

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

БАКАЛАВРСКАЯ РАБОТА

Тема работы
Определение спектроскопических параметров полос ν_{12} и $\nu_6 + \nu_{11}$ молекулы C_2D_4

УДК 539.194

Студент

Группа	ФИО	Подпись	Дата
150Б52	Ван Шэнья		

Руководитель

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Доцент	Фомченко Анна Леонидовна	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 ООД 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	Результат обучения (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	Ван Шэнья

Тема работы:

Определение спектроскопических параметров полос ν_{12} и $\nu_6 + \nu_{11}$ молекулы C_2D_4	
Утверждена приказом директора (дата, номер)	

Срок сдачи студентом выполненной работы:	
--	--

ТЕХНИЧЕСКОЕ ЗАДАНИЕ:

Исходные данные к работе <i>(наименование объекта исследования или проектирования; производительность или нагрузка; режим работы (непрерывный, периодический, циклический и т. д.); вид сырья или материал изделия; требования к продукту, изделию или процессу; особые требования к особенностям функционирования (эксплуатации) объекта или изделия в плане безопасности эксплуатации, влияния на окружающую среду, энергозатратам; экономический анализ и т. д.).</i>	Объект исследования: Изотополог молекулы этилена C_2D_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 спектра молекулы C₂D₄; – Решение обратной спектроскопической задачи (получение параметров эффективного гамильтониана); – Анализ полученных результатов; – Заключение.
Консультанты по разделам выпускной квалификационной работы <i>(с указанием разделов)</i>	
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 / консультант (при наличии):

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Доцент	Фомченко Анна Леонидовна	к.ф.-м.н.		
Старший преподаватель ОЭФ ИЯТШ	Кудияров Виктор Николаевич	к.т.н.		

Задание принял к исполнению студент:

Группа	ФИО	Подпись	Дата
150Б52	Ван Шэнья		

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

Студенту:

Группа		ФИО	
150Б52		Ван Шэнья	
	Инженерная школа ядерных технологий		Отделение экспериментальной физики
Уровень образования	Бакалавр	Направление/специальность	Физика

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

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

Перечень вопросов, подлежащих исследованию, проектированию и разработке:

1. <i>Оценка коммерческого потенциала, перспективности и альтернатив проведения НИ с позиции ресурсоэффективности и ресурсосбережения</i>	
2. <i>Планирование и формирование бюджета научных исследований</i>	
3. <i>Определение ресурсной (ресурсосберегающей), финансовой, бюджетной, социальной и экономической эффективности исследования</i>	

Перечень графического материала (с точным указанием обязательных чертежей):

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

Дата выдачи задания для раздела по линейному графику

Задание выдал консультант:

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Доцент	Конотопский Владимир Юрьевич			

Задание принял к исполнению студент:

Группа	ФИО	Подпись	Дата
150Б52	Ван Шэнья		

ЗАДАНИЕ ДЛЯ РАЗДЕЛА «СОЦИАЛЬНАЯ ОТВЕТСТВЕННОСТЬ»

Студенту:

Группа	ФИО
150Б52	Ван Шэнья

Школа	Инженерная школа ядерных технологий	Отделение (НОЦ)	Отделение экспериментальной физики
Уровень образования	Бакалавр	Направление/специальность	03.03.02 Физика

Тема ВКР:

Определение спектроскопических параметров полос ν_{12} и $\nu_6 + \nu_{11}$ молекулы C_2D_4	
Исходные данные к разделу «Социальная ответственность»:	
1. Характеристика объекта исследования (вещество, материал, прибор, алгоритм, методика, рабочая зона) и области его применения	Данная научно-исследовательская работа выполнялась в помещении отделения экспериментальной физики третьего корпуса Томского Политехнического университета в кабинете 126. Техническим средством является ПЭВМ. Объектом исследования в данной работе является изотополог молекулы этилена C_2D_4 . Полученные спектральные данные используются для пополнения международных баз данных (например, HITRAN и GEISA), а также применяются в различных задачах астрофизики, космологии и атмосферной оптики.
Перечень вопросов, подлежащих исследованию, проектированию и разработке:	
1. Правовые и организационные вопросы обеспечения безопасности: – специальные (характерные при эксплуатации объекта исследования, проектируемой рабочей зоны) правовые нормы трудового законодательства; – организационные мероприятия при компоновке рабочей зоны.	Рабочее место должно соответствовать требованиям ГОСТ 12.2.032-78. В соответствии с СН-245-71 в помещении должен быть организован воздухообмен. В соответствии с СН-181-70 рекомендуются следующие цвета окраски помещений: потолок - белый или светлый цветной; стены - сплошные, светло-голубые; пол - темно-серый, темно-красный или коричневый.
2. Производственная безопасность: 2.1. Анализ выявленных вредных и опасных факторов 2.2. Обоснование мероприятий по снижению воздействия	1. Характеристика факторов изучаемой производственной среды, описывающих процесс взаимодействия человека с

	окружающей производственной средой: — Микроклимат; — Уровень электромагнитного излучения; — Недостаточная освещённость. 2. Анализ опасных факторов проектируемой производственной среды: - электробезопасность; - Опасность возникновения пожара;
3. Экологическая безопасность:	Защита атмосферы. Указать источники загрязнения атмосферы и основные загрязнители. Нормирование загрязнителей. Методы защиты от выбросов в атмосферу. Защита гидросферы. Указать источники загрязнения гидросферы и основные загрязнители. Нормирование загрязнителей. Методы средства очистки воды. Защита литосферы. Виды отходов, образующихся при разработке и эксплуатации технического решения. Планирование сбора отходов. Обращение с образующимися отходами (переработка, захоронение).
4. Безопасность в чрезвычайных ситуациях:	Защита в чрезвычайных ситуациях: Возможными ЧС в офисном помещении является сильные морозы, диверсия, а также возникновение пожара. Приведены способы защиты от пожара.

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

Задание выдал консультант:

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

Задание принял к исполнению студент:

Группа	ФИО	Подпись	Дата
150Б52	Ван Шэнья		

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

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)
01.03.2018	Аналитический обзор литературы	15
01.09.2018	Интерпретация спектров высокого разрешения молекулы C_2D_4 в районе полос ν_{12} и $\nu_6+\nu_{11}$	15
30.12.2018	Решение обратной спектроскопической задачи и определение параметров состояний ($\nu_{12}=1$) и ($\nu_6=\nu_{11}=1$)	20
30.04.2019	Анализ результатов	15
22.05.2019	Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение	15
30.05.2019	Социальная ответственность	15
30.05.2019	Заключение	5

Составил преподаватель:

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Доцент	Фомченко Анна Леонидовна	к.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 99 страниц, 16 рисунков, 13 таблиц, 37 литературных источников, 2 приложения.

Ключевые слова: молекула C_2D_4 , спектральный анализ, теория симметрии, колебательно-вращательный спектр, метод комбинационных разностей.

Объектом исследования в данной работе является изотополог молекулы этилена C_2D_4 . Путем интерпретации спектра, полученного в ходе эксперимента, удалось извлечь информацию и определить различные спектроскопические параметры одной из изотопических модификаций молекулы этилена (в данной работе C_2D_4) за счёт исследования тонкой структуры спектров высокого разрешения.

Цель работы – определение спектроскопических параметров полос поглощения ν_{12} и $\nu_6+\nu_{11}$ на основе исследования колебательно-вращательной структуры спектров высокого разрешения.

Для достижения поставленной цели были определены следующие задачи:

1. Исследование свойств симметрии молекулы C_2D_4 .
2. Изучение метода комбинационных разностей для интерпретации спектров исследуемой молекулы.
3. Построение колебательно-вращательного гамильтониана молекулы C_2D_4 .
4. Интерпретация полос ν_{12} и $\nu_6+\nu_{11}$ молекулы C_2D_4 .
5. Решение обратной спектроскопической задачи для состояний ($\nu_{12}=1$) и ($\nu_6=\nu_{11}=1$).

В процессе исследования проанализированы высокоточные инфракрасные Фурье-спектры молекулы C_2D_4 в области $600-1150\text{ см}^{-1}$ и $3100-3300\text{ см}^{-1}$. Вращательная структура полос поглощения ν_{12} и $\nu_6+\nu_{11}$ была проанализирована с помощью метода комбинационных разностей основного состояния.

В результате исследования получены спектроскопические параметры полос поглощения ν_{12} и $\nu_6 + \nu_{11}$.

Степень внедрения: результаты работы представлены на международной научной конференции «Перспективы развития фундаментальных наук».

Область применения: Полученные спектральные данные используются для пополнения международных баз данных (например, HITRAN и GEISA), а также применяются в различных задачах астрофизики, космологии и атмосферной оптики.

Оглавление

РЕФЕРАТ	12
Введение.....	16
ГЛАВА 1. Литературный обзор.....	18
1.1. Исследования молекулы C_2D_4 в литературе.....	18
1.2. Основные сведения о молекуле C_2D_4	19
1.3. Симметрия молекулы C_2D_4	20
1.4. Структура колебательно-вращательного спектра отдельной полосы.....	23
ГЛАВА 2. Методы исследования колебательно-вращательных спектров ..	25
2.1. Приближение Борна-Оппенгеймера	25
2.2. Углы Эйлера	28
2.3. Колебательно-вращательный гамильтониан молекулы C_2D_4	30
2.4. Некоторые сведения из теории изотопозамещения	37
2.5. Метод комбинационных разностей.....	45
ГЛАВА 3. Анализ данных и обработка результатов	47
3.1. Детали эксперимента	47
3.2. Интерпретация Фурье-спектров молекулы C_2D_4	49
3.3. Определение спектроскопических параметров полос ν_{12} и $\nu_6+\nu_{11}$ молекулы C_2D_4	52
ГЛАВА 4. ФИНАНСОВЫЙ МЕНЕДЖМЕНТ, РЕСУРСОЭФФЕКТИВНОСТЬ И РЕСУРСОСБЕРЕЖЕНИЕ	55
4.1 Организация и планирование работ.....	55
4.2 Расчет сметы затрат на выполнение проекта	59
5.2.1 Расчет затрат на материалы	59
5.2.2 Расчет заработной платы.....	60
5.2.3 Расчет затрат на социальный налог	62
5.2.4 Расчет затрат на электроэнергию	62
5.2.5 Расчет амортизационных расходов.....	64
5.2.6 Расчет расходов, учитываемых непосредственно на основе платежных (расчетных) документов (кроме суточных)	65
5.2.7 Расчет прочих расходов	65
5.2.8 Расчет общей себестоимости разработки.....	65
5.2.9 Расчет прибыли	66

5.2.10 Расчет НДС	66
5.2.11 Цена разработки НИР	66
5.3 Оценка экономической эффективности проекта	66
ГЛАВА 5. СОЦИАЛЬНАЯ ОТВЕТСТВЕННОСТЬ	67
Введение.....	67
5.1 Техногенная безопасность	67
5.2 Анализ вредных производных факторов окружающей работающей среды.....	67
5.3 Анализ опасных производных факторов окружающей работающей среды.....	71
5.3.1 Электробезопасность.....	72
5.3.2 Опасность возникновения пожара	74
5.4 Рекомендации по минимизации влияния.....	75
5.5 Экологическая безопасность	78
5.6 Безопасность в чрезвычайных ситуациях	79
Вывод.....	80
Заключение	81
СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ.....	82
Приложение 1	85
Приложение 2	91

Введение

Данная работа посвящена исследованию колебательно-вращательного спектра многоатомной молекулы C_2D_4 .

Актуальность работы: Можно изучать строение и свойства молекул путем исследования спектров, которые являются очень важным источником информации. За счёт исследования тонкой структуры спектров можно получить много экспериментальных данных, используемых в дальнейшем в различных проблемах газоанализа, атмосферной оптики, планетологии и т.д.

Колебательно-вращательная спектроскопия является разделом молекулярной спектроскопии, связанной с инфракрасными и комбинационными спектрами молекул в газовой фазе. Переходы, связанные с изменениями как колебательного, так и вращательного состояний, обычно называют ровибрационными переходами [1]. Когда такие переходы испускают или поглощают фотоны (электромагнитное излучение), частота пропорциональна разности уровней энергии и может быть обнаружена некоторыми видами спектроскопии. Так как изменения в уровнях вращательной энергии обычно намного меньше, чем изменения уровней колебательной энергии, то говорят, что изменения во вращательном состоянии дают так называемую тонкую структуру колебательного спектра.

Колебательно-вращательные спектры многоатомных молекул, которые используются в задачах медицины, нефтехимии, химической и даже пищевой промышленности, можно наблюдать в среднем инфракрасном диапазоне.

Цель работы:

Определение спектроскопических параметров полос поглощения ν_{12} и $\nu_6 + \nu_{11}$ на основе исследования колебательно-вращательной структуры спектров высокого разрешения.

Для достижения поставленной цели были определены **следующие задачи:**

1. Исследование свойств симметрии молекулы C_2D_4 .
2. Изучение метода комбинационных разностей для интерпретации спектров исследуемой молекулы.
3. Построение колебательно-вращательного гамильтониана молекулы C_2D_4 .
4. Интерпретация полос ν_{12} и $\nu_6 + \nu_{11}$ молекулы C_2D_4 .
5. Решение обратной спектроскопической задачи для состояний $(\nu_{12}=1)$ и $(\nu_6=\nu_{11}=1)$.

ГЛАВА 1. Литературный обзор

1.1. Исследования молекулы C_2D_4 в литературе

Этилен является простой молекулой алкена, которая встречается в природе в атмосфере. Его изотополог C_2D_4 является молекулой, представляющей интерес для спектроскопистов из-за его интенсивного инфракрасного поглощения и ярко выраженной и четкой колебательно-вращательной структуры спектров. Поэтому спектры молекулы C_2D_4 были ранее исследованы в многочисленных работах.

Ранние спектроскопические работы по исследованию молекулы C_2D_4 включают определение точных колебательно-вращательных параметров полос C_2D_4 ниже 2000 см^{-1} при разрешении $0,05\text{ см}^{-1}$, проведенное J. Harper и др. в 1981 году [2]. Год спустя J. Harper проанализировал полосу ν_7 , выполнил полный анализ данного верхнего состояния с учетом различных эффектов непрямого взаимодействия Кориолиса с неактивным торсионным колебанием ν_4 [3].

В 1986 году F.J. Momreán и др. исследовали кориолисово-связанные уровни на основе анализа полос ν_3 и ν_6 в области 1000 см^{-1} [4]. В 1999 году T.L. Tap улучшил колебательные параметры основного состояния путем подбора комбинационных разностей от ИК-спектра фундаментальной полосы ν_{12} молекулы C_2D_4 , зарегистрированной с разрешением $0,004\text{ см}^{-1}$ в диапазоне частот $1030 - 1130\text{ см}^{-1}$ [5]. Год спустя K.L. Goh и др. впервые изучили полосы ν_{11} и $\nu_2 + \nu_7$ с разрешением $0,006\text{ см}^{-1}$ в диапазоне частот от 2150 до 2250 см^{-1} [6]. В том же году T.L. Tap и др. проанализировали полосу ν_9 в диапазоне частот $2300 - 2400\text{ см}^{-1}$ [7].

В 2014 г. T.L. Tap и др. представили более обширный анализ уже изученной ими фундаментальной полосы ν_{12} при более высоком разрешении

0,00096 см^{-1} [8]. В 2017 г. Улеников О.Н. и др. впервые проанализировали две «горячие» полосы поглощения $\nu_7+\nu_{10}-\nu_{10}$ и $\nu_{10}+\nu_{12}-\nu_{10}$, а именно для них было найдено около 740 и 550 переходов (233 и 174 значения колебательно-вращательных уровней энергии верхнего состояния) с $J^{\text{max}} = 25$, $K_a^{\text{max}} = 18$ и $J^{\text{max}} = 20$, $K_a^{\text{max}} = 10$, соответственно [9]. В 2018 г. Улеников О.Н. выполнил анализ отдельно расположенной полосы ν_{10} при оптическом разрешении 0,00096 см^{-1} , расположенной в области 460-710 см^{-1} . В работе были проанализированы экспериментально зарегистрированные положения линий (около 5040 экспериментальных линий с $J^{\text{max}} = 47$ и $K_a^{\text{max}} = 27$) и получены эффективные спектроскопические параметры состояния ($\nu_{10}=1$) [10].

В настоящем исследовании мы стремимся еще больше повысить точность вращательных и колебательных параметров молекулы C_2D_4 . В частности, мы повторно исследовали полосу ν_{12} с помощью инфракрасной спектроскопии высокого разрешения с преобразованием Фурье и расширили анализ до большего числа ИК-переходов с более широким диапазоном волновых чисел и более высокими значениями квантовых чисел J , чтобы получить более точный набор колебательных параметров. Что еще более важно, комбинационная полоса $\nu_6+\nu_{11}$, которая также исследуется в данной работе, ранее не была проанализирована. На основе анализа спектра данной полосы в районе 3100-3300 см^{-1} мы определяем спектроскопические параметры состояния ($\nu_6=\nu_{11}=1$).

1.2. Основные сведения о молекуле C_2D_4

Важно понимать внутренние свойства (потенциальную функцию, спектральную структуру и т.д.) молекулы C_2H_4 , поскольку молекула этилена широко применяется для научных исследований не только в области физики, химии, астрофизики, но и в планетологии, атмосферной оптике, биологии и т. д. [11]. Этилен представляет собой природное соединение в атмосферном воздухе, которое влияет на атмосферную химию и глобальный климат. В результате

реакции с гидроксильным (ОН) радикалом этилен играет важную роль в тропосферной химии и генерации озона. Этот вклад в химию атмосферы делает этилен климатически значимым следовым газом, а его концентрация, источники и поглотители воздуха представляют интерес для науки об атмосфере. Этилен является одним из самых изучаемых в астрофизике веществ, т.к. он был обнаружен в атмосферах планет Юпитер, Сатурн, Нептун и спутник Титан.

Этилен играет важную роль в структурной химии, а также в других областях науки; его можно рассматривать как прототип при исследовании спектров, динамики и потенциальных гиперповерхностей многих органических молекул. Поэтому в течение многих лет молекула этилена была предметом многочисленных спектроскопических исследований спектров высокого разрешения как в микроволновой, так и в инфракрасной областях спектра.

Что касается молекулы C_2D_4 , данный изотополог, а также другие виды дейтерированного этилена должны быть всегда включены в анализ атмосфер других планет. Знание точной колебательно-вращательной структуры спектров молекулы C_2D_4 играет важную роль в такой задаче, как определение правильной многомерной внутримолекулярной потенциальной функции этилена.

1.3. Симметрия молекулы C_2D_4

Молекула C_2D_4 является молекулой типа асимметричного волчка, ее параметр асимметрии $K \cong (2B-A-C)/(A-C) = -0.817$. Каждая молекула имеет определенную группу симметрии, молекула C_2D_4 изоморфна точечной группе симметрии D_{2h} [12] (см. рис.1).

Для удобства читателя элементы симметрии и характеры неприводимых представлений группы D_{2h} представлены в таблице 1 [13]; в последнем столбце представлена симметрия колебательных координат q_λ молекулы C_2D_4 . Из

анализа таблицы 1 можно видеть, что переходы в поглощении допускаются только между колебательными состояниями ($\nu\Gamma$) и ($\nu'\Gamma'$), чьи симметрии Γ и Γ' имеют разные индексы “u” и “g”. Более того, переходы допускаются из основного колебательного состояния только в верхние колебательные состояния типа B_{1u} , B_{2u} или B_{3u} .

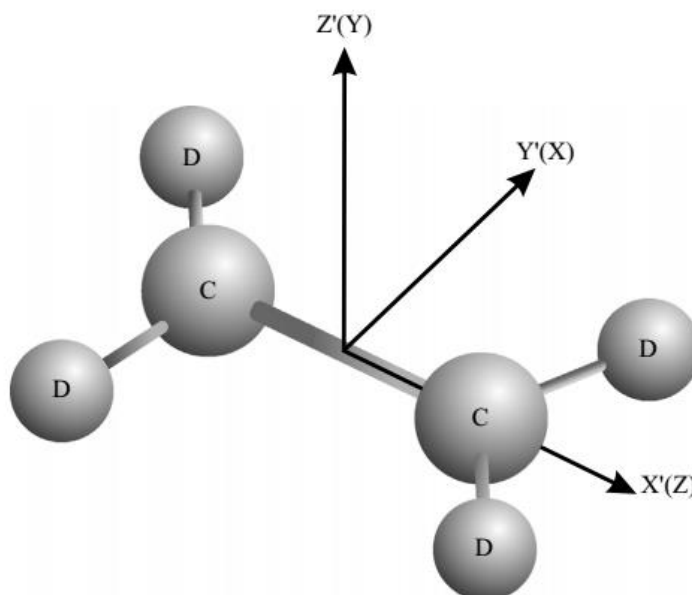


Рисунок 1. Молекула этилена C_2D_4

Таблица 1-Типы симметрии и характеры неприводимых представлений точечной группы D_{2h} .

D_{2h}	E	I	σ_{xy}	σ_{xz}	σ_{yz}	$C_2(x)$	$C_2(y)$	$C_2(z)$	Колеб. коорд.
Ag	1	1	1	1	1	1	1	1	q_1, q_2, q_3
Au	1	-1	-1	-1	-1	1	1	1	q_4
B_{1g}	1	-1	1	-1	-1	-1	-1	1	q_5, q_6
B_{1u}	1	1	-1	1	1	-1	-1	1	q_7
B_{2g}	1	-1	-1	1	-1	-1	1	-1	q_8
B_{2u}	1	1	1	-1	1	1	-1	-1	q_9, q_{10}

V_{3g}	1	1	-1	-1	1	-1	-1	1	
V_{3u}	1	-1	1	1	-1	-1	-1	-1	q_{11}, q_{12}

Переходы в верхнее колебательное состояние A_u-типа запрещены симметрией и могут появляться в спектре только из-за резонансных взаимодействий типа Кориолиса. Переходы из основного колебательного состояния в колебательные состояния типов A_g, V_{1g}, V_{2g} или V_{3g} полностью запрещены свойствами симметрии из-за отсутствия взаимодействий между состояниями “u” и “g” типов.

Из таблицы 1 видно, что:

1. Полосы, образованные переходами V_{1u}←A_g называются полосами с-типа, правила отбора для них имеют вид: $\Delta J=0, \pm 1$ и $\Delta K_a = \text{нечетные}$, $\Delta K_c = \text{четные}$;
2. Полосы, образованные переходами V_{2u}←A_g называются полосами b-типа, правила отбора для них имеют вид: $\Delta J=0, \pm 1$ и $\Delta K_a = \text{нечетные}$, $\Delta K_c = \text{нечетные}$;
3. Полосы, образованные переходами V_{3u}←A_g называются полосами a-типа, правила отбора для них имеют вид: $\Delta J=0, \pm 1$ и $\Delta K_a = \text{четные}$, $\Delta K_c = \text{нечетные}$.

В молекуле этилена C₂D₄ существует 12 нормальных колебаний [14], которые преобразуются в соответствии с неприводимыми представлениями группы D_{2h} (см. табл. 1, рис. 2).

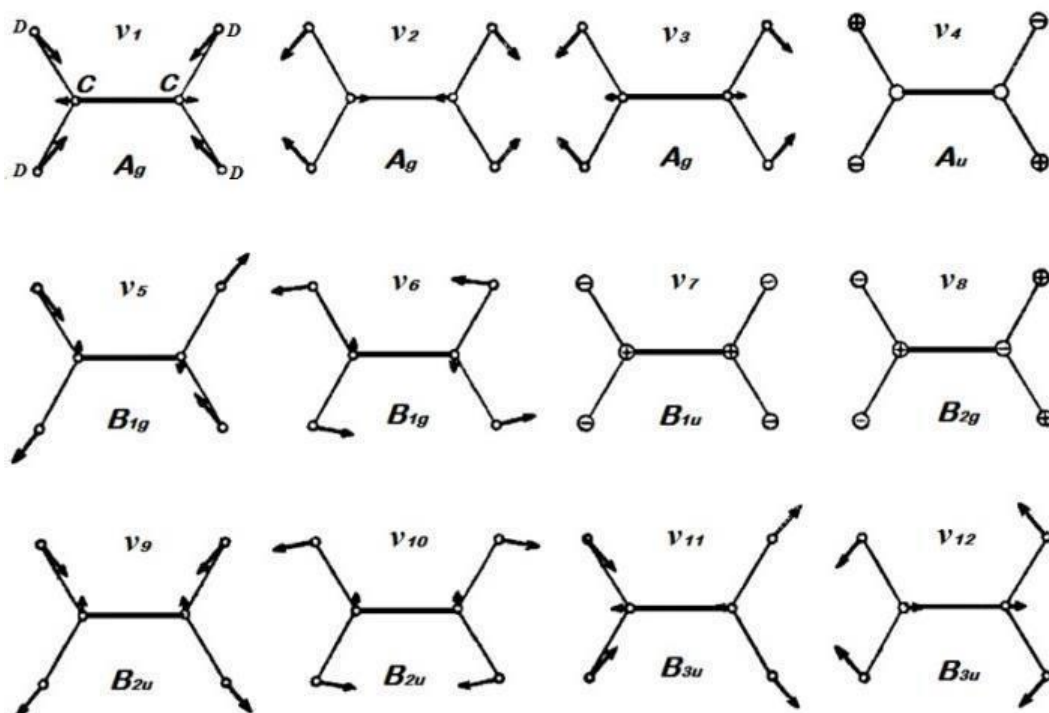


Рисунок 2. Нормальные колебания молекулы C_2D_4 .

1.4. Структура колебательно-вращательного спектра отдельной полосы

Существуют последовательности квантованных вращательных уровней, связанных как с основным, так и с возбужденными колебательными состояниями. Спектры состоят из набора линий, возникающих из-за переходов с одного вращательного уровня в основном колебательном состоянии на один вращательный уровень в колебательном возбужденном состоянии. Линии, соответствующие переходам на уровни одного и того же колебательного состояния, образуют полосу. Вращательные уровни с $J \neq 0$ могут быть заселены. Как следствие, они образуют тонкую структуру колебательных состояний и имеют между собой меньшие разности в энергии, чем последовательные колебательные уровни [15]. Кроме того, поскольку фотон содержит один квант момента количества движения, то при переходах с $\Delta J = \pm 1$ мы соблюдаем принцип сохранения энергии. Это правило выбора вращательных переходов.

Переходы, для которых $\Delta J = +1$, т. е. вращательное квантовое число в основном состоянии меньше, чем вращательное квантовое число в возбужденном состоянии, образуют R-ветвь.

Переходы, для которых $\Delta J = -1$, т. е. вращательное квантовое число в основном состоянии на единицу больше, вращательного квантового числа в возбужденном состоянии, образуют P-ветвь.

Переходы, для которых $\Delta J = 0$, то есть вращательное квантовое число в основном состоянии совпадает с вращательным квантовым числом в возбужденном состоянии, образуют Q-ветвь (рис. 3).

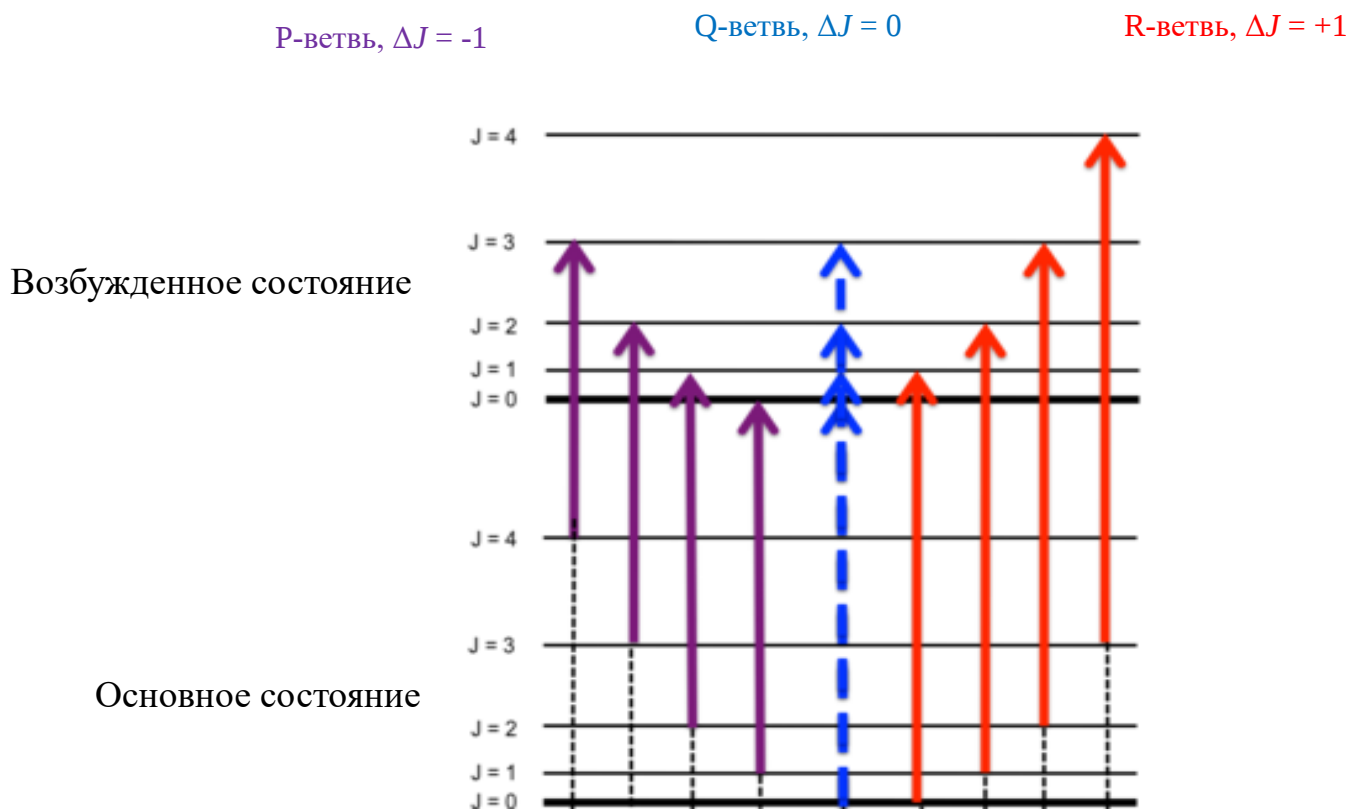


Рисунок 3. Схематическое изображение P-, Q- и R-ветвей

ГЛАВА 2. Методы исследования колебательно-вращательных спектров

2.1. Приближение Борна-Оппенгеймера

В квантовой химии и молекулярной физике приближение Борна – Оппенгеймера (БО) представляет собой предположение о том, что движение атомных ядер и электронов в молекуле может быть разделено. Подход назван в честь Макса Борна и Дж. Роберта Оппенгеймера. В математическом плане это позволяет разбить волновую функцию молекулы на ее электронные и ядерные (колебательные, вращательные) компоненты.

Вычисление энергии и волновой функции молекулы упрощается приближением. Это приближение было предложено в 1927 году в ранний период квантовой механики Борном и Оппенгеймером и все еще необходимо в квантовой химии [16].

Для двухатомной или многоатомной молекулы ее гамильтонова функция H может быть выражена как сумма кинетической энергии T и потенциальной энергии V . В молекуле кинетическая энергия T состоит из вкладов $T_{эл}$ и $T_{яд}$ движений электронов и ядер, соответственно. Потенциальная энергия состоит из двух членов $V_{ээ}$ и $V_{яя}$ из-за кулоновских отталкиваний между электронами и между ядрами, соответственно, и третьего члена $V_{эя}$ из-за сил притяжения между электронами и ядрами:

$$H = T_{эл} + T_{яд} + V_{ээ} + V_{яя} + V_{эя}. \quad (1)$$

Соответственно, они имеют следующий вид:

$$T_{эл} = \frac{-h^2}{2m_i} \sum_i \nabla_i^2, \quad T_{яд} = \frac{-h^2}{2M_A} \sum_A \nabla_A^2, \quad (2)$$
$$V = V_{ээ} + V_{яя} + V_{эя} = \sum_{i>j} \frac{e^2}{r_{ij}} + \sum_{Ai} \frac{Z_A e}{r_{Ai}} - \sum_{A>B} \frac{Z_A Z_B e^2}{R_{AB}},$$

где i, A и B - индексы для электронов и ядер, соответственно.

В приближении Борна-Оппенгеймера полагаем, что полная волновая функция может быть факторизована:

$$\psi(r, R) = \psi_{\text{эл}}(r, R)\chi_N(R), \quad (3)$$

где $\chi_N(R)$ – волновая функция ядер, $\psi_{\text{эл}}(r, R)$ – волновая функция электронов.

Уравнение Шредингера для молекулы имеет вид:

$$H\psi_e\chi_N = (T_{\text{эл}} + T_{\text{яд}})\psi_e\chi_N + V\psi_e\chi_N = E\psi_e\chi_N, \quad (4)$$

$$V = V_{\text{ээ}} + V_{\text{яя}} + V_{\text{эя}},$$

где E – полная энергия молекулы.

Решаем электронное уравнение Шредингера для получения волновой функции электрона и потенциальной энергии:

$$H_{\text{эл}}\psi_{\text{эл}}(r, R) = E_{\text{эл}}\psi_{\text{эл}}(r, R), \quad (5)$$

где $E_{\text{эл}}$ – электронная энергия, которая состоит из $T_{\text{эл}}$, $V_{\text{ээ}}$ и $V_{\text{эя}}$.

Учитывая, что:

$$\begin{aligned} \nabla_i^2\psi_{\text{эл}}\chi_N &= \chi_N\nabla_i^2\psi_{\text{эл}}, \\ \nabla_A^2\psi_{\text{эл}}\chi_N &= \psi_{\text{эл}}\nabla_A^2\chi_N + 2(\nabla_A\psi_{\text{эл}})(\nabla_A\chi_N) + \nabla_A^2\psi_{\text{эл}} \end{aligned} \quad (6)$$

и

$$\left\{ \frac{-h^2}{2m_i} \sum_i \nabla_i^2 - \sum_{Ai} \frac{Z_A e}{r_{Ai}} + \sum_{i>j} \frac{e^2}{r_{ij}} \right\} \psi_{\text{эл}}(r, R) = E_{\text{эл}}\psi_{\text{эл}}(r, R), \quad (7)$$

можно получить:

$$\begin{aligned} \psi_{\text{эл}} \left(\frac{-h^2}{2M_A} \sum_A \nabla_A^2 \chi_N \right) + \chi_N (E_{\text{эл}}\psi_{\text{эл}} + \sum_{A>B} \frac{Z_A Z_B e^2}{R_{AB}}) \\ - \sum_A \frac{-h^2}{2M_A} \{ 2(\nabla_A\psi_{\text{эл}})(\nabla_A\chi_N) - \chi_N \nabla_A^2\psi_{\text{эл}} \} = E\psi_{\text{эл}}\chi_N. \end{aligned} \quad (8)$$

Можно оценить, что $\nabla_A\psi_e$ и $\nabla_A\chi_N$ принадлежат к одному и тому же порядку величины. Так как $-ih\nabla_i$ – оператор импульса электрона, то

$$\frac{-h^2}{2M_A} \nabla_A^2 \psi_{\text{эл}} \propto \frac{p_e^2}{2M_A} = \left(\frac{m}{M}\right) \frac{p_e^2}{2m} = \left(\frac{m}{M}\right) E_{\text{эл}} \approx 10^{-5} E_{\text{эл}}. \quad (9)$$

Из сказанного выше следует, что вклад $2(\nabla_A \psi_{\text{эл}})(\nabla_A \chi_N) - \chi_N \nabla_A^2 \psi_{\text{эл}}$ можно не учитывать.

Таким образом, уравнение Шредингера для ядер примет вид:

$$H_N \chi_N = E \chi_N, \quad (10)$$

$$H_N = T_{\text{яд}} + V_{\text{яя}} + E_{\text{эл}}.$$

В уравнении (10), $V_{\text{яя}} + E_{\text{эл}} = \sum_{A>B} \frac{Z_A Z_B e^2}{R_{AB}} + E_{\text{эл}} = E$ можно рассматривать как потенциальную энергию ядер.

В качестве примера, на рисунке 4 приведена зависимость энергии взаимодействия ядер от расстояния между ядрами R_{AB} в двухатомной молекуле [9].

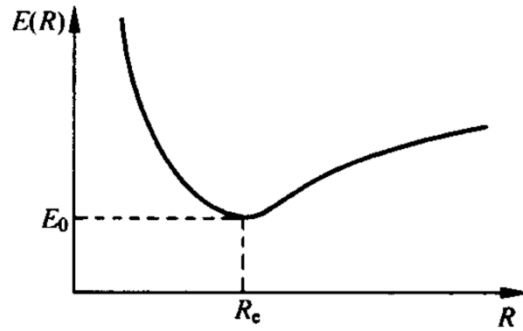


Рисунок 4. Взаимосвязь между потенциальной энергией и расстоянием между ядрами в двухатомной молекуле

Разложим E в ряд в точке равновесия R_e ,

$$E = E_0 + (R - R_e) \left(\frac{\partial E}{\partial R} \right)_{R_e} + \frac{1}{2} (R - R_e)^2 \left(\frac{\partial^2 E}{\partial R^2} \right)_{R_e} + \dots \quad (11)$$

Если положим $E_0 = 0$ и опустим члены более высокого порядка, то

$$E \cong \frac{1}{2} (R - R_e)^2 \left(\frac{\partial^2 E}{\partial R^2} \right)_{R_e} \equiv \frac{1}{2} k (R - R_e)^2. \quad (12)$$

Можно сделать вывод, что простая гармоническая аппроксимация пропорциональна E и $(R - R_e)$ [17].

2.2. Углы Эйлера

Углы Эйлера – это три угла, введенные Леонардом Эйлером для описания ориентации твердого тела относительно фиксированной системы координат [18]. Они также могут представить ориентацию системы отсчета в физике или ориентацию общего базиса в трехмерной линейной алгебре.

Любая ориентация системы может быть достигнута путем составления трех элементарных вращений, то есть вращений вокруг осей системы координат. Углы Эйлера могут быть определены тремя из этих вращений. Они также могут быть определены элементарной геометрией, и геометрическое определение показывает, что трех поворотов всегда достаточно, чтобы достичь любой ориентации.

Система отсчета, также известная как лабораторная система отсчета, является стационарной. Система координат, закрепленная на твердом теле, вращается вместе с твердым телом.

Оси исходной системы обозначены как x, y, z , а оси повернутой системы – как X, Y, Z . Геометрическое определение (иногда называемое статическим) начинается с определения линии узлов как пересечения плоскости xy и XY (его также можно определить как общий перпендикуляр к осям z и Z , а затем записать как векторное произведение $N = z \times Z$). Используя его, три угла Эйлера можно определить следующим образом:

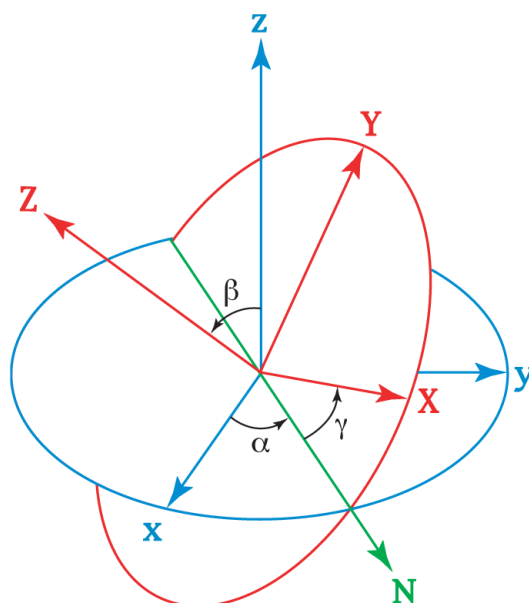


Рисунок 5. Углы Эйлера

Угол α – это угол между осью x и осью N (его условное обозначение x , данный угол также можно определить между осью y и N , называемое условным обозначением y) – угол прецессии.

Угол β – это угол между осью z и осью Z – угол нутации.

Угол γ – это угол между осью N и осью X (условное обозначение x) – угол собственного вращения.

Пространственно-фиксированные положения $\mathbf{R}_n$ связаны с молекулой следующим образом:

$$\mathbf{R}_n = \mathbf{R} + \Phi(\alpha, \beta, \gamma)(\mathbf{r}_n^{(e)} + \boldsymbol{\rho}_n),$$

где $\mathbf{R}$ - положение начала системы координат, связанной с молекулой, а Φ – ортогональная матрица поворота, зависящая от углов Эйлера α, β и γ .

$$Z(\alpha) = \begin{bmatrix} \cos\alpha & \sin\alpha & 0 \\ -\sin\alpha & \cos\alpha & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix},$$

$$X(\beta) = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \cos\beta & \sin\beta \\ 0 & -\sin\beta & \cos\beta \end{bmatrix},$$

$$Z(\gamma) = \begin{bmatrix} \cos\gamma & \sin\gamma & 0 \\ -\sin\gamma & \cos\gamma & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}.$$

$$\Phi(\alpha, \beta, \gamma) = Z(\alpha)X(\beta)Z(\gamma)$$

$$\begin{aligned} &= \begin{bmatrix} \cos\alpha & \sin\alpha & 0 \\ -\sin\alpha & \cos\alpha & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \cos\beta & \sin\beta \\ 0 & -\sin\beta & \cos\beta \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \cos\gamma & \sin\gamma & 0 \\ -\sin\gamma & \cos\gamma & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \\ &= \begin{bmatrix} \cos\alpha\cos\gamma - \cos\beta\sin\alpha\sin\gamma & \sin\alpha\cos\gamma + \cos\beta\cos\alpha\sin\gamma & \sin\beta\sin\gamma \\ -\cos\alpha\sin\gamma - \cos\beta\sin\alpha\cos\gamma & -\sin\alpha\sin\gamma + \cos\beta\cos\alpha\cos\gamma & \sin\beta\cos\gamma \\ \sin\beta\sin\alpha & -\sin\beta\cos\alpha & \cos\beta \end{bmatrix}. \end{aligned}$$

Т. е. :

$$\begin{pmatrix} X \\ Y \\ Z \end{pmatrix} = \begin{bmatrix} \cos\alpha\cos\gamma - \cos\beta\sin\alpha\sin\gamma & \sin\alpha\cos\gamma + \cos\beta\cos\alpha\sin\gamma & \sin\beta\sin\gamma \\ -\cos\alpha\sin\gamma - \cos\beta\sin\alpha\cos\gamma & -\sin\alpha\sin\gamma + \cos\beta\cos\alpha\cos\gamma & \sin\beta\cos\gamma \\ \sin\beta\sin\alpha & -\sin\beta\cos\alpha & \cos\beta \end{bmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix}$$

Кинематические уравнения Эйлера могут быть получены таким образом:

$$\begin{pmatrix} \dot{\alpha} \\ \dot{\beta} \\ \dot{\gamma} \end{pmatrix} = \begin{bmatrix} -\csc\beta\cos\gamma & \csc\beta\sin\gamma & 0 \\ \sin\gamma & \cos\gamma & 0 \\ \cot\beta\cos\gamma & -\cot\beta\sin\gamma & 1 \end{bmatrix} \begin{pmatrix} \omega_x \\ \omega_y \\ \omega_z \end{pmatrix}.$$

2.3. Колебательно-вращательный гамильтониан молекулы C₂D₄

Классическая кинетическая энергия T нелинейной молекулы есть сумма кинетических энергий всех ее ядер с массой m_n :

$$2T = \sum_n m_n \dot{\mathbf{R}}_n^2, \quad (13)$$

где $\dot{\mathbf{R}}_n$ – скорости в пространственно-фиксированной системе координат $\mathbf{e}_x$, $\mathbf{e}_y$, $\mathbf{e}_z$. Молекула вращается вокруг мгновенной оси с угловой скоростью $\boldsymbol{\omega}$. Мгновенные положения ядер задаются формулой $\mathbf{r}_n = \mathbf{r}_n^{(e)} + \boldsymbol{\rho}_n$ в молекулярной системе координат $\mathbf{e}_x$, $\mathbf{e}_y$, $\mathbf{e}_z$, начало которой находится в центре

масс ядер молекулы, ρ_n – отклонения от положений равновесия $r_n^{(e)}$. Запишем условия Экарта:

$$\sum_n m_n \rho_n = 0 \quad \text{и} \quad \sum_n m_n (r_n^{(e)} \times \rho_n) = 0. \quad (14)$$

Мы вычисляем скорости $\dot{R}_n$ на основе угловой скорости ω :

$$\dot{R}_n = \dot{R} + [\omega \times (r_n^{(e)} + \rho_n)] + \dot{\rho}_n. \quad (15)$$

Подставим (15) в (13), получим

$$2T = \dot{R}^2 \sum_n m_n + \sum_n m_n [\omega \times (r_n^{(e)} + \rho_n)]^2 + \sum_n m_n \dot{\rho}_n^2 + \sum_n m_n [\rho_n \times \dot{\rho}_n]. \quad (16)$$

Первое слагаемое представляет собой поступательную энергию молекулы. В дальнейшем мы его учитывать не будем, поскольку поступательное движение полностью отделяется от колебательного и вращательного. Второе слагаемое описывает чисто вращательную энергию, а третье слагаемое – кинетическую энергию колебаний. Последнее слагаемое показывает взаимодействие Кориолиса между вращением и колебанием. Кинетическая энергия (без учета трансляционного движения) удобно выразить как

$$2T = \tilde{\omega} I \omega + \sum_n m_n \dot{\rho}_n^2 + 2\omega \sum_n m_n [\rho_n \times \dot{\rho}_n], \quad (17)$$

где

$$I_{\alpha\beta} = \sum_n m_n [(r_n^{(e)} + \rho_n) \delta_{\alpha\beta} - (r_n^{(e)} + \rho_n)_\alpha (r_n^{(e)} + \rho_n)_\beta] \quad (18)$$

– элементы тензора мгновенных моментов инерции.

Тензор инерции симметричен и положительно определен. Его элементы зависят от отклонений ρ_n от положений равновесия. В общем случае, если

значения моментов инерции вокруг трех осей расположены вдоль осей по обе стороны от центра масс, трехмерный эллипсоид характеризует тензор инерции:

$$I_{\alpha\beta} = \begin{pmatrix} I_{xx} & -I_{xy} & -I_{xz} \\ -I_{yx} & I_{yy} & -I_{yz} \\ -I_{zx} & -I_{zy} & I_{zz} \end{pmatrix} \quad (19)$$

Массово-взвешенные координаты смещения $m_n^{\frac{1}{2}}\rho_{n\alpha}$ преобразуются в $3N$ колебательных координат Q'_k (с ортогональным преобразованием L и с числом ядер N в молекуле). Среди колебательных координат

$$Q'_k = \sum_{n=1}^N L_{n\alpha,k} [m_n^{\frac{1}{2}} \rho_{n\alpha}] \quad (20)$$

$(3N-6)$ являются независимыми нормальными координатами Q_k . Остальные шесть колебательных координат Q'_k удовлетворяют условиям Экарта (14). Коэффициенты $L_{n\alpha,k}$ являются константами и определяют матрицу ортогонального преобразования. Отклонения ядер от их положений равновесия выражаются нормальными координатами:

$$\rho_{n\alpha} = m_n^{-\frac{1}{2}} \sum_{k=1}^{3N-6} L_{n\alpha,k} Q'_k, \quad (21)$$

$$\rho_{n\alpha} = \begin{pmatrix} \rho_{nx} \\ \rho_{ny} \\ \rho_{nz} \end{pmatrix}, \quad (22)$$

$$L_{n\alpha,k} = \begin{pmatrix} L_{nx}^1 & L_{nx}^2 & \dots & L_{nx}^{3N-6} \\ L_{ny}^1 & L_{ny}^2 & \dots & L_{ny}^{3N-6} \\ L_{nz}^1 & L_{nz}^2 & \dots & L_{nz}^{3N-6} \end{pmatrix}. \quad (23)$$

Таким образом, кинетическая энергия колебаний определяется формулой:

$$\sum_n m_n \dot{\rho}_n^2 = \sum_{k=1}^{3N-6} \dot{Q}_k^2. \quad (24)$$

Кориолисово взаимодействие между вращением и колебанием становится равным $2\omega \sum_n m_n [\boldsymbol{\rho}_n \times \dot{\boldsymbol{\rho}}_n]$,

$$m_n [\boldsymbol{\rho}_n \times \dot{\boldsymbol{\rho}}_n] = m_n \begin{vmatrix} i & j & k \\ \rho_{ix} & \rho_{iy} & \rho_{iz} \\ \dot{\rho}_{ix} & \dot{\rho}_{iy} & \dot{\rho}_{iz} \end{vmatrix}. \quad (25)$$

Вводя матрицу M_n^α , $\alpha = x, y, z$

$$M_n^x = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & m_n \\ 0 & -m_n & 0 \end{pmatrix}, M_n^y = \begin{pmatrix} 0 & 0 & -m_n \\ 0 & 0 & 0 \\ m_n & 0 & 0 \end{pmatrix}, M_n^z = \begin{pmatrix} 0 & m_n & 0 \\ -m_n & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (26)$$

получаем

$$m_n [\boldsymbol{\rho}_n \times \dot{\boldsymbol{\rho}}_n] = m_n \begin{vmatrix} i & j & k \\ \rho_{ix} & \rho_{iy} & \rho_{iz} \\ \dot{\rho}_{ix} & \dot{\rho}_{iy} & \dot{\rho}_{iz} \end{vmatrix} = e_\theta \widetilde{\boldsymbol{\rho}}_{n\alpha} M_n^\alpha \boldsymbol{\rho}_{n\alpha}, \quad (27)$$

$$\begin{aligned} \omega \sum_n m_n [\boldsymbol{\rho}_n \times \dot{\boldsymbol{\rho}}_n] &= \omega \sum_n \varepsilon_{\alpha\beta\gamma} \widetilde{\boldsymbol{\rho}}_{n\alpha} M_n^\alpha \boldsymbol{\rho}_{n\alpha} \\ &= \omega_\alpha \sum_{kl} \zeta_{kl}^\alpha Q_k \dot{Q}_l. \end{aligned} \quad (28)$$

Коэффициенты взаимодействия Кориолиса ζ_{kl}^α определяются как

$$\zeta_{kl}^\alpha = -\zeta_{lk}^\alpha = \varepsilon_{\alpha\beta\gamma} \sum_n L_{n\beta,k} L_{n\gamma,l}, \quad (29)$$

где $\varepsilon_{\alpha\beta\gamma}$ – тензор Леви-Чивиты (полностью антисимметричный единичный тензор), т.е. $\varepsilon_{\alpha\beta\gamma} \neq 0$, если α, β, γ все разные, равен +1, если α, β, γ , равные x, y, z, образуют циклическую перестановку и равен -1, если α, β, γ не образуют циклическую перестановку.

Кинетическая энергия теперь выглядит как:

$$2T = \tilde{\omega} I \omega + 2\omega_\alpha \sum_{kl} \zeta_{kl}^\alpha Q_k \dot{Q}_l + \sum_n \dot{Q}_k^2 \quad (30)$$

$$= \sum_{n=1}^{3N-6} (\dot{Q}_k + \sum_{\alpha l} \omega_{\alpha} \zeta_{kl}^{\alpha} Q_l)^2 + \tilde{\omega} I \omega.$$

Чтобы построить классический гамильтониан, мы должны выразить скорости ω и $\dot{Q}_k$ через импульс. Компоненты углового момента P , сопряженного с ω , вычисляются как:

$$P_{\alpha} = \frac{\partial T}{\partial \omega_{\alpha}} = I_{\alpha\beta} \omega_{\beta} + \sum_{kl} \zeta_{kl}^{\alpha} Q_k \dot{Q}_l. \quad (31)$$

Импульсы P_l , сопряженные с $\dot{Q}_l$, равны:

$$P_l = \frac{\partial T}{\partial \dot{Q}_l} = \dot{Q}_l + \omega_{\alpha} \sum_{kl} \zeta_{kl}^{\alpha} Q_k. \quad (32)$$

Выражая $\dot{Q}_l$ из уравнения (32) и подставляя его в уравнение (31), получим:

$$P_{\alpha} = I_{\alpha\beta} \omega_{\beta} + \sum_{kl} \zeta_{kl}^{\alpha} Q_k P_l - \omega_{\beta} \sum_{klm} \zeta_{km}^{\alpha} \zeta_{lm}^{\beta} Q_k Q_l. \quad (33)$$

Удобно вводить аббревиатуры:

$$I'_{\alpha\beta} = I_{\alpha\beta} - \sum_{klm} \zeta_{km}^{\alpha} \zeta_{lm}^{\beta} Q_k Q_l, \quad \pi_{\alpha} = \sum_{kl} \zeta_{kl}^{\alpha} Q_k P_l. \quad (34)$$

Подставим их в уравнение (33). Тогда

$$P - \pi = I' \omega. \quad (35)$$

Решение для ω дает:

$$\omega = I'^{-1}(P - \pi) = \mu(P - \pi), \quad (36)$$

где μ – тензор обратных моментов инерции. Умножая уравнение (31) на ω_{α} и уравнение (32) на $\dot{Q}_l$ и складывая эти два выражения, получаем кинетическую энергию в следующем виде:

$$2T = \tilde{P} \omega + \sum_l P_l \dot{Q}_l. \quad (37)$$

Подстановка ω из уравнения (36) и $\dot{Q}_l$ из уравнения (32), наконец, приводит:

$$2T = (\tilde{\mathbf{P}} - \tilde{\boldsymbol{\pi}})\boldsymbol{\mu}(\mathbf{P} - \boldsymbol{\pi}) + \sum_k \mathbf{P}_k^2. \quad (38)$$

Классический гамильтониан представляет собой сумму кинетической энергии T и потенциальной энергии $V(Q_k)$, где в уравнении (30) скорости $\boldsymbol{\omega}$ и $\dot{Q}_k$ заменяются соответствующими моментами из уравнений (36) и (32):

$$H = \frac{1}{2}(\tilde{\mathbf{P}} - \tilde{\boldsymbol{\pi}})\boldsymbol{\mu}(\mathbf{P} - \boldsymbol{\pi}) + \sum_k \mathbf{P}_k^2 + V(Q_k). \quad (39)$$

При переходе от классического гамильтониана к квантовомеханическому нужно учитывать, что импульсы нужно рассматривать как дифференциальные операторы, действующие в правильном порядке.

Правильная форма квантовомеханического гамильтониана имеет вид:

$$\hat{H} = \frac{1}{2}\mu^{\frac{1}{4}}(\tilde{\mathbf{P}} - \tilde{\boldsymbol{\pi}})\boldsymbol{\mu}\mu^{-\frac{1}{2}}(\hat{\mathbf{P}} - \hat{\boldsymbol{\pi}})\mu^{\frac{1}{4}} + \frac{1}{2}\sum_k \mu^{\frac{1}{4}}\hat{P}_k\mu^{-\frac{1}{2}}\hat{P}_k\mu^{\frac{1}{4}} + V(Q_k), \quad (40)$$

где $\mu = \det |\boldsymbol{\mu}|$ и $\tilde{\mathbf{P}}, \tilde{\boldsymbol{\pi}}$ и $\hat{P}_k$ являются квантовомеханическими операторами. Эта форма гамильтониана справедлива для конечных, но прямолинейных отклонений ядер от их положений равновесия. Все возможные эффекты от движений электронов исключаются из-за того, что гамильтониан можно представить в следующем виде:

$$\hat{H} = \frac{1}{2}\mu^{\frac{1}{4}}(\tilde{\mathbf{P}} - \tilde{\boldsymbol{\pi}})\boldsymbol{\mu}\mu^{-\frac{1}{2}}(\hat{\mathbf{P}} - \hat{\boldsymbol{\pi}})\mu^{\frac{1}{4}} + \frac{1}{2}\sum_k \mathbf{P}_k^2 + V(Q_k) - \frac{1}{8}h^2\mu_{\alpha\alpha}. \quad (41)$$

Последнее слагаемое является вкладом в потенциальную энергию, зависящим от массы. Порядок перемножения слагаемых в первом члене несущественен, так как $\hat{\boldsymbol{\pi}}_\alpha\boldsymbol{\mu}_{\alpha\beta} = \boldsymbol{\mu}_{\alpha\beta}\hat{\boldsymbol{\pi}}_\alpha$. Простых решений для этого гамильтониана нет, поэтому должны быть введены различные приближения [19].

Фактически, когда мы решаем уравнение Шредингера, чтобы определить колебательно-вращательные уровни энергии, обычно используется

гамильтониан в следующем виде:

$$H = \frac{1}{2} \sum_{\lambda} P_{\lambda}^2 + \frac{1}{2} \sum_{\alpha\beta} (J_{\alpha} - G_{\alpha}) \mu_{\alpha\beta} (J_{\beta} - G_{\beta}) + V(Q_{\lambda}), \quad (42)$$

где Q_{λ} – это обобщенные колебательные координаты,

P_{λ} – это оператор импульса, зависящий от Q_{λ} ,

J_{α} – это оператор полного углового момента,

$\mu_{\alpha\beta}$ – это матрица обратных моментов инерции,

$V(Q_{\lambda})$ – это потенциальная функция,

$\Delta_j, \Delta_{jk}, \Delta_k, \delta_K, \delta_{JK}$ – параметры центробежного искажения.

Для анализа полученных из эксперимента данных, была использована модель колебательно-вращательного эффективного гамильтониана, которая была получена на основе использования свойств симметрии молекулы и с использованием теории неприводимых тензорных операторов. Данная модель гамильтониана учитывает наличие резонансных взаимодействий и имеет следующий вид:

$$H^{vib.-rot.} = \sum_{\nu, \tilde{\nu}} |\nu\rangle \langle \tilde{\nu}| H^{\nu\tilde{\nu}} \quad (43)$$

где суммирование ведется по всем колебательным состояниям, а $H^{\nu\tilde{\nu}}$ представлен в следующем виде:

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

W - обозначают матричные элементы диагонального оператора $H^{\nu\tilde{\nu}}$;

F - это оператор Ферми резонансного взаимодействия;

C – соответствует типу Кориолиса взаимодействия.

Если мы разделим оператор гамильтониана по степени оператора углового момента J , диагональные блоки гамильтониана в выражении (43), описывающие вращательную структуру невозмущенных колебательных состояний, взяты в виде оператора Уотсона [22]:

$$\begin{aligned}
 H^{\nu\nu} = & E^{\nu} + \left[A^{\nu} - \frac{1}{2}(B^{\nu} + C^{\nu}) \right] J_z^2 + \frac{1}{2}(B^{\nu} + C^{\nu}) J^2 + \frac{1}{2}(B^{\nu} + C^{\nu}) J_{xy}^2 \\
 & - \Delta_K^{\nu} J_z^4 - \Delta_{JK}^{\nu} J_z^2 J^2 - \Delta_K^{\nu} J^2 - \delta_K^{\nu} [J_z^2, J_{xy}^2]_{+} - 2\delta_J^{\nu} J^2 J_{xy}^2 \\
 & + H_K^{\nu} J_z^6 + H_{KJ}^{\nu} J_z^4 J^2 + H_{JK}^{\nu} J_z^2 J^4 + H_J^{\nu} J^6 \\
 & + \left[h_K^{\nu} J_z^4 + h_{JK}^{\nu} J_z^2 J^2 + h_J^{\nu} J^4, J_{xy}^2 \right]_{+} + L_K^{\nu} J_z^8 + L_{KKJ}^{\nu} J_z^6 J^2 + L_{JK}^{\nu} J_z^4 J^4 \\
 & + L_{JJK}^{\nu} J_z^2 J^6 + L_J^{\nu} J_z^8 + \left[J_K^{\nu} J_z^6 + J_{KJ}^{\nu} J_z^4 J^2 + J_{JK}^{\nu} J_z^2 J^4 + J_J^{\nu} J^6, J_{xy}^2 \right]_{+} \\
 & + P_K^{\nu} J_z^{10} + P_{KKJ}^{\nu} J_z^8 J^2 + P_{KJ}^{\nu} J_z^6 J^4 + P_{JK}^{\nu} J_z^4 J^6 + \\
 & + S_K^{\nu} J_z^{12} + S_{KKJ}^{\nu} J_z^{10} J^2 + \dots,
 \end{aligned}$$

где $J_{xy}^2 = J_x^2 - J_y^2$ и $[A, B]_{+} = AB + BA$, J_{α} ($\alpha = x, y, z$) – компоненты оператора углового момента, определенного в молекулярно-фиксированной системе координат;

E – колебательная энергия, центр полосы,

$A^{\nu}, B^{\nu}, C^{\nu}$ – вращательные постоянные,

$\Delta_J, \Delta_{JK}, \Delta_K, \delta_K, \delta_{JK}$ – параметры центробежного искажения.

2.4. Некоторые сведения из теории изотопозамещения

Изотопы – это атомы, которые имеют одинаковое количество протонов, но различаются по количеству нейтронов, содержащихся в ядре, что дает этим атомам разные массовые числа. Удельная масса каждого атома будет влиять на массу всей молекулы и, как следствие, изменять частоты колебаний этой молекулы. Изотопическое замещение является полезным методом, так как

нормальные моды изотопически замещенной молекулы отличаются от нормальных мод незамещенной молекулы, что приводит к различным соответствующим частотам колебаний для замещенных молекул [20].

При исследовании колебательно-вращательных спектров высокого разрешения многоатомных молекул часто используется теория изотопозамещения. В то же время данная теория является также методом исследования структуры и внутренних свойств молекул. Мы можем получить параметры эффективного гамильтониана или параметры спектральных линий изотопозамещенных модификаций по известным значениям параметров основной модификации [21]. Для получения изотопических соотношений между молекулярными постоянными изотопологов необходимо рассмотреть связь между вращательными, трансляционными и нормальными колебательными координатами основной и изотопозамещенной модификаций [22].

Пусть гамильтонианы

$$\mathcal{H}(x) = \sum_N \frac{P_{N\alpha}^2}{2m_N} + V(x_{Nk}) \quad (44)$$

– это гамильтонианы основной молекулы

$$H(x) = \sum_N \frac{P_{N\alpha}^2}{2m'_N} + V(x_{Nk}) \quad (45)$$

– это гамильтонианы изотополога [23].

Здесь x_{Nk} – координаты N -го ядра в молекуле;

m'_N – массы ядер изотополога;

$V(x_{Nk})$ – потенциальная функция молекулы;

$P_{N\alpha} = i\hbar \frac{\partial}{\partial x_{N\alpha}}$ – оператор импульса.

Оператор $H(x)$ удобно представить в виде:

$$H(x) = \mathcal{H}(x) - \sum_N \frac{m'_N - m_N}{2m'_N m_N} P_{N\alpha}^2. \quad (46)$$

Второе слагаемое в (46) можно интерпретировать как оператор, ответственный за изменения в молекулярном спектре из-за изотопического замещения.

Необходимо выполнить преобразование из декартовых координат в систему координат, зафиксированную в молекуле, как показано в разделе 2.3 данной работы.

Аналогичное преобразование координат:

$$r'_{N\beta} = m_N'^{-1/2} \sum_{\lambda} l'_{N\beta\lambda} Q'_{\lambda}, \quad (47)$$

$$x_{N\alpha} = R'_{\alpha} + \sum_{\beta} K'_{\alpha\beta} r'_{N\beta}, \quad (48)$$

Q'_{λ} – обобщенные колебательные координаты; $x_{N\alpha}$ – компоненты векторов, описывающих положение N -го ядра в пространственной системе координат; $l_{N\beta\lambda}$ в общем случае являются произвольными константами.

Далее рассмотрим переход гамильтониана изотополога $H(x)$ в гамильтониан Уотсоновского типа H^w . В качестве первого шага можно провести любое неособенное преобразование координат и выразить гамильтониан в этих координатах. В результате мы получим промежуточный гамильтониан. Так как совокупность неособенных координат образует группу, таким образом, есть преобразование, которое позволяет перейти от промежуточных координат к набору переменных $R'_{\alpha}, \theta', \varphi', \psi', Q'$, которые удовлетворяют условиям Экарта.

$$\begin{array}{ccc}
H(x) & x_{N\alpha} = R'_\alpha + \sum_\beta K'_{\alpha\beta} \left\{ r'^0_{N\beta} + m'^{-1/2}_N \sum_\lambda l'_{N\beta\lambda} Q'_\lambda \right\} & \longrightarrow H^w = D^{1/2} H D^{-1/2} \\
\swarrow & & \nearrow \\
x_{N\alpha} = R_\alpha + \sum_\beta K_{\alpha\beta} \left\{ r^0_{N\beta} + m_N^{-1/2} \sum_\lambda l_{N\beta\lambda} Q_\lambda \right\} & & \begin{array}{l} R_\alpha = R_\alpha(R', \varphi', Q') \\ \varphi_m = \varphi_m(R', \varphi', Q') \\ Q_\lambda = Q_\lambda(R', \varphi', Q') \end{array} \\
\searrow & & \\
h = H(x) + \Delta h & &
\end{array}$$

Такое промежуточное преобразование координат приобретает особое значение, если вспомнить следующий факт: гамильтониан изотополога $H(x)$ отличается от гамильтониана материнской молекулы $\mathcal{H}(x)$ только в знаменателе в первом члене. Координаты $x_{N\alpha}$ и оператор $P_{N\alpha}$ в обоих гамильтонианах совпадают. Следовательно, оператор изотопозамещенной молекулы $H(x)$ будет иметь тот же спектр собственных значений, что и оператор $\mathcal{H}(x)$ и $H^w(q)$, а собственные функции операторов $H(x)$, $\mathcal{H}(x)$ и $H^w(q)$ будут связаны определенным образом. В то же время, за исключением масс m'_N , все остальные параметры, встречающиеся в $H(x)$, являются параметрами материнской молекулы. Второе преобразование (от $h(x)$ к $H^w(q')$ на схеме) имеет форму:

$$\begin{aligned}
R_\alpha &= R_\alpha(R', \varphi', Q') \\
\varphi_m &= \varphi_m(R', \varphi', Q') \\
Q_\lambda &= Q_\lambda(R', \varphi', Q')
\end{aligned} \tag{49}$$

Если известно выражение для «промежуточного» гамильтониана основной молекулы, мы можем получить изотопические соотношения, сравнив его с классическим оператором.

Таким образом, задача заключается в том, чтобы найти формулы преобразования от нормальных, вращательных и трансляционных координат основной молекулы к соответствующим переменным для изотополога. При этом нет необходимости проводить каждое из преобразований гамильтониана, представленных на схеме, в явном виде.

Обозначим координатную систему, которая определяется условиями Экарта для основной молекулы, как систему 1. Рассмотрим новую систему координат 2, начало которой расположено в центре масс изотополога, а оси параллельны осям старой системы координат для каждой конфигурации ядер. Тогда можно записать:

$$x_{N\alpha} = R'_\alpha + \sum_{\beta} K_{\alpha\beta} \tilde{r}_{N\beta}, \quad (50)$$

где R'_α – радиус-вектор начала координатной системы 2 в пространственной системе координат, $\tilde{r}_{N\beta}$ – векторы положений ядер относительно системы 2.

Введем вектор A , описывающий смещение центра масс основной молекулы относительно центра масс изотопически замещенной молекулы:

$$\tilde{r}_{N\alpha} = r_{N\alpha} + A_\alpha. \quad (51)$$

Здесь $r_{N\alpha}$ – положения ядер относительно центра масс основной молекулы.

Для A_α должны выполняться соотношения:

$$A_\beta = -\frac{1}{M'} \sum_N \mu_N r_{N\beta}, \quad (52)$$

где $\mu_N = m'_N - m_N$ и M' – полная масса изотопозамещенной молекулы. Тогда получим:

$$R_\alpha = R'_\alpha + \sum_{\beta} K_{\alpha\beta} A_\beta, \quad (53)$$

$$R'_\alpha = R_\alpha + \sum_{\beta} K_{\alpha\beta} \sum_N \frac{\mu_N}{M'} \{r_{N\beta}^0 + m_N^{-\frac{1}{2}} \sum_{\lambda} l_{N\alpha\lambda} Q_{\lambda}\} \quad (54)$$

Выражение (54) можно рассматривать как формулу, определяющую три новые координаты в виде функций старых координат $R_\alpha, \varphi_m, Q_\lambda$. Добавим к ним три соотношения

$$\tilde{\varphi}_m = \varphi_m, m = 1, 2, 3, \quad (55)$$

которые определяют новые углы $\tilde{\varphi}_m$ через старые; и также добавим $(3N-6)$ выражений

$$\tilde{Q}_\lambda = Q_\lambda, \lambda = 1, 2, 3, \dots, (3N - 6), \quad (56)$$

которые определяют новые колебательные координаты. Формулы (54)-(56) полностью определяют закон преобразования координат.

Необходимо сделать переход от системы 1 и повернуть ее так, чтобы она совпала с системой 2. Первая часть перехода уже была сделана выше. Рассмотрим вторую часть преобразования, для чего введем матрицу $\mathcal{K}_{\alpha\beta}$, соответствующую повороту системы 1 до ее совпадения с системой 2 для любой мгновенной конфигурации ядер, т.е

$$K'_{\alpha\beta} = K_{\alpha\gamma} \mathcal{K}_{\gamma\beta}, \quad (57)$$

где $\mathcal{K}_{\gamma\beta}$ – функции нормальных координат.

Обобщая сказанное, можно сделать преобразование координат (49). Это преобразование будет полностью задано, если будут определены параметры изотопозамещенной молекулы $r'_{N\beta}{}^0$, $l'_{N\alpha\lambda}$ и коэффициенты $\tilde{K}_{\alpha\beta}{}^0$, $\tilde{K}_{\alpha\beta}{}^\lambda$. Процесс определения коэффициентов $\tilde{K}_{\alpha\beta}{}^0$, $\tilde{K}_{\alpha\beta}{}^\lambda$ подробно описан в [24].

Одной из основных задач колебательно-вращательной спектроскопии является определение констант форм колебаний для различных изотопологов. Определяются данные параметры по следующей схеме: величины $l'_{N\alpha\lambda}$ записываются в виде функции параметров α_μ^λ .

После серии преобразований можно получить, что:

$$\alpha_{\mu}^{\lambda} = \sum_N \mathcal{K}_{\alpha\beta}^0 \frac{m_N^{\frac{1}{2}}}{m'_N{}^{\frac{1}{2}}} l_{N\alpha\lambda} l'_{N\beta\lambda}. \quad (58)$$

Тогда мы можем определить константы форм колебаний $l'_{N\beta\lambda}$ для изотополога:

$$l'_{\mathcal{K}\gamma\lambda} = \mathcal{K}_{\alpha\beta}^0 \frac{m_{\mathcal{K}}^{\frac{1}{2}}}{m'_{\mathcal{K}}{}^{\frac{1}{2}}} l_{\mathcal{K}\alpha\mu} \beta_{\lambda}^{\mu}, \quad (59)$$

где β_{λ}^{μ} – это элементы матрицы, которая обратна матрице $\{\alpha\}$ с элементами α_{μ}^{λ} .

Кроме того, можно показать, что:

$$\alpha_{\lambda}^{\mu} \alpha_{\nu}^{\mu} = \sum_N \frac{m_N}{m'_N} l_{N\alpha\lambda} l_{N\alpha\nu} \equiv A_{\lambda\nu}. \quad (60)$$

Давайте рассмотрим функцию молекулярного потенциала. В координатах q_j она имеет вид:

$$V = \frac{(2\pi c)^2}{2} \sum_N \omega_i^2 q_i^2 + \sum_{ijk} k_{ijk} q_i q_j q_k + \sum_{ijkl} k_{ijkl} q_i q_j q_k q_l + \dots \quad (61)$$

В координатах q'_j , потенциальная функция выглядит так:

$$V = \frac{(2\pi c)^2}{2} \sum_N \omega_i^2 \alpha_i^j \alpha_i^k q'_i q'_k + \sum_{ijk} k'_{ijk} q'_i q'_j q'_k + \dots \quad (62)$$

Следует учесть, что в силу определения координат q'_{λ} , которые являются нормальными, гармоническая часть потенциальной функции должна иметь члены типа $q'_j q'_k$ при $j \neq k$. При этом коэффициенты при q'^2_{λ} в (62) являются квадратами гармонических частот изотополога:

$$\omega_j^2 \delta_{jk} = \omega_i^2 \alpha_i^j \alpha_i^k \quad (63)$$

Формулы (60), (63) можно рассматривать как систему уравнений для определения параметров α_{λ}^{μ} и величин $W'_j = \omega'^2_j$ по известным значениям квадратов гармонических частот $W_i = \omega_i^2$ и элементам $A_{\lambda\nu}$. Из (60) получим:

$$\alpha_{\lambda}^{\mu} = \sum_v A_{\lambda v} \beta_{\mu}^v. \quad (64)$$

Подстановка формулы (64) в (63) дает

$$\delta_{jk} = \sum_{il} A_{\lambda l} \beta_j^l W_i \alpha_k^i. \quad (65)$$

Умножая обе части этого выражения на α_m^j и суммируя по j , находим:

$$\sum_{il} A_{\lambda l} W_i \alpha_k^i = \alpha_l^k W_k'. \quad (66)$$

Это линейное уравнение для определения параметров α_{λ}^{μ} . Как известно, данная система уравнений имеет нетривиальное решение только при условии

$$\det\{AW - \omega'^2 E\} = 0. \quad (67)$$

Здесь A – квадратная симметричная матрица с элементами $A_{\lambda\mu}$, W – диагональная матрица с элементами $\omega_{\lambda}^{\prime 2}$, ω_{λ}' – гармонические частоты изотополога, E – единичная матрица. Вычислив отсюда гармонические частоты изотополога и подставив их в формулу (66), можно определить искомые параметры. Следовательно, решив приведенные выше уравнения, мы найдем параметры $l'_{N\beta\lambda}$.

Также можно определить параметры ангармоничности, кориолисовы постоянные и другие параметры эффективного гамильтониана изотополога. В качестве примера приводим некоторые соотношения:

$$\alpha_{\lambda}^{\prime\alpha\beta} = \left(\frac{m'}{m}\right)^{1/2} \alpha_{\lambda}^{\alpha\beta}, \quad (68)$$

$$\zeta_{\lambda\mu}^{\prime\alpha} = \zeta_{\lambda\mu}^{\alpha}, \quad (69)$$

$$k_{\lambda\dots\mu}' = \left(\frac{m'}{m}\right)^{n/2} k_{\lambda\dots\mu}. \quad (70)$$

2.5. Метод комбинационных разностей

Для определения энергетических вращательных уровней возбужденного колебательного состояния из колебательно-вращательных спектров используются так называемые комбинационные разности. Всегда есть несколько переходов с нескольких вращательных уровней основного колебательного состояния на один вращательный уровень возбужденного состояния (см. рис. 6). Если вращательные уровни основного колебательного состояния и положения линий известны, то нетрудно определить вращательные уровни возбужденного колебательного состояния.

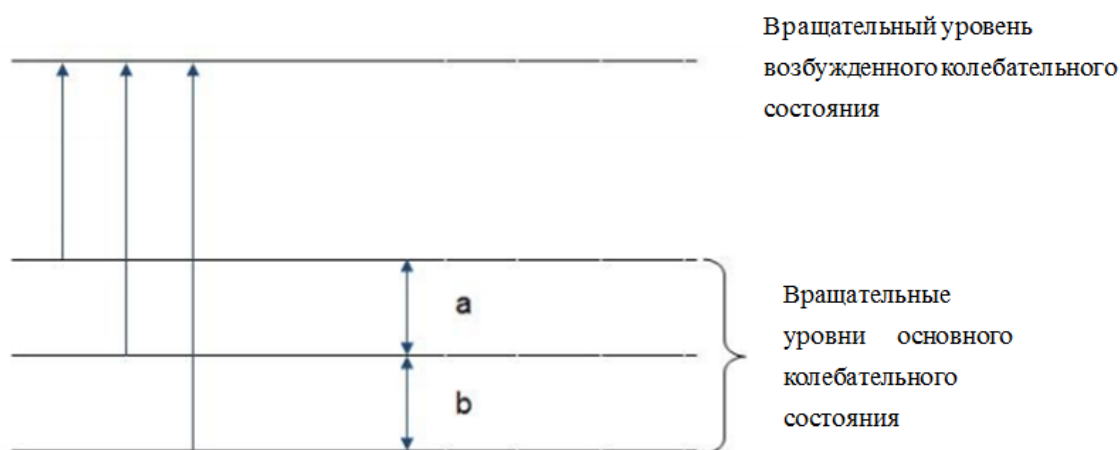


Рисунок 6. Метод комбинационных разностей – переходы с нескольких вращательных уровней основного колебательного состояния на один вращательный уровень возбужденного состояния

Мы точно знаем структуру основного колебательного состояния и, следовательно, расстояния между уровнями a и b. Можем сделать так называемую «гребенку», где расстояния между линиями соответствуют расстояниям между вращательными уровнями основного состояния (см. рис. 7).

Далее мы используем программу, которая находит линии, совпадающие с зубчиками "гребенки".

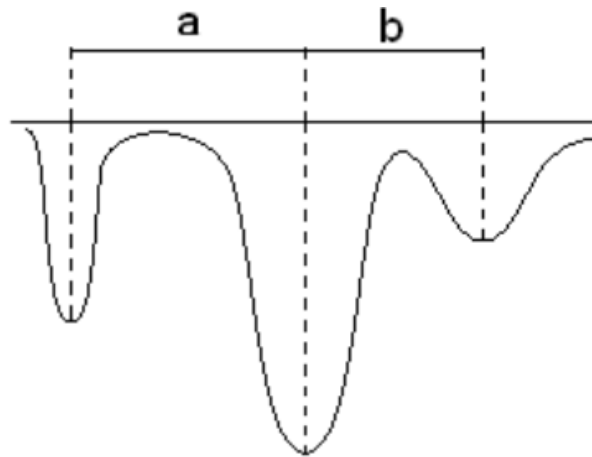


Рисунок 7. Метод комбинационных разностей

Практически невозможно достичь полного совпадения спектральных линий в процессе идентификации, поэтому указана точность поиска (например, 0,001) (см. рис. 8).

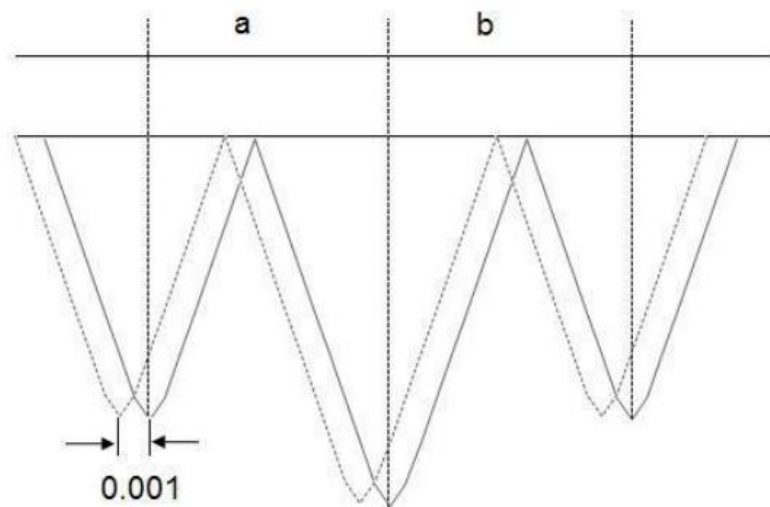


Рисунок 8. Отклонение центра линии спектра

После этого мы проверяем варианты, которые программа нашла, и выбираем из них оптимальный.

ГЛАВА 3. Анализ данных и обработка результатов

3.1. Детали эксперимента

Спектры молекулы C_2D_4 были зарегистрированы в Техническом университете Брауншвейга (г. Брауншвейг, Германия) с помощью инфракрасного (FTIR) спектрометра Bruker IFS 120 в сочетании с ячейкой Уайта из нержавеющей стали с длиной основания 1 м. Номинальное разрешение прибора, определяемое с помощью метода $1/d_{MOPD}$ (максимальная разность оптических путей = 4,86 м), составило $0,00206\text{ см}^{-1}$. Экспериментальные условия, при которых были зарегистрированы исследуемые спектры, представлены в таблице 2.

Таблица 2 - Экспериментальные условия для спектров молекулы C_2D_4

Спектр №	I	II	III
Диапазон / см^{-1}	600–1150	3100–3300	3100–3300
Разрешение/ см^{-1}	0,0020–0,0030	0,003	0,003
Число сканирований	430	500	450
Источник	Globalar	Globalar	Globalar
Детектор	MCT	InSb	InSb
Оптическая длина пути / м	4	24	24
Температура / К	$298 \pm 0,5$	300	300
Давление / Па	150	1,05	6,33

В пределах спектрального диапазона $600\text{--}1150\text{ см}^{-1}$ (спектр I) расположена полоса поглощения ν_{12} с центром около 1495 см^{-1} (рис. 9).

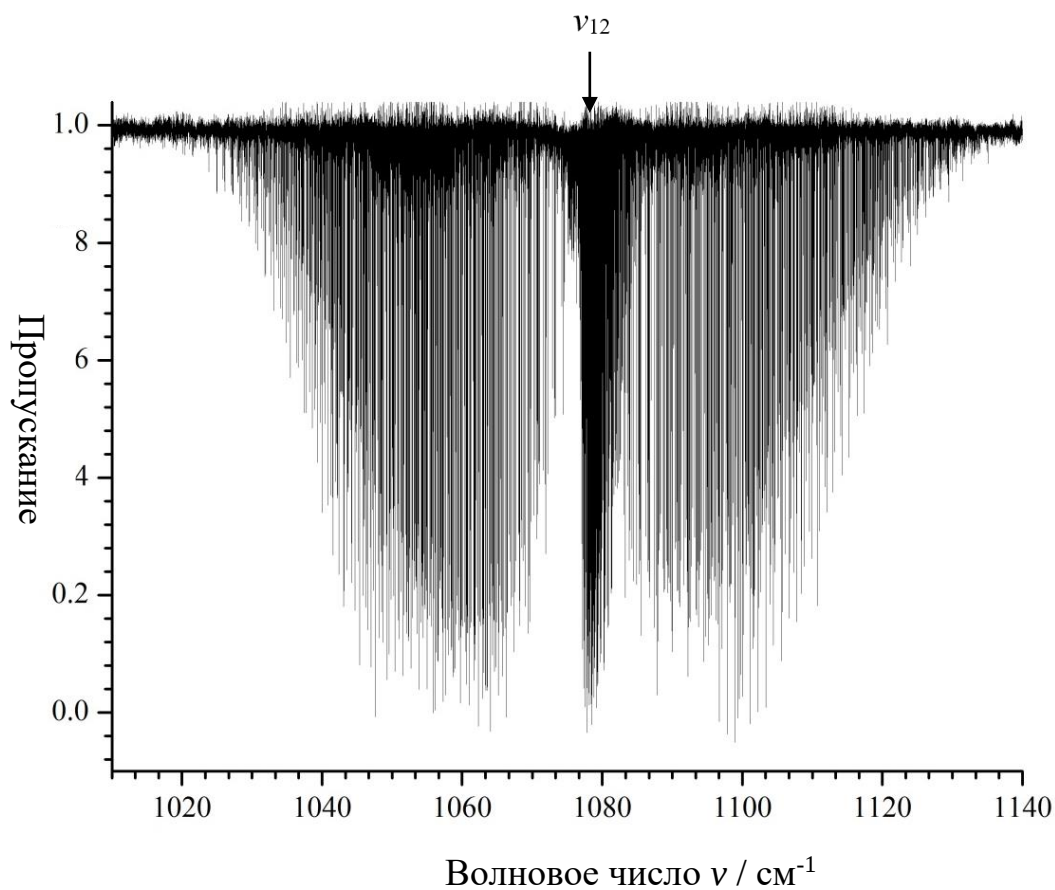


Рисунок 9. Экспериментально зарегистрированный спектр молекулы

C_2D_4 в районе полосы ν_{12}

В диапазоне $3100\text{--}3300\text{ см}^{-1}$ (спектры II и III) расположена комбинационная полоса $\nu_6+\nu_{11}$ с центром около 3202 см^{-1} (рис. 10).

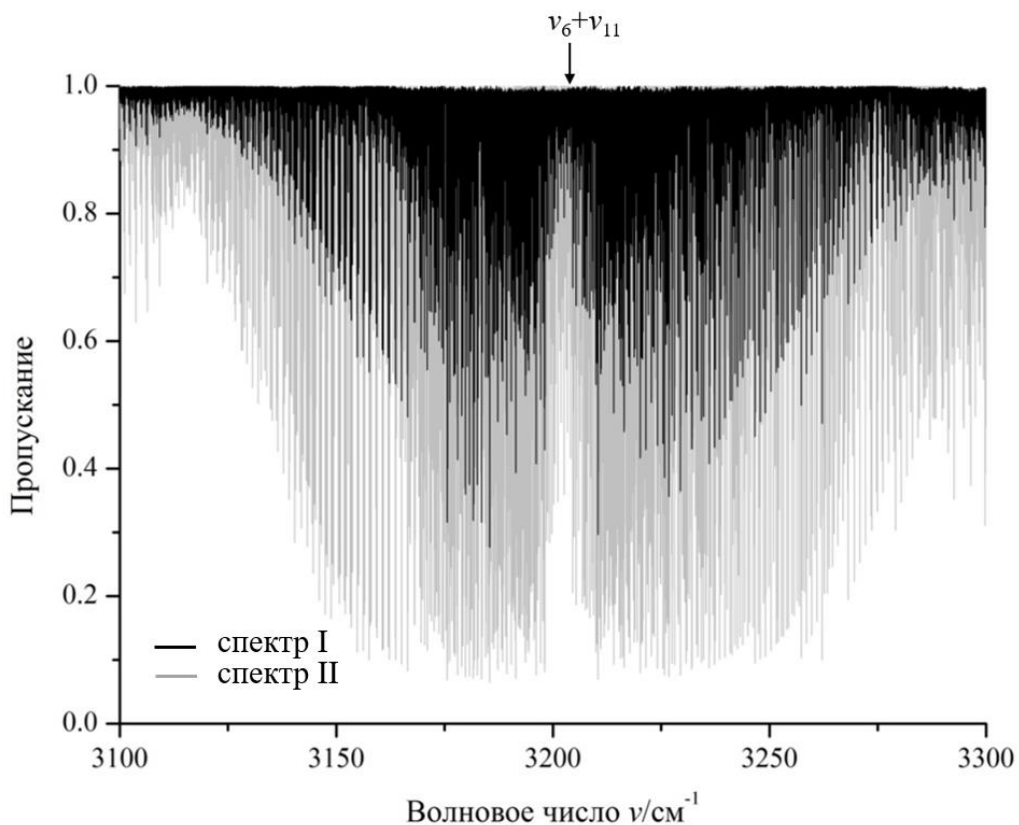


Рисунок 10. Экспериментально зарегистрированный спектр молекулы C_2D_4 в районе полосы $\nu_6+\nu_{11}$

3.2. Интерпретация Фурье-спектров молекулы C_2D_4

В результате анализа спектра поглощения фундаментальной полосы ν_{12} молекулы C_2D_4 на основе метода комбинационных разностей, было найдено более 800 переходов, на основе которых было определено более 300 колебательно-вращательных энергий состояния ($\nu_{12}=1$) до следующих максимальных значений квантовых чисел $J^{\max}=27$, $K_a^{\max}=10$.

Впервые для комбинационной полосы $\nu_6+\nu_{11}$ было найдено более 1500 переходов и было определено более 450 колебательно-вращательных энергий состояния ($\nu_6=\nu_{11}=1$) до максимальных значений квантовых чисел $J^{\max}=25$, $K_a^{\max}=17$.

Чтобы представить процесс исследования более четко, ниже мы покажем некоторые результаты, а именно положения идентифицированных линий. В процессе анализа мы сопоставляем положение линии и квантовые числа верхнего и нижнего состояний, между которыми происходит обмен энергией. На рисунке 11 мы приводим для серии 1 1 0 – Р-ветвь (треугольники), для серии 1 1 1 – Q (квадраты) и R-ветви (круги). Более детально структура каждой ветви представлена на рисунках 12, 13, 14.

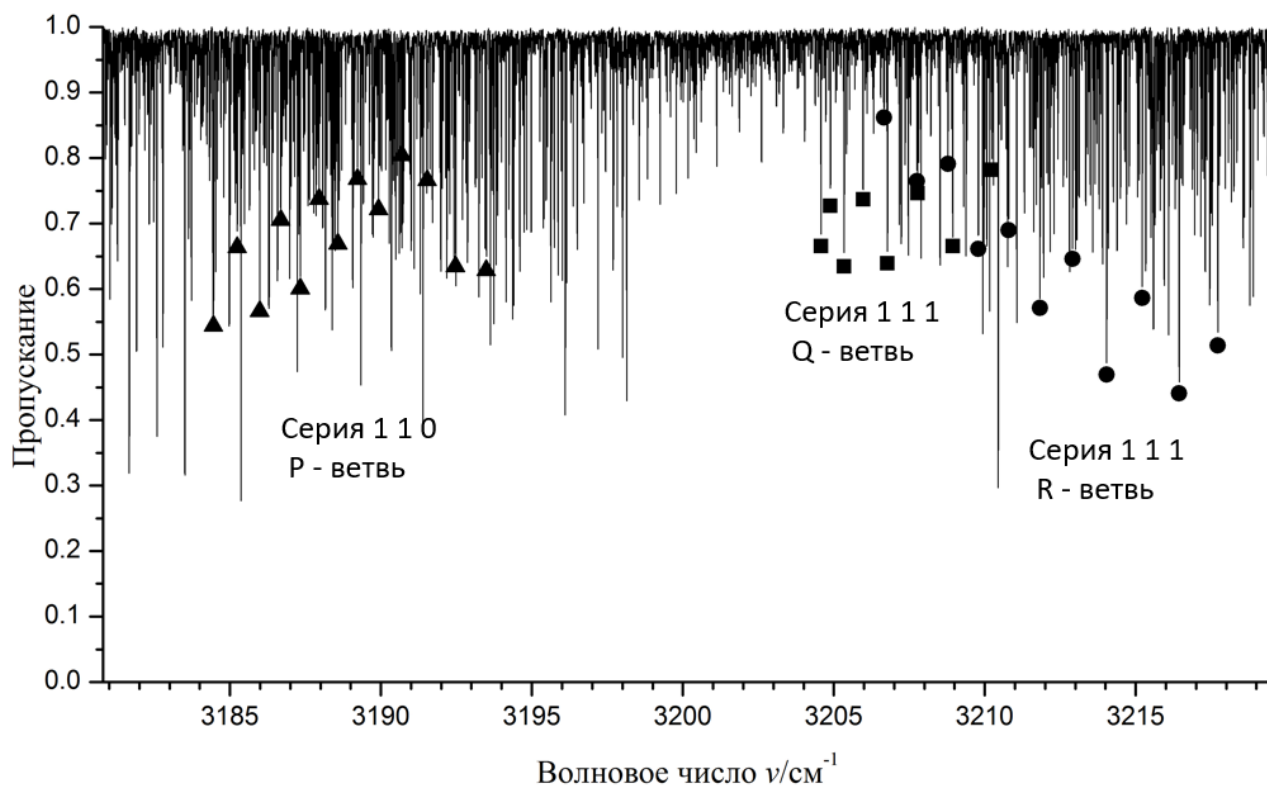


Рисунок 11. Иллюстрация структуры спектра: Р, Q и R -ветви

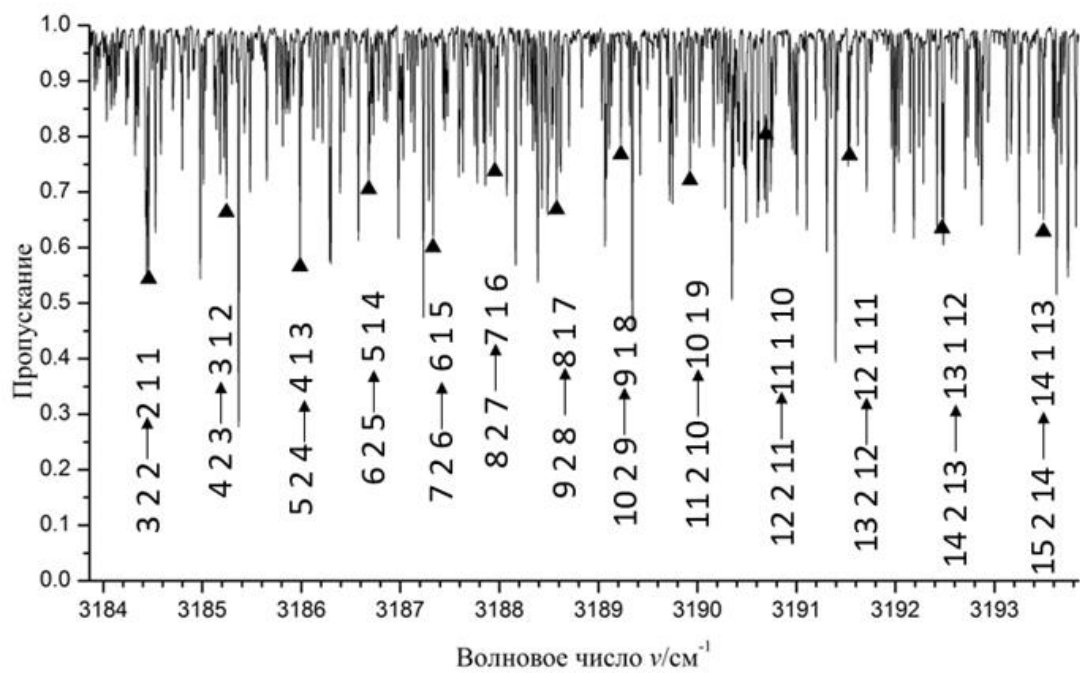


Рисунок 12. Р – ветвь серии 1 1 0

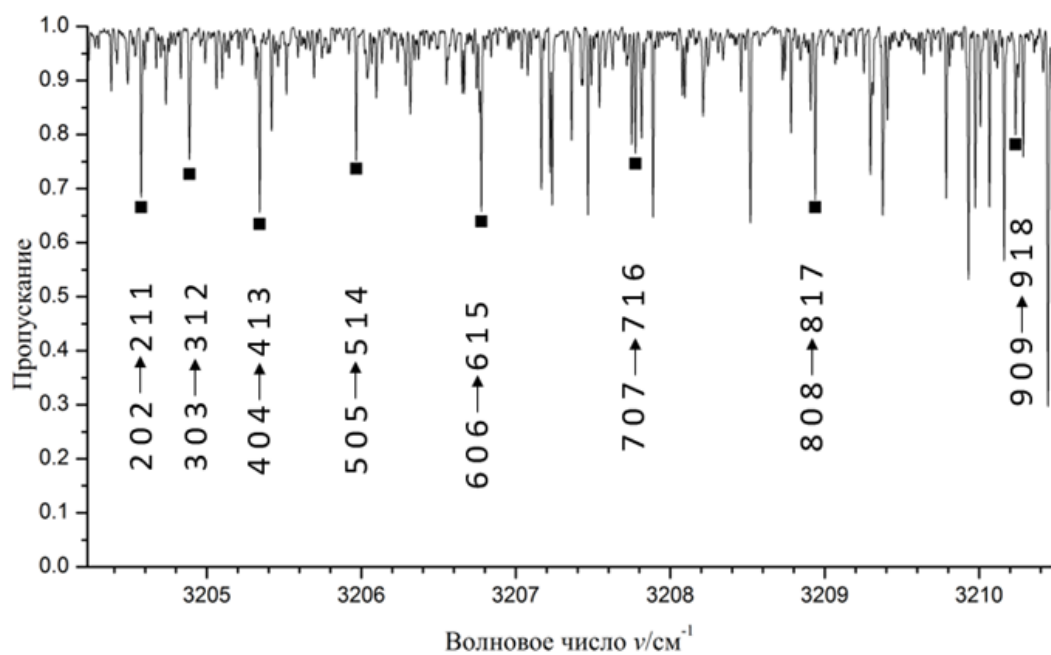


Рисунок 13. Q-ветвь серии 1 1 1

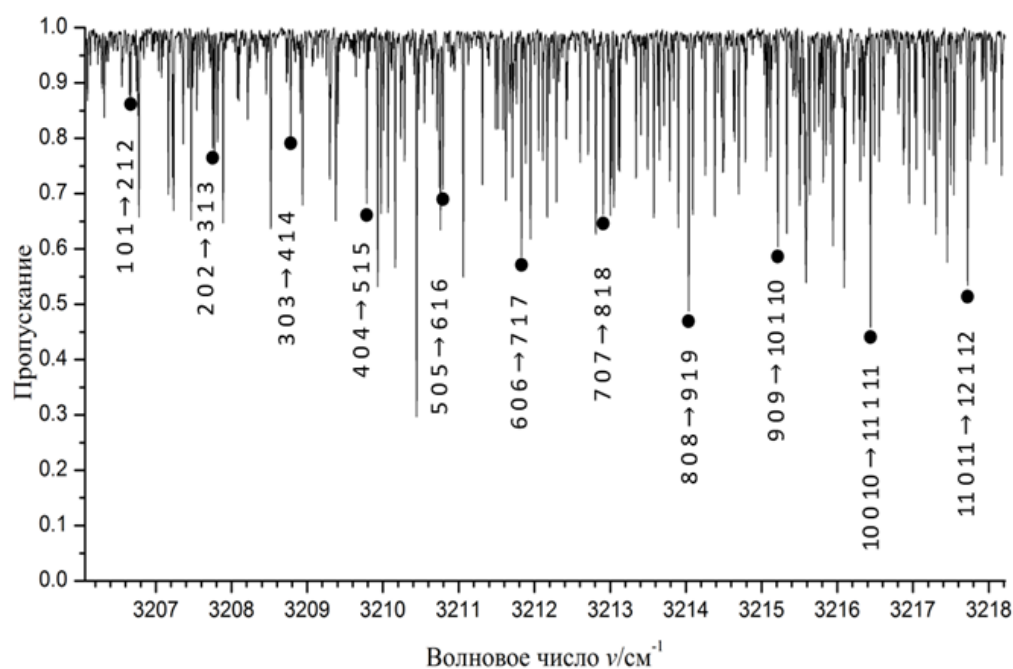


Рисунок 14. R-ветвь серии 1 1 1

Часть данных, извлеченных из спектров высокого разрешения, представлена в приложении.

3.3. Определение спектроскопических параметров полос ν_{12} и $\nu_6 + \nu_{11}$ молекулы C_2D_4

Полученные экспериментальные данные для полос ν_{12} и $\nu_6 + \nu_{11}$ были использованы для определения спектроскопических параметров рассматриваемых состояний. В качестве иллюстрации правильности проведенной интерпретации спектров на рисунке 15 приведены редуцированные значения энергии состояния ($\nu_{12}=1$).

Редуцированные энергии E' рассчитывались с использованием значений параметров основного состояния $B = 0,73492916 \text{ см}^{-1}$, $C = 0,56352243 \text{ см}^{-1}$ по

формуле $E' = E - \frac{B+C}{2}J(J+1)$. Числа 1, 2, 3, ... на рисунке 2 обозначают квантовые числа K_a колебательно-вращательных состояний.

В результате процедуры варьирования были получены параметры эффективного гамильтониана состояний ($\nu_{12}=1$) и ($\nu_6=\nu_{11}=1$) молекулы C_2D_4 , которые приведены в таблице 3. Данный набор параметров воспроизводит исходные экспериментальные данные с точностью $d_{rms} = 1,2 \cdot 10^{-3} \text{ см}^{-1}$ и $d_{rms} = 5,3 \cdot 10^{-3} \text{ см}^{-1}$ для полос ν_{12} и $\nu_6+\nu_{11}$ соответственно.

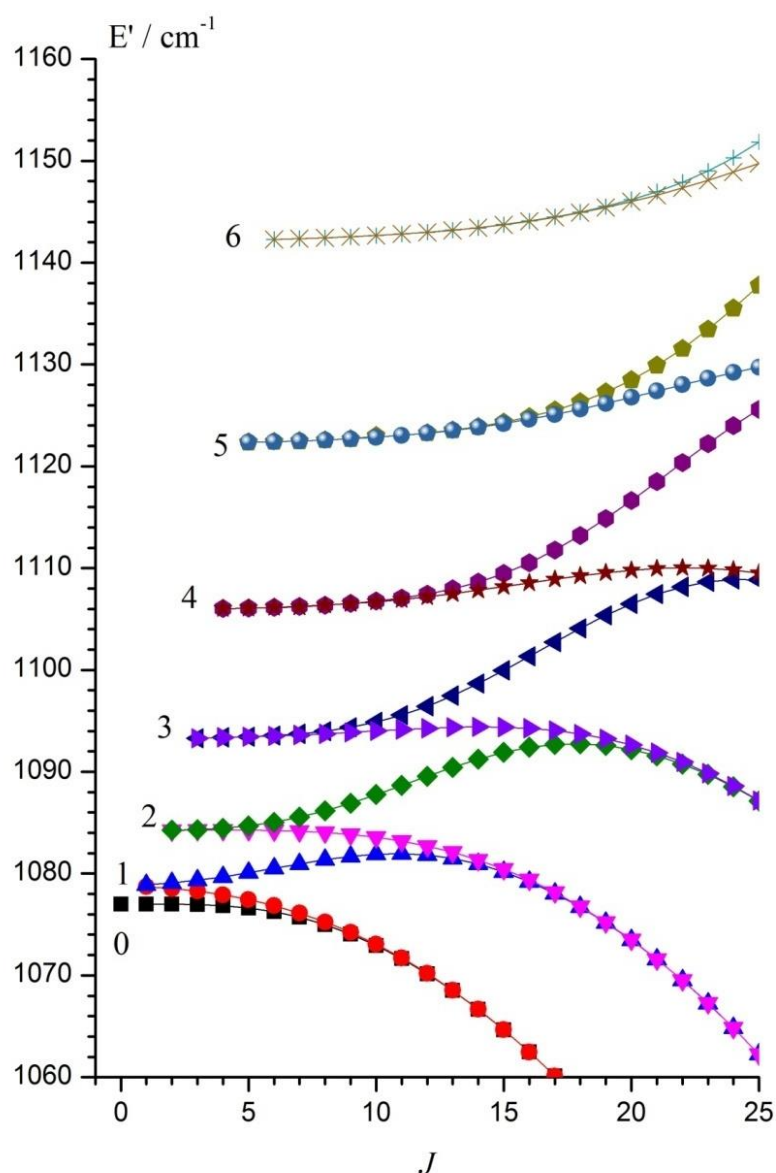


Рисунок 15. Энергетическая структура состояния ($\nu_{12}=1$) молекулы C_2D_4 .

Таблица 3 –Параметры эффективного гамильтониана состояний ($v_{12}=1$) и ($v_6=v_{11}=1$) молекулы C_2D_4

Параметр	($v_{12}=1$)	($v_6=v_{11}=1$)
E	1076,9832(13)	3202,4762(16)
A	2,464104(31)	2,47204(24)
B	0,7398053(89)	0,735247(60)
C	0,5627940(89)	0,571120(66)
$\Delta_J \times 10^4$	0,008511(10)	0,00903(21)
$\Delta_{Jk} \times 10^4$	0,02134 (88)	0,0237(32)
$\Delta_k \times 10^4$	0,24895(34)	0,2644(14)
$\delta_J \times 10^5$	0,02387(75)	0,0104(17)
$\delta_k \times 10^5$	0,4738(27)	0,378(61)
$d_{rms} \times 10^3$	1,2	5,3

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.

таблица 4. Перечень работ и продолжительность их выполнения

Этапы работы	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%

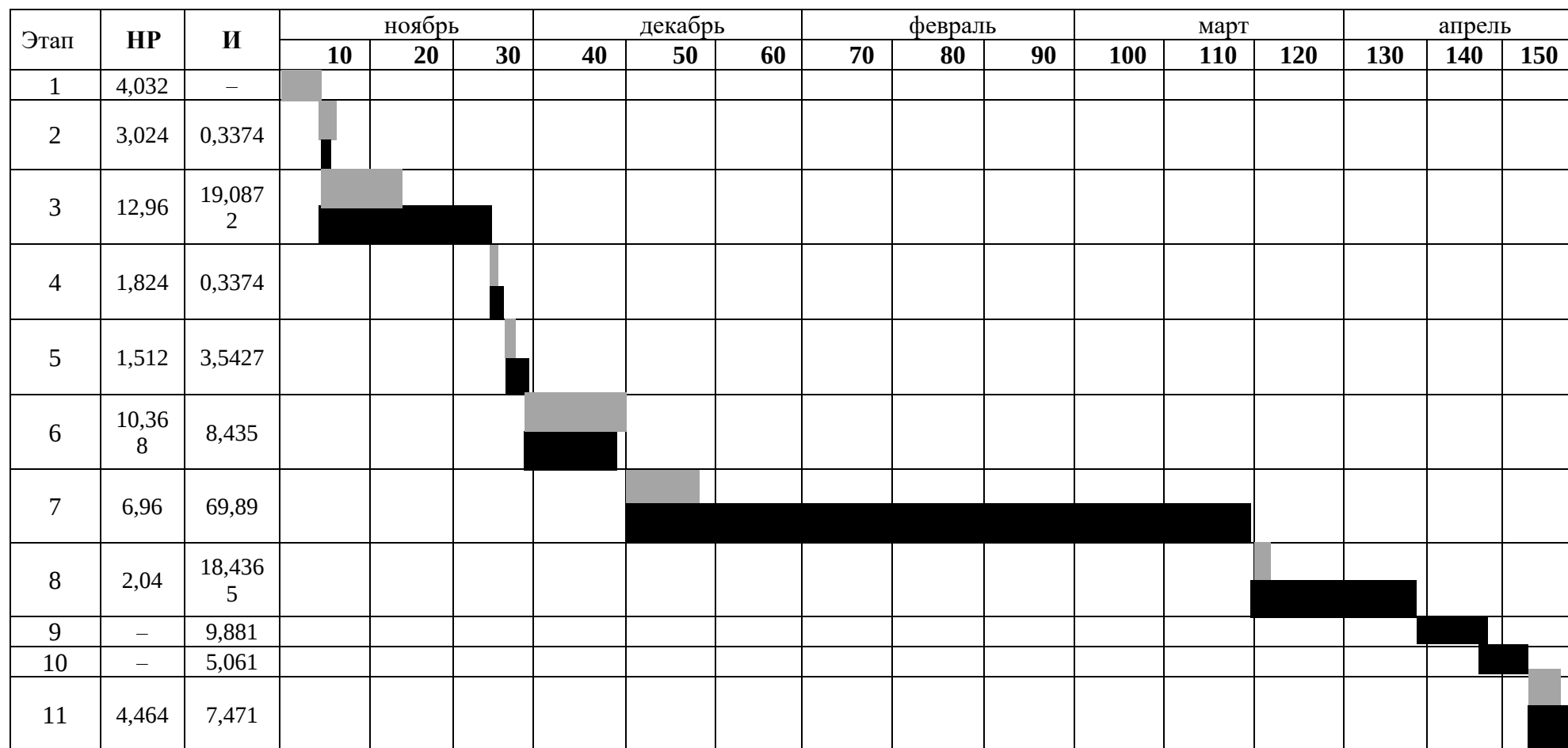
		И – 70%
Выбор принципиальной схемы устройства	НР, И	НР – 100% И – 80%
Получение экспериментальных результатов	НР, И	НР – 10% И – 100%
Расчет принципиальной схемы устройства	НР, И	НР – 10% И – 90%
Оформление расчетно-пояснительной записки	И	И – 100%
Оформление графического материала	И	И – 100%
Подведение итогов	НР, И	НР – 60% И – 100%

Таблица 0

Трудозатраты на выполнение проекта

Этап	Исполнители	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 тематике	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 6

Линейный график работ

НР – И

5.2 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.

5.2.1 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. 7

Таблица 7

Расчет затрат на материалы

п/п	Наименование оборудования	Кол-во единиц оборудования	Цена единицы оборудования, руб.	Общая стоимость оборудования, руб.
.	бумага	2	200	400
Итого:				400

Допустим, что ТЗР составляют 5 % от отпускной цены материалов, тогда расходы на материалы с учетом ТЗР равны $C_{\text{мат}} = 400 * 1,05 = 420 \text{ руб.}$

5.2.2 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:

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

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 $K_{\text{и}} = 1,62$.

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

Таблица 8

Заплаты на заработную плату

Исполнитель	Оклад, руб./мес.	Среднедневная ставка, руб./раб.день	Затраты времени, раб.дни	Коэффициент	Фонд з/платы, руб.
НР	27230	1,089.2	39.32	1.699	72,763.657456
И	15470	616	118.24	1.62	117,994.0608
Итого:					190,757.71825

5.2.3 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. $C_{\text{соц.}} = C_{\text{зп}} \cdot 0,3$. Итак, в нашем случае $C_{\text{соц.}} = 190,757.718256 \cdot 0,3 = 57,227.3154768$ руб.

5.2.4 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:

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

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

$Ц_{\text{э}}$ – тариф на 1 кВт·час;

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

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

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

$$t_{об} = T_{РД} * K_t, \quad (5.8)$$

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

Мощность, потребляемая оборудованием, определяется по формуле:

$$P_{ОБ} = P_{ном.} * K_C \quad (5.9)$$

где $P_{ном.}$ – 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.

Таблица 9

Затраты на электроэнергию технологическую

Наименование оборудования	Время работы оборудования $t_{об}$, час	Потребляемая мощность $P_{об}$, кВт	Затраты $\mathcal{E}_{об}$, руб.
Персональный компьютер	945.92	0,3	1631.14445
Итого:			1631.14445

5.2.5 Расчет амортизационных расходов

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

Используется формула

$$C_{AM} = \frac{H_A * C_{OB} * t_{pf} * n}{F_D}, \quad (5.10)$$

где H_A – годовая норма амортизации единицы оборудования;

C_{OB} – 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_D – 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_{AM} . Например, для ПК в 2019 г. (301 рабочий дней при шестидневной рабочей неделе) можно принять $F_D = 301 * 8 = 2408$ часа;

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

n – число задействованных однотипных единиц оборудования.

$H_A = 0,4$

$$C_{OB} = 40000 \text{ руб}$$

$$t_{pf} = 800 \text{ час}$$

$$n = 1$$

$$F_D = 301 * 8 = 2408 \text{ час}$$

$$C_{AM} = \frac{H_A * C_{OB} * t_{pf} * n}{F_D} = 5315,6 \text{ руб}$$

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

Расходы по данному пункту отсутствует

5.2.7 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.

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

Для нашего примера это

$$C_{\text{проч.}} = (420 + 190,757.71825 + 57,227.3154768 + 1631.14445 + 5315.6) \cdot 0,1 = 25,535.17781768 \text{ руб.}$$

5.2.8 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 10
Смета затрат на разработку проекта

Статья затрат	Условное обозначение	Сумма, руб.
Материалы и покупные изделия	$C_{\text{мат}}$	420
Основная заработная плата	$C_{\text{зп}}$	190,757.71825
Отчисления в социальные фонды	$C_{\text{соц}}$	57,227.3154768
Расходы на электроэнергию	$C_{\text{эл.}}$	1631.14445
Амортизационные отчисления	$C_{\text{ам}}$	5315.6

²Тема условная

Непосредственно учитываемые расходы	$C_{\text{нр}}$	0
Прочие расходы	$C_{\text{проч}}$	25,535.17781768
Итого:		280,886.95599448

Таким образом, затраты на разработку составили $C = 280,886.95599448$ руб.

5.2.9 Расчет прибыли

Прибыль следует принять в размере $5 \div 20 \%$ от полной себестоимости проекта. В нашем случае она составляет руб. 28,088.695599448 (10 %) от расходов на разработку проекта.

5.2.10 Расчет НДС

НДС составляет 20% от суммы затрат на разработку и прибыли. В нашем случае это $(280,886.95599448 + 28,088.695599448) * 0,2 = 308975.651593928$

5.2.11 Цена разработки НИР

Цена равна сумме полной себестоимости, прибыли и НДС, в нашем случае $C_{\text{НИР(КР)}} = 280,886.95599448 + 28,088.695599448 + 308975.651593928 = 617,951.303187856$ руб.

5.3 Оценка экономической эффективности проекта

Так как результаты эксперимента не имеют промышленного применения и все еще находятся на стадии исследований, то оценка его экономической эффективности не возможна.

ГЛАВА 5. СОЦИАЛЬНАЯ ОТВЕТСТВЕННОСТЬ

Введение

Данная работа посвящена исследованию колебательно-вращательного спектра многоатомной молекулы C_2D_4 .

Данная научно-исследовательская работа выполнялась в помещении отделение экспериментальной физики ИШЯТ третьего корпуса Томского Политехнического университета в кабинете 126. Помещение оснащено видео-дисплейными терминалами(ВДТ), персональными электронно-вычислительными машинами(ПЭВМ), компьютерными столами, стульями 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.

5.1 Техногенная безопасность

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 Анализ вредных производных факторов окружающей работающей среды

К вредным факторам на производстве относятся: физические факторы (Повышенная или пониженная температура воздуха рабочей зоны,

повышенный уровень электромагнитных излучений, монотонный режим работы).

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.

Для создания оптимальных значений микроклимата в помещении необходимо, чтобы системы отопления, вентиляции и кондиционирования соответствовали СНиП 41-01-2003 [28].

Оптимальные условия микроклимата в лаборатории приведены в таблице 2, согласно СанПиН 2.2.4.548–96 [29].

Оптимальные и допустимые значения параметров микроклимата приведены в таблице 11

Таблица 11 Оптимальные и допустимые нормы микроклимата

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	Допус тимая, не
		Верхняя	Нижняя				

		Пост.	Не пост.	Пост.	Не пост.			более	более
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

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.

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.

Уровень электромагнитных излучений на рабочем месте оператора ПЭВМ является вредным фактором производственной среды, величины параметров которого определяются СанПиН 2.2.2/2.4.1340-03[4]. Основными источниками электромагнитных излучений в помещениях для работы операторов ПЭВМ являются дисплеи компьютеров и мобильных устройств, сеть электропроводки, системный блок, устройства бесперебойного питания, блоки питания.

Воздействие электромагнитных полей на человека зависит от напряженностей электрического и магнитного полей, потока энергии, частоты колебаний, размера облучаемой поверхности тела и индивидуальных особенностей организма.

Нарушения в организме человека при воздействии электромагнитных полей незначительных напряжений носят обратимый характер. При воздействии полей, имеющих напряженность выше предельно допустимого уровня, развиваются нарушения со стороны нервной, сердечно–сосудистой систем, органов пищеварения и некоторых биологических показателей крови. Допустимые уровни воздействия электрического поля представлены в таблице 12

Таблица 12 Допустимые уровни воздействия электрического поля

ПДУ, кВ/м	Условия облучения
,5	внутри жилых зданий
,0	на территории зоны жилой застройки
,0	в населенной местности вне зоны жилой застройки; (земли городов в пределах городской черты в границах их перспективного развития на 10 лет, пригородные и зеленые зоны, курорты, земли поселков городского типа в пределах поселковой черты и сельских населенных пунктов в пределах черты этих пунктов) а также на территории огородов и садов;
	на участках пересечения воздушных линий электропередачи с

0,0	автомобильными дорогами 1 – IV категорий;
5,0	в ненаселенной местности (незастроенные местности, хотя бы и часто посещаемые людьми, доступные для транспорта, и сельскохозяйственные угодья);
0,0	в труднодоступной местности (недоступной для транспорта и сельскохозяйственных машин) и на участках, специально выгороженных для исключения доступа населения.

Согласно технической спецификации монитеры, соответствуют стандарту ТСО'03. Это значит, что напряженность электромагнитного поля вокруг монитора по электрической составляющей в диапазоне частот 5 Гц–2 кГц составляет не более 10 В/м, что соответствует нормам ТСО'03 и СанПиН 2.2.2/2.4.1340–03 «Гигиенические требования к персональным электронно-вычислительным машинам и организации работы»[32].

Согласно СанПиН 2.4.1340-03 напряженность электромагнитного поля на расстоянии 50 см вокруг ВДТ по электрической составляющей должна быть не более[31]:

в диапазоне частот 5 Гц – 2 кГц – 25 в/м;

в диапазоне частот 2 – 400 кГц – 2.5 в/м.

5.3 Анализ опасных производных факторов окружающей работающей среды

Опасный производственный фактор - производственный фактор, воздействие которого на работника может привести к его травме (Опасность поражения электрическим током; Опасность возникновения пожара.)

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.

5.3.1 Электробезопасность

Лаборатория относится к помещению без повышенной опасности поражения электрическим током (в которой отсутствуют условия, создающие повышенную или особую опасность). Строгое выполнение организационных и технических мероприятий при проведении работ с электроустановками, очень важно в целях предупреждения электротравматизма, кроме этого используются средства защиты, к которым относятся: электрическая изоляция токоведущих частей, защитное заземление и отключение, электрическое разделение сети. Использование этих средств позволяет обеспечить защиту людей от прикосновения к токоведущим частям, от опасности перехода напряжения к металлическим нетоковедущим частям, от шагового напряжения.

Преднамеренное соединение с землей металлических нетоковедущих частей, которые могут оказываться под напряжением, называют защитным заземлением (ГОСТ 12.1.009 – 2009)[33]. Чтобы защитить человека от поражения электрическим током, защитное заземление должно удовлетворять ряду требований, изложенных в ПУЭ и ГОСТ 12.1.030 – 81 “ССВТ[34]. Электробезопасность. Защитное заземление. Занесение”. Эти требования зависят от напряжения электроустановок и мощности источника питания. К средствам защиты относятся: электрическая изоляция токоведущих частей, защитное заземление и отключение, электрическое разделение сети. Использование этих средств позволяет обеспечить защиту людей от

прикосновения к токоведущим частям, от опасности перехода напряжения к металлическим нетоковедущим частям, от шагового напряжения.

Помещение без повышенной опасности (сухое, хорошо отапливаемое, помещение с токонепроводящими полами, с температурой 18–20 С°, с влажностью 40–50%. Электробезопасность является опасным фактором и обычно она связана со следующими источниками:

- поражение электрическим током;
- статическое электричество;
- молниезащита.

Мероприятия защиты при электробезопасности следующие:

- отключать электрооборудование при его ремонте;
- периодически снимать электростатическое напряжение, касаясь пальцами рук, заземленных поверхностей;
- для безопасности во время гроз необходимо удостовериться о наличии молниеотвода, и того факта, что все розетки в кабинете заземлены.

В отличие от других источников опасности электрический ток нельзя обнаружить без специального оборудования и приборов, поэтому воздействие его на человека чаще всего неожиданно.

Следствия воздействия электрического тока на тело человека приведены в таблице 13.

Таблица 13 Воздействие электрического тока на тело человека

Вид воздействия	Следствие	Виды электротравм
Термическое	Ожоги отдельных участков тела, нагрев внутренних органов	Электрический ожог, электрический знак, металлизация кожи.
Биологическое	Разложение и возбуждение живых тканей,	Механические повреждения

	судорожное сокращение мышц	
Электролитическое	Разложение крови и других жидкостей, нарушение их физико- химического состава	Электрический удар

Особое внимание необходимо уделять защите от статического электричества. Для его снижения применяют специальное покрытие полов, которое выполнено из линолеума антистатического поливинилхлоридного. К другому методу защиты можно отнести нейтрализацию зарядов ионизированным воздухом. Рабочая среда (сырость, высокая температура, токопроводящая пыль, едкие пары и газы, токопроводящие полы и т.д.) могут оказывать в той или иной степени оказывать воздействие – усиливать или уменьшать опасность поражения током. При проектировании способов и средств защиты от поражения электрическим руководствуются безопасными значениями тока при данной длительности и пути его прохождения через тело в соответствии с ГОСТ 12.1.038-82 [35]. При длительном воздействии допустимый безопасный ток принят в 1 мА, при продолжительности воздействия до 30 с – 6 мА.

5.3.2 Опасность 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[36].

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[37].

5.4 Рекомендации по минимизации влияния

Рекомендации по минимизации влияния электромагнитных излучений:

Данная разработка направлена на уменьшение количества часов, затрачиваемых сотрудником на ввод персональных данных гражданина, что сокращает влияние электромагнитного излучения. Время на переобучение сотрудников не сильно увеличит влияние фактора, так как это происходит одноразово.

Рекомендации по улучшению микроклимата:

Воздушной среды в исследовательском производственном помещении относятся правильная организация вентиляции и кондиционирования воздуха, отопление помещений. Вентиляция может осуществляться естественным и механическим. В зимнее время в помещении необходимо предусмотреть систему отопления. Объем помещений с ЭВМ не должен быть меньше 20 м³/человека.

Для обеспечения комфортных условий используют как организационные методы (рациональная организация проведения работ в зависимости от времени года и суток, чередование труда и отдыха), так и технические средства (вентиляция, кондиционирование воздуха, отопительная система).

Рекомендации по минимизации влияния электромагнитных излучений:

Данная разработка направлена на уменьшение количества часов, затрачиваемых сотрудником на ввод персональных данных гражданина, что сокращает влияние электромагнитного излучения. Время на переобучение сотрудников не сильно увеличит влияние фактора, так как это происходит однократно.

Рекомендации по защите от электрического тока:

Опасное и вредное воздействие на людей электрического тока, электрической дуги и электромагнитных полей проявляется в виде электротравм и профессиональных заболеваний.

Кроме того, при неисправности каких-либо блоков компьютера корпус может оказаться под током, что может привести к электрическим травмам или электрическим ударам. Для устранения этого предлагается обеспечить подсоединение металлических корпусов оборудования к заземляющей жиле.

При возникновении несчастного случая следует немедленно освободить пострадавшего от действия электрического тока и, вызвав врача, оказать ему необходимую помощь.

Для защиты от поражения электрическим током все токоведущие части должны быть защищены от случайных прикосновений кожухами, корпус устройства должен быть заземлен. Заземление выполняется изолированным медным проводом сечением 1,5 мм², который присоединяется к общей шине заземления с общим сечением 5,4 мм² при помощи сварки. Общая шина присоединяется к заземлению, сопротивление которого не должно превышать 4 Ом. Питание устройства должно осуществляться от силового щита через автоматический предохранитель, который срабатывает при коротком замыкании нагрузки.

При эксплуатации ЭВМ запрещается:

- включать ЭВМ при неисправной защите электропитания;
- подключать и отключать разъемы кабелей электропитания и блоков вентиляции при поданном напряжении электросети;
- заменять съемные элементы под напряжением;
- производить пайку аппаратуры, находящейся под напряжением;
- снимать щиты, закрывающие доступ к токоведущим частям;
- пользоваться электроинструментами с напряжением 36В и выше с незаземленными корпусами.

При правильной эксплуатации электроустановок и использовании соответствующих средств защиты риск поражения электрическим током сводится к минимуму.

Для предотвращения поражения электрическим током в организации должны проводиться следующие мероприятия:

- компьютеры подключаются к сети с помощью трехполюсных вилок, причем центральный контакт вилки надежно заземляется.
- при эксплуатации электрооборудования рабочее место должно быть оборудовано так, что исключается возможность прикосновения служащих к токоведущим устройствам, шинам заземления, батареям отопления, водопроводным трубам.
- обслуживающий персонал должен пройти инструктаж по технике безопасности на рабочем месте.
- осуществляется профилактическая проверка отсутствия напряжения,

отключение неисправного оборудования и наложение заземления.

5.5 Экологическая безопасность

В данном разделе рассматривается воздействие на окружающую среду деятельности по данному исследованию.

Данное исследование программного обеспечения и работа за ПЭВМ не являются экологически опасными работами, потому что результат, который выполнялся в данной работе, а также объекты, на которых будет реализоваться его использование операторами ПЭВМ относятся к предприятиям пятого класса.

Непосредственно программный результат, разработанный в ходе выполнения бакалаврской работы, не наносит вреда окружающей среде ни на стадиях его разработки, ни на стадиях эксплуатации. Однако, средства, необходимые для его разработки и эксплуатации могут быть наносить вред окружающей среде.

Современные ПЭВМ производят практически без использования вредных веществ, опасных для человека и окружающей среды. Исключением являются аккумуляторные батареи компьютеров и мобильных устройств. В аккумуляторах содержатся тяжелые металлы, кислоты и щелочи, которые могут наносить ущерб окружающей среде, попадая в гидросферу и литосферу, если они были неправильно утилизированы. Для утилизации аккумуляторов необходимо обращаться в специальные организации, специализировано занимающиеся приемом, утилизацией и переработкой аккумуляторных батарей.

Люминесцентные лампы, применяющиеся для искусственного освещения рабочих мест, также требуют особой утилизации, т.к. в них присутствует от 10 до 70 мг ртути, которая относится к чрезвычайно-опасным химическим веществам и может стать причиной отравления живых существ, а также загрязнения атмосферы, гидросферы и литосферы. Сроки службы таких

ламп составляют около 5-ти лет, после чего их необходимо сдавать на переработку в специальных пунктах приема. Юридические лица обязаны сдавать лампы на переработку и вести паспорт для данного вида отходов.

5.6 Безопасность в чрезвычайных ситуациях

Лаборатория расположена в городе Томск с континентально-циклоническим климатом и природные явления (землетрясения, наводнения, засухи, ураганы и т. д.), в данном городе отсутствуют. Возможными ЧС на объекте в данном случае в городе Томск могут быть сильные морозы и диверсия. Для Сибири в зимнее время года характерны морозы и метели. В результате порывов ветра могут быть обрывы линий электропитания, из-за чего возможны перебои в электроснабжении; перегрузки, которые могут стать причиной пожара. Для предотвращения подобных ситуаций необходима организация системы аварийного электропитания, по возможности проведение линии электроснабжения под землей. Низкие температуры могут привести к авариям систем теплоснабжения. В случае разморозив труб должны быть предусмотрены запасные обогреватели. Их количества и мощности должно хватать для того, чтобы работа на производстве не прекратилась. В последнее время, в связи с внешней политикой страны, возможны проявления диверсии. Угрозы могут быть как ложными, так и действительными, поэтому необходимы меры предосторожности по этому поводу. В качестве мер безопасности могут быть приняты следующие действия— установка системы видеонаблюдения и круглосуточной охраны, сохранение конфиденциальной информации о охранной системе. Необходимо так же проводить информирование должностных лиц и тренировки по отработке действий на случай экстренной эвакуации, план эвакуации в рисунке 16.

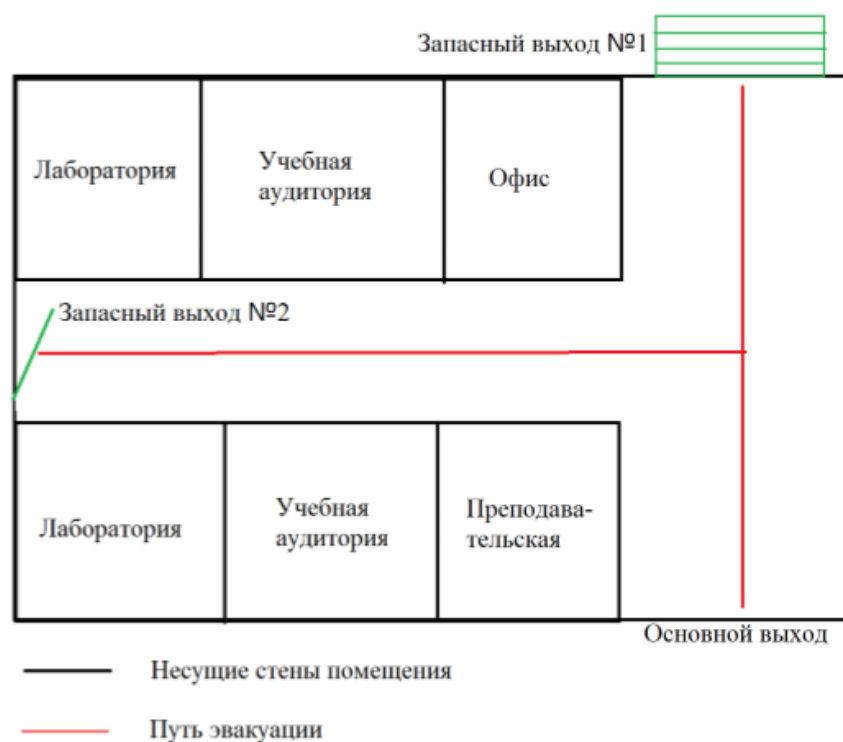


Рисунок 16 - План эвакуации из лаборатории

Вывод

В ходе проанализированы выявленных вредных и опасных факторов для исследования спектроскопических параметров молекулы C_2D_4 и предоставлены обоснование мероприятий по снижению воздействия. Рассматривается воздействие на окружающую среду деятельности по данному исследованию. Были выявлены мероприятия и средства защиты, рассмотрены чрезвычайные ситуации и поведение в них.

Для обеспечения безопасности жизнедеятельности обязательно выполнить работу по правилам.

Заключение

В данной работе были изучены свойства симметрии молекулы C_2D_4 , область ее применения, структура колебательно-вращательных спектров многоатомных молекул. Также был освоен метод комбинационных разностей, с помощью которого затем был проведен анализ экспериментально зарегистрированного спектра высокого разрешения полос ν_{12} и $\nu_6+\nu_{11}$ исследуемой молекулы.

Было проинтерпретировано более 800 переходов полосы ν_{12} , на основе которых было определено более 250 колебательно-вращательных энергий состояния ($\nu_{12}=1$) до следующих максимальных значений квантовых чисел $J^{\max}=28$, $K_a^{\max}=15$.

Для комбинационной полосы $\nu_6+\nu_{11}$ впервые было найдено более 1500 переходов на основе которых было определено более 400 колебательно-вращательных энергий состояния ($\nu_6+\nu_{11}=1$) до следующих максимальных значений квантовых чисел $J^{\max}=17$, $K_a^{\max}=25$.

Полученные данные были использованы для решения обратной спектроскопической задачи. Были определены параметры исследуемых состояний ($\nu_{12}=1$) и ($\nu_6+\nu_{11}=1$) молекулы C_2D_4 , которые воспроизводят исходные данные с экспериментальной точностью.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Hollas M.J. Modern Spectroscopy. // Wiley, 1996 – 103c.
2. Harper J., Morrisson A.R., Duncan J.L. Fourier transform infrared spectroscopic analyses of the ν_{12} fundamentals of C_2H_4 and C_2D_4 // Chemical Physics Letters. – 1981 V. 83. – P. 32-36.
3. Harper J, Duncan J.L. High resolution analysis of the infrared active ν_7 wagging fundamental of C_2D_4 // Molecular Physics. – 1982 – V. 46. – P. 139-149.
4. Mompeán F.J., scribano R.E, Montero S., Bendtsen J.,Butcher R.J The Raman spectrum of C_2D_4 near 1000 cm^{-1} : The Coriolis coupled ν_3 and ν_6 bands // Journal of Molecular Spectroscopy. – 1986. – V. 116. – P. 48-57.
5. Tan T.L., Goh K.L., Ong P.P., Teo H. H. High-resolution Fourier transform infrared spectroscopy and analysis of the ν_{12} fundamental band of ethylene- d_4 // Chemical Physics Letters –1999. – V. 315, P. 82-86.
6. Goh K. L., Tan T. L., Ong P. P. & Teo H. H. High-resolution FTIR spectroscopy of the ν_{11} and $\nu_2 + \nu_7$ bands of ethylene- d_4 // Molecular Physics – 2000. V. 98. – P. 583-587.
7. Tan T.L., Goh K.L., Ong P.P., Teo H.H. High-Resolution FTIR Spectrum of the ν_9 Band of Ethylene- D_4 (C_2D_4) // Journal of Molecular Spectroscopy –2000. – V. 202, P. 249-252.
8. Tan T.L., Gabona M.G., Appadoo D.R.T., Godfrey P.D., McNaughton D. Rovibrational constants of the ground and $\nu_{12} = 1$ states of C_2D_4 by high-resolution synchrotron FTIR spectroscopy // Journal of Molecular Spectroscopy – 2014. V. – 303. – P. 42-45.
9. Ulenikov O.N., Gromova O.V., Bekhtereva E.S., Fomchenko A.L., Sydow C., Maul C., Bauerecker S. First study of the ro-vibrational structure of the g-symmetry vibrational states of C_2D_4 from the analysis of hot bands: The $\nu(7)+\nu(10)-\nu(10)$ and $\nu(10)+\nu(12)-\nu(10)$ bands // Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer –2017. – V. 187. – P. 178-189.
10. Ulenikov O.N., Bekhtereva E.S., Gromova O.V., Fomchenko A.L., Merkulova M.A., Mellau G.Ch., Sydow C., Bauerecker S.. Extended high-resolution analysis of the ν_{10} band of C_2D_4 // Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer – 2018. – V. 219. – P. 262-273.
11. Ulenikov O.N., Gromova O.V., Bekhtereva E.S., Fomchenko A.L., Fangce Zhang, Sydow C., Maul C., Bauerecker S. High resolution analysis of C_2D_4 in the region of $600-1150\text{ cm}^{-1}$. // Journal of Quantitative Spectroscopy & Radiative Transfer. – 2016. – V. 182. – P. 55-70.

12. Макушкин Ю. С., Улеников О. Н., Чеглоков А. Е. Симметрия и ее применение к задачам колебательно-вращательной спектроскопии молекул. Часть 1. // Томск: Издательство ТГУ, 1990. – 224с.
13. Любарский Г.Я. Теория групп и ее применение в физике. // М.: Физматгиз, 1958.
14. Герцберг Г. Колебательные и вращательные спектры многоатомных молекул. // М.: Издательство иностранной литературы, 1949.
15. Rovibrational Spectroscopy [Electronic resource] – Joya Cooley, UC Davis – https://chem.libretexts.org/Core/Physical_and_Theoretical_Chemistry/Spectroscopy/Rotational_Spectroscopy/Rovibrational_Spectroscopy.
16. Hollas M.J. Modern Spectroscopy fourth edition. // University of Reading, 2004
17. Guozhen W. Principles and research of molecular vibration spectroscopy // Tsinghua University Press, 2001. – 26с.
18. Alfred Bauder Fundamentals of Rotational Spectroscopy Laboratorium fur Physikalische Chemie // John Wiley & Sons, Ltd. 2011.
19. Давыдов А. С. Квантовая механика // М.: Наука, 1975. – 703с.
20. Ландау Л. Д. Квантовая механика. Нерелятивистская теория / Л. Д. Ландау Е. М. Лифшиц. // М.: Наука, 1989. – 71-74с.
21. 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. – Р. 224.
22. Ulenikov O. N., Gromova O. V., Bekhtereva E. S., Aslapovskaya Yu. S., and Horneman V.M., High Resolution Study of C₂H₄: Re-analysis of the Ground and Strongly Interacting ν_2 , ν_5 , and $\nu_3 + \nu_4$ Vibrational Bands”. // 22th International Conference on High Resolution Molecular Spectroscopy – 2012 – Paper H32. – P.145.
23. Harris, D. C.; Bertolucci, M. D. Symmetry and Spectroscopy // Oxford University Press, Inc.: New York, NY, 1989.
24. Bykov A. D., Makushkin Yu. S., and Ulenikov O. N., // J. Mol. Spectrosc., 1982. – V. 93, – P. 46 - 54.
25. Быков А.Д., Макушкин Ю.С., Улеников О.Н. Изотопозамещение в многоатомных молекулах // Новосибирск, изд - во «Наука» , 1985.
26. Bykov A. D., Makushkin Yu. S., and Ulenikov O. N., // J. Mol. Spectrosc., 1981. – V. 85. – P. 462–479.
27. Duncan J. L., McKean D.C., Mallinson P. D., // J. Molec. Spectroscopy –1973. – V. 45, – P. 221-246.

28. ГОСТ 12.1.007-76. ССБТ. Вредные вещества. Классификация и общие требования безопасности
29. ГОСТ 12.1.005-88. ССБТ Общие санитарно-гигиенические требования к воздуху рабочей зоны.
30. СНиП 23-05-95. Естественное и искусственное освещение.
31. СанПиН 2.2.1/2.1.1.1278-03. Гигиенические требования к естественному, искусственному и совмещенному освещению жилых и общественных зданий.
32. СанПиН 2.2.2.542-96. Гигиенические требования к видеодисплейным терминалам, персональным электронно-вычислительным машинам и организации работ.
33. ГОСТ 12.1.009 – 2009. Система стандартов безопасности труда. Электробезопасность. Термины и определения
34. ГОСТ 12.1.030 – 81. Электробезопасность. Защитное заземление. Зануление.
35. ГОСТ 12.1.038-82 (2001). Электробезопасность. Предельно допустимые значения прикосновения и токов.
36. СНиП 21-01-97. Пожарная безопасность зданий и сооружений.
37. НПБ 105-03. Определение категорий помещений, зданий и наружных установок по взрывопожарной и пожарной опасности.

Приложение 1

Часть экспериментальных колебательно-вращательных переходов и
уровней энергии полосы ν_{12} молекулы C_2D_4

Квантовые числа верхнего состояния	Квантовые числа нижнего состояния	Переход, см^{-1}	Интенсивность	Средняя энергия, см^{-1}
1 1 1	1 1 0	1076.83304	17.5	1080.0098
	2 1 2	1074.57952	15.5	
2 1 2	1 1 1	1079.43310	17.3	1082.4382
	2 1 1	1076.49358	9.3	
	3 1 3	1073.37691	29.6	
3 1 3	2 1 2	1080.64191	26.2	1086.0725
	3 1 2	1075.98332	7.0	
	4 1 4	1072.18339	39.2	
4 1 4	3 1 3	1081.84347	35.0	1090.9045
	4 1 3	1075.30502	7.4	
	5 1 5	1071.00012	41.1	
5 1 5	4 1 4	1083.03511	47.3	1096.9243
	5 1 4	1074.46446	6.1	
	6 1 6	1069.82746	48.9	
6 1 6	5 1 5	1084.21566	55.7	1104.1203
	6 1 5	1073.47060	5.4	
	7 1 7	1068.66469	58.7	
7 1 7	6 1 6	1085.38550	58.6	1112.4823
	7 1 6	1072.34093	3.5	
	8 1 8	1067.51042	68.8	
8 1 8	7 1 7	1086.54458	62.4	1122.0002

	8 1 7	1071.10000	4.0	
	9 1 9	1066.36326	76.9	
9 1 9	8 1 8	1087.69417	70.1	1132.6658
	9 1 8	1069.78186	3.7	
	10 1 10	1065.22120	86.4	
10 1 10	9 1 9	1088.83547	69.1	1144.4723
	10 1 9	1068.42225	4.6	
11 1 11	10 1 10	1089.97039	70.8	1157.4148
	11 1 10	1067.05623	3.2	
	12 1 12	1062.94661	98.2	
12 1 12	11 1 11	1091.09970	74.7	1171.4894
	12 1 11	1065.70991	3.1	
	13 1 13	1061.81162	105.0	
13 1 13	12 1 12	1092.22499	71.1	1186.6933
	13 1 12	1064.39629	5.1	
	14 1 14	1060.67687	87.4	
14 1 14	13 1 13	1093.34676	69.7	1203.0245
	14 1 13	1063.11842	3.2	
	15 1 15	1059.54192	83.5	
1 1 0	1 1 1	1077.18126	35.8	1080.18660
	2 1 1	1074.24209	16.0	
3 1 2	2 1 1	1081.18900	24.7	1087.1338
	3 1 3	1078.07273	5.9	
	4 1 3	1071.53461	38.6	
5 1 4	4 1 3	1083.96237	50.8	1099.5620
	5 1 5	1079.65765	5.4	
	6 1 5	1068.91237	54.3	

6 1 5	5 1 4	1085.32784	50.5	1107.7873
	6 1 6	1080.69015	38.3	
	7 1 6	1067.64551	58.9	
7 1 6	6 1 5	1086.66667	47.8	1117.3165
	8 1 7	1066.41642	77.0	
8 1 7	7 1 6	1087.97054	59.8	1128.1121
	9 1 8	1065.22808	77.1	
9 1 8	8 1 7	1089.23135	59.0	1140.1305
	9 1 9	1084.49261	3.7	
10 1 9	10 1 9	1091.61369	66.5	1153.3286
	12 1 11	1061.88398	88.0	
11 1 10	10 1 9	1091.61369	66.5	1153.3286
	12 1 11	1061.88398	88.0	
12 1 11	11 1 10	1092.74857	60.4	1183.1069
	13 1 12	1060.80968	86.9	
13 1 12	12 1 11	1093.86311	64.6	1199.6428
	14 1 13	1059.73687	86.4	
14 1 13	13 1 12	1094.97025	69.5	1217.2674
	15 1 14	1058.65924	75.1	
15 1 14	14 1 13	1096.07794	63.8	1235.9837
	16 1 15	1057.57434	74.4	
2 2 0	2 2 1	1077.09025	51.3	1088.1545
	3 2 1	1073.13383	18.5	
3 2 1	2 2 0	1081.03711	24.5	1092.1135
	3 2 2	1077.15388	31.6	
	4 2 2	1071.78986	41.1	
4 2 2	3 2 1	1082.41780	38.5	1097.4386

	4 2 3	1077.29527	16.5	
	5 2 3	1070.42253	36.6	
5 2 3	4 2 2	1083.83926	58.7	1104.1627
	5 2 4	1077.55487	202.2	
	6 2 4	1069.03833	74.8	
6 2 4	5 2 3	1085.29449	43.0	1112.3107
	6 2 5	1077.96767	10.1	
	7 2 5	1067.65029	55.0	
7 2 5	6 2 4	1086.77177	71.2	1121.8972
	7 2 6	1078.56195	118.5	
8 2 6	7 2 5	1088.25375	51.6	1132.9139
	8 2 7	1079.33847	7.3	
	9 2 7	1064.91959	81.4	
9 2 7	8 2 6	1089.72651	72.4	1145.3486
	10 2 8	1063.59699	136.4	
11 2 9	10 2 8	1092.59900	81.1	1174.3507
	11 2 10	1082.73676	12.3	
	12 2 10	1061.06479	190.1	
12 2 10	11 2 9	1093.98121	59.2	1190.8425
	13 2 11	1059.86247	83.2	
13 2 11	12 2 10	1095.31702	79.5	1208.6024
	14 2 12	1058.70498	122.7	
14 2 12	13 2 11	1096.59975	59.5	1227.5797
	15 2 13	1057.59071	74.1	
15 2 13	14 2 12	1097.82742	117.6	1247.7245
	16 2 14	1056.51319	105.7	
16 2 14	15 2 13	1099.00331	60.2	1268.9921

	17 2 15	1055.46131	69.3	
2 2 1	2 2 0	1077.06468	54.2	1088.1415
	3 2 2	1073.18210	27.3	
3 2 2	2 2 1	1080.98466	36.3	1092.0491
	3 2 1	1077.02871	24.8	
	4 2 3	1071.90565	28.6	
4 2 3	3 2 2	1082.28977	40.7	1097.2494
	4 2 2	1076.92586	27.4	
	5 2 4	1070.64136	53.1	
5 2 4	4 2 3	1083.58970	41.4	1103.73319
	5 2 3	1076.71703	16.2	
	6 2 5	1069.39000	87.8	
6 2 5	5 2 4	1084.88205	66.4	1111.4900
	6 2 4	1076.36573	15.7	
	7 2 6	1068.15341	83.5	
7 2 6	6 2 5	1086.16459	52.3	1120.5076
	7 2 5	1075.84740	10.2	
	8 2 7	1066.93230	59.7	
8 2 7	7 2 6	1087.43493	84.8	1130.7714
	8 2 6	1075.14921	10.8	
	9 2 8	1065.72693	122.6-	
9 2 8	8 2 7	1088.69140	61.1	1154.9775
	9 2 7	1074.27197	6.8	
	10 2 9	1064.53725	81.0	
10 2 9	9 2 8	1089.93309	86.2	1154.9775
	10 2 8	1073.22603	8.7	
	11 2 10	1063.36263	142.4	

11 2 10	10 2 9	1091.15888	59.0	1168.8880
	11 2 9	1072.02646	4.9	
	12 2 11	1062.20185	4.9	
12 2 11	11 2 10	1092.36924	83.8	1183.9838
	12 2 10	1070.69811	7.6	
	13 2 12	1061.05302	153.6	
13 2 12	12 2 11	1093.56482	61.7	1200.2510
	13 2 11	1069.27059	5.0	
	14 2 13	1059.91422	80.4	
14 2 13	13 2 12	1094.74716	89.1	1217.6780
	14 2 12	1067.78027	6.5	
	15 2 14	1058.78357	116.2	
15 2 14	14 2 13	1095.91800	65.1	1236.2549
	16 2 15	1057.65850	153.1	
16 2 15	15 2 14	1097.07908	96.8	1255.9735
	16 2 14	1064.76205	6.1	
	17 2 16	1056.53756	106.2	

Приложение 2

Часть экспериментальных колебательно-вращательных переходов и
уровней энергии полосы $\nu_6+\nu_{11}$ молекулы C_2D_4

Квантовые числа верхнего состояния	Квантовые числа нижнего состояния	Переход, см^{-1}	Интенсивно сть	Средняя энергия, см^{-1}
1 0 1	1 1 0	3200.60727	85.5	3203.78738
	2 1 2	3198.35244	85.0	
2 0 2	1 1 1	3203.38014	93.0	3206.38545
	2 1 1	3200.44077	80.8	
	3 1 3	3197.32430	83.8	
3 0 3	2 1 2	3204.83063	90.3	3210.26150
	3 1 2	3200.17222	76.9	
	3 3 0	3186.3342	96.5	
4 0 4	3 1 3	3206.31775	83.7	3215.37938
	4 1 3	3199.77997	74.5	
	5 1 5	3195.47538	73.5	
5 0 5	4 1 4	3207.81415	79.3	3221.70359
	5 1 4	3199.24384	72.9	
6 0 6	5 1 5	3209.29639	72.6	3229.20042
	6 1 5	3198.55047	73.5	
	7 3 5	3176.52700	73.7	
7 0 7	6 1 6	3210.74774	71.1	3237.84432
	7 1 6	3197.70273	74.5	
	8 1 8	3192.87232	64.0	
8 0 8	7 1 7	3212.16842	65.7	3247.62408
	8 1 7	3196.72428	73.1	

	9 1 9	3191.98689	62.6	
9 0 9	8 1 8	3213.57647	65.6	3258.54812
	9 1 8	3195.66403	79.6	
	10 1 10	3191.10355	63.1	
	10 3 8	3170.53798	93.0	
10 0 10	9 1 9	3215.11706	76.6	3270.75385
	10 1 9	3194.70378	84.9	
	11 1 11	3190.36422	74.5	
11 0 11	10 1 10	3216.36614	83.0	3283.81039
	11 3 8	3180.09313	67.9	
	12 1 12	3189.34164	45.2	
12 0 12	11 1 11	3217.86153	97.8	3298.25137
	12 1 11	3192.47236	65.4	
	12 3 9	3178.17442	90.5	
1 1 1	0 0 0	3205.51529	87.3	3205.51550
	2 0 2	3201.63268	87.9	
	2 2 0	3194.43884	82.9	
2 1 2	1 0 1	3206.66693	87.6	3207.96536
	2 2 1	3196.90134	91.5	
	3 0 3	3200.23565	88.7	
	3 2 1	3192.94452	85.4	
3 1 3	2 0 2	3207.75059	78.1	3211.63364
	3 2 2	3196.67383	82.3	
	4 0 4	3198.82938	76.8	
	4 4 0	3169.96862	84.7	
4 1 4	3 0 3	3208.78206	80.3	3216.51185

	3 2 1	3201.4917	96.5	
	5 0 5	3197.44409	77.9	
	5 2 3	3189.49545	88.5	
5 1 5	4 0 4	3209.78682	68.1	3222.59101
	5 2 4	3195.98299	78.0	
	6 2 4	3187.46677	87.8	
6 1 6	5 0 5	3210.79332	70.7	3229.86106
	6 2 5	3195.51801	81.7	
	7 0 7	3194.83405	69.1	
	7 2 5	3185.20078	91.3	
7 1 7	6 0 6	3211.82802	58.5	3238.31194
	6 2 4	3203.18770	89.8	
	8 0 8	3193.62889	51.4	
	8 2 6	3182.68966	91.5	
8 1 8	7 0 7	3212.90729	66.1	3247.93446
	7 2 5	3203.27442	97.9	
	8 4 5	3172.30333	90.7	
	9 0 9	3192.48589	60.4	
9 1 9	8 0 8	3214.03700	48.7	3258.72015
	8 2 6	3203.09833	87.9	
	9 2 8	3193.67570	75.1	
	10 0 10	3191.39645	39.3	
	10 2 8	3176.96774	93.7	
10 1 10	9 0 9	3215.21535	60.3	3270.66346
	9 2 7	3202.66895	94.7	
	10 2 9	3192.93449	82.5	

	11 0 11	3190.34877	50.5	
8 8 0	7 7 1	3241.34595	50.50	3365.48371
	8 7 1	3162.01533	90.20	
	9 9 1	3230.92402	57.40	
8 8 1	7 7 0	3241.34595	50.50	3365.48371
	8 7 2	3230.92402	90.20	
	9 9 0	3162.01533	57.40	
9 8 1	8 7 2	3242.57674	52.80	3377.13619
	9 7 2	3230.84577	84.30	
	10 9 2	3160.64512	58.60	
9 8 2	8 7 1	3242.57674	52.80	3377.13629
	9 7 3	3230.84577	84.30	
	10 9 1	3160.64512	58.60	
	10 5 5	3260.60885	98.30	
10 8 2	9 7 3	3243.80016	54.30	3390.09048
	10 7 3	3230.75825	79.60	
	10 9 1	3173.59976	88.00	
	11 9 3	3159.26952	62.70	
	11 7 5	3216.40328	97.10	
10 8 3	9 7 2	3243.80016	54.30	3390.09047
	10 7 4	3230.75825	79.60	
	10 9 2	3173.59976	88.00	
	11 7 4	3216.40328	97.10	
	11 9 2	3159.26952	62.70	
	11 9 2	3159.26952	62.70	
11 8 3	10 7 4	3245.01653	57.30	3404.34874

	10 9 2	3187.85820	71.10	
	12 9 4	3157.88865	64.20	
	12 7 6	3214.98965	96.40	
	11 7 4	3230.66252	72.40	
11 8 4	10 7 3	3245.01653	57.30	3404.34875
	10 9 1	3187.85820	71.10	
	12 7 5	3214.98965	96.40	
	12 9 3	3157.88865	64.20	
	11 7 5	3230.66252	72.40	
12 8 4	11 7 5	3246.22545	60.10	3419.91254
	12 7 5	3230.55466	72.80	
	12 9 3	3173.45232	83.10	
	13 9 5	3156.50291	66.00	
13 8 5	12 7 6	3247.42638	57.80	3436.78460
	13 7 6	3230.43621	72.30	
	13 9 4	3173.37533	81.90	
	14 9 6	3155.11314	70.50	
	14 7 8	3212.12429	93.90	
13 8 6	12 7 5	3247.42638	57.80	3436.78461
	13 7 7	3230.43621	72.30	
	13 9 5	3173.37533	81.90	
	14 7 7	3212.12429	93.90	
	14 9 5	3155.11314	70.50	
14 8 6	13 7 7	3248.62073	65.00	3454.96880
	14 7 7	3230.30866	74.30	
	14 9 5	3173.29722	81.00	

	15 9 7	3153.72074	72.00	
	15 7 9	3210.67115	94.30	
14 8 7	13 7 6	3248.62073	65.00	3454.96883
	14 7 8	3230.30866	74.30	
	14 9 6	3173.29722	81.00	
	15 7 8	3210.67115	94.30	
	15 9 6	3153.72074	72.00	
15 8 7	14 7 8	3249.80607	67.80	3474.46659
	14 9 6	3192.79454	95.90	
	14 5 10	3292.28072	89.30	
	16 9 8	3152.32567	73.30	
	16 7 10	3209.20165	94.50	
	15 7 8	3230.16973	71.00	
	15 9 6	3173.21970	68.80	
15 8 8	14 7 7	3249.80607	67.80	3474.46685
	14 9 5	3192.79454	95.90	
	16 7 9	3209.20165	94.50	
	16 9 7	3152.32567	73.30	
	15 7 9	3230.16973	71.00	
	15 9 7	3173.21970	68.80	
	16 5 11	3251.19460	92.10	
16 8 8	15 7 9	3250.99401	71.10	3495.29223
	15 9 7	3194.04350	94.90	
	16 7 9	3230.02707	73.70	
	17 9 9	3150.94020	72.60	
	15 11 5	3122.72944	98.30	

	16 7 9	3230.02707	73.70	
	16 9 7	3173.15209	71.80	
	16 11 5	3101.87654	98.50	
16 8 9	15 7 8	3250.99401	71.10	3495.29208
	15 9 6	3194.04350	94.90	
	16 7 10	3230.02707	73.70	
	16 9 8	3173.15209	71.80	
	17 7 10	3207.72620	93.90	
	17 9 8	3150.94020	72.60	
	16 11 6	3101.87654	98.50	
7 7 1	6 6 0	3236.10251	40.80	3327.87593
	7 6 2	3226.98175	86.80	
	8 8 0	3166.50479	48.00	
7 7 0	6 6 1	3236.10251	40.80	3327.87593
	7 6 1	3226.98175	86.80	
	8 8 1	3166.50479	48.00	
8 7 2	7 6 1	3237.30669	43.40	3338.20093
	8 8 1	3176.82988	89.50	
	9 8 1	3165.10755	50.60	
8 7 1	7 6 2	3237.30669	43.40	3338.20093
	8 8 0	3176.82988	89.50	
	9 8 2	3165.10755	50.60	
9 7 3	8 6 2	3238.50141	44.60	3349.82644
	9 6 4	3226.75850	67.40	
	9 8 2	3176.73298	82.20	
	10 8 2	3163.70241	53.20	

9 7 2	8 6 3	3238.50141	44.60	3349.82644
	9 6 3	3226.75850	67.40	
	9 8 1	3176.73298	82.20	
	10 8 3	3163.70241	53.20	
10 7 4	9 6 3	3239.68715	48.00	3362.75524
	9 8 1	3189.66252	97.70	
	10 6 5	3226.62902	66.80	
	10 8 3	3176.63112	79.10	
	11 6 5	3212.25101	90.70	
	11 8 3	3162.29067	53.40	
10 7 3	9 6 4	3239.68715	48.00	3362.75522
	9 8 2	3189.66252	97.70	
	10 6 4	3226.62902	66.80	
	10 8 2	3176.63112	79.10	
	11 8 4	3162.29067	53.40	
	11 6 6	3212.25101	90.70	
11 7 5	10 6 4	3240.86387	50.60	3376.99062
	10 8 2	3190.86642	96.00	
	11 6 6	3226.48716	62.80	
	11 8 4	3176.52700	73.70	
	12 8 4	3160.87365	57.80	
11 7 4	10 6 5	3240.86387	50.60	3376.99057
	10 8 3	3190.86642	96.00	
	10 4 7	3276.44104	90.30	
	11 6 5	3226.48716	62.80	
	11 8 3	3176.52700	73.70	

	12 8 5	3160.87365	57.80	
12 7 6	11 6 5	3242.03151	54.80	3392.53489
	12 6 7	3226.33103	62.50	
	12 8 5	3176.41855	73.50	
	13 8 5	3159.45204	60.60	
12 7 5	11 6 6	3242.03151	54.80	3392.53496
	12 6 6	3226.33103	62.50	
	12 8 4	3176.41855	73.50	
	13 8 6	3159.45204	60.60	
13 7 7	12 6 6	3243.18994	56.90	3409.39314
	12 8 4	3193.27617	92.90	
	13 6 8	3226.16345	63.20	
	13 8 6	3176.31044	69.10	
	14 8 6	3158.02792	64.90	
13 7 6	12 6 7	3243.18994	56.90	3409.39328
	12 8 5	3193.27617	92.90	
	13 6 7	3226.16345	63.20	
	13 8 5	3176.31044	69.10	
	14 8 7	3158.02792	64.90	
14 7 8	13 6 7	3244.33933	60.20	3427.56862
	13 8 5	3194.48539	91.10	
	14 6 9	3225.98123	66.10	
	14 8 7	3176.20349	72.90	
	15 8 7	3156.60201	67.70	