами и несчастными случаями. Причём пожары приводят к полной потере информации и большим трудностям восстановления всей информации в полном объёме. Регулирование пожаробезопасности производится СНиП 21-01-97.

В помещениях с ПЭВМ повышен риск возникновения пожара из-за присутствия множества факторов: наличие большого количества электронных схем, устройств электропитания, устройств кондиционирования воздуха; возможные неисправности электрооборудования, освещения, или неправильная их эксплуатация может послужить причиной пожара.

Возможные виды источников воспламенения:

- Искра при разряде статического электричества;

- Искры от электрооборудования;
- Искры от удара и трения;
- Открытое пламя.

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 5.1).

5.4 Безопасность в чрезвычайных ситуациях

При обнаружении неисправной работы суперкомпьютера необходимо прекратить работу, выйти из программы, отключить питание компьютера, отключить насос, суперкомпьютеру от электросети и известить об этом руководителя.

При возникновении возгорания необходимо немедленно прекратить работу, отключить электрооборудование, позвонить в подразделение пожарной охраны по телефону 01 или 010, сообщить о случившемся руководителю подразделения и приступить к тушению огня первичными средствами пожаротушения.

Чтобы избежать опасности пожара и взрыва, можно принять следующие мероприятия:

1) планирование защиты населения и территорий от пожара и взрыва на уровне предприятия;

- 2) эвакуация работающих;
- 3) создание запасов средств индивидуальной защиты и поддержание их в готовности;
- 4) проектирование, размещение, строительство и эксплуатация объектов инфраструктуры, в том числе и потенциально опасных;
- 5) инженерное обеспечение защиты населения – строительство защитных сооружений (средств коллективной защиты).

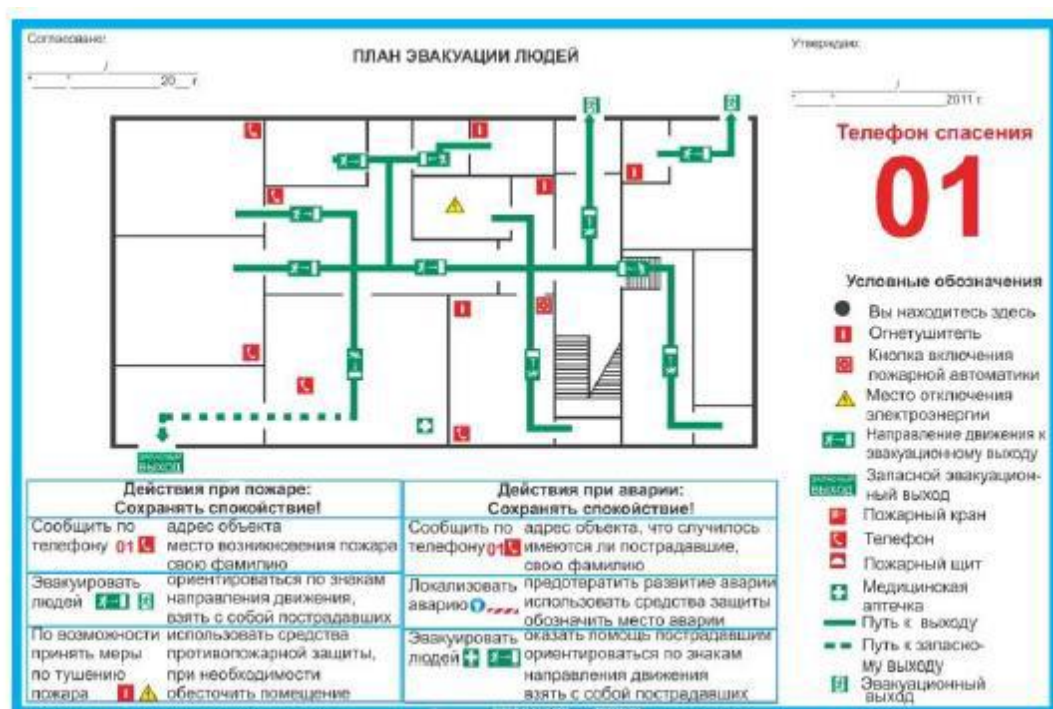


Рис. 1 – план эвакуации людей

В лаборатории обязательно показан план эвакуации: Заранее разработанный план (схема), в котором указаны пути эвакуации, эвакуационные и аварийные выходы, установлены правила поведения людей, порядок и последовательность действий в условиях чрезвычайной ситуации.

Вывод

В работе рассмотрены вопросы охраны труда и здоровья. Изучались выбросы термостимулированного газа, вредные и опасные факторы в рабочей

зоне, определялись меры и средства защиты, учитывалась аварийная ситуация и ее поведение, а также вводились рабочие процедуры устройства. Для обеспечения безопасности жизнедеятельности работы должны проводиться по мере необходимости.