

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

Школа – Инженерно – ядерной технологии
 Направление подготовки – Физика конденсированного состояния
 Отделение школы (НОЦ) – Экспериментальная физика

МАГИСТЕРСКАЯ ДИССЕРТАЦИЯ

Тема работы Колебательно-вращательный анализ спектров высокого разрешения молекулы $^{12}\text{C}_2\text{H}_2\text{D}_2$-тран
--

УДК 539.194

Студент

Группа	ФИО	Подпись	Дата
ОБМ71	Гиниятова Айгерим Болатовна		

Руководитель

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Профессор ИШФВП	Уленекон О.Н.	д.ф.-м.н.		

КОНСУЛЬТАНТЫ ПО РАЗДЕЛАМ:

По разделу «Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение»

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Доцент ОСГН ШБИП	Меньшикова Е.В	к.ф.н		

По разделу «Социальная ответственность»

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Старший преподаватель ООД	Исаева Е.С			

ДОПУСТИТЬ К ЗАЩИТЕ:

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

Томск – 2019 г.

РЕЗУЛЬТАТЫ ОБУЧЕНИЯ

Код результата	Результат обучения (Выпускник должен быть готов)	Требования ФГОС, критериев и/или заинтересованных сторон
<i>Общекультурные (универсальные) компетенции</i>		
P1	Понимает необходимость самостоятельного обучения и повышения квалификации в течение всего периода профессиональной деятельности.	Требования ФГОС (ОК-7), критерий 5 АИОР
P2	Проявляет способность эффективно работать самостоятельно в качестве члена команды по междисциплинарной тематике, быть лидером в команде, консультировать по вопросам проектирования научных исследований, а также быть готовым к педагогической деятельности.	Требования ФГОС (ОК-6, ПК-11), критерий 5 АИОР
P3	Умеет находить зарубежных и отечественных партнеров, владеет иностранным языком, позволяющим работать с зарубежными партнерами с учетом культурных, языковых и социально-экономических условий.	Требования ФГОС (ОК-2, ОК-4), критерий 5 АИОР
P4	Проявляет понимание используемых методов, области их применения, вопросов безопасности и здравоохранения, юридических аспектов, ответственности за профессиональную деятельность и ее влияния на окружающую среду.	Требования ФГОС (ОК-3), критерий 5 АИОР
P5	Следует кодексу профессиональной этики, ответственности и нормам научно-исследовательской деятельности.	Требования ФГОС (ОК-5), критерий 5 АИОР
<i>Профессиональные компетенции</i>		
P6	Проявляет глубокие естественнонаучные, математические профессиональные знания в проведении научных исследований в перспективных областях профессиональной деятельности.	Требования ФГОС (ОК-1, ПК-1), критерий 5 АИОР
P7	Принимает участие в фундаментальных исследованиях и проектах в области физики низких температур, конденсированного состояния и материаловедения, а также в модернизации современных и создании новых методов изучения механических, электрических, магнитных и тепловых свойств твердых, жидких и газообразных веществ.	Требования ФГОС (ПК-2), критерий 5 АИОР
P8	Способен обрабатывать, анализировать и обобщать научно-техническую информацию, передовой отечественный и зарубежный опыт в профессиональной деятельности, осуществлять презентацию научной деятельности.	Требования ФГОС (ПК-4), критерий 5 АИОР
P9	Способен применять полученные знания для решения нечетко определенных задач, в нестандартных ситуациях, использует творческий	Требования ФГОС (ПК-3), критерий 5 АИОР

	<p>подход для разработки новых оригинальных идей и методов исследования в области физики конденсированного состояния, низких температур и сжижения природного газа.</p>	
P10	<p>Способен планировать проведение аналитических имитационных исследований по профессиональной деятельности с применением современных достижений науки и техники, передового отечественного и зарубежного опыта в области научных исследований, умеет критически оценивать полученные теоретические и экспериментальные данные и делает выводы, знает правовые основы в области интеллектуальной собственности.</p>	<p>Требования ФГОС (ОК-4, ПК-6, ПК-7, ПК-8, ПК-9), критерий 5 АИОР</p>
P11	<p>Умеет интегрировать знания в различных и смежных областях научных исследований и решает задачи, требующие абстрактного и креативного мышления и оригинальности в разработке концептуальных аспектов проектов научных исследований.</p>	<p>Требования ФГОС (ОК-5, ПК-10), критерий 5 АИОР</p>

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 (специальность) _____ 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:

Магистерской диссертации

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

Студенту:

Группа	ФИО
ОБМ71	Гиниятова Айгерим Болатовна

Тема работы:

Колебательно-вращательный анализ спектров высокого разрешения молекулы $^{12}\text{C}_2\text{H}_2\text{D}_2$-тран	
Утверждена приказом директора (дата, номер)	

Срок сдачи студентом выполненной работы:

--	--

ТЕХНИЧЕСКОЕ ЗАДАНИЕ:

<p>Исходные данные к работе</p> <p><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></p>	<p>Объект исследования: Изотополог молекулы этилена</p>
---	---

<p>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></p>	<p>Обзор литературы. Интерпретация спектра молекулы $^{12}\text{C}_2\text{H}_2\text{D}_2$- транс. Решение обратной спектроскопической задачи (получение спектроскопических постоянных). Раздел «Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение» Раздел «Социальная ответственность»</p>
---	---

<p>Перечень графического материала <i>(с точным указанием обязательных чертежей)</i></p>	
---	--

Консультанты по разделам выпускной квалификационной работы
(с указанием разделов)

Раздел	Консультант
Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение	Меньшикова Е.В.
Социальная ответственность	Исаева Е.С.

Названия разделов, которые должны быть написаны на русском и иностранном языках:

ГЛАВА 1. МЕТОДЫ ТЕОРЕТИЧЕСКОГО ИССЛЕДОВАНИЯ КОЛЕБАТЕЛЬНО-ВРАЩАТЕЛЬНЫХ СПЕКТРОВ
1.1. Эффективный гамильтониан
1.2. Приближение Борна – Оппенгеймера
1.3. Метод комбинационных разностей
1.4. Полуклассическая теория взаимодействия излучения с веществом
1.5. Эффективный дипольный момент

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

Задание выдал руководитель:

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Профессор ИШФВП	Уленев О.Н.	д.ф.-м.н., профессор		

Задание принял к исполнению студент:

Группа	ФИО	Подпись	Дата
ОБМ71	Гиниятова Айгерим Болатовна		

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 (специальность) Физика
 Уровень образования Экспериментальная физика
 Отделение школы (НОЦ) Магистр
 Период выполнения (осенний / весенний семестр 2018 /2019 учебного года)

Форма представления работы:

Магистерская 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)
01.08.2018	<i>Обзор литературы</i>	10
10.12.2018	<i>Объект и методы исследования; Расчеты и аналитика</i>	40
01.02.2019	<i>Результаты проведенного исследования</i>	30
01.05.2019	<i>Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение</i>	10
01.05.2019	<i>Социальная ответственность</i>	10

СОСТАВИЛ:

Руководитель ВКР

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Профессор ИШФВП	Уленеков О.Н.	д.ф.-м.н., профессор		

СОГЛАСОВАНО:

Руководитель ООП

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

Реферат

Выпускная квалифицированная работа состоит из 153 страниц, 10 рисунков, 24 таблиц, 29 источников, 3 приложения.

Ключевые слова: этилен, молекулярные спектры, правило отбора, спектроскопические постоянные.

Объект исследования – молекула $^{12}\text{C}_2\text{H}_2\text{D}_2$ -транс.

В рамках выполнения данной работы был проинтерпретирован спектр в районе полос $\nu_2+\nu_{10}$, $\nu_3+\nu_4$, ν_9 . В результате было определено около 900 колебательно-вращательных переходов для полосы $\nu_2+\nu_{10}$, около 140 колебательно-вращательных переходов для полосы $\nu_3+\nu_4$ и около 2700 колебательно-вращательных переходов для полосы ν_9 . Решена обратная спектроскопическая задача. Полученный набор параметров воспроизводит исходные экспериментальные колебательно-вращательные энергии с точностью $d_{rms}=8.1*10^{-4} \text{ см}^{-1}$, $d_{rms}=6.6*10^{-4} \text{ см}^{-1}$, $d_{rms}=3.8*10^{-4} \text{ см}^{-1}$, соответственно для каждой выше перечисленных полос.

Области применения:

- Международные и российские базы данных для спектроскопических постоянных;
- Физика, химия, астрофизика, планетология, атмосферная оптика.

Содержание

ВВЕДЕНИЕ.....	11
ГЛАВА 1. МЕТОДЫ ТЕОРЕТИЧЕСКОГО ИССЛЕДОВАНИЯ КОЛЕБАТЕЛЬНО-ВРАЩАТЕЛЬНЫХ СПЕКТРОВ.....	14
1.1. Эффективный гамильтониан.....	14
1.2. Приближение Борна – Оппенгеймера.....	17
1.3. Метод комбинационных разностей.....	19
1.4. Полуклассическая теория взаимодействия излучения с веществом..	20
1.5. Эффективный дипольный момент.....	25
ГЛАВА 2. ИССЛЕДОВАНИЕ СПЕКТРОВ ВЫСОКОГО РАЗРЕШЕНИЯ МОЛЕКУЛЫ $^{12}\text{C}_2\text{H}_2\text{D}_2$ -ТРАНС В ДИАПАЗОНЕ $2100\text{-}2500\text{ CM}^{-1}$	27
2.1. Экспериментальные условия.....	27
2.2. Анализ положения линий комбинационной полосы $\nu_2+\nu_{10}$ и $\nu_3+\nu_4$	28
2.3. Определение спектроскопических параметров.....	32
Таблица 3 – Спектроскопические параметры, полученные в результате решения обратной задачи (в cm^{-1}).....	32
ГЛАВА 3. ИССЛЕДОВАНИЕ СПЕКТРОВ ВЫСОКОГО РАЗРЕШЕНИЯ МОЛЕКУЛЫ $^{12}\text{C}_2\text{H}_2\text{D}_2$ -ТРАНС В ДИАПАЗОНЕ $2800\text{-}3300\text{ CM}^{-1}$	35
3.1. Экспериментальные условия.....	35
3.2. Анализ колебательно-вращательного спектра и получение параметров гамильтониана фундаментальной полосы ν_9	36
3.3. Некоторые сведения об определении интенсивностей спектральных линий.....	39
3.4. Анализ интенсивностей линий в полосе ν_9	40
ГЛАВА 4. ФИНАНСОВЫЙ МЕНЕДЖМЕНТ, РЕСУРСОЭФФЕКТИВНОСТЬ И РЕСУРСОСБЕРЕЖЕНИЕ.....	46
4.1. Оценка коммерческого потенциала и перспективности проведения научных исследований с позиции ресурсоэффективности и ресурсосбережения.....	46
4.1.1. Потенциальные потребители результатов исследования.....	46
4.1.2. SWOT-анализ.....	47

4.1.3. Диаграмма Исикавы	48
4.1.4. Инициация проекта	51
4.1.5. Организационная структура и план проекта	51
4.1.6. Бюджет научного исследования	53
4.1.7. Реестр рисков проекта.....	57
Выводы	58
ГЛАВА 5. СОЦИАЛЬНАЯ ОТВЕТСТВЕННОСТЬ	62
5.1 Правовые и организационные вопросы обеспечения безопасности	62
5.1.1. Специальные (характерные для рабочей зоны исследователя) правовые нормы трудового законодательства.	63
5.1.2. Организационные мероприятия при компоновке рабочей зоны исследователя.	63
5.2. Вредные факторы проектируемой производственной среды.....	65
5.2.1. Отклонение показателей микроклимата.....	66
5.2.2. Превышение уровня шума	67
5.2.3. Недостаток естественного света, освещенности рабочей зоны	68
5.2.1. Повышенное значение напряжения в электрической цепи, замыкание которой может произойти через тело человека	72
5.2.2. Пожаровзрывоопасность	74
5.3. Организационные мероприятия обеспечения безопасности	75
5.4. Экологическая безопасность. Анализ влияния процесса исследования на окружающую среду. Обоснование мероприятий по защите окружающей среды.	76
5.5. Защита в чрезвычайных ситуациях	77
Выводы	78
СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ.....	79
ЗАКЛЮЧЕНИЕ	83
СПИСОК ПУБЛИКАЦИЙ И АПРОБАЦИЯ РАБОТЫ	84
ПРИЛОЖЕНИЕ А	85
ПРИЛОЖЕНИЕ Б.....	106

ВВЕДЕНИЕ

Одной из основных задач спектроскопии высокого разрешения является определение фундаментальных свойств на основе анализа её тонкой колебательно-вращательной структуры. Молекулярная спектроскопия и её методы дают возможности извлечь из полученной экспериментальной информации структурные постоянные, параметры силового поля, дипольные моменты, моменты инерции, энергетическую колебательно-вращательную структуру [1] для определения внутримолекулярной потенциальной функции (ВМПФ) молекул. Т.е. параметры спектральных линий, определяемые из анализа колебательно-вращательных линий, содержат информацию о фундаментальных характеристиках молекулы (структурные постоянные, силовое поле, дипольный момент). В последнее время большое развитие получили полуэмпирические методы определения ВМПФ на основе использования высокоточной спектроскопической информации не только об основной модификации молекулы, но и её изотопологов. Таким образом, исследование спектров дейтерированных модификаций молекулы этилена является важным, актуальным и своевременным.

Вышеперечисленная информация является важной при решении многих академических и прикладных задач физики, химии, астрофизики, атмосферной оптики и других областей науки [2-3].

Исследуемая молекула является дважды дейтерированным изотопологом молекулы C_2H_4 . Этилен, в свою очередь, является компонентом атмосферы планеты Земля, который оказывает влияние на химический состав атмосферы и глобальный климат. Несомненно, концентрацию этилена в атмосфере необходимо контролировать. У растений этилен является растительным гормоном, влияющим на биохимию растений и играет важную роль в химии тропосферы и генерации озона [4-6]. С другой стороны, этилен – самое производимое органическое соединение в мире. Он применяется в получении

пластмасс, взрывчатых веществ, и многое другое. В связи с этим он является антропогенным органическим загрязнителем [7-8].

В настоящей работе представляется исследование колебательно-вращательных состояний, принадлежащих колебательным состояниям ($\nu_3=\nu_4=1$, A_u), ($\nu_2=\nu_{10}=1$, B_u), ($\nu_9=1$, B_u).

Цель настоящей научной исследовательской работы: – исследование резонансных взаимодействий в многоатомной молекуле на примере изотополога этилена $^{12}\text{C}_2\text{H}_2\text{D}_2$ -транс, основанное на высокоточных экспериментальных данных сильно резонирующих полос $\nu_3+\nu_4$, $\nu_2+\nu_{10}$ и фундаментальной полосы ν_9 в диапазоне 2100 – 3300 cm^{-1} .

Реализация поставленной цели заключается в решении следующих **задач**:

1. исследование колебательно-вращательной структуры и резонансных взаимодействий в состояниях ($\nu_3=\nu_4=1$, A_u), ($\nu_2=\nu_{10}=1$, B_u) и ($\nu_9=1$, B_u) молекулы $^{12}\text{C}_2\text{H}_2\text{D}_2$ -транс;
2. решение обратной спектроскопической задачи и определение спектроскопических параметров указанных состояний;
3. анализ абсолютных интенсивностей в полосе ν_9 .

Основные методы исследования: выше указанные задачи были реализованы методом комбинационных разностей и с помощью программного обеспечения UltraEdit и Peaks Finder.

Научные положения, выносимые на защиту:

1. Корректное описание вращательной структуры колебательных состояний ($\nu_2=\nu_{10}=1$) и ($\nu_3=\nu_4=1$) возможно только при учете сильного резонансного взаимодействия между ними.
2. Было показано, что для воспроизведения с точностью не хуже 2% интенсивностей изолированных линий в полосе ν_9 достаточно двух параметров (Δ_2 , ν_{vc}) в модели контура линии.

Научная новизна.

Благодаря уникальной аппаратуре Технологического университета Брауншвейга (Германия), удалось значительно дополнить существующую

информацию по фундаментальной полосе ν_9 , которая ранее изучалась в 1969-м году в работе С. Di Lauro и А. Panunzi [9].

Инфракрасные спектры высокого разрешения, зарегистрированные при различных экспериментальных условиях в районе полос $\nu_3+\nu_4$ и $\nu_2+\nu_{10}$, позволили получить новую спектроскопическую информацию о ранее неизученных колебательно-вращательных состояниях. Информация по спектральному диапазону, в котором локализованы полосы $\nu_3+\nu_4$ и $\nu_2+\nu_{10}$, а именно $2100-2500 \text{ см}^{-1}$, отсутствует в литературе.

ГЛАВА 1. МЕТОДЫ ТЕОРЕТИЧЕСКОГО ИССЛЕДОВАНИЯ КОЛЕБАТЕЛЬНО-ВРАЩАТЕЛЬНЫХ СПЕКТРОВ

Для нашей задачи необходим гамильтониан, который будет зависеть от координат и спинов всех частиц, которые образуют молекулы и учитывают все виды взаимодействия между этими частицами. Построение такого гамильтониана является сложной задачей. А решение уравнения Шредингера с таким гамильтонианом - еще более сложная задача. Поэтому необходимо использовать различного рода приближения для решения таких задач.

1.1. Эффективный гамильтониан

Для решения уравнения Шредингера для многоатомных молекул используется теория возмущений. Исходный гамильтониан H исследуемой молекулы разбивается на две части [10]:

$$H(w) = H_0(w) + h(w), \quad (1.1)$$

где $H_0(w)$ – оператор Гамильтона, решения уравнения Шредингера с которым известно, $h(w)$ – малая добавка к оператору $H_0(w)$ ($h(w) \ll H_0(w)$), w – совокупность переменных, от которых зависит H , а также H_0 и h .

Рассмотрим электронно-колебательно-вращательный гамильтониан, где оператор h выражается в виде $\sum_{n=1}^{\infty} H_n(\kappa^n)$:

$$H = H_0 + \sum_{n=1}^{\infty} H_n(\kappa^n), \quad (1.2)$$

где $H_n(\kappa^n)$ – оператор порядка малости κ^n по отношению к оператору H_0 ($H_n \ll H_0$ на порядок малости κ^n).

Однако, оператор в виде выражения (1.2) существенно отличается от оператора (1.1), так как h должен зависеть от вращательных и колебательных координат.

$$H = H_0(w) + h(w, v), \quad (1.3)$$

В указанной задаче поправки к собственным значениям и собственным функциям являются искомыми величинами, которые в теории возмущения образуются в виде суммы различных комбинаций матричных элементов (чисел) $\langle \psi | h(w) | \psi' \rangle$. Однако матричные элементы операторов $h(w, v)$ на собственных функциях операторов $H_0(w)$ представляют собой операторы.

Данный случай усложняет решение задачи, то есть применение теории возмущений для молекулярных задач не приводит к точному решению уравнения Шредингера. Поэтому чтобы решить подобного рода задачу был сформулирован специальный метод решения – модель эффективного гамильтониана, которая излагается в следующем подразделе.

Как сказано выше, решение уравнения Шредингера с гамильтонианом, описывающим многоатомные молекулы, является сложной задачей или не решается вовсе. В таком случае используется модель эффективного гамильтониана. Для этого необходимо построить эрмитов оператор H' , который будет обладать следующими свойствами:

1. Решение уравнения с данным оператором имеет явный вид;
2. Множество всех решений (N') уравнения с оператором H' совпадает с неким подмножеством (N) множества (A) всех решений уравнения с исходным оператором H .

Оператор H' , обладающий указанными свойствами, называют эффективным гамильтонианом.

Рассмотрим оператор Гамильтона в выражении (1.1). E_w и $|\psi_w\rangle$ – собственные значения энергий и собственные функции оператора H_0 , при этом $|\psi_w\rangle$ – это полный ортогональный набор функций, зависящих от переменных w . Пусть некоторый произвольный набор функций $|\alpha\rangle$, зависит от переменных p и удовлетворяет условию полноты и ортонормированности. Тогда функции $|\psi_w, \alpha\rangle = |\psi_w\rangle |\alpha\rangle$ образует полный набор ортонормированных функций в рассматриваемом гильбертовом пространстве, в котором действует оператор вида (1.1), для нахождения собственных значений и собственных функций

оператора (1.1) нужно построить матрицу эрмитова оператора H на функциях $|\psi_w, \alpha\rangle$, диагонализировать её и выполнить унитарное преобразование:

$$H \rightarrow H' = U^+ H U, \quad (1.4)$$

Элементы диагональной матрицы H' являются собственными значениями исходного оператора H . Собственные функции будут записываться в следующем форме:

$$\varphi_\beta(w, v) = \sum_{\psi, \alpha} U_{\beta, \psi \alpha} |\psi, \alpha\rangle, \quad (1.5)$$

где $U_{\beta, \psi \alpha}$ – элементы унитарной матрицы U , которая диагонализует исходную. Однако решение задач по данному алгоритму невозможно. Потому что собственные функций оператора начального приближения $|\psi\rangle$ образуют бесконечномерный базис. Следовательно H , H' , U , матрицы являются бесконечномерными. В результате диагонализация матрицы H представляется невозможной.

Построение и диагонализация матрицы H выполняется следующим образом:

1. Построить матрицу $\langle \psi | H | \beta \rangle$ на функциях $|\psi\rangle$;
2. Построить и диагонализировать матрицу $\langle i | \langle \psi | H | \beta \rangle | j \rangle$.

Элементы матрицы $\langle \psi | H | \beta \rangle$ будут отличны от нуля. При построении числовой матрицы $\langle i | \langle \psi | H | \beta \rangle | j \rangle$, процедура определения собственных значений и собственных функций оператора H сведётся к процедуре простой диагонализации.

Второй вариант – вместо оператора H мы берем новый оператор H' :

$$H \rightarrow H' = G^+ H G, \quad (1.6)$$

где G – произвольный унитарный оператор, который выбирается таким образом, чтобы оператор $(G-I)$ был малым по сравнению с единичным. Данное условие будет выполнимо, если оператор будет выражаться как сумма малых операторов g :

$$G = \exp(i \sum_{n=1}^{\infty} g_n(\kappa^n)), \quad (1.7)$$

где $g_n = g_n(w, p)$ – малые эрмитовы операторы порядка κ^n . Затем строится матрица $\langle \psi | H' | \beta \rangle$. Оператор G – произвольный унитарный оператор, который является функцией от колебательных и вращательных координат, при котором некоторые матричные элементы $\langle \psi | H' | \beta \rangle$ обратятся в ноль. Для этого гильбертово пространство L_ψ волновых функций $|\psi\rangle$ разбивается на два произвольных подпространства L_{ψ_0} и $L_{\psi'}$, таким образом, чтобы удовлетворялось следующее условие:

$$L_\psi = L_{\psi_0} + L_{\psi'}, \quad (1.8)$$

где пространство L_{ψ_0} – бесконечномерное пространство. Все матричные элементы $\langle \psi | H' | \beta \rangle$ разбивается на следующие совокупности элементов:

$$\langle \psi^0 | H' | \beta^0 \rangle, \langle \psi^0 | H' | \beta' \rangle, \langle \psi' | H' | \beta^0 \rangle, \langle \psi' | H' | \beta' \rangle, \quad (1.9)$$

Оператор G выбирается так, чтобы элементы типа $\langle \psi^0 | H' | \beta' \rangle$ и $\langle \psi' | H' | \beta^0 \rangle$ обратились в ноли.

$$\langle \psi | H' | \beta \rangle = \begin{pmatrix} H_{\text{эфф}}^* & 0 & \dots \\ 0 & 0 & \dots \\ \dots & \dots & \dots \end{pmatrix}, \quad (1.10)$$

Оператор $H_{\text{эфф}}^*$ является эффективным оператором – гамильтонианом системы состояний.

1.2. Приближение Борна – Оппенгеймера

В приближении Борна – Оппенгеймера рассматриваются вопросы о внутримолекулярной потенциальной функции и о равновесной структуре молекулы, которые и являются одной из задач молекулярной спектроскопии. Гамильтониан свободной молекулы в отсутствии внешних полей записывается в виде сумм энергии ядер, электронов и их кулоновских взаимодействий [11]:

$$H = T_{\text{я}} + T_{\text{е}} + V, \quad (1.11)$$

где $T_{\text{я}}$ и $T_{\text{е}}$ – операторы кинетической энергии ядер и электронов соответственно, V – оператор потенциальной энергии молекулы.

Гамильтониан, который рассматривается в теории возмущений, как уже говорилось в разделе 1.1, учитывает различные малые релятивистские добавки, эффекты связанные с спин - спиновым взаимодействием.

Для точного решения уравнения Шредингера с гамильтонианом для многоатомных молекул невозможно, но получить решение данного уравнения с преобразованным видом гамильтониана, который разбивается на три части, различных по порядку малости:

$$H = H_{\text{е}} + \Delta H_1 + \Delta H_2, \quad (1.12)$$

где

$$H_{\text{е}} = \frac{1}{2m_{\text{е}}} \sum_{i\alpha} P_{i\alpha}^2 + V, \quad (1.13)$$

$$\Delta H_1 = \sum_{\alpha} \frac{P_{\alpha}^2}{2M} + \frac{1}{2} \sum_{\lambda} P_{\lambda}^2 + \frac{1}{2} \sum_{\alpha\beta} \tilde{\mu}_{\alpha\beta} (J_{\alpha} - G_{\alpha})(J_{\beta} - G_{\beta}), \quad (1.14)$$

$$\Delta H_2 = \frac{1}{2M_N} \sum_{\alpha} (\sum_i P_{i\alpha})^2 + \frac{1}{2} \sum_{\alpha\beta} \tilde{\mu}_{\alpha\beta} (L_{\alpha} L_{\beta} - (J_{\alpha} - G_{\alpha})L_{\beta} - L_{\alpha}(J_{\beta} - G_{\beta})), \quad (1.15)$$

Решение уравнения Шредингера в приближении Борна – Оппенгеймера разбивается на две части, в которых рассматриваются движения электронов в поле медленного движущихся ядер и движения ядер в эффективном поле электронов.

Реализация решения первой задачи соответствует решению стационарного уравнения Шредингера с гамильтонианом вида:

$$H_{\text{el}} \varphi_n^{\text{el}}(\Delta r_{NK}) = E_n(\Delta r_{NK}) \varphi_n^{\text{el}}(\Delta r_{NK}) \equiv V_n(\Delta r_{NK}) \varphi_n^{\text{el}}(\Delta r_{NK}), \quad (1.16)$$

Полученные собственные функции и собственные значения гамильтониана $H_{\text{е}}$ зависят от параметра и от расстояний между ядрами Δr_{NK} в молекуле. Некоторая параметризация точек $V_n(\Delta r_{NK})$ и называется потенциальной функцией молекулы.

В приближении Борна – Оппенгеймера учитывается отношение масс электрона и протона, $m_p = 1836m_e$, и, как вследствие, движения ядерной подсистемы происходит медленнее, чем электронной. Поэтому в некоторых задачах, например в структурной химии, конфигурация ядер принимается фиксированным. Поэтому ядерная конфигурация молекулы стабильно относительно малых колебаний ядер характеризует молекулярную структуру в принятом приближении [12-13].

1.3. Метод комбинационных разностей

При анализе спектра исследуемой молекулы применяется метод комбинационных разностей. Суть данного метода заключается в следующем. Энергетическая структура основного состояния известна с высокой точностью, она определяется из анализа микроволновых спектров. При взаимодействии электромагнитного излучения с молекулой происходит несколько переходов с основного колебательного состояния на один и тот же уровень возбуждённого колебательного состояния [14].

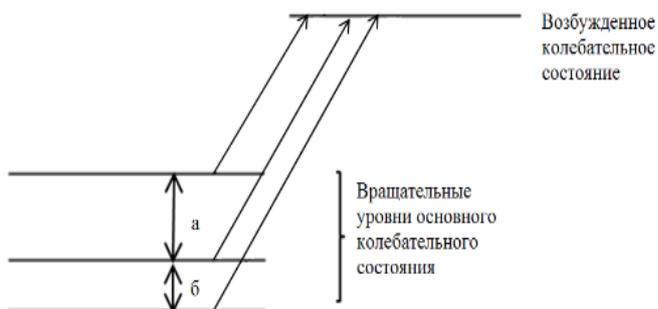


Рисунок 1 – Иллюстрация метода комбинационных разностей.

Цель данной работы – отыскание энергий возбужденного колебательного состояния. Для этого необходимо знать разницы между энергетическими уровнями основного колебательного состояния. Расстояния между вращательными уровнями основного колебательного состояния с высокой точностью. Можно сделать «линейку», расстояния между делениями

которой будут соответствовать расстояниям между вращательными уровнями основного колебательного состояния (см. Рис.2).

Далее полученную «линейку» мы будем двигать по спектру. Так как были переходы с основного состояния на возбужденное колебательное состояние, то в спектре должны быть такие три линии, которые расположены друг от друга на такие же расстояния (см. Рис.2). Таким образом, зная положения энергий основного состояния, длины волн переходов, можно определить энергии верхних уровней – возбужденных состояний. Двигая «линейку» по спектру, можем обнаружить ещё несколько линий, которые совпадут с делениями «линейки». Из числа обнаруженных линий нужно найти верную комбинацию переходов. Описанный процесс является одним из способов интерпретации спектров [15].

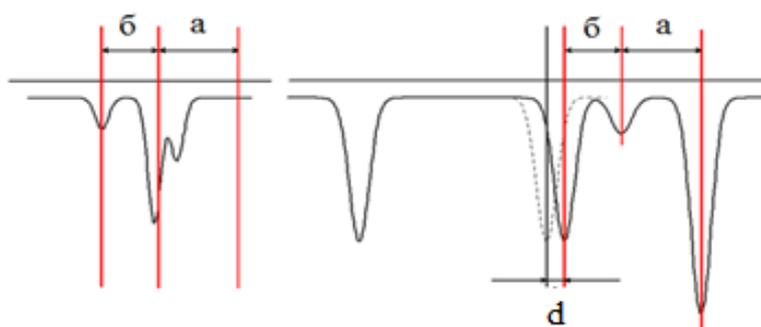


Рисунок 2 – Иллюстрация движения «линейки» по спектру.

Точное совпадение линий спектра с делениями «линейки» в процессе идентификации маловероятно. Учитывая это, задается точность поиска d , т.е. если центр линии спектра отклонился от деления «линейки» на величину меньшую или равную d , то данная линия попадает в выборку.

1.4. Полуклассическая теория взаимодействия излучения с веществом

Как уже упоминалось в разделе 1.1 данной работы, для описания молекулы как квантово-механической системы необходимо решить уравнение Шрёдингера с правильным гамильтонианом этой молекулы. Для молекулы,

помещенной в поле, гамильтониан записывается выражением (1.1). Для невозмущенной системы состояние определяется из уравнения:

$$i\hbar \frac{\delta\Psi}{\delta t} = H\Psi, \quad (1.17)$$

где $\Psi(r, t)$ – собственная функция гамильтониан от координат и времени. Собственные функции гамильтониана, которые представляются в следующем виде:

$$\Psi(r, t) = \sum_{\alpha} b_{\alpha}^i(t) \varphi_{\alpha}(r), \quad (1.18)$$

где $\varphi_{\alpha}(r)$ – собственные волновые функции оператора H_0 в уравнений (1.1). Коэффициент $b_{\alpha}^i(t)$ имеет вид:

$$b_{\alpha}^i(t) = \exp\left(-\frac{i\varepsilon_{\alpha}t}{\hbar} C_{\alpha}^i(t)\right), \quad (1.19)$$

Подставив разложение (1.18) в уравнение (1.1) получим $C_{\alpha}^i(t)$ коэффициент:

$$\frac{dC_{\alpha}^i(t)}{dt} = \frac{1}{i\hbar} \sum_l h_{\alpha l} \exp(i \frac{E_{\alpha}-E_l}{\hbar} t) C_l^i(t), \quad (1.20)$$

где $h_{\alpha l} = \langle \alpha | h | l \rangle$ – матричный элемент оператора h . При выводе уравнений (1.20) частота переходов имеет вид $w_{\alpha l} = \frac{E_{\alpha}-E_l}{\hbar}$. Подробный вывод коэффициента рассматривается в работе [16] и в итоге коэффициент записывается в выражении:

$$C_{\alpha}^{\beta} = -\frac{w_{\alpha\beta}}{2\hbar c} (\vec{A}_0 \vec{D})_{\alpha\beta} \left\{ \frac{\exp(i(w_{\alpha\beta}-w)t-1)}{i(w_{\alpha\beta}-w)} \right\} - \frac{w_{\alpha\beta}}{2\hbar c} (\vec{A}_0 \vec{D}) \left\{ \frac{\exp(i(w_{\alpha\beta}+w)t-1)}{i(w_{\alpha\beta}+w)} \right\}, \quad (1.21)$$

В момент поглощения частоты внешнего поля и перехода являются относительно равными величинами, т.е. $w=w_{\alpha\beta}$. Следовательно, разница между частотами $(w_{\alpha\beta} - w)$ – мала, поэтому вторым слагаемым можно пренебречь в уравнении (1.21). Квадрат коэффициента $|C_{\alpha}^{\beta}|^2(t) = P_{\alpha\beta}(w, t)$ – вероятность заселённости молекулы в стационарном состоянии $|\alpha\rangle$ в момент времени t , где

$|\beta\rangle$ – стационарное состояние в начальной момент времени.

Вероятность вынужденного перехода на всех частотах w_s имеет вид:

$$P_{\alpha\beta}(t) = \int_0^\infty P_{\alpha\beta}(w_s, t) dw_s, \quad (1.22)$$

При $t \rightarrow \infty$, где t является временем наблюдения, то (1.22) преобразуется:

$$P_{\alpha\beta}(t \rightarrow \infty) = \lim_{t \rightarrow \infty} \int_0^\infty dw_s \frac{tw_{\alpha\beta}^2}{2\hbar^2 c^2} ([(\vec{A}_0 \vec{D})_{\alpha\beta}]^2 \frac{\sin^2 \left[\frac{t}{2} (w_{\alpha\beta} - w) \right]}{\left[\frac{t}{2} (w_{\alpha\beta} - w) \right]^2} + [(\vec{A}_0 \vec{D})_{\alpha\beta}]^2 \frac{\sin^2 \left[\frac{t}{2} (w_{\alpha\beta} + w) \right]}{\left[\frac{t}{2} (w_{\alpha\beta} + w) \right]^2}), \quad (1.23)$$

Но также $(w_{\alpha\beta} - w)$ является функцией t , \vec{A}_0 – векторный потенциал, \vec{D} – произвольный вектор. При $t \rightarrow \infty$ функция $(w_{\alpha\beta} - w)$ будет выглядеть как пик, который затухающего колебания (см. Рис.3). Высота пика пропорционален t , а ширина пропорционален $1/t$.

При достаточно долгом наблюдении для определения интенсивности применяется функция Дирака:

$$\delta(\alpha - \beta) = \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{2}{\pi} \frac{[\sin(\alpha - \beta) \frac{x}{2}]^2}{(\alpha - \beta)^2 x}, \quad (1.24)$$

Вероятность перехода для поглощения и излучения в единицу времени, так называемая константа скорости перехода:

$$\frac{P_{\alpha\beta}(t)}{t} = \frac{|w_s|}{6h\varepsilon_0} |\vec{D}_{\alpha\beta}| n_s \delta_{\tilde{n}, n-1} + \frac{|w_s|}{6h\varepsilon_0} |\vec{D}_{\alpha\beta}| n_s \delta_{\tilde{n}, n+1}, \quad (1.25)$$

Количественное значение константы $P_{\alpha\beta}/t$ получается путем интегрировании по частоте. Для начала введем следующие понятие $\frac{\Sigma E_s}{V} = \rho(w_s)$ – спектральная плотность излучения, где E_s – энергия поля.

$$\frac{P_{\alpha\beta}(t)}{t} = B_{\beta \rightarrow \alpha} \rho(w_s) \delta_{\tilde{n}, n-1} + B_{\beta \leftarrow \alpha} \rho(w_s) \delta_{\tilde{n}, n+1} + A_{\beta \leftarrow \alpha} \delta_{\tilde{n}, n+1}, \quad (1.26)$$

где $B_{\beta \rightarrow \alpha}$ ($B_{\beta \leftarrow \alpha}$) – коэффициенты Эйнштейна для вынужденного поглощения (излучения), $A_{\beta \leftarrow \alpha}$ – коэффициент произвольного излучения.

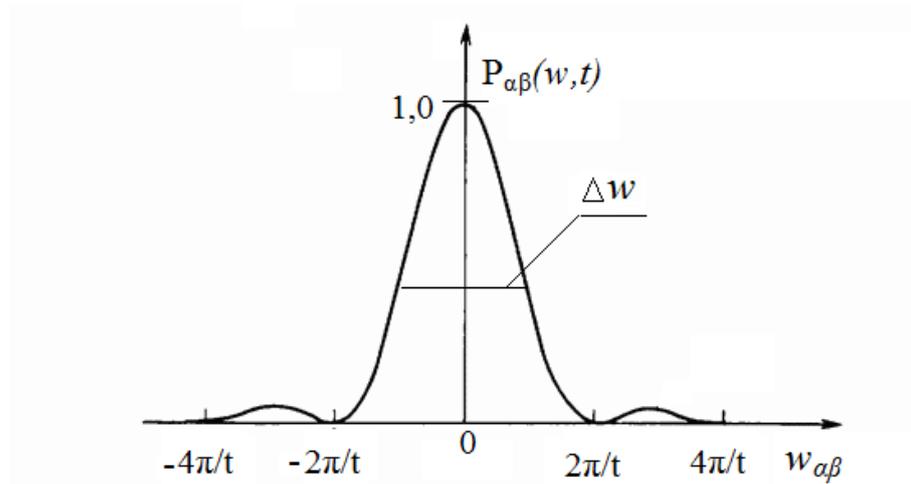


Рисунок 3 – Зависимость вероятности перехода $P_{\alpha\beta}(w, t)$ от частоты.

Когда $(w_{\alpha\beta} - w) \rightarrow 0$, то $P_{\alpha\beta}(w, t)$ имеет максимальное значение и она пропорциональна t^2 ,

$$\lim_{(w_s - w) \rightarrow 0} P_{\alpha\beta}(w, t) = \frac{w_{\alpha\beta}^2 (|\langle \vec{A}_0 \vec{D} \rangle|_{\alpha\beta})^2}{4h^2 c^2} t^2 = P_{max}, \quad (1.27)$$

Переходим к рассмотрению интенсивности линии поглощения. Энергия, поглощаемая в единице объема в единицу времени [17]:

$$E_w = c \rho_w k_w, \quad (1.28)$$

где ρ_w – плотность излучения на частоте w , k_w – спектральный показатель поглощения.

Согласно тому, что энергия поглощается квантами, то число поглощенных фотонов на заданной частоте $N = E_w / (\hbar w)$. Фотоны поглощённых в единице объема и в единице времени в интервале частоты Δw по количеству будут равны числу переходов N_{trs} в единице объема и в единице времени из состояния $|\beta\rangle$ в состояния $|\alpha\rangle$. При малых интервалах частот

плотность излучения относительно не меняется, то ρ можно заменить $\rho(w_{\alpha\beta})$.

Тогда:

$$N_{trs} \approx \frac{c\rho(w_{\alpha\beta})}{\hbar w} \int_{\Delta w} k(w)dw, \quad (1.29)$$

Вероятность вынужденных переходов, реализованные полем, $B_{\beta\leftarrow\alpha}\rho(w_{\alpha\beta})$ и $B_{\beta\rightarrow\alpha}\rho(w_{\alpha\beta})$ дает число переходов N_{tr} с энергетического уровня E_β на E_α :

$$N_{trs} = (N_\beta B_{\beta\rightarrow\alpha} - N_\alpha B_{\beta\leftarrow\alpha})\rho(w_{\alpha\beta}), \quad (1.30)$$

где $N_\beta(N_\alpha)$ – число молекул в единице объема в нижнем (в верхнем) квантовом состоянии. Из уравнений (1.29) и (1.30) получаем:

$$S_{\alpha\beta} = \int_{\Delta w} k_w dw = \frac{\hbar w_{\alpha\beta}}{c} (N_\beta B_{\beta\rightarrow\alpha} - N_\alpha B_{\beta\leftarrow\alpha}), \quad (1.31)$$

Величина $S_{\alpha\beta}$ есть интегральный показатель поглощения, т.е. интенсивность, $[\text{см}^{-1}\cdot\text{с}^{-1}]$.

При отсутствии воздействия внешнего излучения на элемент объема населенность уровней N_β и N_α будут определяются иными уравнениями, с учетом закона распределения Больцмана:

$$\begin{cases} N_\beta = \frac{N}{Z(T)} \exp\left(-\frac{E_\beta}{kT}\right) \\ N_\alpha = \frac{N}{Z(T)} \exp\left(-\frac{E_\alpha}{kT}\right) \end{cases}, \quad (1.32)$$

Здесь N – число частиц в единице объема, k – постоянная Больцмана, T – абсолютная температура, $E_\alpha(E_\beta)$ – энергия верхнего (нижнего) состояния молекулы. Статистическая сумма Z в термодинамическом равновесии из выражения (1.32) определяется как функция от температуры:

$$Z(T) = g_i \sum_i \exp\left(-\frac{E_i}{kT}\right), \quad (1.33)$$

где i – все возможные состояния молекулы.

В итоге уравнение (1.32) преобразуется в следующее уравнение [18]:

$$S_{\alpha\beta} = \frac{8\pi^3}{4\pi\epsilon_0 3hc} [1 - \exp(-\frac{hc\sigma}{kT})] N \frac{g_\alpha}{Z(T)} \exp(-\frac{hcE_\alpha}{kT}) |\vec{P}_{\alpha\beta}|^2, \quad (1.34)$$

где $\sigma = (E_\alpha - E_\beta)$ – частота перехода, g – статистический вес нижнего состояния. Макроскопические параметры необходимые для расчета интенсивности линии являются известными величинами. Для определения энергии, частоты переходов, матричного элемента дипольного момента (1.35):

$$P_{\alpha\beta} = \langle \alpha | P_Z | \beta \rangle, \quad (1.35)$$

необходимо знать точные волновые функции гамильтониана свободной молекулы, что и являются неизвестными.

1.5. Эффективный дипольный момент

При выполнении расчета интенсивностей колебательно-вращательных линий можно столкнуться с расчетом матричных элементов $\langle \Psi_\alpha | P_Z | \Psi_\beta \rangle$. Расчет матричных элементов требует знание точных волновых функции, т.е. знание собственных функции гамильтониана:

$$H = \frac{1}{2} \sum_\lambda P_\lambda^2 + \frac{1}{2} \sum_{\alpha\beta} \mu_{\alpha\beta} (J_\alpha - G_\alpha)(J_\beta - G_\beta) - \frac{\hbar^2}{8} \sum_\alpha \mu_{\alpha\alpha} + V(Q), \quad (1.36)$$

Оператор дипольного момента молекулы записывается в виде разложения по степеням колебательно-вращательных координат (1.36):

$$P_Z = \sum_\alpha k_{Z\alpha} (\mu_\alpha^0 + \sum_\lambda \mu_\alpha^\lambda q_\lambda + \sum_{\lambda,\nu \geq \lambda} \mu_\alpha^{\lambda\nu} q_\lambda q_\nu + \dots), \quad (1.37)$$

где $k_{Z\alpha}$ является коэффициентом матрицы направляющих косинусов.

Собственные значения гамильтониана вида (1.36) можно свести к определению собственных значений некоторого простого «эффективного оператора». Реализация перехода оператора H к H' рассматривалось в разделе 1.1, преобразование в выражений (1.3). При этом связь между собственными функциями для данных преобразуемых операторов записывается в выражении:

$$\Psi_\alpha = G\varphi_\alpha, \quad (1.38)$$

Если известны собственные функции эффективного оператора H' , то можно вместо выполнения расчетов матричных элементов от оператора P_Z на собственных функциях гамильтониана H , выполнить расчет соответствующих матричных элементов оператора $P'_Z = G^+ P_Z G$ на собственных функциях эффективного гамильтониана. Решение уравнения Шрёдингера с оператором H' решается после следующих выполняемых операций:

1. построения матрицы на колебательно-вращательных функциях
2. и её диагонализация.

В результате будут определены собственные значения E_α и собственные значения функции $\varphi_\alpha = \sum A_{i\alpha} |i\rangle$, где $|i\rangle$ – базисные функции гамильтониана H' по столбцу которой выполняется суммирование. Оператор P'_Z является функцией произвольных колебательных (q, p) и угловых $(k_{\alpha\beta}, J_\alpha)$ переменных. Оператор P'_Z можно записать в виде:

$$P'_Z = \sum_\alpha f^\alpha(q, p) k_{Z\alpha} + \sum_{\alpha\beta} f_\beta^\alpha(q, p) J_\beta k_{Z\alpha} + \sum_{\alpha\beta\gamma} f_{\beta\gamma}^\alpha(q, p) J_\beta J_\gamma k_{Z\alpha} + \dots \quad (1.39)$$

Для определения эффективного оператора дипольного момента, который включает параметры, характеризующие колебательно-вращательного состояния необходимо умножить разложение (1.39) на единичный вектор $\sum |v\rangle \langle \tilde{v}|$, где суммирование введется по всем ортонормированным волновым функциям образующим полную систему. В результате оператор P'_Z будет выражаться в следующем в виде:

$$P'_Z = \sum_{v\tilde{v}} |v\rangle \langle \tilde{v}| \sum_\alpha [\langle v| f^\alpha(q, p) | \tilde{v}\rangle + \sum_\beta \langle v| f_\beta^\alpha(q, p) | \tilde{v}\rangle J_\beta + \sum_{\beta\gamma} \langle v| f_{\beta\gamma}^\alpha(q, p) | \tilde{v}\rangle J_\beta J_\gamma + \dots] k_{Z\alpha}, \quad (1.40)$$

который позволит использовать экспериментальные данные об интенсивностях линии для расчета полного оператора (1.36) [14].

ГЛАВА 2. ИССЛЕДОВАНИЕ СПЕКТРОВ ВЫСОКОГО РАЗРЕШЕНИЯ МОЛЕКУЛЫ $^{12}\text{C}_2\text{H}_2\text{D}_2$ -ТРАНС В ДИАПАЗОНЕ 2100-2500 CM^{-1}

2.1. Экспериментальные условия

Исследуемый спектр зарегистрирован в лаборатории ИК-спектроскопии Брауншвейгского технического университета (Германия) (см Рис. 4). Эксперимент проводился на Фурье спектрометре Bruker IFS 120 в комбинации с многоходовой ячейкой Уайта из нержавеющей стали длиной 1 м. В качестве детектора использовался фотоприемник на основе полупроводникового соединения ртуть-кадмий-теллур. Эксперимент выполнялся при давлении 10 Па, при комнатной температуре, выполнено 300 сканирований.

Зарегистрированный спектр в районе 2100-2500 cm^{-1} представлен на Рисунке 4.

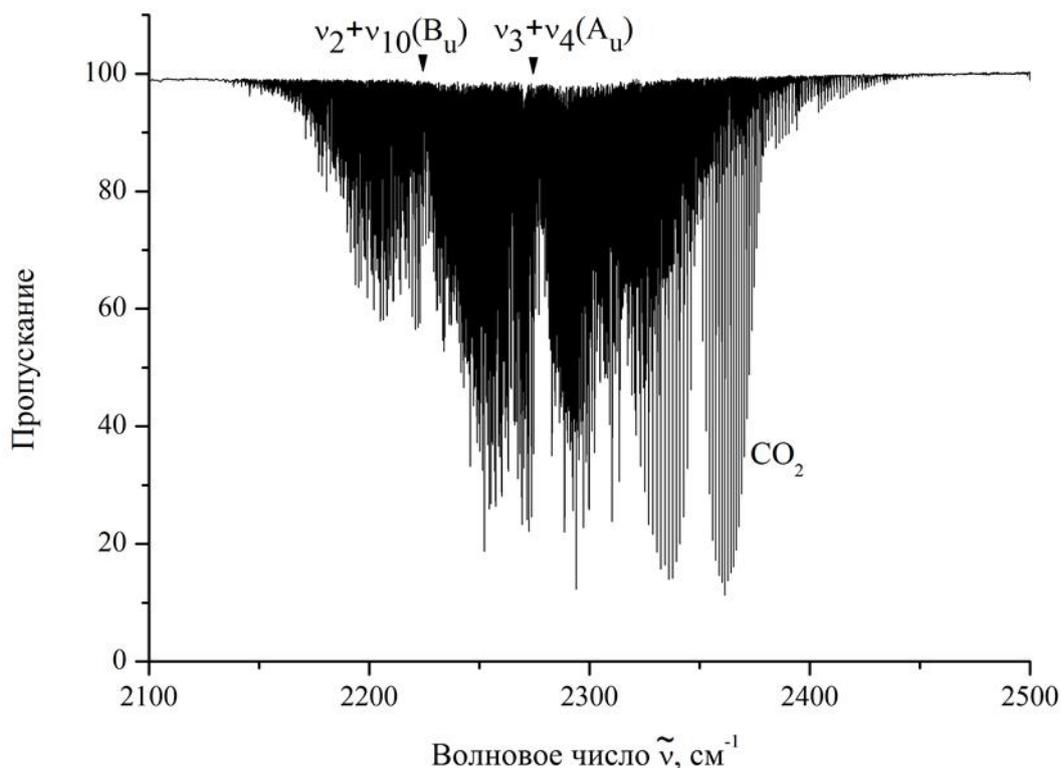


Рисунок 4 – Колебательно-вращательные полосы молекулы $^{12}\text{C}_2\text{H}_2\text{D}_2$ -транс в области 2100-2500 cm^{-1} .

2.2. Анализ положения линий комбинационной полосы $\nu_2+\nu_{10}$ и $\nu_3+\nu_4$

На основе метода комбинационных разностей был проинтерпретирован колебательно-вращательный спектр гибридных полос $\nu_2+\nu_{10}$ (B_u) и $\nu_3+\nu_4$ (A_u). Вращательные энергии основного колебательного состояния были рассчитаны на основе параметров из работы [19].

Для решения задачи выбрана модель гамильтониана [20] молекулы типа асимметричного волчка в A -редукции и I' -представлении.

Для анализа данного диапазона использовался метод эффективных гамильтонианов, т.е. эффективный гамильтониан представим в виде:

$$\tilde{H} = \sum_{v\tilde{v}} |v\rangle \langle \tilde{v}| \tilde{H}^{v\tilde{v}}, \quad (1.41)$$

Для описания невозмущенной вращательной структуры $v = \tilde{v}$. Соответствующий этой модели оператор имеет следующий вид:

$$\begin{aligned} H^{v\tilde{v}} = & E^v + [A^v - \frac{1}{2}(B^v + C^v)]J_z^2 + \frac{1}{2}(B^v + C^v)J^2 + \\ & + \frac{1}{2}(B^v - C^v)J_{xy}^2 - \Delta_K^v J_z^4 - \Delta_{JK}^v J_z^2 J^2 - \Delta_J^v J^4 - \delta_K^v [J_z^2, J_{xy}^2]_+ \\ & - 2\delta_J^v J^2 J_{xy}^2 + H_K^v J_z^6 + H_{KJ}^v J_z^4 J^2 + H_{JK}^v J_z^2 J^2 + H_J^v J^2 + \dots, \end{aligned} \quad (1.42)$$

где $A^v, B^v, C^v, \Delta_K^v, \Delta_{JK}^v, \Delta_J^v$ – вращательные параметры и параметры центробежного искажения; E – центр полосы, $J_{xy}^2 = J_x^2 - J_y^2$, $[A, B]_+ = AB + BA$ – операторы.

Так как между состояниями ($\nu_2 = \nu_{10} = 1$) и ($\nu_3 = \nu_4 = 1$) возникают сильные резонансные взаимодействия типа Кориолиса (C_z и C_x), то необходимо рассмотреть недиагональные блики эффективного гамильтониана, которые в общем виде имеют вид:

$$H^{v\tilde{v}} = H_{C_z}^{v\tilde{v}} + H_{C_x}^{v\tilde{v}}, \quad (1.43)$$

где

$$H_{C_z}^{v\tilde{v}} = iJ_z H_{v\tilde{v}}^{(1z)} + [J_x, J_y]_+ H_{v\tilde{v}}^{(2z)} + H_{v\tilde{v}}^{(2z)} [J_x, J_y]_+ + \dots \quad (1.44)$$

и

$$H_{C_x}^{v\bar{v}} = iJ_x H_{v\bar{v}}^{(1x)} + H_{v\bar{v}}^{(1x)} iJ_x + [J_y, J_z]_+ H_{v\bar{v}}^{(2x)} + H_{v\bar{v}}^{(2x)} [J_y, J_z]_+ + \dots \quad (1.45)$$

Операторы $H_{v\bar{v}}^{(i\alpha)}$ в формулах (1.44), (1.45) рассчитываются по следующей формуле:

$$H_{v\bar{v}}^{(i\alpha)} = \frac{1}{2} v\bar{v} C^{(i\alpha)} + v\bar{v} C_K^{(i\alpha)} J_Z^2 + \frac{1}{2} v\bar{v} C_J^{(i\alpha)} J^2 + \dots \quad (1.46)$$

Полоса $\nu_2 + \nu_{10}$ является гибридной, т.е. в спектре проявляются два типа переходов, *a* и *b*-тип [21]. Правила отбора для этих типов записываются в следующем виде:

$$a\text{-типа: } \Delta J = 0, \pm 1, \Delta K_a = \pm 2n, \Delta K_c = \pm(2n+1), \text{ где } n = 0, 1, 2, \dots;$$

$$b\text{-типа: } \Delta J = 0, \pm 1, \Delta K_a = \pm(2n+1), \Delta K_c = \pm(2n+1), \text{ где } n = 0, 1, 2, \dots$$

Полоса $\nu_3 + \nu_4$ преобразуется по неприводимому представлению A_u , т.е. принадлежит только *c*-типу колебательных переходов [21]. Правила отбора для данного типа запишутся в следующем виде:

$$c\text{-типа: } \Delta J = 0, \pm 1, \Delta K_a = \pm 1, \Delta K_c = 0, \text{ где } n = 0, 1, 2, \dots$$

В таблице 1 представлена часть проинтерпретированных в экспериментальном спектре колебательно-вращательных переходов полосы $\nu_2 + \nu_{10}$ симметрии B_u (колонка 3). В колонках 1 и 2 представлены квантовые числа возбужденного колебательного состояния ($\nu_2 = \nu_{10} = 1$) и квантовые числа, относящиеся к основному состоянию, соответственно. Колонка 4 содержит в себе информацию о величине пропускания для соответствующих линий в спектре. С помощью метода комбинационных разностей были рассчитаны значения верхних колебательно-вращательных энергий в отдельности для P-, Q- и R- ветвей (см. колонку 6) и вычисленные на этой основе средние значения (колонка 7). Данные из таблицы 1 позволяют установить точность эксперимента, которая определяется разбросом в значениях энергий верхних уровней. В частности, как показал анализ, экспериментальная погрешность составляет $8,1 \cdot 10^{-4} \text{ см}^{-1}$ для полосы $\nu_2 + \nu_{10}$. В дополнение для полосы $\nu_2 + \nu_{10}$, из таблицы 1 видно, что для $J = 4, 5$ и 6 наблюдается характерное для этой молекулы вырождение уровней. Например,

уровни, характеризующиеся квантовыми числами $J=4$, $K_a=4$, $K_c=0$ и $J=4$, $K_a=4$, $K_c=1$ обладают одинаковыми значениями энергий (данная пара уровней обозначена как 4 4 d).

Таблица 1 – Фрагмент списка линий, идентифицированных в полосе $\nu_2 + \nu_{10}$ (B_u)

$J K_a K_c$	$J' K'_a K'_c$	Переход, см^{-1}	Пропускание, %	Колебательно-вращательная энергия, см^{-1}	Среднее значение, см^{-1}	$\delta \cdot 10^{-4}$, см^{-1}
1	2	3	4	6	7	8
4 4 0	4 4 1	2222,13281	56,8	2280,90889	2280,9089	1,3
	5 4 1	2214,59968	83,9	2280,90878		
	3 3 1	2247,27861	68,8	2280,90910		
4 4 1	4 4 0	2222,13281	56,8	2280,90890	2280,9090	2,3
	5 4 2	2214,59968	83,9	2280,90874		
	3 3 0	2247,27861	68,8	2280,90930		
5 4 1	4 4 0	2229,56189	85,6	2288,33797	2288,3379	1,8
	5 4 2	2222,02911	65,1	2288,33817		
	6 4 2	2212,98406	73,6	2288,33788		
	4 3 2	2248,67892	82,4	2288,33716		
5 4 2	6 5 2	2188,41835	91,4	2288,33830	2288,3381	0,7
	4 4 1	2229,56189	85,6	2288,33797		
	5 4 1	2222,02911	65,1	2288,33821		
	6 4 3	2212,98406	73,6	2288,33767		
6 4 2	4 3 1	2248,67892	82,4	2288,33856	2297,2580	2,6
	6 5 1	2197,33821	95,1	2297,25815		
	7 5 3	2186,78978	91,5	2297,25797		
	5 4 1	2230,94829	59,9	2297,25739		
	6 4 3	2221,90420	70,2	2297,25782		
6 4 3	7 4 3	2211,34506	69,7	2297,25819	2297,2577	3
	5 3 3	2250,05965	85,2	2297,25785		
	6 5 1	2197,33821	95,1	2297,25815		
	7 5 2	2186,78978	91,5	2297,25798		
11 4 7	5 4 2	2230,94829	59,9	2297,25735	2364,2922	2,6
	6 4 2	2221,90420	70,2	2297,25802		
	7 4 4	2211,34506	69,7	2297,25743		
	7 5 2	2186,78978	91,5	2297,25798		
	10 4 6	2237,57435	75,4	2364,29229		
	11 4 8	2220,94115	94,0	2364,29191		
11 4 8	12 4 8	2202,70810	77,8	2364,29209	2364,2709	1,4
	10 5 6	2213,09514	82,6	2364,29171		
	11 3 8	2239,45523	92,0	2364,29265		
	11 5 6	2196,48326	96,2	2364,29284		
	10 4 7	2237,56658	67,8	2364,27088		
11 4 8	11 4 7	2220,89126	91,9	2364,27100	2364,2709	1,4
	12 4 9	2202,74430	73,0	2364,27096		
	10 3 7	2256,30014	84,2	2364,27064		

	11 3 9	2239,98923	92,0	2364,27104		
--	--------	------------	------	------------	--	--

Часть проинтерпретированных в экспериментальном спектре колебательно-вращательных переходов полосы $\nu_3+\nu_4$ симметрии A_u (колонка 3) дана в виде таблицы 2. В колонках 1 и 2 представлены квантовые числа возбужденного колебательного состояния ($\nu_3 = \nu_4 = 1$) и квантовые числа, относящиеся к основному состоянию, соответственно. Колонка 4 содержит информацию о величине пропускания для соответствующих линий в спектре. С помощью метода комбинационных разностей были рассчитаны значения верхних колебательно-вращательных энергий в отдельности для P-, Q- и R- ветви (см. колонку 6) и вычисленные на этой основе средние значения (колонка 7). Данные из таблицы 2 позволяют установить точность эксперимента, которая определяется разбросом в значениях энергий верхних уровней. В частности, как показал анализ, экспериментальная погрешность составляет $6,6 \cdot 10^{-4} \text{ см}^{-1}$ для полосы $\nu_3+\nu_4$. В дополнение для полосы $\nu_3+\nu_4$, в колонке 6 приведены значения энергий верхних вращательных уровней колебательного состояния ($\nu_3 = \nu_4 = 1$).

Таблица 2 – Фрагмент списка линий, идентифицированных в полосе $\nu_3+\nu_4$ (A_u)

$J K_a K_c$	$J' K'a K'c$	Переход, см^{-1}	Пропуск - кание, %	Колебательно - вращательная энергия, см^{-1}	Среднее значение, см^{-1}	$\delta,$ $10^{-4},$ см^{-1}
1	2	3	4	6	7	8
5 5 0	4 4 0 6 6 0	2304,59133 2233,42635	57,1 54,6	2363,36742 2363,36872	2363,3681	6,5
5 5 1	4 4 0 6 6 0	2304,59133 2233,42635	57,1 54,6	2363,36741 2363,36872	2363,3681	6,5

6 5 1	5 4 1 7 6 1	2306,00933 2231,83410	57,5 62,3	2372,31843 2372,31878	2372,3186	1,8
6 5 2	5 4 2 7 6 2	2306,00933 2231,83410	57,5 62,3	2372,31839 2372,31878	2372,3186	1,8
6 6 1	5 5 1 6 5 1 7 7 1	2310,70992 2301,67220 2225,64356	63,3 66,6 71,0	2401,59211 2401,59215 2401,59226	2401,5922	0,4
6 6 0	5 5 0 7 7 0	2310,70992 2225,64356	63,3 71,0	2401,59211 2401,59226	2401,5922	0,8
7 6 2	6 5 2 7 5 2	2312,31222 2301,76380	67,4 84,2	2412,23216 2412,23200	2412,2321	0,8
7 6 1	6 5 1 7 7 1	2312,31222 2236,2826	67,4 85,7	2412,23217 2412,23137	2412,2318	4
8 6 3	7 5 3 8 5 3 9 7 3	2313,92314 2301,86220 2222,84030	58,2 77,4 67,8	2424,39133 2424,39109 2424,39105	2424,3912	1,2
8 6 2	7 5 2 8 7 2 9 7 2	2313,92314 2236,39613 2222,84030	58,2 62,2 67,8	2424,39134 2424,39134 2424,39105	2424,3912	1,4

2.3. Определение спектроскопических параметров

Решение обратной спектроскопической задачи было выполнено с моделью гамильтониана, описанной формулами (1.41)-(1.46). В таблице 3 приведены параметры диагональных блоков для полос $\nu_2+\nu_{10}$ и $\nu_3+\nu_4$.

Таблица 3 – Спектроскопические параметры, полученные в результате решения обратной задачи (в см^{-1})

Параметр	Основное состояние ¹	$\nu_2+\nu_{10}$	$\nu_3+\nu_4$
E		2224,14907(76)	2275,49525(65)

A	3,4861906	3,362261(73)	3,457741(67)
B	0,83295973	0,8149355(56)	0,8032960(14)
C	0,67064016	0,6686666(48)	0,6855085(33)
$\Delta_K \cdot 10^4$	0,56237	0,5789(70)	0,5853(85)
$\Delta_{JK} \cdot 10^5$	0,030163	0,030163	0,030163
$\Delta_J \cdot 10^5$	0,0106967	0,0106967	0,0106967
$H_K \cdot 10^8$	0,3239	0,3239	0,3239
$H_{KJ} \cdot 10^{10}$	-0,0119	-0,0119	-0,0119
$H_{JK} \cdot 10^{10}$	0,00256	0,00256	0,00256
$\delta_K \cdot 10^5$	0,057687	0,057687	0,057687
$\delta_J \cdot 10^6$	0,0024729	0,0024729	0,0024729
¹ Примечание: параметры основного состояния взяты из статьи [19]			

2.4 Определение параметров взаимодействия между состояниями ($v_2=v_{10}=1$) и ($v_3=v_4=1$)

Как уже выше упоминалось между состояниями ($v_2 = v_{10} = 1$) и ($v_3 = v_4 = 1$) возникают сильные резонансные взаимодействия типа Кориолиса (C_z и C_x), которые описываются формулами (1.43)-(1.46). В процессе анализа недиагональных вкладов в эффективный гамильтониан оказалось необходимым учитывать 6 параметров Кориолиса различного порядка для воспроизведения значений энергий с экспериментальной точностью. Значения данных параметров представлены в таблице 4.

Таблица 4 – Параметры взаимодействия между состояниями ($v_2=v_{10}=1$) и ($v_3 = v_4 = 1$) в молекуле $^{12}\text{C}_2\text{H}_2\text{D}_2$ -транс (в см^{-1})

Параметр	Значение
$C^{(1x)}$	-0,322(32)
$C_J^{(1x)} \cdot 10^4$	-0,168(21)

$C_{KJ}^{(1x)} \cdot 10^7$	-0,283(74)
$C^{(2x)} \cdot 10^2$	0,2579(32)
$C_{KK}^{(2z)} \cdot 10^7$	0,1119(98)
$C_{KJ}^{(2x)} \cdot 10^8$	0,1161(38)

ГЛАВА 3. ИССЛЕДОВАНИЕ СПЕКТРОВ ВЫСОКОГО РАЗРЕШЕНИЯ МОЛЕКУЛЫ $^{12}\text{C}_2\text{H}_2\text{D}_2$ -ТРАНС В ДИАПАЗОНЕ 2800-3300 CM^{-1}

3.1. Экспериментальные условия

Спектр молекулы $^{12}\text{C}_2\text{H}_2\text{D}_2$ - транс был зарегистрирован в диапазоне 2800-3300 cm^{-1} с помощью Фурье-спектрометра Bruker 120HR со спектральным разрешением $3 \cdot 10^{-3} \text{ cm}^{-1}$. Регистрация спектра проводилась при комнатной температуре (297 К) и давлении исследуемого газа $P = 60$ Па. В процессе регистрации спектра было выполнено 550 сканирований, при оптической длине пути $L = 4$ м.

Обзорный спектр исследуемого диапазона представлен на рисунке 6. В рассматриваемом диапазоне локализуется интенсивная фундаментальная полоса ν_9 с центром 3065,0348 cm^{-1} . Данная полоса соответствует однократному возбуждению колебательной моды q_9 , которая преобразуется по неприводимому представлению B_u точечной группы симметрии C_{2h} (см. Рис. 5). Колебание q_9 происходит в плоскости молекулы и соответствует изменениям СН- и CD- валентных связей.

Изотопозамещение $^{12}\text{C}_2\text{H}_2\text{D}_2$ -транс $\leftarrow \text{C}_2\text{H}_4$ приводит к понижению симметрии молекулы ($C_{2h} \leftarrow D_{2h}$) и повороту системы координат изотополога относительно системы координат «материнской» молекулы (см. Рис.5) на угол примерно равный 8° . Влияние изотопозамещения проявляется в изменениях положения центра масс молекулы, вращательных постоянных. В том числе, за счет этого эффекта, полоса ν_9 в спектре молекулы $^{12}\text{C}_2\text{H}_2\text{D}_2$ -транс смещается относительно соответствующей полосы ν_9 в спектре «материнской» молекулы (C_2H_4). Сдвиг центра полосы ν_9 за счет влияния изотопозамещения составляет около 40 cm^{-1} . Как показал анализ, значения абсолютных интенсивностей спектральных линий также претерпевают изменения.

В качестве первого шага был проведен анализ положений линий в исследуемой полосе. В результате, определено более 2700 переходов, которые соответствуют 475 энергиям возбужденного колебательного состояния ($\nu_9=1$).

Для анализа интенсивностей были выбраны 741 несмешанных, ненасыщенных, не слишком слабых и отдельно стоящих линий.

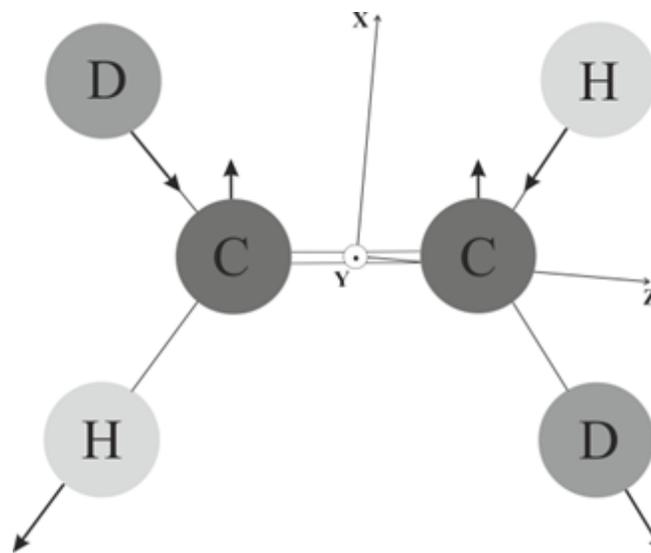


Рисунок 5 – Колебание q_9 (B_u) в молекуле $^{12}\text{C}_2\text{H}_2\text{D}_2$ -транс.

3.2. Анализ колебательно-вращательного спектра и получение параметров гамильтониана фундаментальной полосы ν_9

На основе метода комбинационных разностей был проинтерпретирован колебательно-вращательный спектр гибридной полосы ν_9 (B_u). Вращательные энергии основного колебательного состояния были рассчитаны на основе параметров из работы [19]. Для решения задачи выбрана модель гамильтониана [20] молекулы типа асимметричного волчка в A -редукции и Γ^f -представлении.

Полоса ν_9 является гибридной, т.е. в спектре проявляются два типа переходов, a и b -тип [21]. Правила отбора для этих типов записываются в следующем виде:

$$a\text{-типа: } \Delta J=0, \pm 1, \Delta K_a = \pm 2n, \Delta K_c = \pm (2n+1), \text{ где } n = 0, 1, 2, \dots;$$

$$b\text{-типа: } \Delta J=0, \pm 1, \Delta K_a = \pm (2n+1), \Delta K_c = \pm (2n+1), \text{ где } n = 0, 1, 2, \dots$$

В таблице 5 представлена часть проинтерпретированных в экспериментальном спектре колебательно-вращательных переходов полосы ν_9 симметрии B_u (колонка 3). В колонках 1 и 2 представлены квантовые числа

возбужденного колебательного состояния ($\nu_9=1$) и квантовые числа, относящиеся к основному состоянию, соответственно. Колонка 4 содержит в себе информацию о величине пропускания для соответствующих линий в спектре. С помощью метода комбинационных разностей были рассчитаны значения верхних колебательно-вращательных энергий в отдельности для P-, Q- и R- ветвей (см. колонку 6) и вычисленные на этой основе средние значения (колонка 7). Данные из таблицы 5 позволяют установить точность эксперимента, которая определяется разбросом в значениях энергий верхних уровней. В частности, как показал анализ, экспериментальная погрешность составляет $3,8 \cdot 10^{-3} \text{ см}^{-1}$ для полосы ν_9 . В дополнение для полосы ν_9 , из таблицы 5 видно, что для $J = 5, 6, 7$ и 8 наблюдается характерное для этой молекулы вырождение уровней. Например, уровни, характеризующиеся квантовыми числами $J=5, K_a=5, K_c=0$ и $J=5, K_a=5, K_c=1$ обладают одинаковыми значениями энергий (данная пара уровней обозначена как 5 5 d).

Таблица 5 – Фрагмент списка линий, идентифицированных в полосе $\nu_3 + \nu_4$ (A_u)

$J K_a K_c$	$J' K'_a K'_c$	Переход, см^{-1}	Пропускание, %	Колебательно-вращательная энергия, см^{-1}	Среднее значение, см^{-1}	$\delta \cdot 10^{-4}$, см^{-1}
1	2	3	4	6	7	8
5 5 0	5 5 1	3064,59264	21,1	3155,47483	3155,4749	1
	6 5 1	3055,55519	75,0	3155,47513		
	5 4 1	3089,16577	53,0	3155,47487		
	6 6 1	3025,53252	9,0	3155,47489		
5 5 1	5 5 0	3064,59264	21,1	3155,47483	3155,4749	1
	6 5 2	3055,55519	75,0	3155,47513		
	5 4 2	3089,16577	53,0	3155,47483		
	6 6 0	3025,53252	9,0	3155,47489		
6 5 1	6 5 2	3064,57703	26,7	3164,49697	3164,4972	0,7
	6 4 2	3089,14332	32,0	3164,49714		
	7 6 2	3024,01234	9,9	3164,49702		
6 5 2	6 5 1	3064,57703	26,7	3164,49697	3164,4970	0,4
	6 4 3	3089,14332	32,0	3164,49693		
	7 6 1	3024,01234	9,9	3164,49702		

7 5 2	6 5 1	3075,10563	30,6	3175,02558	3175,0268	5,6
	7 5 3	3064,55879	33,6	3175,02698		
	8 5 3	3052,49815	47,5	3175,02704		
	7 4 3	3089,11403	22,4	3175,02717		
	7 6 1	3034,54249	47,1	3175,02717		
	8 6 3	3022,49022	10,4	3175,02690		
7 5 3	6 5 2	3075,10563	30,6	3175,02558	3175,0268	6
	7 5 2	3064,55879	33,6	3175,02699		
	8 5 4	3052,49815	47,5	3175,02701		
	7 4 4	3089,11403	22,4	3175,02641		
	7 6 2	3034,54249	47,1	3175,02717		
	8 4 4	3077,03725	79,9	3175,02781		
8 6 2	3022,49022	10,4	3175,02690			
8 5 3	7 5 2	3076,59840	44,0	3187,06659	3187,0669	5,6
	8 5 4	3064,53746	37,1	3187,06633		
	9 5 4	3050,96366	34,2	3187,06793		
	8 4 4	3089,07666	13,6	3187,06722		
	9 6 4	3020,96678	12,4	3187,06660		
8 5 4	7 5 3	3076,59840	44,0	3187,06659	3187,0665	9
	8 5 3	3064,53746	37,1	3187,06635		
	9 5 5	3050,96366	34,2	3187,06783		
	8 4 5	3089,07666	13,6	3187,06494		
	9 6 3	3020,96678	12,4	3187,06660		

С полученными данными была решена обратная спектроскопическая задача, выполненная с моделью гамильтониана, описанного формулами (1.41)-(1.46). В таблице 6 приведены параметры полосы ν_9 .

Таблица 6 – Спектроскопические параметры, полученные в результате решения обратной задачи (в см^{-1})

Параметры	Основное состояние ¹	ν_9
E		3065,0348(36)
A	3,4861906	3,46882(47)
B	0,83295973	0,831845(48)
C	0,67064016	0,669017(33)
$\Delta_K \cdot 10^4$	0,56237	0,5624(87)
$\Delta_{JK} \cdot 10^5$	0,030163	0,03016(37)
$\Delta_J \cdot 10^5$	0,0106967	0,010697(80)
$H_K \cdot 10^8$	0,3239	0,3239
$H_{KJ} \cdot 10^{10}$	-0,0119	-0,0119
$H_{JK} \cdot 10^{10}$	0,00256	0,00256

$\delta_K \cdot 10^5$	0,057687	0,057687
$\delta_J \cdot 10^6$	0,0024729	0,0024729
¹ Примечание: параметры основного состояния взяты из статьи [19]		

3.3. Некоторые сведения об определении интенсивностей спектральных линий

Для корректного определения интенсивностей линий необходимо принимать во внимание физические явления, которые происходят в газе во время регистрации спектра. Способ определения экспериментальных значений интенсивностей линий связан с аппроксимацией формы линии тем или иным теоретическим профилем. К основным характеристикам, определяющим ширину и профиль линии, относятся: естественная ширина линии, эффект Доплера, уширение давлением, обусловленные давлением сдвиги центров линий и изменения скоростей молекул в результате столкновений (velocity-changing collisions). Как известно, эффект изменения скоростей молекул приводит к уменьшению доплеровской ширины, как следствие, описание линии широко использовавшимся контуром Фойгта (не учитывающим зависимость параметров контура от скоростей молекул) дает более широкий и заниженный в пике контур, что приводит к погрешности в определении экспериментальных значений интенсивностей вплоть до 10% [22]. Таким образом, выбор теоретического контура влияет на точность значений, определяемых из эксперимента, спектральных интенсивностей.

Одним из рекомендованных профилей линий [22] на сегодняшний день является профиль Армана-Тран (ПАТ). ПАТ учитывает следующие параметры: Γ_D , Γ_0 , Γ_2 , Δ_0 , Δ_2 , v_{vc} , η . Здесь, Γ_D – ширина доплеровской линии, Γ_0 и Γ_2 – параметры, учитывающие уширение линии давлением, Δ_0 и Δ_2 – параметры, описывающие сдвиг линии, обусловленный давлением, v_{vc} – параметр, учитывающий эффект изменения скорости в процессе столкновений (velocity-changing collisions) и η – параметр, ответственный за учет изменения

вращательных состояний при столкновениях. ПАТ рассматривается в приближении квадратичных зависимостей от скоростей молекул и модели жестких столкновений. Эта модель контура успешно использовалась в ряде работ для молекул различных типов.

Спектральное поглощение описывается законом Бугера-Ламберта-Бера.

$$I(\nu) = I_0(\nu)e^{-\tau(\nu)}, \quad (3.1)$$

здесь, $I(\nu)$ и $I_0(\nu)$ - значения интенсивностей падающего и проходящего света для определенной частоты ν , $\tau(\nu)$ - оптическая толщина среды, которая определяется через произведение толщины слоя, через которое прошло излучение L и коэффициента поглощения $k(\nu)$:

$$\tau(\nu) = k(\nu)L = S_\nu^P F(\nu - \nu') PL. \quad (3.2)$$

Где $S_\nu^P \equiv S_\nu^N / kT$ - интенсивность колебательно-вращательной линии, соответствующая переходу между двумя вращательными уровнями, $F(\nu - \nu')$ - функция контура спектральной линии, имеющей центр ν' .

Значение оптической толщины среды $\tau(\nu)$, получаемое из эксперимента определяется выражением

$$\tau(\nu)^{\text{экспер.}} = \frac{1}{\lg e} \lg \left(\frac{I_0(\nu)}{I(\nu)} \right). \quad (3.3)$$

3.4. Анализ интенсивностей линий в полосе ν_9

Важными экспериментальными характеристиками кроме частоты спектральных линий является еще и интенсивность различных полос и линий [23]. Важность исследования интенсивностей заключается в определении сведения о важнейших параметрах молекулы: её дипольный момент, поляризуемость и их производные по колебательным координатам. В свою очередь, данные величины дают сведения о природе химической связи в молекуле, структурных изменениях (о различных изомерах), межмолекулярных взаимодействиях и др. [24]. Теоретическая основа об интенсивностях спектральных линии была рассмотрена в подразделе 1.4 в

данной работе. Поэтому указанная глава посвящается интерпретации интенсивностей фундаментальной полосы ν_9 исследуемой молекулы $^{12}\text{C}_2\text{H}_2\text{D}_2$ - транс.

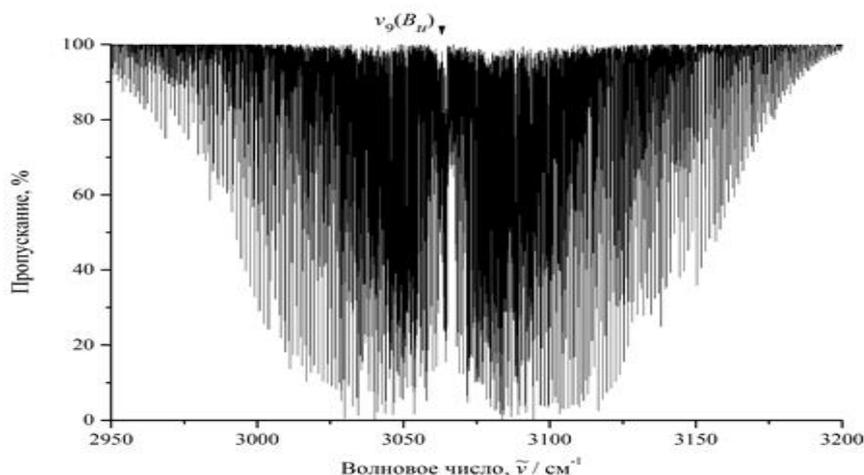


Рисунок 6 – Обзорный спектр полосы ν_9 молекулы $^{12}\text{C}_2\text{H}_2\text{D}_2$ -транс.

Анализ интенсивностей линий была выполнена в программе Peaks Finder. Для описания формы линии использовался профиль Армана-Тран [25-27], который определяется через семь параметров [28-29]. Для оценки влияния параметров на точность в описании профиля линии был проведен ряд тестовых расчетов. В результате чего было показано, что при включении параметра ν_{vc} погрешность в описании контура линии уменьшается в 1,3 раза, а при одновременном рассмотрении параметров ν_{vc} и Δ_2 уменьшается в 1,5 раза. При этом варьирование параметров Γ_0 , Γ_2 , Δ_0 и η в процессе подгонки формы линии не приводит к уменьшению разницы между теоретически рассчитанной и экспериментальной интенсивностями линий. Доплеровская полуширина $\Gamma_D=3,33 \cdot 10^{-3} \text{ см}^{-1}$ для линии $\nu_0=2958,2775 \text{ см}^{-1}$ и $\Gamma_0=3,59 \cdot 10^{-3} \text{ см}^{-1}$ для линии $\nu_0=3186,5087 \text{ см}^{-1}$, что описывает прямо пропорциональную зависимость полуширины Доплера от частоты.

На рисунке 6 в качестве иллюстрации выполненного анализа приведены примеры подгонки контура экспериментальной линии профилем Армана-Тран. По оси OY отображена величина τ/PL (размерность $\text{см}^{-1} \cdot \text{атм}^{-1}$). Нижняя часть

рисунка иллюстрирует разницу между экспериментальным и рассчитанным контуром на основе профиля Армана-Тран. Как видно из рисунка б, выбранный профиль описывает контур экспериментальной линии с очень хорошей точностью (погрешностью на уровне 1-2 %).

В результате проделанного анализа впервые получены значения абсолютных интенсивностей для 741 линий полосы ν_9 молекулы $^{12}\text{C}_2\text{H}_2\text{D}_2$ -транс. В таблице 1 в колонках 1, 2, 3 и 4 представлены квантовые числа верхнего ($J K_a K_c$) и нижнего ($J' K_a' K_c'$) колебательно-вращательных состояний, частота перехода (в см^{-1}), а также величина пропускания (%), соответственно. В колонке 5 для каждого перехода соотносится значение интенсивности линии (в $10^{-2}\text{см}^{-2}\cdot\text{атм}^{-1}$), полученной путем подгонки контура линии профилем Армана-Тран. Учитывая рассчитанное значение доплеровской полуширины ($\bar{\Gamma}_D=3,4\cdot 10^{-3}\text{см}^{-1}$), а также усредненное по всем 741 линиям значение параметра $\bar{\Gamma}_0=1,2\cdot 10^{-3}\text{см}^{-1}$ можно заключить, что при условиях регистрации настоящего спектра (T и P), основной вклад в уширение линии вносит эффект Доплера.

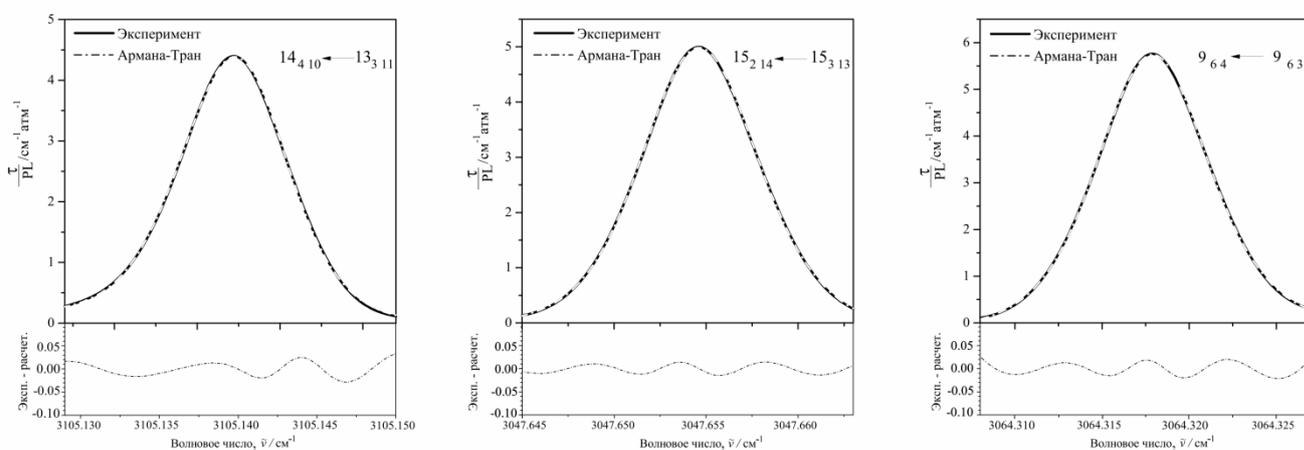


Рисунок 6 – Аппроксимация формы линии полосы ν_9 молекулы $^{12}\text{C}_2\text{H}_2\text{D}_2$ -транс профилем Армана-Тран.

Величины в колонке 6 представлены с круглыми скобками, которые характеризуют погрешность в определении интенсивности линии. В частности, для перехода $(14\ 13\ 2)-(15\ 14\ 1)$ с центром линии ($2967,0558\text{см}^{-1}$) интенсивность $(1,092\pm 0,004)\cdot 10^{-2}\text{см}^{-2}\cdot\text{атм}^{-1}$ с погрешностью 0,4%.

Таблица 7 – Интенсивность некоторых линий полосы ν_9 (ν_{11}) молекулы $^{12}\text{C}_2\text{H}_2\text{D}_2$ -транс

J Ka Kc	J' Ka'Kc'	Колебательно-вращательная энергия, см ⁻¹	$\delta \cdot 10^{-3}$, см ⁻¹	Пропускание, %	Интенсивность, 10^{-2} , см ⁻² ·атм ⁻¹	Полуширина, 10^{-4} , см ⁻¹
1	2	3	4	5	6	7
14 13 2	15 14 1	3681,1420	0,7	77,5	1,092(4)	10,8(1)
14 13 1	15 14 2	3681,1420	0,7	77,5	1,092(4)	10,8(1)
13 13 1	14 14 0	3660,1354	1,1	75,0	1,209(4)	10,1(1)
13 13 0	14 14 0	3660,1354	2,1	75,0	1,209(4)	10,1(1)
14 12 2	15 13 3	3614,2247	0,3	78,6	1,042(3)	10,7(8)
14 12 3	15 13 2	3614,2247	3,3	78,6	1,042(3)	10,7(8)
13 12 1	14 13 2	3593,2047	0,6	76,5	1,142(4)	10,8(1)
13 12 2	14 13 1	3593,2047	0,6	76,5	1,142(4)	10,8(1)
20 10 11	21 11 10	3652,6092	3,1	80,1	1,129(2)	16,49(5)
20 10 10	21 11 11	3652,6092	1,1	80,1	1,129(2)	16,49(5)
12 12 0	13 13 1	3573,6873	0,7	74,7	1,163(4)	8,3(1)
12 12 1	13 13 0	3573,6873	0,7	74,7	1,163(4)	8,3(1)
18 10 9	19 11 8	3594,0826	0,3	79,3	1,53(1)	26,0(3)
18 10 8	19 11 9	3594,0826	2,3	79,3	1,53(1)	26,0(3)
17 10 7	18 11 8	3567,1015	3,1	70,7	1,492(4)	11,91(9)
17 10 8	18 11 7	3567,1015	1,1	70,7	1,492(4)	11,91(9)
16 10 7	17 11 6	3541,6426	0,6	71,1	1,357(2)	9,02(6)
16 10 6	17 11 7	3541,6426	0,6	71,1	1,357(2)	9,02(6)
12 11 1	13 12 2	3511,6578	0,4	69,1	1,531(3)	10,09(6)
12 11 2	13 12 1	3511,6578	3,4	69,1	1,531(3)	10,09(6)
15 10 6	16 11 5	3517,7019	0,7	71,2	1,524(3)	12,83(6)
15 10 5	16 11 6	3517,7019	0,7	71,2	1,524(3)	12,83(6)
11 11 1	12 12 0	3493,5854	2,7	58,5	2,209(8)	10,8(1)
17 14 3	17 15 2	3826,0595	0,7	58,5	2,209(8)	10,8(1)
11 11 0	12 12 1	3493,5854	0,7	58,5	2,209(8)	10,8(1)
17 14 4	17 15 3	3826,0595	2,7	58,5	2,209(8)	10,8(1)

14 10 4	15 11 5	3495,2888	0,7	66,3	1,72(2)	13,49(5)
---------	---------	-----------	-----	------	---------	----------

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

Студенту:

Группа ОБМ71	ФИО Гиниятова Айгерим Болатовна
------------------------	---

Школа	Инженерная школа ядерных технологий	Отделение (НОЦ)	Отделение экспериментальной физики
Уровень образования	Магистрант	Направление/специальность	03.04.02 «Физика конденсированного состояния»

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

1. <i>Стоимость ресурсов научного исследования (НИ): материально-технических, энергетических, финансовых, информационных и человеческих</i>	Стоимость материала – 7500 руб., заработная плата – 186 344 руб. и отчисления на социальные нужды – 50 313 руб.
2. <i>Нормы и нормативы расходования ресурсов</i>	Нормы амортизации – 20%, нормы премии по счету заработной платы – 0,3; коэффициент доплат и надбавок – 0,3; районный коэффициент – 1,3; коэффициент дополнительной зарплаты – 15%
3. <i>Используемая система налогообложения, ставки налогов, отчислений, дисконтирования и кредитования</i>	Отчисления во внебюджетные фонды – 27,1%

Перечень вопросов, подлежащих исследованию, проектированию и разработке:

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

Перечень графического материала (с точным указанием обязательных чертежей):

1. <i>Оценка конкурентоспособности технических решений</i>	
2. <i>Матрица SWOT</i>	
3. <i>Альтернативы проведения НИ</i>	
4. <i>График проведения и бюджет НИ</i>	
5. <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 ОСГН ШБИП	Меньшикова Екатерина Валентиновна	Кандидат философских наук		

Задание принял к исполнению студент:

Группа	ФИО	Подпись	Дата
ОБМ71	Гиниятова Айгерим Болатовна		

ГЛАВА 4. ФИНАНСОВЫЙ МЕНЕДЖМЕНТ, РЕСУРСОЭФФЕКТИВНОСТЬ И РЕСУРСОСБЕРЕЖЕНИЕ

4.1. Оценка коммерческого потенциала и перспективности проведения научных исследований с позиции ресурсоэффективности и ресурсосбережения

4.1.1. Потенциальные потребители результатов исследования

Основным продуктом данного исследования являются параметры спектральных линий, которые будут использоваться для пополнения как Российских, так и международных баз данных. Последние, в свою очередь, широко используются для решения многочисленных задач астрофизики, планетологии, атмосферной оптики, и т.д.

Для решений задачи вплоть до того момента, когда точностью экспериментальной стали уже хорошими, специалисты пользовались для описания контуров моделью контура Фойта. Фойт дает точность плохую, занижает значение интенсивности на 10%, Фойт должен быть усовершенствован, оказывается что столкновительные эффекты которые влияют на скорость молекулы, они очень важны и вот учитывать их модели контура обязательно нужно, поэтому международное сообщество специально разработала контур Армана-Трана который содержит зависимость от скоростей молекул. То есть основное отличие от контуров Фойта который раньше использовали что Арман - Тран содержит зависимость от скоростей. Этот контур позволяет гораздо большей точностью описывать форму линии и получать интенсивности. Определяет точность до 0,3 % в среднем. Контур Армана - Трана гораздо более точный, чем контур Фойта. Контур Фойта дает погрешность на уровне 10 % иногда в то время, когда контур Армана - Трана дает 0,3% максимум 1 %. Этот контур содержит зависимость скорость молекул которое дает правильный результат, это зависимость должна быть учтена. Чтобы получить более точное значение интенсивностей.

4.1.2. SWOT-анализ

SWOT – Strengths (сильные стороны), Weaknesses (слабые стороны), Opportunities (возможности) и Threats (угрозы) – представляет собой комплексный анализ научно-исследовательского проекта. SWOT- анализ применяют для исследования внешней и внутренней среды проекта.

Таблица 8 – SWOT анализ

	<p>Сильные стороны научно-исследовательского проекта: С1. Наличие бюджетного финансирования С2. Актуальность тематики С3. Использование современных программ С4. Использование собственной разработки программного обеспечения С5. Оригинальность решения поставленной задачи С6. Наличие всех материалов для исследования</p>	<p>Слабые стороны научно-исследовательского проекта: Сл1. Отсутствие прототипа научной разработки Сл2. Отсутствие потенциальных потребителей Сл3. Программное обеспечение с закрытым исходным кодом Сл4. Большая трудоёмкость работы Сл5. Долгое ожидание результатов эксперимента</p>
<p>Возможности: В1.Использование инновационной инфраструктуры ТПУ В2. Появление дополнительного спроса на результаты исследования В3. Возможность появления новых методов анализа В4. Расширение лаборатории В5. Возможность улучшения программного обеспечения</p>	<p>По результатам анализа интерактивной матрицы проекта полей «Сильные стороны и возможности» можно сделать вывод о том, что нужно расширять лабораторию и попытаться улучшить программные обеспечения, чтобы увеличить эффективность программного обеспечения.</p>	<p>По результатам анализа интерактивной матрицы проекта полей «Слабые стороны и возможности» можно сделать вывод о том, что мы должны развивать новые методы исследования, чтобы уменьшить трудоёмкость работы.</p>

<p>Угрозы:</p> <p>У1. Отсутствие спроса на результаты исследования</p> <p>У2. Развитая конкуренция других научных центров</p> <p>У3. Задержки финансирования</p> <p>У4. Ограничение точности эксперимента</p> <p>У5. Повышение издержек</p>	<p>По результатам анализа интерактивной матрицы проекта полей «Сильные стороны и угрозы» можно сделать вывод о том, что возможные угрозы при производстве, такие как отсутствие спроса и развитая конкуренция, могут сильно ослабить позиции данного научного исследования. тематика очень актуальна, и мы имеем оригинальные решения поставленной задачи молекулярной спектроскопии высокого разрешения, поэтому мы имеем конкурентоспособность</p>	<p>По результатам анализа интерактивной матрицы проекта полей «Слабые стороны и угрозы» можно сделать вывод о том, что мы должны развивать новые методы исследования. При необходимости можно стремиться к сотрудничеству с другими научными центрами.</p>
--	--	--

4.1.3. Диаграмма Исикавы

Диаграмма причины-следствия Исикавы (Cause-and-Effect-Diagram) – это графический метод анализа и формирования причинно-следственных связей, инструментальное средство для систематического определения причин проблемы и последующего графического представления.

Область применения диаграммы:

1. Выявление причин возникновения проблемы;
2. Анализ и структурирование процессов на предприятии;
3. Оценка причинно-следственных связей.

Проблемной областью проекта является несвоевременное и некачественное получение результата. Факторы, влияющие на объект анализа:

1. Исследовательская группа;
2. Оборудование;
3. Методы;
4. Материалы.

Существует ряд причин, которые оказывают на это влияние.

1. Оборудование. Экспериментальные данные, которые необходимы

для исследования, получают на установке Bruker 120 HR. Данная установка позволяет получать спектры молекул с хорошим разрешением, однако она обладает невысокой производительностью для снятия спектра в ближнем инфракрасном диапазоне. Решением данной проблемы является Bruker 125 HR, который значительно лучше с точки зрения производительности, так как он имеет девятикамерную конструкцию и оснащен современной цифровой технологией обработки. Также 120-ая версия имеет не высокий предел обнаружения по сравнению со 125 версией, то есть необходимость использовать Bruker 125, который позволяет увеличить предел обнаружения. Следовательно, для улучшения качества и производительности работы необходимо приобрести установку последней версии.

Программное обеспечение OPUS используется для управления спектрометром, а также для оценки записанных спектров. Программное обеспечение для машины Bruker IFS 120 имеет малый функционал по сравнению со 125 версией, следовательно, целесообразно обновить программный продукт.

2. Материалы исследования. Теоретическое исследование молекул построено на интерпретации колебательно-вращательных молекулярных спектров. Для корректного описания молекулярного спектра необходимо получать спектры с наиболее четкой структурой. Большой вклад делает чистота образца. Образцы сомнительной чистоты приводят к неточному и некорректному описанию полученных экспериментальных данных. Это влечет за собой к понижению качества исследований. Для решения данной проблемы необходимо закупать образцы чистотой не меньше 99%.

Не менее важной проблемой является сроки подготовки и поставки образцов. Долгая подготовка и поставка тормозит исследование. Лучшее решение выбор надежных поставщиков, например, Кембриджская Изотопная Лаборатория, Великобритания.

3. Методы. Существует необходимость постоянного создания новых методик и написания программных продуктов для проведения исследований. В

частности, исследование сосредоточено на анализе внутренней структуры молекул. Так как каждая молекула имеет определенные особенности внутренней структуры (число атомов, тип симметрии и т.д.), то для каждой задачи необходимы свои методы исследования. Создание новых методов и программ (которые позволяют проводить исследование) является крайне трудоемкой и времязатратной работой. Наиболее эффективным решением в данном случае будет расширение научного персонала. Это позволит увеличить результативность работы, а также сократить время на написание новых программ.

4. Исполнители. Первой причиной является нехватка научных сотрудников. Это может привести к увеличению сроков исследований. Устранение данной проблемы можно реализовать за счет расширения научной группы, например, привлечение студентов старших курсов и аспирантов.

Второй причиной является загруженность по учебной и научной деятельности. Данная проблема также приводит к увеличению сроков исследования. Оптимальное решение данной проблемы – уменьшение преподавательской нагрузки для профессоров и научных сотрудников.

На рисунке 7 представлена причинно-следственная диаграмма (диаграмма Исикавы).



Рисунок 7 – Причинно-следственная диаграмма.

Исходя из вышесказанного, можно установить, что для повышения качества анализа экспериментальных данных в первую очередь необходимо приобрести новейшее экспериментальное оборудование и расширить научный персонал.

4.1.4. Инициация проекта

Инициация нашего проекта заключается в следующем:

Цель: исследование резонансных взаимодействий в многоатомной молекуле на примере изотополога этилена $^{12}\text{C}_2\text{H}_2\text{D}_2$ -транс, основанное на высокоточных экспериментальных данных сильно резонирующих полос $\nu_3+\nu_4$, $\nu_2+\nu_{10}$, а также анализ фундаментальной полосы ν_9 в диапазоне 2100 – 3300 cm^{-1} .

Реализация поставленной цели заключается в решении следующих **задач:**

1. исследование колебательно-вращательной структуры и резонансных взаимодействий в состояниях $(\nu_3 = \nu_4 = 1, A_u)$, $(\nu_2 = \nu_{10} = 1, B_u)$ и $(\nu_9 = 1, B_u)$ молекулы $^{12}\text{C}_2\text{H}_2\text{D}_2$ -транс;
2. решение обратной спектроскопической задачи и определение спектроскопических параметров указанных состояний;
3. анализ абсолютных интенсивностей в полосе ν_9 .

4.1.5. Организационная структура и план проекта

На данном этапе работы необходимо решить следующие вопросы: календарный план проекта, кто будет входить в рабочую группу, определить роль каждого участника в данном проекте, а также прописать функции, выполняемые каждым из участников и их трудозатраты в проекте.

Для определения общего содержания работ, уточнения целей и разработки последовательных действий необходимо составить календарный график выполнения НИОКР (таблицы 9 и 10)

Таблица 9 – Календарный план контрольных событий проект

Событие	D_p	Дата нач.	Дата оконч.	Участники
Разработка и утверждение ТЗ	4	04.09.2018	07.09.2018	Рук.
Проведение теоретического исследования	121	11.09.2018	10.02.2019	Инж.
Анализ и обработка результатов	37	11.02.2019	27.03.2019	Инж.
Оценка полученных результатов	9	28.03.2019	07.04.2019	Рук.
Написание магистерской диссертации	42	08.04.2019	25.05.2019	Инж.
ИТОГО	13 200			

Таблица 10 – Календарный план контрольных событий проект



Таблица 11 – Рабочая группа проекта

ФИО, должность Место работы	Роль в проекте	Функции
Уленков О.Н. Профессор ИШИФП, ТПУ	Руководитель	1. Разработка ТЗ* 2. Программное обеспечение 3. Оценка полученных результатов
Гиниятова А.Б. Магистр, ТПУ	Инженер	1. Изучение литературы по текущему исследованию 2. Теоретического исследование 3. Анализ и обработка полученных результатов

*ТЗ – Техническое задание

4.1.6. Бюджет научного исследования

При планировании бюджета научного исследования должно быть обеспечено полное и достоверное отражение всех видов планируемых расходов, необходимых для его выполнения. В процессе формирования бюджета учитываются только затраты на материалы для исследования и заработную плату участникам проекта.

Расчет стоимости материальных затрат производится по действующим прейскурантам или договорным ценам. Результаты по данной статье занесены в таблицу 12.

Таблица 12 – Материальные затраты

Наименование	Количество, ед	Цена за ед., руб	Сумма, руб
Бумага	5	500	2500
Краска для принтера	5	1000	5000
Итого			7500

Так как все исследования теоретические и проводились на компьютерах, то необходимо учесть затраты на электроэнергию. Примерное потребление одного компьютера за сутки – 180 Ватт, плюс монитор, еще 40 Ватт, т.е. 220 Ватт (или 0.22 кВт). Весь период работы составляет 176 дней или 4224.

Электроэнергетические затраты за время работы над проектом можно рассчитать, как $Q_3 = W P t = 0,44 \cdot 176 \cdot 6 \cdot 5,8 = 2695$ руб, где W – тариф на электроэнергию (5,8 рублей за 1 кВт/ч), P – электроэнергетические затраты компьютера за весь период работы (2 компьютера – 0.44 кВт), t – время работы над проектом в часах.

Итого, электроэнергетические затраты на компьютеры составляют 2695 рублей за весь период исследовательской работы.

Основная заработная плата рассчитывается на основании отраслевой оплаты труда. Отраслевая система оплаты труда в ТПУ предполагает следующий состав заработной платы: оклад – определяется предприятием. В ТПУ оклады распределены в соответствии с занимаемыми должностями; стимулирующие выплаты – устанавливаются руководителем подразделений за эффективный труд и выполнение дополнительных обязанностей. В раздел включается основная заработная плата научных и инженерно-технических работников непосредственно участвующих в выполнении работ. Величина расходов по заработной плате определяется исходя из трудоемкости выполняемых работ и действующей системы окладов и тарифных ставок. В состав основной заработной платы включается премия, выплачиваемая 61 ежемесячно из фонда заработной платы в размере 20 –30 % от тарифа или оклада. Расчет основной заработной платы $Z_{осн}$ представлен в таблице. Полная заработная плата включает в себя основную и дополнительную (12-20 % от $Z_{осн}$):

$$Z_{зп} = Z_{осн} + Z_{доп}. \quad (5.1)$$

Основная заработная плата рассчитывается по следующей формуле:

$$Z_{осн} = Z_{дн} \cdot T_p, \quad (5.2)$$

где $Z_{дн}$ – среднедневная заработная плата, руб., T_p – продолжительность работ, раб. дн.

Среднедневная заработная плата рассчитывается по формуле:

$$Z_{дн} = \frac{Z_{ок} \cdot M}{F_d}, \quad (5.3)$$

где $Z_{ок}$ – месячный должностной оклад, руб., M – количество месяцев работы без отпуска в течение года (при отпуске в 48 раб. дней $M = 10.4$ месяца, 6дневная неделя), F_d – действительный годовой фонд рабочего времени (таблица 13).

Таблица 13 – Фонд рабочего времени

Показатель рабочего времени	Количество дней	
		Руководитель

Календарное число дней	365	365
Количество нерабочих дней	52	52
Праздничные дни	14	14
Отпуск	48	48
Действительный годовой фонд рабочего времени	251	251

Руководитель – профессор ИШВФП

Месячный должностной оклад работника:

$$Z_{\text{м}} = Z_{\text{ок}} \cdot k_p, \quad (5.4)$$

где $Z_{\text{ок}}$ – заработная плата по окладу, руб.; k_p – районный коэффициент (для Томска равен 1.3).

Затраты по дополнительной заработной плате исполнителей учитывают величину предусмотренных Трудовым кодексом РФ доплат за отклонение от нормальных условий труда, а также выплат, связанных с обеспечением гарантий и компенсаций. Расчет дополнительной заработной платы ведется по следующей формуле:

$$Z_{\text{доп}} = k_{\text{доп}} \cdot Z_{\text{осн}}, \quad (5.5)$$

где $k_{\text{доп}}$ – коэффициент дополнительной заработной плат. Расчет основной и дополнительной заработной платы приведён в таблице 14.

Таблица 14 – Расчет основной и дополнительной заработной платы

Участники	$Z_{\text{ок}}$, руб	k_p	$Z_{\text{м}}$, руб	$Z_{\text{дн}}$, руб	T_p	$Z_{\text{осн}}$, руб	$Z_{\text{доп}}$, руб
Руководитель	47 104	1.3	61 235,2	2 537,2	13	32 983,6	3 298,4
Инженер	12 664	1.3	16 463,2	682,1	200	136 420	13 642
Итого						169 403,6	16 940,4

Отчисления во внебюджетные фонды – обязательные отчисления по установленным законодательством Российской Федерации нормам органам государственного социального страхования, пенсионного фонда и медицинского страхования от затрат на оплату труда работников. Величина

отчислений во внебюджетные фонды определяется следующей формулой:

$$Z_{\text{внб}} = k_{\text{внб}}(Z_{\text{осн}} + Z_{\text{доп}}), \quad (5.6)$$

где $k_{\text{внб}}$ – коэффициент отчислений на уплату во внебюджетные фонды (пенсионный фонд, фонд обязательного медицинского страхования и пр.). На 2014 г. в соответствии с Федеральным законом от 24.07.2009 №212-ФЗ установлен размер страховых взносов равный 30%. На основании пункта 1 ст.58 закона №212-ФЗ для учреждений, осуществляющих образовательную и научную деятельность в 2014 году водится коэффициент – 0,271. Контрольные цифры отчислений во внебюджетные фонды представлены в таблице 15. Полный сформирование бюджет затрат научно-исследовательского проекта (таблица 15).

Таблица 15 – Отчисления во внебюджетные фонды

Участники	Сумма, руб
Руководитель	9 796.14
Инженер	40 516.74
Итого	50 312.88

Накладные расходы учитывают прочие затраты организации: печать и ксерокопирование, оплата услуг связи, электроэнергии и т.д. Их величина определяется по формуле:

$$Z_{\text{накл}} = k_{\text{нр}}(Z_{\text{осн}} + Z_{\text{доп}}), \quad (5.7)$$

где $k_{\text{нр}}$ – коэффициент, учитывающий накладные расходы (равен 0,16).

Накладные расходы представлены в таблице 16.

Таблица 16– Накладные расходы

Участники	Сумма, руб
Руководитель	10 884,6
Инженер	45 018,6
Итого	55 903,2

Таблица 17 – Расчет бюджета затрат

Наименование	Сумма, руб
Материальные затраты	7 500
Отчисления во внебюджетные фонды	50 312,88
Затраты по основной заработной плате	169 403,6
Затраты по дополнительной заработной плате	16 940,4
Затраты на электроэнергию	2 695
Накладные расходы	55 903,2
Бюджет затрат	302 755,08

4.1.7. Реестр рисков проекта

Идентифицированные риски проекта включают в себя возможные неопределенные события, которые могут возникнуть в проекте и вызвать последствия, которые повлекут за собой нежелательные эффекты. В таблице 18 сведены возможные риски проекта

Таблица 18 – Реестр рисков проектов

Риск	Потенциальное воздействие	Вероятность наступления (1-5)	Влияние риска (1-5)	Уровень риска	Способы смягчения риска	Условия наступления
Интерпретация не достаточно количественных результатов	Невозможность проведения необходимых исследований для научной работы	3	4	высокий	Привлечение дополнительных рабочих сил	Неправильное предсказание
Недостоверность полученных результатов	Низкая точность выводов обратной задачи	3	4	высокий	Тщательное проведение расчетных работ	Неправильное использование используемого программного обеспечения

Выводы

Сравнительный анализ интегральных показателей эффективности показывает, что первый вариант – это более эффективный вариант решения поставленной в магистерской работе технической задачи с позиции финансовой и ресурсной эффективности, вследствие обеспечения высоких показателей реализации.

ЗАДАНИЕ ДЛЯ РАЗДЕЛА «СОЦИАЛЬНАЯ ОТВЕТСТВЕННОСТЬ»

Студенту:

Группа	ФИО
ОБМ71	Гиниятова Айгерим Болатовна

Школа	Инженерная школа ядерных технологий	Отделение (НОЦ)	Экспериментальной физики
Уровень образования	Магистр	Направление/специальность	Физика конденсированного состояния

Тема ВКР:

Колебательно-вращательный анализ спектров высокого разрешения молекулы $^{12}\text{C}_2\text{H}_2\text{D}_2$-транс	
Исходные данные к разделу «Социальная ответственность»:	
1. Характеристика объекта исследования (вещество, материал, алгоритм, методика, рабочая зона) и области его применения	Рабочая зона: аудитория 123, корпус №3 НИ ТПУ; Материал: спектр молекулы $^{12}\text{C}_2\text{H}_2\text{D}_2$ -транс
Перечень вопросов, подлежащих исследованию, проектированию и разработке:	
1. Правовые и организационные вопросы обеспечения безопасности: <ul style="list-style-type: none"> – специальные (характерные при эксплуатации объекта исследования, проектируемой рабочей зоны) правовые нормы трудового законодательства; – организационные мероприятия при компоновке рабочей зоны. 	<ul style="list-style-type: none"> – ГОСТ 12.0.003-2015 Система стандартов безопасности труда (ССБТ). Опасные и вредные производственные факторы. Классификация – ГОСТ 12.2.032-78 Система стандартов безопасности труда (ССБТ). Рабочее место при выполнении работ сидя. Общие эргономические требования – СанПиН 2.2.2/2.4.1340-03 "Гигиенические требования к персональным электронно-вычислительным машинам и организации работы" (с изменениями на 21 июня 2016 года) – ПНД Ф 12.13.1-03 Методические рекомендации. Техника безопасности при работе в аналитических лабораториях (общие положения) – ГОСТ Р ИСО 6385-2016 Эргономика. Применение эргономических принципов при проектировании производственных систем

	– ГОСТ Р 50923-96. Дисплеи. Рабочее место оператора. Общие эргономические требования и требования к производственной среде. Методы измерения
2. Производственная безопасность: 2.1. Анализ выявленных вредных и опасных факторов 2.2. Обоснование мероприятий по снижению воздействия	<ul style="list-style-type: none"> – вредные производственные факторы, связанные с аномальными микроклиматическими параметрами воздушной среды на местонахождении работающего; – вредные производственные факторы, связанные с акустическими колебаниями в производственной среде ; – вредные производственные факторы, связанные с электромагнитными полями переменного характера; – вредные производственные факторы, связанные со световой средой; – опасные производственные факторы, связанные с электрическим током, вызываемым разницей; электрических потенциалов, – пожароопасность.
3. Экологическая безопасность:	В процессе выполнения работы могут возникать отходы металла, и остаточный электролитический раствор которые могут вызвать загрязнение почвы и воды. Полученные отходы не загрязняют атмосферу
4. Безопасность в чрезвычайных ситуациях:	Возможные ЧС: <ul style="list-style-type: none"> – выбросы ядовитых веществ, – пожары; – взрывы; – диверсии; – природные катаклизмы; Наиболее вероятным ЧС является наступление сильных морозов, пожары.

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

Задание выдал консультант:

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Старший преподаватель	Исаева Елизаветта Сергеевна			

Задание принял к исполнению студент:

Группа	ФИО	Подпись	Дата
0БМ71	Гиниятова Айгерим Болатовна		

ГЛАВА 5. СОЦИАЛЬНАЯ ОТВЕТСТВЕННОСТЬ

В данной работе проводится моделирование ИК-спектра поглощения молекулы $^{12}\text{C}_2\text{H}_2\text{D}_2$ -транс в области 2100-3300 cm^{-1} .

Результатом исследования является идентификация линий экспериментального спектра, а также набор спектроскопических параметров модели спектра поглощения молекулы $^{12}\text{C}_2\text{H}_2\text{D}_2$ -транс. Полученные данные будут использоваться для пополнения как российских, так и международных баз данных (NITRAN). Последние, в свою очередь, широко используются для решения многочисленных как теоретических, так и прикладных задач астрофизики, планетологии, атмосферной оптики.

Теоретическая работа, а также непосредственное моделирование экспериментального спектра выполнялось в лаборатории молекулярной спектроскопии высокого разрешения – аудитория 123, корпус №3 НИ ТПУ.

5.1 Правовые и организационные вопросы обеспечения безопасности

По данной теме рассматриваются законодательный и нормативные документы:

1.ГОСТ 12.0.003-2015. Опасные и вредные производственные факторы. Классификация.

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

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

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

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

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

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

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

9.ГОСТ 12.1.009 - 2009. Система стандартов безопасности труда. Электробезопасность. Термины и определения.

10.ГОСТ 12.1.030 - 81. Электробезопасность. Защитное заземление. Зануление.

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

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

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

5.1.1. Специальные (характерные для рабочей зоны исследователя) правовые нормы трудового законодательства.

Режим рабочего времени, защиту персональных данных работника; оплату и нормирование труда регулирует Трудовой кодекс РФ.

Оклад – определяется предприятием. В ТПУ оклады распределены в соответствии с занимаемыми должностями, например, ассистент, ст. преподаватель, доцент, профессор. Базовый оклад определяется исходя из размеров окладов, определенных штатным расписанием предприятия. Размер окладов ППС и НС ТПУ представлен на корпоративном портале ТПУ.

5.1.2. Организационные мероприятия при компоновке рабочей зоны исследователя.

Рабочие места должны быть спроектированы таким образом, чтобы способствовать достижению целей производственной системы, в том числе достижению оптимальной общей рабочей нагрузки на сотрудников (ГОСТ Р ИСО 6385-2016). Рабочая среда должна быть разработана и поддерживаться

таким образом, чтобы минимизировать неблагоприятные физические, химические, биологические и социальные условия, влияющие на здоровье и безопасность людей, а также на их способность и готовность выполнять стоящие перед ними задачи.

Согласно ГОСТ Р 50923-96 рабочее место с дисплеем должно обеспечивать оператору возможность удобного выполнения работ в положении сидя и не создавать перегрузки костно-мышечной системы. Основными элементами рабочего места оператора являются: рабочий стол, рабочий стул (кресло), дисплей, клавиатура; вспомогательными – пюпитр, подставка для ног. Рабочий стул должен быть подъемно-поворотным и регулируемым по высоте и углам наклона сиденья и спинки, а также расстоянию спинки от переднего края сиденья. Требования каждому из этих элементов рабочего места рассмотрено в ГОСТ Р 50923-96 подробно. Дисплей на рабочем месте оператора должен располагаться так, чтобы изображение в любой его части было различимо без необходимости поднять или опустить голову. Дисплей на рабочем месте должен быть установлен ниже уровня глаз оператора. Угол наблюдения экрана оператором относительно горизонтальной линии взгляда не должен превышать 60° , как показано на рисунке 8.

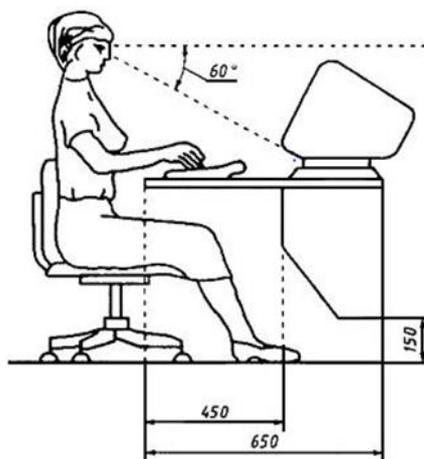


Рисунок 8 – Расположение дисплея на столе.

5.2. Вредные факторы проектируемой производственной среды

Для идентификации потенциальных факторов необходимо использовать ГОСТ 12.0.003-2015 «Опасные и вредные производственные факторы. Классификация». Перечень опасных и вредных факторов, характерных для проектируемой производственной среды представлены в виде таблицы 19.

Таблица 19 – Возможные опасные и вредные факторы

Факторы (ГОСТ 12.0.003-2015)	Этапы работ			Нормативные документы
	Разрабо тка	Изготов ление	Эксплу тация	
1. Вредные производственные факторы, связанные с аномальными микроклиматическими параметрами воздушной среды на местонахождении работающего	+	+	+	ГОСТ 12.1.005-88. СН-245-71
2. Вредные производственные факторы, связанные с электромагнитными полями переменного характера	+	+	+	СанПиН 2.2.2/2.4.1340–03
3 Вредные производственные факторы, связанные с акустическими колебаниями в производственной среде	-	-	+	ГОСТ 12.1.003-83 ГОСТ 12.4.026.
4 Вредные производственные факторы, связанные со световой средой	+	+	+	ГОСТ 12.4.026-2015 Система стандартов безопасности труда (ССБТ). Цвета сигнальные, знаки безопасности и разметка сигнальная. Назначение и правила применения. Общие технические требования и характеристики. Методы испытаний.
5. Повышенное значение напряжения в электрической цепи, замыкание которой может	-	+	+	ГОСТ 12.1.038-82 ГОСТ 12.1.030-81

произойти через тело человека				
6.Пожаровзрывоопасность.	-	-	+	НПБ 105-03

В процессе научно исследовательских работ возможна воздействие следующих вредных производственных факторов:

- вредные производственные факторы, связанные с аномальными микроклиматическими параметрами воздушной среды на местонахождении работающего;
- вредные производственные факторы, связанные с электромагнитными полями переменного характера;
- вредные производственные факторы, связанные с акустическими колебаниями в производственной среде;
- вредные производственные факторы, связанные со световой средой.

5.2.1. Отклонение показателей микроклимата

Требования, предъявленные к воздуху, т.е. оптимальные и допустимые значения показателей микроклимата в производственных помещениях для работ разной категории тяжести и в зависимости от периода года, представлены в санитарных нормах проектирования промышленных предприятий СН 245-71 и ГОСТ 12.11.005-88 ССБТ «Общие санитарно-технические требования к воздуху рабочей зоны». В таблице 20 представлены оптимальные и допустимые параметры рабочей зоны для конкретной категории работ - 2а, т.е. работы, связанные с постоянной ходьбой, выполняемые стоя или сидя, но не требующие перемещения тяжестей.

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

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

Таблица 20 – Оптимальные и допустимые параметры для рабочей зоны

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

В теплый период года необходимо предусмотреть защиту от попадания прямых солнечных лучей. К средствам коллективной защиты можно отнести установки кондиционирования воздуха, основная задача которых поддерживать параметры воздуха в установленных пределах, для обеспечения надежной работы и комфортных условий для работников.

5.2.2. Превышение уровня шума

Для определения допустимого уровня шума на рабочих местах используется ГОСТ 12.1.003-83. ССБТ «Шум. Общие требования безопасности», СН 2.2.4/2.1.8.562-96 «Шум на рабочих местах, в помещениях жилых, общественных зданий и на территории жилой застройки». Согласно ГОСТ 12.1.003 - 83, нормируемой шумовой характеристикой рабочих мест при шуме являются уровни звуковых давлений в децибелах в октановых полосах. В таблице 6 приведены допустимые уровни звукового давления на рабочем месте.

В нашей научно-исследовательской лаборатории не находится никаких приборов и устройств, создающих шум, который может оказать влияние на здоровье. Так же в помещении отсутствует вентиляционная система, которая

могла бы создавать дополнительные шумы. Лаборатория расположена среди учебных комнат, что означает, что в соседних комнатах так же отсутствует производственное оборудование.

Таблица 21 - Допустимы уровни звукового давления на рабочем месте

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

Для защита лаборатории от воздействия шума целесообразно применить в качестве средства коллективной защиты (СКЗ) рациональную планировку предприятий и производственных помещений. При проектировании ограждающих конструкций, предназначенных для защиты от шума следует принимать наиболее эффективные по изоляции воздушного шума конструкции – *однослойные с пустотами или из бетонов на пористых заполнителях и ячеистых бетонов, или однослойные конструкции с тонкой облицовкой толщиной не более 1,5 см (сухая штукатурка и другие подобные материалы) с воздушным промежутком не менее 4 см.*

5.2.3. Недостаток естественного света, освещенности рабочей зоны

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

Источник естественного освещения – поток энергии солнца. Естественное освещение является наиболее гигиеничным. Однако по условиям зрительной работы в лаборатории естественного освещения, как правило, недостаточно, поэтому на рабочих местах оказывается задействованным и искусственное освещение. Оно может быть обеспечено с помощью люминесцентных ламп ЛВ (белого цвета) мощностью 20, 40, 80 Вт. Для рабочих мест с искусственным освещением регламентирована допустимая

освещенность, согласно действующим санитарным нормам и правилам СНиП 23-05-95.

«Гигиенические требования к естественному, искусственному и совмещенному освещению жилых и общественных зданий. СанПиН 2.2.1/2.1.1.1278-03» определяет наименьшую освещенность рабочих поверхностей в производственных помещениях в зависимости от вида производимой деятельности. В соответствии со СНиП 23-05-95 все зрительные работы делятся на 8 разрядов и в зависимости от размера объекта различия и условий зрительной работы. Принимаем четвертый разряд зрительной работы (средней точности). Допустимые значения наименьшей освещенности рабочих поверхностей в производственных помещениях в соответствии со СНиП 23-05-95 для четвертого разряда зрительной работы приведены в таблице 21. На рабочей поверхности должны отсутствовать резкие тени, которые создают неравномерное распределение поверхностей с различной яркостью в поле зрения, искажает размеры и формы объектов различия, в результате повышается утомляемость и снижается производительность труда.

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

Таблица 22 – Нормирование значения освещенности на рабочих местах
производственных помещений при искусственном освещении

Характер Зрительной работы	Наименьший размер объекта, мм	Подразряд зрительной работы	Контраст объекта различия с фоном	Характер фона	Освещенность, лк	
					Комбинированное	Общее
Средняя точность (4 разряд зрительной работы)	0,5-1,0	а	Малый	Темный	750	300
			б	Малый	Средний	500
		Средний		Темный	500	200
		в	Малый	Светлый	400	200
			Средний	Светлый	400	200
			г	Большой	Темный	400
		Средний		Светлый	300	150
Большой	Светлый	300	150			
Большой	Средний	300	150			

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

Площадь помещения: $S = A * B = 24,91 \text{ м}^2$. Коэффициент отражения свежестроенных стен с окнами, без штор $\rho_c = 50\%$, свежестроенного потолка $\rho_{\Pi} = 70\%$. Коэффициент запаса, соответствующий помещению с малым выделением пыли равен $K_z = 1,5$. Коэффициент неравномерности для люминесцентных ламп $Z = 1,1$.

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

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

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

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

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

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

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

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

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

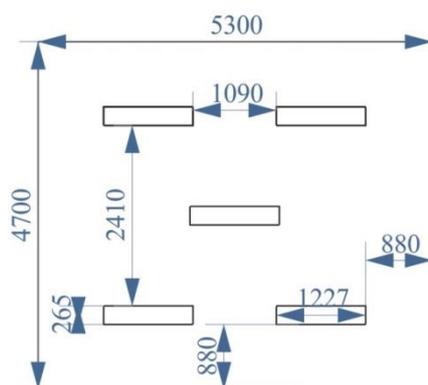


Рисунок 9 – План помещения и размещения светильников с люминесцентными лампами.

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

Коэффициент использования светового потока, показывающий какая часть светового потока ламп попадает на рабочую поверхность, для

светильников типа ОДОР с люминесцентными лампами при $\rho_{\Pi} = 70\%$, $\rho_C = 50\%$ и индексе помещения $i = 1,6$ равен $\eta = 0,42$.

Потребный световой поток группы люминесцентных ламп светильника будет равно $\Phi_{\Pi} = \frac{EABK_3Z}{N\eta} = 2836$ лм.

Делаем проверку выполнения условия:

$$-10\% \leq \frac{\Phi_{ЛД} - \Phi_{\Pi}}{\Phi_{ЛД}} * 100\% \leq 20\%,$$

$$\frac{\Phi_{ЛД} - \Phi_{\Pi}}{\Phi_{ЛД}} * 100\% = -9,07\%.$$

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

5.2.1. Повышенное значение напряжения в электрической цепи, замыкание которой может произойти через тело человека

Воздействие электрического напряжения на человека связано с протеканием через него тока. Действие электрического тока на человека носит сложный и разнообразный характер. При замыкании электрической цепи через организм человека ток оказывает термическое, электролитическое, биологическое и механическое воздействие.

Основными причинами воздействия тока на человека являются:

- случайное прикосновение или приближение на опасное расстояние к токоведущим частям;
- появление напряжения на металлических частях оборудования в результате повреждения изоляции или ошибочных действий персонала;
- шаговое напряжение на поверхности земли в результате замыкания провода на землю;
- появление напряжения на отключенных токоведущих частях, на которых работают люди, вследствие ошибочного включения установки;
- освобождение другого человека, находящегося под напряжением;

- воздействие атмосферного электричества, грозových разрядов.

Согласно ГОСТ 12.1.038-82 предельно допустимые уровни напряжения прикосновения и токов, воздействию которых человек может подвергаться в процессе работы с электрооборудованием, составляют для установок в нормативном режиме: для постоянного тока – не более 0,8 В и 1 мА соответственно, для переменного тока (частота 50 Гц) – не более 2,0 В и 0,3 мА соответственно. Установки работающие напряжения выше 42 В должны иметь заземления. Необходимо иметь возможность быстро отключить оборудования в случае попадания человека под напряжения (ГОСТ 12.1.030-81).

Электроустановки классифицируют по напряжению: с номинальным напряжением до 1000 В (помещение без повышенной опасности), до 1000 В с присутствием агрессивной среды (помещение с повышенной опасностью) и свыше 1000 В (особо опасное помещение). Лаборатория относится к помещениям без повышенной опасности поражения электрическим током, в которых отсутствуют условия, создающие повышенную или особую опасность. Для предотвращения поражения электрическим током следует проводить следующие мероприятия:

- содержать оборудование в работоспособном состоянии и эксплуатировать его в соответствии с нормативно-техническими документами;
- своевременно проводить техническое обслуживание;
- соблюдать технику безопасности при работе с оборудованием;
- проводить инструктаж для работников.

Лаборатория относится к помещению без повышенной опасности поражения электрическим током (в которой отсутствуют условия, создающие повышенную или особую опасность), поскольку – это помещение сухое, хорошо отапливаемое, с токонепроводящими полами, с температурой 18—20°, с влажностью 40—50%. Заземление металлических нетоковедущих частей обеспечивается присоединением вилки прибора к специальной розетке с заземляющим контактом. Имеется устройство защитного отключения. Защита

от прямого прикосновения не требуется, поскольку отсутствуют электроустановки, а электрооборудование находится в зоне системы уравнивания потенциалов, и наибольшее рабочее напряжение не превышает 25 В переменного или 60 В постоянного тока.

Безопасные номиналы характеристик тока:

- Сила тока $I = 0,1$ А,
- Напряжение $U = 36$ В,
- Сопротивление заземления $R_{\text{зазем}} = 4$ Ом.

5.2.2. Пожаровзрывоопасность

Согласно НПБ 105-03 по взрывопожарной и пожарной опасности помещения подразделяются на категории А, Б, В1 - В4, Г и Д

Причины возникновения пожара электрического характера: короткое замыкание, перегрузки по току, статическое электричество и т. д. Для устранения причин возникновения и локализации пожаров в помещении лаборатории должны проводиться следующие мероприятия:

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

Огнетушители водо-пенные (ОХВП-10) используют для тушения очагов пожара без наличия электроэнергии. Углекислотные (ОУ-2) и порошковые огнетушители предназначены для тушения электроустановок, находящихся под напряжением до 1000 В.

В общественных зданиях и сооружениях на каждом этаже должно размещаться не менее двух переносных огнетушителей. Огнетушители следует

располагать на видных местах вблизи от выходов из помещений на высоте не более 1,35 м. Размещение первичных средств пожаротушения в коридорах, переходах не должно препятствовать безопасной эвакуации людей.

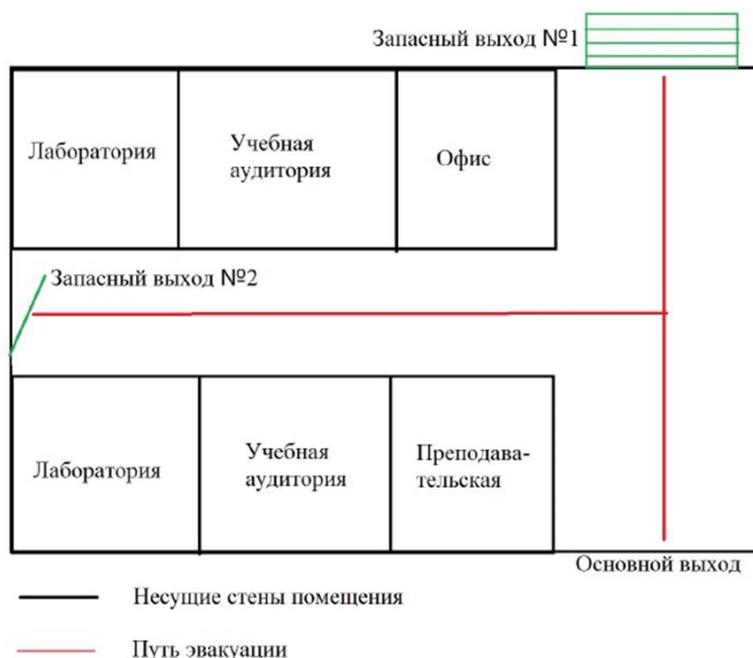


Рисунок 10 – Пути эвакуации.

Здание должно соответствовать требованиям пожарной безопасности, а именно, наличие охранно-пожарной сигнализации, плана эвакуации, порошковых или углекислотных огнетушителей с поверенным клеймом, табличек с указанием направления к запасному (эвакуационному) выходу (рисунок 10).

5.3. Организационные мероприятия обеспечения безопасности

Подготовка спецодежды, рабочего стола, инструментов, приспособлений является первым необходимыми вещами, которые нужно сделать для обеспечения безопасности.

Проверка оборудования на исправность, отсутствия внешних повреждений является необходимыми мероприятиями. Требуется проверить исправность контрольных измерительных, сигнальных приборов, компьютеров, тумблеров, переключателей. Приступить к работе в случае неисправности любого используемого оборудования, истечении срока годности баллона и

срока проверки его манометра категорически запрещается. Запрещается также приступать к работе, если человек не прошел проверку на знания правила безопасности труда.

Помещение перед работой должно быть чистым, свободном от пыли, паров, кислот и щелочей, агрессивных газов и других вредных примесей, вызывающий коррозию. Недопустимо наличие открытого огня около прибора.

После окончания работы с установкой необходимо:

- убедиться, что все клапаны контроллера закрыты;
- выйти из программы, отключить питание компьютера;
- отключить установку и насос от электросети.

5.4. Экологическая безопасность. Анализ влияния процесса исследования на окружающую среду. Обоснование мероприятий по защите окружающей среды.

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

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

Макулатура (черновики, отработанная бумага и т.п.) будет собираться в размерах более одного килограмма и утилизироваться по адресу 634024, г. Томск, ул. Трудовая, 11 компанией ООО «Пирс». Предварительно макулатура должна быть отчищена от посторонних предметов, таких как, например, скрепки.

Компания ООО «Экоорг» осуществляет утилизацию отработанных картриджей от принтеров практически всех компаний. Предварительная обработка картриджей бывших в употреблении не требуется.

ООО Научно-производственное предприятие «ЭКОТОМ» осуществляет бесплатные сбор, обезвреживание и транспортировку опасных отходов отработанных люминесцентных ламп.

5.5. Защита в чрезвычайных ситуациях

Чрезвычайная ситуация (ЧС) – обстановка на определенной территории, сложившаяся в результате аварии, опасного природного явления, катастрофы, стихийного или иного бедствия, которые могут повлечь или повлекли за собой человеческие жертвы, ущерб здоровью людей или окружающей природной среде, значительные материальные потери и нарушение условий жизнедеятельности людей. Есть два вида чрезвычайных ситуации:

- техногенная;
- природная.

К техногенным ЧС относиться можно отнести пожары, взрывы, диверсии, выбросы ядовитых веществ, пожары, взрывы. К природным ЧС можно отнести природные катаклизмы. К наиболее вероятным техногенной ЧС является пожары. Для предотвращения пожаров, взрывов необходимо соблюдать правила техники безопасности и организовывать мероприятия, упомянутые в разделе 5.2.

При возникновении пожаров необходимо:

- сообщить о возникновения возгорания пожарным службам;
- отключить по мере возможности все электротехнические оборудования от розетки;
- закрыть по мере возможности все окна в помещении;
- покинуть помещения по схеме эвакуации.

Наиболее вероятным природным катаклизмом являются сильные морозы.

Для защиты от сильных морозов производственные здания должны быть оборудованы запасными электрогенераторами и теплогенераторами. Помещения при сильном морозе должны быть обеспечены приборами обогрева. Для транспортировки персонала к рабочему месту и обратно домой, предприятия должны иметь рабочий транспорт. Производственные помещения должны быть обеспечены суточной нормой питьевой воды.

Выводы

В результате рассмотрения условия работы с установкой, выделены опасные и вредные производственные факторы, а также существующие средства и методы защиты, описаны организационные и технические мероприятия, проводимые перед началом работы. Проведен расчет освещенности помещения, который удовлетворяет требуемым нормам общего равномерного освещения.

Вредные производственные факторы такие как отклонение микроклимата от нормы, производственный шум, электромагнитные волны, недостаточная освещенность можно и контролировать и свести к минимуму путем применения вытяжки, кондиционеров, специальных звукоизолирующих материалов, рациональным планированием помещений, контролем работы за ЭВМ. Для предотвращения опасных производственных факторов необходимо соблюдение правил пожарной и электрической безопасности.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Герцберг Г. Колебательные и вращательные спектры многоатомных молекул. – Москва: Изд-во иностранной литературы, 1949. – С. 647 .
2. Ulenikov O.N., Gromova O.V., Aslapovskaya Yu.S., Horneman V.-M. High resolution spectroscopic study of C₂H₄: Re-analysis of the ground state and ν_4 , ν_7 , ν_{10} and ν_{12} vibrational bands. // Journal of Quantitative Spectroscopy & Radiative Transfer. – 2013 . – V. 118. – P. 14-25.
3. Ulenikov O.N., Gromova O.V. Bekhtereva E.S., Maul C., Bauerecker S., Gabona M.G., Tan T.L. High resolution ro-vibrational analysis of interacting bands ν_4 , ν_7 , ν_{10} and ν_{12} of ¹³C₂H₄. // Journal of Spectroscopy & Radiative Transfer. – 2015. – V. 151. – P. 224-238.
4. Tasir S. Per, M. Iqbal R. Khan, Naser A. Anjum, Asim Masood, Sofi J. Hussain, Nafees A. Khan. Jasmonates in plants under abiotic stresses: Crosstalk with other phytohormones matters // Environmental and Experimental Botany. – 2018. – V. 145. – P. 104 – 120.
5. Ulenikov O.N., Gromova O.V., Bekhtereva E.S., Berezkin K.B., Kashirina N.V., Tan T.L., Sydow C., Maul C., Bauerecker S. Study of resonance interactions in polyatomic molecules on the basis of highly experimental data: Set of strongly interacting Bands $\nu_{10}(B_1)$, $\nu_7(B_2)$, $\nu_4(A_2)$, $\nu_8(B_2)$, $\nu_3(A_1)$ and $\nu_6(B_1)$ of CH₂=CD₂ // Journal of Quantitative Spectroscopy & Radiative Transfer . – 2016. – V. 180. – P. 14 – 28.
6. Кулаева О.Н. Этилен в жизни растений // Соросовский образовательный журнал. – 1998 . – №11. – С. 78 – 84.
7. Фомченко А.Л., Белова А.С., Берёзкин К.Б., Зятькова А.С. Определение констант форм колебаний молекулы C₂H₂ // Известия высших учебных заведений. Физика. – 2016. – Т. 56. – № 7. – С. 132 – 133.
8. Берёзкин К.Б., Фомченко А.Л., Аслаповская Ю.С., Громова О.В., Бехтерева Е.С., Мауль К. Спектроскопия высокого разрешения молекулы

$\text{CH}_2=\text{CD}_2$: анализ «горячей» полосы $\nu_7+\nu_{10} - \nu_{10}$ // Известия высших учебных заведений. Физика. – 2017. – Т. 60. – № 4. – С. 4 – 6.

9. Laura C. DI, Panunzi A. Vibration-rotation bands of trans- D_2 -ethylene. – 1969. – V. 3. – P. 223–241.

10. Давыдов А.С. Квантовая механика. – 3 изд., стереотипное. – СПб.: БХВ-Петербург. – 2011. – С. 704.

11. Конн Ж., Делуи Э., Конн П., Гелашвили Г., Майар Ж. П., Мишель Г. Фурье-спектроскопия с использованием миллиона точек интерферограммы // Инфракрасная спектроскопия высокого разрешения / под ред. Г. Н. Жижина. – М.: Мир, 1972. – С. 19–56.

12. Громова О.В., Спектроскопия высокого разрешения серосодержащих молекул типа XY_2 : диссертация на соискание учёной степени кандидата физико-математических наук / Гомова О.В. – Томск., 2010. – С. 158 .

13. Белова А.Г., Использование теории изотопозамещения для расчета параметров изотопологов этилена $\text{C}_2\text{H}_2\text{D}$ и $\text{C}_2\text{H}_2\text{D}_2$ -trans: Магистерская диссертация. ТГУ. Томск. – 2017. – С. 50.

14. Hegelund F.M., Nicolaisen F.M. Coriolis Perturbations in the ν_{10} , ν_7 , ν_4 , ν_{12} Band System of trans- d_2 -Ethylene // Journal of Molecular Spectroscopy. – 1986. – V. 116. – P. 214–227.

15. Макушкин Ю.С., Улеников О.Н., Чеглоков А. Е. Симметрия и ее применение к задачам колебательно-вращательной спектроскопии молекул, часть 2. – Томск: Изд-во ТГУ, 1990. – С. 222.

16. Аслаповская Ю.С. Спектроскопия высокого разрешения молекул типа ассиметричного волчка на примере молекулы $^{12}\text{C}_2\text{H}_4$ и её изотополога $^{13}\text{C}^{12}\text{CH}_4$. Диссертация на соискание учёной степени кандидата физико-математических наук / Аслаповская Ю.С. – Томск., – 2018. – С. 126.

17. Сошников, В. Н. Абсолютные интенсивности электронных переходов в двухатомных молекулах // УФН. – 1961. – Т. 74. – С. 61–85.

18. Perrin, A., Demaison, J., Toon, G. The 1, 2, and 3 bands of carbonyl chlorofluoride (COFCl) at 5.3, 9.1, and 13.1 mm: position and intensity parameters

and their use for atmospheric studies // *J. Quant. Spectrosc. & Radiat. Transer.* – 2011. – Vol. 112. – P. 1266–1279.

19. Tan T. L., Ng L. L., Gabon M. G. // *Journal of Molecular Spectroscopy.* – 2015. –V. 312. –P. 6–12.

20. Watson J. K. G. Simplification of the molecular vibrational-rotational Hamiltonian // *Molecular Physics.* – 1968. – №15. – P. 479 – 49.

21. Tan T.L., Tan W.H. High resolution FTIR spectrum and analysis of the ν_4 band of trans-d₂-ethylene (trans-C₂H₂D₂) // *Chemical Physics Letters.* – 2005. – V. 411. – P. 43 – 45.

22. Recommended isolated-line profile representing high-resolution spectroscopic transitions / Tennyson, J. [other] // *Pure Appl. Chem.* – 2014. – Vol. 86. – P. 1931–1943.

23. Ельяшевич М.А. Атомная и молекулярная спектроскопия. Изд.2. – М.:Эдиториал УРСС,2001. – С. 896 .

24. Волькенштейн М.В. Колебания молекул. – М.: Главная редакция физико – математической литературы «Наука», 1972. – 699 с.

25. Ngo, N. H., Lisak, D., Tran, H., Hartmann, J.-M. An isolated line-shape model to go beyond the Voigt profile in spectroscopic databases and radiative transfer codes // *J. Quant. Spectrosc. & Radiat. Transer.* – 2014. – Vol. 129. – P. 89–100.

26. Tran, H., Ngo, N. H., Hartmann, J.-M. Efficient computation of some speed-dependent isolated line profiles // *J. Quant. Spectrosc. & Radiat. Transer.* – 2013. – Vol. 129. – P. 199–203.

27. Lisak D., Cygana A., Bermejo D., Domenech J.L, Hodges J.T., Tran H. Application of the Hartmann–Tran profile to analysis of H₂O spectra // *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer.* – 2015. – Vol. 164. – P. 221-230.

28. Forthommea D., Cichb M. J., Twagirayezua S., Halla G. E., Searsa T. J. Application of the Hartmann-Tran profile to precise experimental data sets of ¹²C₂H₂ // Preprint submitted to *The Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer.* – 2015. – P. 2 – 24.

29. Jonathan T., Peter F. B., Alain C., Attila G. C. Recommended isolated-line profile for representing high-resolution spectroscopic transitions (IUPAC Technical Report) // Pure Appl. Chem. – 2014. – Vol. 86. – № 12. – P. 1931–1943.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В данной работе выполнен теоретический анализ спектра высокого разрешения молекулы $^{12}\text{C}_2\text{H}_2\text{D}_2$ -транс, исследование положения и интенсивности линии в полосах $\nu_3+\nu_4$, $\nu_2+\nu_{10}$ и ν_9 .

1. Рассмотрен один из методов определения собственных значений и функций гамильтониана, а именно, метод эффективных гамильтонианов в рамках операторной теории возмущений;
2. Обсуждена полуклассическая теория взаимодействия излучения с веществом, модель профиля изолированной линии для определения количественного значения интенсивностей спектральных линии.
3. Увеличено количество экспериментальной информации, извлекаемой из спектра для полосы ν_9 (в 10 раз больше, по сравнению с имеющимися данными в работе [9]).
4. Впервые выполнен анализ абсолютных интенсивностей для фундаментальной полосы ν_9 с помощью профиля Армана-Тран. В результате было обработано 741 спектральных линии с погрешностью на уровне 1 – 2% . ;
5. Впервые на основе метода комбинационных разностей было проанализировано около 1040 переходов для комбинационных полос $\nu_3+\nu_4$ и $\nu_2+\nu_{10}$. Для данных переходов максимальное значение квантовых чисел составляет: $J^{max}/K_a^{max} - 18/7$ и $20/9$, соответственно. В результате варьирования получен набор из 30 параметров гамильтониана, в том числе и параметры взаимодействия;

СПИСОК ПУБЛИКАЦИЙ И АПРОБАЦИЯ РАБОТЫ

1. Зяткова А.Г., Гиниятова А. Б. Исследование гибридной полосы $\nu_2 + \nu_{10}$ молекулы $C_2H_2D_2$ -транс. Известия высших учебных заведений. Физика. – 2018. – Т. 61. – №12(732). – С. 142 – 145.
2. Ziatkova A.G., Giniyatova A.B. Study of the $\nu_2 + \nu_{10}$ Hybrid Band of the Trans- $C_2H_2D_2$ Molecule. Russian Physics Journal. – 2019. – Vol. 61. – №12. – P. 2300 – 2304.

ПРИЛОЖЕНИЕ А

Таблица 23 – Список интерпретированных интенсивностей, соответствующих
полосе ν_9 молекулы $^{12}\text{C}_2\text{H}_2\text{D}_2$ -транс

J Ka Kc	J' Ka'Kc'	Переход, см ⁻¹	Пропус- кание, %	Колебательно- вращательная энергия, см ⁻¹	$\delta \cdot 10^{-4}$, см ⁻¹	Полоса
1	2	3	4	5	6	7
14 8 6	15 9 7	2145.6373	96.2	2547.3529	7	$\nu_2 + \nu_{10}$
14 8 7	15 9 6	2145.6373	96.2	2547.3529	7	$\nu_2 + \nu_{10}$
11 8 3	12 9 4	2151.0040	96.5	2489.4498	9	$\nu_2 + \nu_{10}$
8 8 1	9 9 0	2156.1531	96.3	2444.9141	4	$\nu_2 + \nu_{10}$
8 8 0	9 9 1	2156.1531	96.3	2444.9141	4	$\nu_2 + \nu_{10}$
10 7 3	11 8 4	2160.0240	96.2	2434.0929	4	$\nu_2 + \nu_{10}$
10 7 4	11 8 3	2160.0240	96.2	2434.0929	4	$\nu_2 + \nu_{10}$
9 7 3	10 8 2	2161.7535	95.5	2419.2542	9	$\nu_2 + \nu_{10}$
9 7 2	10 8 3	2161.7535	95.5	2419.2542	9	$\nu_2 + \nu_{10}$
8 7 2	9 8 1	2163.4610	95.3	2405.9031	5	$\nu_2 + \nu_{10}$
8 7 1	9 8 2	2163.4610	95.3	2405.9031	5	$\nu_2 + \nu_{10}$
7 7 0	8 8 1	2165.1460	95.2	2394.0378	4	$\nu_2 + \nu_{10}$
7 7 1	8 8 0	2165.1460	95.2	2394.0378	4	$\nu_2 + \nu_{10}$
7 6 2	8 7 1	2171.9676	93.6	2359.9629	9	$\nu_2 + \nu_{10}$
7 6 1	8 7 2	2171.9676	93.6	2359.9629	9	$\nu_2 + \nu_{10}$
14 4 11	15 5 10	2172.9828	94.6	2422.5175	2	$\nu_2 + \nu_{10}$
6 6 1	7 7 0	2173.6252	93.6	2349.5739	9	$\nu_2 + \nu_{10}$
6 6 0	7 7 1	2173.6252	93.6	2349.5739	9	$\nu_2 + \nu_{10}$
13 4 9	14 5 10	2174.8786	96.1	2401.6735	1	$\nu_2 + \nu_{10}$
12 4 8	13 5 9	2176.6193	93.0	2382.2241	2	$\nu_2 + \nu_{10}$
8 5 3	9 6 4	2176.9637	93.7	2343.0635	3	$\nu_2 + \nu_{10}$
8 5 4	9 6 3	2176.9637	93.7	2343.0635	3	$\nu_2 + \nu_{10}$
7 5 2	8 6 3	2178.6408	93.1	2331.1775	1	$\nu_2 + \nu_{10}$
7 5 3	8 6 2	2178.6408	93.1	2331.1775	1	$\nu_2 + \nu_{10}$
10 4 6	11 5 7	2180.0604	95.3	2347.8692	7	$\nu_2 + \nu_{10}$

6 5 1	7 6 2	2180.2972	92.6	2320.7818	1	$v_2 + v_{10}$
6 5 2	7 6 1	2180.2972	92.6	2320.7818	1	$v_2 + v_{10}$
9 4 6	10 5 5	2181.8277	95.6	2333.0246	3	$v_2 + v_{10}$
5 5 0	6 6 1	2181.9324	91.9	2311.8747	1	$v_2 + v_{10}$
5 5 1	6 6 0	2181.9324	91.9	2311.8747	1	$v_2 + v_{10}$
8 4 5	9 5 4	2183.4774	93.6	2319.5817	9	$v_2 + v_{10}$
8 4 4	9 5 5	2183.4774	93.6	2319.5816	9	$v_2 + v_{10}$
7 4 3	8 5 4	2185.1419	91.7	2307.6708	7	$v_2 + v_{10}$
7 4 4	8 5 3	2185.1419	91.7	2307.6708	7	$v_2 + v_{10}$
6 4 3	7 5 2	2186.7898	91.5	2297.2580	7	$v_2 + v_{10}$
6 4 2	7 5 3	2186.7898	91.5	2297.2580	7	$v_2 + v_{10}$
16 8 8	17 8 9	2188.1694	81.5	2593.4047	3	$v_2 + v_{10}$
16 8 9	17 8 10	2188.1694	81.5	2593.4047	3	$v_2 + v_{10}$
5 4 1	6 5 2	2188.4184	91.4	2288.3383	8	$v_2 + v_{10}$
5 4 2	6 5 1	2188.4184	91.4	2288.3383	8	$v_2 + v_{10}$
15 8 7	16 8 8	2190.0451	80.5	2569.6322	9	$v_2 + v_{10}$
15 8 8	16 8 9	2190.0451	80.5	2569.6322	9	$v_2 + v_{10}$
8 5 3	8 6 2	2190.5270	95.6	2343.0636	3	$v_2 + v_{10}$
8 5 4	8 6 3	2190.5270	95.6	2343.0636	3	$v_2 + v_{10}$
7 5 2	7 6 1	2190.6929	96.4	2331.1776	1	$v_2 + v_{10}$
7 5 3	7 6 2	2190.6929	96.4	2331.1776	1	$v_2 + v_{10}$
11 2 9	12 3 10	2192.9286	95.0	2335.3560	5	$v_2 + v_{10}$
9 2 8	10 3 7	2193.1523	96.4	2301.1227	1	$v_2 + v_{10}$
13 8 6	14 8 7	2193.7253	64.1	2526.5647	6	$v_2 + v_{10}$
13 8 5	14 8 6	2193.7253	64.1	2526.5647	6	$v_2 + v_{10}$
9 1 9	10 2 8	2193.8219	92.7	2289.8230	9	$v_2 + v_{10}$
10 2 8	11 3 9	2194.0672	96.2	2318.3490	8	$v_2 + v_{10}$
9 2 7	10 3 8	2195.2805	96.0	2302.9252	2	$v_2 + v_{10}$
12 8 4	13 8 5	2195.5258	80.7	2507.2628	7	$v_2 + v_{10}$
12 8 5	13 8 6	2195.5258	80.7	2507.2628	7	$v_2 + v_{10}$
14 4 11	14 5 10	2195.7236	96.0	2422.5186	2	$v_2 + v_{10}$
13 4 10	13 5 9	2195.9903	94.7	2401.5951	1	$v_2 + v_{10}$
13 4 9	13 5 8	2196.0641	96.3	2401.6730	1	$v_2 + v_{10}$
16 1 15	17 1 16	2196.2361	81.5	2432.1825	2	$v_2 + v_{10}$

12 4 9	12 5 8	2196.2361	81.5	2382.1800	2	$v_2 + v_{10}$
12 4 8	12 5 7	2196.2779	95.0	2382.2236	2	$v_2 + v_{10}$
4 3 1	5 4 1	2196.3015	91.2	2262.6106	2	$v_2 + v_{10}$
4 3 1	5 4 2	2196.3015	91.2	2262.6106	2	$v_2 + v_{10}$
11 4 7	11 5 6	2196.4833	96.2	2364.2928	4	$v_2 + v_{10}$
10 4 7	10 5 6	2196.6639	96.3	2347.8605	7	$v_2 + v_{10}$
10 4 6	10 5 5	2196.6741	95.1	2347.8710	7	$v_2 + v_{10}$
9 4 6	9 5 5	2196.9203	94.2	2333.0244	3	$v_2 + v_{10}$
8 4 4	8 5 3	2197.0529	93.2	2319.5818	9	$v_2 + v_{10}$
8 4 5	8 5 4	2197.0529	93.2	2319.5818	9	$v_2 + v_{10}$
14 4 10	15 4 11	2197.0782	75.6	2422.6444	2	$v_2 + v_{10}$
7 2 6	8 3 5	2197.1068	95.0	2276.1110	6	$v_2 + v_{10}$
14 3 11	15 3 12	2197.1767	79.1	2405.8329	5	$v_2 + v_{10}$
9 6 3	8 7 2	2197.2025	94.4	2385.1977	5	$v_2 + v_{10}$
7 4 4	7 5 3	2197.2025	94.4	2307.6707	7	$v_2 + v_{10}$
7 4 3	7 5 2	2197.2025	94.4	2307.6707	7	$v_2 + v_{10}$
14 4 11	15 4 12	2197.2709	82.4	2422.5185	2	$v_2 + v_{10}$
11 8 3	12 8 4	2197.3020	82.7	2489.4492	9	$v_2 + v_{10}$
11 8 4	12 8 5	2197.3020	82.7	2489.4492	9	$v_2 + v_{10}$
6 4 3	6 5 2	2197.3382	95.1	2297.2582	7	$v_2 + v_{10}$
6 4 2	6 5 1	2197.3382	95.1	2297.2582	7	$v_2 + v_{10}$
15 1 14	16 1 15	2197.7742	68.9	2408.7193	8	$v_2 + v_{10}$
3 3 1	4 4 0	2197.8906	90.4	2256.6667	6	$v_2 + v_{10}$
3 3 0	4 4 1	2197.8906	90.4	2256.6667	6	$v_2 + v_{10}$
7 2 5	8 3 6	2197.9439	96.5	2276.8574	6	$v_2 + v_{10}$
14 3 12	15 3 13	2198.2631	71.4	2404.1034	4	$v_2 + v_{10}$
6 2 5	7 3 4	2198.9158	96.4	2265.7817	5	$v_2 + v_{10}$
13 4 9	14 4 10	2199.0099	80.8	2401.6731	1	$v_2 + v_{10}$
10 8 3	11 8 4	2199.0519	85.9	2473.1208	3	$v_2 + v_{10}$
10 8 2	11 8 3	2199.0519	85.9	2473.1208	3	$v_2 + v_{10}$
16 1 16	17 1 17	2199.1543	62.3	2415.3684	5	$v_2 + v_{10}$
13 3 10	14 3 11	2199.2215	71.6	2384.4420	4	$v_2 + v_{10}$
13 3 11	14 3 12	2200.0499	76.9	2383.2656	3	$v_2 + v_{10}$
5 2 4	6 3 3	2200.6443	95.2	2256.9139	6	$v_2 + v_{10}$

15 1 15	16 1 16	2200.6646	70.4	2393.4185	3	$v_2 + v_{10}$
15 1 15	16 0 16	2200.7206	96.5	2393.4184	3	$v_2 + v_{10}$
9 8 1	10 8 2	2200.7753	88.9	2458.2761	8	$v_2 + v_{10}$
9 8 2	10 8 3	2200.7753	88.9	2458.2761	8	$v_2 + v_{10}$
12 4 8	13 4 9	2200.8826	73.8	2382.2235	2	$v_2 + v_{10}$
10 7 4	11 7 5	2200.8993	79.6	2434.0929	4	$v_2 + v_{10}$
10 7 3	11 7 4	2200.8993	79.6	2434.0929	4	$v_2 + v_{10}$
13 1 12	14 1 13	2200.9235	66.5	2365.7927	5	$v_2 + v_{10}$
12 4 9	13 4 10	2200.9469	79.9	2382.1810	2	$v_2 + v_{10}$
12 3 9	13 3 10	2201.2218	77.4	2364.6666	4	$v_2 + v_{10}$
7 5 2	6 6 1	2201.2361	68.9	2331.1784	1	$v_2 + v_{10}$
12 2 10	13 2 11	2201.2361	68.9	2353.9338	3	$v_2 + v_{10}$
12 3 10	13 3 11	2201.8268	68.7	2363.9016	3	$v_2 + v_{10}$
14 1 14	15 1 15	2202.1484	59.8	2372.7848	2	$v_2 + v_{10}$
10 1 9	11 2 10	2202.1703	96.5	2311.5805	1	$v_2 + v_{10}$
4 2 3	5 3 2	2202.3091	93.0	2249.5129	9	$v_2 + v_{10}$
4 2 2	5 3 3	2202.4101	93.9	2249.6083	9	$v_2 + v_{10}$
8 8 0	9 8 1	2202.4722	93.3	2444.9143	4	$v_2 + v_{10}$
8 8 1	9 8 2	2202.4722	93.3	2444.9143	4	$v_2 + v_{10}$
12 1 11	13 1 12	2202.5233	72.6	2346.3387	6	$v_2 + v_{10}$
9 7 2	10 7 3	2202.6377	81.9	2419.2542	9	$v_2 + v_{10}$
9 7 3	10 7 4	2202.6377	81.9	2419.2542	9	$v_2 + v_{10}$
11 4 7	12 4 8	2202.7081	77.8	2364.2921	4	$v_2 + v_{10}$
11 4 8	12 4 9	2202.7443	73.0	2364.2710	4	$v_2 + v_{10}$
11 2 9	12 2 10	2203.1377	76.0	2335.3564	5	$v_2 + v_{10}$
11 3 8	12 3 9	2203.1696	66.5	2346.4918	6	$v_2 + v_{10}$
9 1 8	10 2 9	2203.2186	94.9	2296.3351	6	$v_2 + v_{10}$
11 3 9	12 3 10	2203.5910	76.5	2346.0184	6	$v_2 + v_{10}$
13 1 13	14 1 14	2203.6358	68.8	2353.4991	3	$v_2 + v_{10}$
5 3 2	5 4 1	2203.7385	96.1	2270.0476	1	$v_2 + v_{10}$
13 1 13	14 0 14	2203.7560	95.1	2353.4992	3	$v_2 + v_{10}$
4 3 1	4 4 0	2203.8344	96.5	2262.6105	2	$v_2 + v_{10}$
4 3 1	4 4 1	2203.8344	96.5	2262.6105	2	$v_2 + v_{10}$
3 2 2	4 3 1	2203.9281	94.8	2243.5878	3	$v_2 + v_{10}$

3 2 1	4 3 2	2203.9614	96.0	2243.6196	3	$v_2 + v_{10}$
11 1 10	12 1 11	2204.1476	65.1	2328.2583	8	$v_2 + v_{10}$
8 1 7	9 2 8	2204.2835	95.3	2282.5471	2	$v_2 + v_{10}$
8 7 2	9 7 3	2204.3523	85.4	2405.9031	5	$v_2 + v_{10}$
8 7 1	9 7 2	2204.3523	85.4	2405.9031	5	$v_2 + v_{10}$
10 4 6	11 4 7	2204.4907	74.7	2347.8704	7	$v_2 + v_{10}$
10 4 7	11 4 8	2204.5099	80.8	2347.8606	7	$v_2 + v_{10}$
15 1 15	15 2 14	2204.6479	95.5	2393.4189	3	$v_2 + v_{10}$
11 2 10	12 2 11	2204.7503	64.5	2331.8842	1	$v_2 + v_{10}$
5 1 5	6 2 4	2204.9961	87.6	2247.9374	7	$v_2 + v_{10}$
10 3 7	11 3 8	2205.0617	76.3	2329.8991	9	$v_2 + v_{10}$
12 1 12	13 1 13	2205.1195	58.4	2335.5565	5	$v_2 + v_{10}$
12 1 12	13 0 13	2205.2923	90.9	2335.5558	5	$v_2 + v_{10}$
10 3 8	11 3 9	2205.3404	68.8	2329.6222	9	$v_2 + v_{10}$
7 1 6	8 2 7	2205.3788	90.0	2270.2415	1	$v_2 + v_{10}$
8 6 2	9 6 3	2205.7395	85.1	2371.8393	1	$v_2 + v_{10}$
8 6 3	9 6 4	2205.7395	85.1	2371.8393	1	$v_2 + v_{10}$
10 1 9	11 1 10	2205.7974	71.6	2311.5807	1	$v_2 + v_{10}$
7 7 0	8 7 1	2206.0425	91.4	2394.0377	4	$v_2 + v_{10}$
7 7 1	8 7 2	2206.0425	91.4	2394.0377	4	$v_2 + v_{10}$
9 4 5	10 4 6	2206.3086	85.0	2333.0266	3	$v_2 + v_{10}$
9 4 6	10 4 7	2206.3191	79.2	2333.0234	3	$v_2 + v_{10}$
10 2 9	11 2 10	2206.3788	73.2	2315.7890	5	$v_2 + v_{10}$
6 1 5	7 2 6	2206.5157	96.6	2259.4393	9	$v_2 + v_{10}$
11 1 11	12 1 12	2206.5997	68.3	2318.9600	8	$v_2 + v_{10}$
11 1 11	12 0 12	2206.8473	94.3	2318.9598	8	$v_2 + v_{10}$
9 3 6	10 3 7	2206.8983	69.8	2314.8688	4	$v_2 + v_{10}$
9 2 7	10 2 8	2206.9243	74.9	2302.9253	2	$v_2 + v_{10}$
8 5 3	9 5 4	2206.9592	70.6	2343.0634	3	$v_2 + v_{10}$
8 5 4	9 5 5	2206.9592	70.6	2343.0633	3	$v_2 + v_{10}$
9 3 7	10 3 8	2207.0725	76.0	2314.7172	4	$v_2 + v_{10}$
13 1 13	13 2 12	2207.2229	94.8	2353.4988	3	$v_2 + v_{10}$
7 6 2	8 6 3	2207.4260	82.7	2359.9627	9	$v_2 + v_{10}$
7 6 1	8 6 2	2207.4260	82.7	2359.9627	9	$v_2 + v_{10}$

9 1 8	10 1 9	2207.4695	65.0	2296.3347	6	$v_2 + v_{10}$
11 2 10	11 3 9	2207.6021	91.9	2331.8839	1	$v_2 + v_{10}$
11 2 10	12 1 11	2207.7737	96.0	2331.8844	1	$v_2 + v_{10}$
9 2 8	10 2 9	2208.0065	64.5	2301.1229	1	$v_2 + v_{10}$
10 1 10	11 1 11	2208.0770	58.8	2303.7138	3	$v_2 + v_{10}$
10 2 9	10 3 8	2208.1444	94.0	2315.7891	5	$v_2 + v_{10}$
7 5 3	8 5 4	2208.6484	73.7	2331.1773	1	$v_2 + v_{10}$
7 5 2	8 5 3	2208.6484	73.7	2331.1773	1	$v_2 + v_{10}$
8 3 5	9 3 6	2208.6832	77.7	2301.3829	1	$v_2 + v_{10}$
8 3 6	9 3 7	2208.7853	69.7	2301.3062	1	$v_2 + v_{10}$
8 2 6	9 2 7	2208.7931	63.4	2289.0943	9	$v_2 + v_{10}$
4 1 3	5 2 4	2208.9337	94.9	2242.4015	2	$v_2 + v_{10}$
8 2 7	8 3 6	2208.9802	94.5	2287.8938	7	$v_2 + v_{10}$
6 6 0	7 6 1	2209.0895	84.5	2349.5742	9	$v_2 + v_{10}$
6 6 1	7 6 2	2209.0895	84.5	2349.5742	9	$v_2 + v_{10}$
8 1 7	9 1 8	2209.1588	73.7	2282.5474	2	$v_2 + v_{10}$
7 2 6	7 3 5	2209.2864	93.3	2276.1106	6	$v_2 + v_{10}$
6 2 5	6 3 4	2209.5288	95.2	2265.7816	5	$v_2 + v_{10}$
9 1 9	10 1 10	2209.5519	66.6	2289.8228	9	$v_2 + v_{10}$
8 2 7	9 2 8	2209.6300	73.8	2287.8937	7	$v_2 + v_{10}$
7 4 3	8 4 4	2209.6814	65.7	2307.6720	7	$v_2 + v_{10}$
7 4 4	8 4 5	2209.6814	65.7	2307.6697	7	$v_2 + v_{10}$
5 2 4	5 3 3	2209.7159	94.5	2256.9141	6	$v_2 + v_{10}$
4 2 3	4 3 2	2209.8553	94.0	2249.5135	9	$v_2 + v_{10}$
4 2 2	4 3 1	2209.9486	95.9	2249.6082	9	$v_2 + v_{10}$
3 2 1	3 3 0	2209.9909	93.8	2243.6216	3	$v_2 + v_{10}$
7 2 5	7 3 4	2209.9909	93.8	2276.8567	6	$v_2 + v_{10}$
9 1 9	10 0 10	2210.0360	93.6	2289.8228	9	$v_2 + v_{10}$
8 2 6	8 3 5	2210.0901	91.5	2289.0943	9	$v_2 + v_{10}$
3 1 2	4 2 3	2210.2185	87.7	2236.1849	6	$v_2 + v_{10}$
6 5 1	7 5 2	2210.3136	79.5	2320.7818	1	$v_2 + v_{10}$
6 5 2	7 5 3	2210.3136	79.5	2320.7818	1	$v_2 + v_{10}$
10 2 8	10 3 7	2210.3783	90.3	2318.3488	8	$v_2 + v_{10}$
7 3 4	8 3 5	2210.4214	72.3	2289.4256	9	$v_2 + v_{10}$

15 1 14	15 2 13	2210.4510	90.3	2408.7193	8	$v_2 + v_{10}$
7 3 5	8 3 6	2210.4769	79.4	2289.3905	9	$v_2 + v_{10}$
11 2 9	11 3 8	2210.5189	91.9	2335.3563	5	$v_2 + v_{10}$
10 1 10	10 2 9	2210.5982	91.0	2303.7146	3	$v_2 + v_{10}$
7 2 5	8 2 6	2210.6333	76.4	2276.8574	6	$v_2 + v_{10}$
7 1 6	8 1 7	2210.8581	66.6	2270.2423	1	$v_2 + v_{10}$
8 1 8	9 1 9	2211.0250	61.3	2277.2932	7	$v_2 + v_{10}$
2 1 2	3 2 1	2211.0804	95.6	2231.0743	1	$v_2 + v_{10}$
7 2 6	8 2 7	2211.2479	67.8	2276.1106	6	$v_2 + v_{10}$
6 4 3	7 4 4	2211.3451	69.7	2297.2574	7	$v_2 + v_{10}$
6 4 2	7 4 3	2211.3451	69.7	2297.2582	7	$v_2 + v_{10}$
9 1 9	9 2 8	2211.5597	92.3	2289.8233	9	$v_2 + v_{10}$
2 1 1	3 2 2	2211.5597	92.3	2231.5176	1	$v_2 + v_{10}$
8 1 8	9 0 9	2211.6832	91.6	2277.2931	7	$v_2 + v_{10}$
5 5 1	6 5 2	2211.9545	87.5	2311.8745	1	$v_2 + v_{10}$
5 5 0	6 5 1	2211.9545	87.5	2311.8745	1	$v_2 + v_{10}$
6 3 3	7 3 4	2212.1183	81.2	2278.9841	8	$v_2 + v_{10}$
6 3 4	7 3 5	2212.1457	75.1	2278.9700	8	$v_2 + v_{10}$
9 2 8	10 1 9	2212.2582	93.9	2301.1233	1	$v_2 + v_{10}$
6 2 4	7 2 5	2212.4344	68.6	2266.2072	6	$v_2 + v_{10}$
6 1 5	7 1 6	2212.5604	76.1	2259.4391	9	$v_2 + v_{10}$
6 2 5	7 2 6	2212.8578	77.8	2265.7815	5	$v_2 + v_{10}$
5 4 2	6 4 3	2212.9841	73.6	2288.3377	8	$v_2 + v_{10}$
5 4 1	6 4 2	2212.9841	73.6	2288.3379	8	$v_2 + v_{10}$
11 4 7	10 5 6	2213.0951	82.6	2364.2917	4	$v_2 + v_{10}$
13 1 12	13 2 11	2213.0951	82.6	2365.7928	5	$v_2 + v_{10}$
18 5 13	19 6 13	2213.2332	94.3	2598.5387	8	$v_3 + v_4$
18 5 14	19 6 14	2213.3048	96.5	2598.6011	8	$v_3 + v_4$
7 1 7	8 0 8	2213.3709	93.6	2266.1313	6	$v_2 + v_{10}$
5 3 2	6 3 3	2213.7788	77.8	2270.0484	1	$v_2 + v_{10}$
5 3 3	6 3 4	2213.7909	84.0	2270.0438	1	$v_2 + v_{10}$
16 8 8	16 8 9	2213.8174	92.4	2593.4045	3	$v_2 + v_{10}$
16 8 9	16 8 8	2213.8174	92.4	2593.4045	3	$v_2 + v_{10}$
14 4 11	15 3 12	2213.8875	93.5	2422.5437	2	$v_2 + v_{10}$

6 1 6	6 2 5	2213.8875	93.5	2256.3434	6	$v_2 + v_{10}$
6 1 6	7 1 7	2213.9658	66.0	2256.3434	6	$v_2 + v_{10}$
12 1 11	12 2 10	2214.1204	89.6	2346.3391	6	$v_2 + v_{10}$
15 8 8	15 8 7	2214.1764	93.3	2569.6321	9	$v_2 + v_{10}$
15 8 7	15 8 8	2214.1764	93.3	2569.6321	9	$v_2 + v_{10}$
5 2 3	6 2 4	2214.1902	62.5	2257.1315	7	$v_2 + v_{10}$
5 1 4	6 1 5	2214.2590	71.2	2250.1538	1	$v_2 + v_{10}$
5 2 4	6 2 5	2214.4579	72.2	2256.9138	6	$v_2 + v_{10}$
5 1 5	5 2 4	2214.4693	95.5	2247.9370	7	$v_2 + v_{10}$
14 8 6	14 8 7	2214.5129	91.6	2547.3524	7	$v_2 + v_{10}$
14 8 7	14 8 6	2214.5129	91.6	2547.3524	7	$v_2 + v_{10}$
4 4 0	5 4 1	2214.5997	83.9	2280.9088	1	$v_2 + v_{10}$
4 4 1	5 4 2	2214.5997	83.9	2280.9087	1	$v_2 + v_{10}$
17 5 13	18 6 13	2214.6784	92.9	2571.1797	1	$v_3 + v_4$
17 5 12	18 6 12	2214.6784	92.9	2571.1845	1	$v_3 + v_4$
13 8 6	13 8 5	2214.8263	90.0	2526.5634	6	$v_2 + v_{10}$
13 8 5	13 8 6	2214.8263	90.0	2526.5634	6	$v_2 + v_{10}$
11 1 10	11 2 9	2214.9456	81.5	2328.2582	8	$v_2 + v_{10}$
6 1 6	7 0 7	2215.0958	92.6	2256.3435	6	$v_2 + v_{10}$
12 8 5	12 8 4	2215.1157	86.8	2507.2629	7	$v_2 + v_{10}$
12 8 4	12 8 5	2215.1157	86.8	2507.2629	7	$v_2 + v_{10}$
11 8 4	11 8 3	2215.3805	83.5	2489.4493	9	$v_2 + v_{10}$
11 8 3	11 8 4	2215.3805	83.5	2489.4493	9	$v_2 + v_{10}$
5 1 5	6 1 6	2215.4329	77.0	2247.9371	7	$v_2 + v_{10}$
10 1 9	10 2 8	2215.5795	90.0	2311.5806	1	$v_2 + v_{10}$
10 8 3	10 8 2	2215.6198	79.7	2473.1206	3	$v_2 + v_{10}$
10 8 2	10 8 3	2215.6198	79.7	2473.1206	3	$v_2 + v_{10}$
9 8 2	9 8 1	2215.8339	75.4	2458.2760	8	$v_2 + v_{10}$
9 8 1	9 8 2	2215.8339	75.4	2458.2760	8	$v_2 + v_{10}$
8 7 2	9 8 2	2215.8339	75.4	2458.2760	8	$v_3 + v_4$
8 7 1	9 8 1	2215.8339	75.4	2458.2760	8	$v_3 + v_4$
4 2 2	5 2 3	2215.8930	74.4	2249.6081	9	$v_2 + v_{10}$
13 6 8	14 7 8	2215.9482	81.2	2507.9563	7	$v_3 + v_4$
4 1 3	5 1 4	2215.9482	81.2	2242.3991	2	$v_2 + v_{10}$

13 6 7	14 7 7	2215.9482	81.2	2507.9563	7	$v_3 + v_4$
8 8 0	8 8 1	2216.0224	70.0	2444.9142	4	$v_2 + v_{10}$
8 8 1	8 8 0	2216.0224	70.0	2444.9142	4	$v_2 + v_{10}$
9 1 8	9 2 7	2216.0327	81.3	2296.3339	6	$v_2 + v_{10}$
4 2 3	5 2 4	2216.0465	83.3	2249.5142	9	$v_2 + v_{10}$
16 5 11	17 6 11	2216.1297	93.1	2545.3740	5	$v_3 + v_4$
3 1 2	3 2 1	2216.1914	94.8	2236.1854	6	$v_2 + v_{10}$
5 1 4	5 2 3	2216.4386	91.8	2250.1538	1	$v_2 + v_{10}$
7 1 6	7 2 5	2216.4696	88.8	2270.2423	1	$v_2 + v_{10}$
6 1 5	6 2 4	2216.4968	89.4	2259.4381	9	$v_2 + v_{10}$
7 2 6	8 1 7	2216.7272	95.4	2276.1114	6	$v_2 + v_{10}$
5 1 5	6 0 6	2216.8490	94.6	2247.9371	7	$v_2 + v_{10}$
4 1 4	5 1 5	2216.8968	72.1	2240.9193	1	$v_2 + v_{10}$
3 3 0	4 3 1	2217.0076	84.1	2256.6673	6	$v_2 + v_{10}$
3 3 1	4 3 2	2217.0076	84.1	2256.6659	6	$v_2 + v_{10}$
14 4 10	13 5 9	2217.0391	96.2	2422.6439	2	$v_2 + v_{10}$
7 7 0	8 8 0	2217.1640	80.0	2446.0559	6	$v_3 + v_4$
7 7 1	8 8 1	2217.1640	80.0	2446.0559	6	$v_3 + v_4$
11 7 4	11 7 5	2217.2273	82.4	2450.4209	1	$v_2 + v_{10}$
11 7 5	11 7 4	2217.2273	82.4	2450.4209	1	$v_2 + v_{10}$
12 6 7	13 7 7	2217.3661	89.1	2488.2539	8	$v_3 + v_4$
12 6 6	13 7 6	2217.3661	89.1	2488.2539	8	$v_3 + v_4$
10 7 4	10 7 3	2217.4764	79.1	2434.0929	4	$v_2 + v_{10}$
10 7 3	10 7 4	2217.4764	79.1	2434.0929	4	$v_2 + v_{10}$
3 2 1	4 2 2	2217.5456	87.0	2243.6193	3	$v_2 + v_{10}$
3 2 2	4 2 3	2217.6224	67.8	2243.5888	3	$v_2 + v_{10}$
3 1 2	4 1 3	2217.6224	67.8	2236.1840	6	$v_2 + v_{10}$
15 5 11	16 6 11	2217.6569	92.2	2521.1719	1	$v_3 + v_4$
9 7 3	9 7 2	2217.7034	74.5	2419.2542	9	$v_2 + v_{10}$
9 7 2	9 7 3	2217.7034	74.5	2419.2542	9	$v_2 + v_{10}$
8 7 1	8 7 2	2217.9078	68.8	2405.9030	5	$v_2 + v_{10}$
8 7 2	8 7 1	2217.9078	68.8	2405.9030	5	$v_2 + v_{10}$
7 7 0	7 7 1	2218.0889	63.5	2394.0376	4	$v_2 + v_{10}$
7 7 1	7 7 0	2218.0889	63.5	2394.0376	4	$v_2 + v_{10}$

3 1 3	4 1 4	2218.3562	82.8	2235.2964	5	$v_2 + v_{10}$
4 1 4	5 0 5	2218.6137	93.9	2240.9192	1	$v_2 + v_{10}$
11 6 5	12 7 5	2218.7158	82.5	2469.9993	9	$v_3 + v_4$
11 6 6	12 7 6	2218.7158	82.5	2469.9993	9	$v_3 + v_4$
14 5 9	15 6 9	2219.1823	85.1	2498.5003	8	$v_3 + v_4$
14 5 10	15 6 10	2219.1906	93.4	2498.5081	8	$v_3 + v_4$
7 6 2	7 6 1	2219.4781	65.7	2359.9628	9	$v_2 + v_{10}$
7 6 1	7 6 2	2219.4781	65.7	2359.9628	9	$v_2 + v_{10}$
6 6 0	6 6 1	2219.6314	58.7	2349.5737	9	$v_2 + v_{10}$
6 6 1	6 6 0	2219.6314	58.7	2349.5737	9	$v_2 + v_{10}$
2 2 0	3 2 1	2219.6899	81.6	2239.6838	9	$v_2 + v_{10}$
10 2 9	10 2 8	2219.7878	95.5	2315.7888	5	$v_2 + v_{10}$
2 1 2	3 1 3	2219.8092	76.1	2231.0737	1	$v_2 + v_{10}$
13 3 11	13 3 10	2219.8213	95.9	2383.2661	3	$v_2 + v_{10}$
10 6 4	11 7 4	2220.0786	83.4	2453.2722	3	$v_3 + v_4$
10 6 5	11 7 5	2220.0786	83.4	2453.2722	3	$v_3 + v_4$
14 4 10	14 4 11	2220.1703	96.4	2422.6448	2	$v_2 + v_{10}$
8 5 4	8 5 3	2220.5345	75.2	2343.0633	3	$v_2 + v_{10}$
8 5 3	8 5 4	2220.5345	75.2	2343.0633	3	$v_2 + v_{10}$
12 3 10	12 3 9	2220.5791	96.2	2363.9013	3	$v_2 + v_{10}$
12 4 9	12 4 8	2220.5970	95.7	2382.1810	2	$v_2 + v_{10}$
12 4 8	12 4 9	2220.6970	93.2	2382.2236	2	$v_2 + v_{10}$
7 5 3	7 5 2	2220.7091	69.0	2331.1773	1	$v_2 + v_{10}$
7 5 2	7 5 3	2220.7091	69.0	2331.1773	1	$v_2 + v_{10}$
9 2 8	9 2 7	2220.8219	96.7	2301.1231	1	$v_2 + v_{10}$
6 5 1	6 5 2	2220.8617	60.2	2320.7817	1	$v_2 + v_{10}$
6 5 2	6 5 1	2220.8617	60.2	2320.7817	1	$v_2 + v_{10}$
11 4 8	11 4 7	2220.8913	91.9	2364.2710	4	$v_2 + v_{10}$
11 4 7	11 4 8	2220.9412	94.0	2364.2919	4	$v_2 + v_{10}$
5 5 0	5 5 1	2220.9924	56.5	2311.8746	1	$v_2 + v_{10}$
5 5 1	5 5 0	2220.9924	56.5	2311.8746	1	$v_2 + v_{10}$
5 2 4	6 1 5	2221.0178	95.1	2256.9126	6	$v_2 + v_{10}$
10 4 7	10 4 6	2221.1429	92.7	2347.8609	7	$v_2 + v_{10}$
10 4 6	10 4 7	2221.1661	91.6	2347.8704	7	$v_2 + v_{10}$

9 4 6	9 4 5	2221.4326	92.6	2333.0230	3	$v_2 + v_{10}$
9 4 5	9 4 6	2221.4421	94.4	2333.0266	3	$v_2 + v_{10}$
10 3 8	10 3 7	2221.6517	93.1	2329.6222	9	$v_2 + v_{10}$
7 4 3	7 4 4	2221.7578	77.2	2307.6701	7	$v_2 + v_{10}$
7 4 4	7 4 3	2221.7578	77.2	2307.6709	7	$v_2 + v_{10}$
6 4 3	6 4 2	2221.9042	70.2	2297.2580	7	$v_2 + v_{10}$
6 4 2	6 4 3	2221.9042	70.2	2297.2578	7	$v_2 + v_{10}$
9 3 7	9 3 6	2222.0177	94.7	2314.7174	4	$v_2 + v_{10}$
5 4 2	5 4 1	2222.0291	65.1	2288.3382	8	$v_2 + v_{10}$
5 4 1	5 4 2	2222.0291	65.1	2288.3382	8	$v_2 + v_{10}$
2 1 2	3 0 3	2222.0880	96.1	2231.0735	1	$v_2 + v_{10}$
4 4 0	4 4 1	2222.1328	56.8	2280.9089	1	$v_2 + v_{10}$
4 4 1	4 4 0	2222.1328	56.8	2280.9089	1	$v_2 + v_{10}$
11 3 8	11 3 9	2222.2100	95.3	2346.4918	6	$v_2 + v_{10}$
12 3 9	12 3 10	2222.2394	95.3	2364.6668	4	$v_2 + v_{10}$
10 3 7	10 3 8	2222.2547	95.3	2329.8993	9	$v_2 + v_{10}$
7 2 6	7 2 5	2222.3389	87.6	2276.1117	6	$v_2 + v_{10}$
9 3 6	9 3 7	2222.3478	93.1	2314.8687	4	$v_2 + v_{10}$
13 3 10	13 3 11	2222.3676	96.4	2384.4423	4	$v_2 + v_{10}$
8 3 5	8 3 6	2222.4692	92.3	2301.3827	1	$v_2 + v_{10}$
7 3 5	7 3 4	2222.5247	92.4	2289.3905	9	$v_2 + v_{10}$
7 3 4	7 3 5	2222.6014	90.0	2289.4257	9	$v_2 + v_{10}$
6 3 4	6 3 3	2222.7005	87.2	2278.9700	8	$v_2 + v_{10}$
6 3 3	6 3 4	2222.7304	85.7	2278.9832	8	$v_2 + v_{10}$
5 3 3	5 3 2	2222.8403	67.8	2270.0441	1	$v_2 + v_{10}$
6 2 5	6 2 4	2222.8403	67.8	2265.7816	5	$v_2 + v_{10}$
8 6 2	9 7 2	2222.8403	67.8	2424.3911	4	$v_3 + v_4$
8 6 3	9 7 3	2222.8403	67.8	2424.3911	4	$v_3 + v_4$
5 3 2	5 3 3	2222.8496	80.4	2270.0478	1	$v_2 + v_{10}$
4 3 1	4 3 1	2222.9513	73.4	2262.6109	2	$v_2 + v_{10}$
3 3 0	3 3 1	2223.0360	57.6	2256.6665	6	$v_2 + v_{10}$
3 3 1	3 3 0	2223.0360	57.6	2256.6667	6	$v_2 + v_{10}$
3 1 3	3 1 2	2223.0652	82.3	2235.3032	5	$v_2 + v_{10}$
5 2 4	5 2 3	2223.1981	91.2	2256.9132	6	$v_2 + v_{10}$

4 2 3	4 2 2	2223.4404	92.5	2249.5141	9	$v_2 + v_{10}$
3 2 2	3 2 1	2223.5942	82.9	2243.5881	3	$v_2 + v_{10}$
5 2 3	5 2 4	2223.6628	82.0	2257.1305	7	$v_2 + v_{10}$
11 5 6	12 6 6	2223.8825	81.1	2439.7560	9	$v_3 + v_4$
11 5 7	12 6 7	2223.8825	81.1	2439.7560	9	$v_3 + v_4$
1 1 1	2 0 2	2223.9367	77.9	2228.4403	8	$v_2 + v_{10}$
9 2 7	8 3 6	2224.0115	96.3	2302.9251	2	$v_2 + v_{10}$
1 1 1	1 1 0	2224.1251	84.8	2228.4442	8	$v_2 + v_{10}$
2 2 1	2 2 0	2224.2475	88.7	2239.7020	9	$v_2 + v_{10}$
2 1 1	2 1 2	2224.5170	94.2	2231.5187	1	$v_2 + v_{10}$
9 2 7	9 2 8	2224.6619	96.4	2302.9256	2	$v_2 + v_{10}$
3 1 2	3 1 3	2224.9206	94.4	2236.1850	6	$v_2 + v_{10}$
10 5 5	11 6 5	2225.4657	79.8	2423.2320	3	$v_3 + v_4$
10 5 6	11 6 6	2225.4657	79.8	2423.2320	3	$v_3 + v_4$
6 6 1	7 7 1	2225.6436	71.0	2401.5923	1	$v_3 + v_4$
6 6 0	7 7 0	2225.6436	71.0	2401.5923	1	$v_3 + v_4$
11 2 9	11 2 10	2225.9456	97.2	2335.3559	5	$v_2 + v_{10}$
1 1 0	1 0 1	2226.7422	85.5	2228.2458	8	$v_2 + v_{10}$
12 2 10	12 2 11	2226.7998	92.5	2353.9336	3	$v_2 + v_{10}$
2 1 2	1 1 1	2226.9168	89.9	2231.0736	1	$v_2 + v_{10}$
2 1 1	2 0 2	2227.0146	93.8	2231.5181	1	$v_2 + v_{10}$
9 5 4	10 6 4	2227.0548	72.0	2408.2305	8	$v_3 + v_4$
9 5 5	10 6 5	2227.0548	72.0	2408.2305	8	$v_3 + v_4$
3 1 2	3 0 3	2227.1990	84.3	2236.1845	6	$v_2 + v_{10}$
2 1 1	1 1 0	2227.1990	84.3	2231.5181	1	$v_2 + v_{10}$
4 1 3	4 0 4	2227.4715	90.8	2242.3997	2	$v_2 + v_{10}$
11 2 9	10 3 8	2227.7117	73.2	2335.3563	5	$v_2 + v_{10}$
7 1 6	6 2 5	2227.7863	93.4	2270.2423	1	$v_2 + v_{10}$
7 1 6	7 1 7	2227.8639	89.7	2270.2415	1	$v_2 + v_{10}$
3 2 2	2 2 1	2228.1405	89.4	2243.5879	3	$v_2 + v_{10}$
3 2 1	2 2 0	2228.1649	87.2	2243.6195	3	$v_2 + v_{10}$
6 1 5	6 0 6	2228.3511	91.3	2259.4392	9	$v_2 + v_{10}$
3 1 2	2 1 1	2228.6961	82.2	2236.1846	6	$v_2 + v_{10}$
4 3 1	5 2 3	2228.8943	86.2	2262.6095	2	$v_2 + v_{10}$

16 8 9	17 7 10	2228.9227	95.9	2593.4059	3	$v_2 + v_{10}$
4 3 1	3 3 1	2228.9795	83.3	2262.6100	2	$v_2 + v_{10}$
4 3 1	3 3 0	2228.9795	83.3	2262.6102	2	$v_2 + v_{10}$
7 1 6	7 0 7	2228.9947	88.2	2270.2423	1	$v_2 + v_{10}$
9 8 1	8 8 0	2229.3836	93.4	2458.2754	8	$v_2 + v_{10}$
9 8 2	8 8 1	2229.3836	93.4	2458.2754	8	$v_2 + v_{10}$
10 2 8	10 1 9	2229.4836	86.1	2318.3488	8	$v_2 + v_{10}$
9 2 7	9 1 8	2229.5369	87.9	2302.9255	2	$v_2 + v_{10}$
11 2 9	11 1 10	2229.5723	87.3	2335.3557	5	$v_2 + v_{10}$
4 2 2	3 2 1	2229.6140	80.6	2249.6080	9	$v_2 + v_{10}$
4 1 4	3 1 3	2229.6546	76.8	2240.9190	1	$v_2 + v_{10}$
8 2 6	8 1 7	2229.7095	80.8	2289.0936	9	$v_2 + v_{10}$
8 1 7	8 0 8	2229.7869	91.1	2282.5474	2	$v_2 + v_{10}$
8 7 2	7 7 1	2229.9538	81.6	2405.9025	5	$v_2 + v_{10}$
8 7 1	7 7 0	2229.9538	81.6	2405.9025	5	$v_2 + v_{10}$
4 1 3	3 1 2	2230.1620	64.8	2242.4000	2	$v_2 + v_{10}$
7 5 3	8 6 3	2230.2406	71.1	2382.7773	2	$v_3 + v_4$
7 5 2	8 6 2	2230.2406	71.1	2382.7773	2	$v_3 + v_4$
5 3 2	4 3 1	2230.3885	72.7	2270.0481	1	$v_2 + v_{10}$
10 8 3	9 8 2	2230.6795	82.9	2473.1216	3	$v_2 + v_{10}$
10 8 2	9 8 1	2230.6795	82.9	2473.1216	3	$v_2 + v_{10}$
9 1 8	9 0 9	2230.7246	89.2	2296.3345	6	$v_2 + v_{10}$
6 4 3	5 4 2	2230.9483	59.9	2297.2574	7	$v_2 + v_{10}$
6 4 2	5 4 1	2230.9483	59.9	2297.2574	7	$v_2 + v_{10}$
5 2 4	4 2 3	2230.9483	59.9	2256.9147	6	$v_2 + v_{10}$
5 1 5	4 1 4	2230.9971	79.3	2247.9373	7	$v_2 + v_{10}$
4 2 2	4 1 3	2231.0465	92.8	2249.6080	9	$v_2 + v_{10}$
5 2 3	4 2 2	2231.0564	71.8	2257.1301	7	$v_2 + v_{10}$
7 5 2	6 5 1	2231.2583	70.4	2331.1783	1	$v_2 + v_{10}$
9 7 2	8 7 1	2231.2583	70.4	2419.2536	9	$v_2 + v_{10}$
7 5 3	6 5 2	2231.2583	70.4	2331.1783	1	$v_2 + v_{10}$
9 7 3	8 7 2	2231.2583	70.4	2419.2536	9	$v_2 + v_{10}$
8 6 2	7 6 1	2231.3534	87.2	2371.8380	1	$v_2 + v_{10}$
8 6 3	7 6 2	2231.3534	87.2	2371.8380	1	$v_2 + v_{10}$

9 1 8	8 2 7	2231.4717	92.4	2296.3344	6	$v_2 + v_{10}$
5 1 4	4 1 3	2231.5923	74.0	2250.1539	1	$v_2 + v_{10}$
6 3 4	5 3 3	2231.7715	75.6	2278.9697	8	$v_2 + v_{10}$
6 3 3	5 3 2	2231.7794	80.1	2278.9832	8	$v_2 + v_{10}$
10 1 9	10 0 10	2231.7938	93.3	2311.5806	1	$v_2 + v_{10}$
6 5 1	7 6 1	2231.8341	62.3	2372.3188	2	$v_3 + v_4$
6 5 2	7 6 2	2231.8341	62.3	2372.3188	2	$v_3 + v_4$
4 1 4	3 0 3	2231.9339	89.4	2240.9193	1	$v_2 + v_{10}$
11 8 4	10 8 3	2231.9484	89.2	2489.4492	9	$v_2 + v_{10}$
11 8 3	10 8 2	2231.9484	89.2	2489.4492	9	$v_2 + v_{10}$
6 2 4	5 2 3	2232.4921	73.8	2266.2073	6	$v_2 + v_{10}$
10 7 4	9 7 3	2232.5422	85.5	2434.0929	4	$v_2 + v_{10}$
10 7 3	9 7 2	2232.5422	85.5	2434.0929	4	$v_2 + v_{10}$
4 2 3	4 1 4	2232.5736	96.2	2249.5138	9	$v_2 + v_{10}$
8 5 3	7 5 2	2232.5957	73.1	2343.0639	3	$v_2 + v_{10}$
8 5 4	7 5 3	2232.5957	73.1	2343.0639	3	$v_2 + v_{10}$
11 1 10	11 0 11	2232.9707	91.5	2328.2583	8	$v_2 + v_{10}$
6 1 5	5 1 4	2232.9881	75.1	2259.4390	9	$v_2 + v_{10}$
5 1 5	4 0 4	2233.0089	89.9	2247.9371	7	$v_2 + v_{10}$
7 3 5	6 3 4	2233.1375	81.6	2289.3903	9	$v_2 + v_{10}$
7 3 4	6 3 3	2233.1560	68.7	2289.4256	9	$v_2 + v_{10}$
12 8 5	11 8 4	2233.1941	87.6	2507.2630	7	$v_2 + v_{10}$
12 8 4	11 8 3	2233.1941	87.6	2507.2630	7	$v_2 + v_{10}$
6 2 5	6 1 6	2233.2769	94.2	2265.7811	5	$v_2 + v_{10}$
5 5 0	6 6 0	2233.4264	54.6	2363.3687	3	$v_3 + v_4$
5 5 1	6 6 1	2233.4264	54.6	2363.3687	3	$v_3 + v_4$
7 1 7	6 1 6	2233.6271	72.6	2266.1313	6	$v_2 + v_{10}$
7 2 6	6 2 5	2233.6547	70.3	2276.1106	6	$v_2 + v_{10}$
8 4 4	7 4 3	2233.6688	66.8	2319.5819	9	$v_2 + v_{10}$
8 4 5	7 4 4	2233.6688	66.8	2319.5811	9	$v_2 + v_{10}$
7 2 6	7 1 7	2233.7332	92.4	2276.1107	6	$v_2 + v_{10}$
11 7 4	10 7 3	2233.8040	83.6	2450.4205	1	$v_2 + v_{10}$
11 7 5	10 7 4	2233.8040	83.6	2450.4205	1	$v_2 + v_{10}$
7 2 5	6 2 4	2233.9160	52.8	2276.8573	6	$v_2 + v_{10}$

12 1 11	12 0 12	2234.2264	94.2	2346.3389	6	$v_2 + v_{10}$
8 3 6	7 3 5	2234.4819	72.4	2301.3061	1	$v_2 + v_{10}$
8 3 5	7 3 4	2234.5170	79.9	2301.3828	1	$v_2 + v_{10}$
13 8 6	14 7 7	2234.5539	92.9	2526.5620	6	$v_2 + v_{10}$
8 1 8	7 1 7	2234.9151	65.1	2277.2926	7	$v_2 + v_{10}$
8 2 7	7 2 6	2234.9702	75.8	2287.8938	7	$v_2 + v_{10}$
9 4 5	8 4 4	2235.0356	72.3	2333.0261	3	$v_2 + v_{10}$
9 4 6	8 4 5	2235.0356	72.3	2333.0238	3	$v_2 + v_{10}$
7 1 7	6 0 6	2235.0444	76.2	2266.1325	6	$v_2 + v_{10}$
11 1 10	10 2 9	2235.1417	88.8	2328.2582	8	$v_2 + v_{10}$
8 2 6	7 2 5	2235.3216	68.4	2289.0943	9	$v_2 + v_{10}$
10 2 9	10 1 10	2235.5171	80.5	2315.7880	5	$v_2 + v_{10}$
13 1 12	13 0 13	2235.5291	93.0	2365.7926	5	$v_2 + v_{10}$
14 8 6	13 8 5	2235.6155	86.9	2547.3525	7	$v_2 + v_{10}$
14 8 7	13 8 6	2235.6155	86.9	2547.3525	7	$v_2 + v_{10}$
8 1 7	7 1 6	2235.6686	73.9	2282.5473	2	$v_2 + v_{10}$
8 6 3	9 5 4	2235.7341	82.7	2371.8384	1	$v_2 + v_{10}$
9 3 7	8 3 6	2235.8035	78.8	2314.7170	4	$v_2 + v_{10}$
9 3 6	8 3 5	2235.8647	70.4	2314.8689	4	$v_2 + v_{10}$
8 1 8	7 0 7	2236.0463	75.1	2277.2939	7	$v_2 + v_{10}$
3 2 2	2 1 1	2236.0990	93.5	2243.5875	3	$v_2 + v_{10}$
9 1 9	8 1 8	2236.1881	74.8	2289.8229	9	$v_2 + v_{10}$
11 2 10	11 1 11	2236.2474	92.0	2331.8842	1	$v_2 + v_{10}$
9 2 8	8 2 7	2236.2602	67.7	2301.1229	1	$v_2 + v_{10}$
12 8 5	13 7 6	2236.3752	84.3	2507.2631	7	$v_2 + v_{10}$
5 5 1	6 4 2	2236.5201	80.8	2311.8739	1	$v_2 + v_{10}$
3 2 1	2 1 2	2236.6190	85.4	2243.6207	3	$v_2 + v_{10}$
4 3 1	4 2 3	2236.6432	93.2	2262.6096	2	$v_2 + v_{10}$
10 6 4	10 7 4	2236.6560	82.5	2453.2725	3	$v_3 + v_4$
9 2 7	8 2 6	2236.7012	74.2	2302.9253	2	$v_2 + v_{10}$
15 8 7	14 8 6	2236.7926	85.2	2569.6320	9	$v_2 + v_{10}$
15 8 8	14 8 7	2236.7926	85.2	2569.6320	9	$v_2 + v_{10}$
11 6 5	11 7 5	2236.8056	81.4	2469.9992	9	$v_3 + v_4$
12 1 11	11 2 10	2236.9281	90.0	2346.3383	6	$v_2 + v_{10}$

10 3 8	9 3 7	2237.1013	71.1	2329.6222	9	$v_2 + v_{10}$
10 3 7	9 3 6	2237.1993	78.1	2329.8990	9	$v_2 + v_{10}$
10 2 9	9 2 8	2237.5253	75.6	2315.7889	5	$v_2 + v_{10}$
11 4 8	10 4 7	2237.5666	67.8	2364.2709	4	$v_2 + v_{10}$
11 4 7	10 4 6	2237.5744	75.4	2364.2923	4	$v_2 + v_{10}$
16 8 9	15 8 8	2237.9482	83.7	2593.4039	3	$v_2 + v_{10}$
16 8 8	15 8 7	2237.9482	83.7	2593.4039	3	$v_2 + v_{10}$
10 2 8	9 2 7	2238.0478	65.9	2318.3489	8	$v_2 + v_{10}$
9 7 3	10 6 4	2238.0795	91.3	2419.2553	9	$v_2 + v_{10}$
10 1 10	9 0 9	2238.1038	78.2	2303.7137	3	$v_2 + v_{10}$
10 1 9	9 1 8	2238.1920	73.4	2311.5806	1	$v_2 + v_{10}$
13 4 9	13 3 10	2238.2279	94.3	2401.6728	1	$v_2 + v_{10}$
4 2 2	3 1 3	2238.3439	93.8	2249.6084	9	$v_2 + v_{10}$
5 2 4	4 1 3	2238.3518	91.3	2256.9134	6	$v_2 + v_{10}$
11 3 9	10 3 8	2238.3738	76.9	2346.0185	6	$v_2 + v_{10}$
11 3 8	10 3 7	2238.5212	70.0	2346.4917	6	$v_2 + v_{10}$
11 1 11	10 1 10	2238.6891	73.8	2318.9600	8	$v_2 + v_{10}$
11 2 10	10 2 9	2238.7677	68.2	2331.8841	1	$v_2 + v_{10}$
12 4 9	11 4 8	2238.8300	79.7	2382.1808	2	$v_2 + v_{10}$
6 6 1	7 5 2	2239.1045	81.2	2349.5727	9	$v_2 + v_{10}$
11 1 11	10 0 10	2239.1731	82.6	2318.9599	8	$v_2 + v_{10}$
14 4 11	14 3 12	2239.3029	94.0	2422.5185	2	$v_2 + v_{10}$
6 2 5	5 1 4	2239.3303	93.1	2265.7812	5	$v_2 + v_{10}$
11 2 9	10 2 8	2239.3554	74.2	2335.3564	5	$v_2 + v_{10}$
11 1 10	10 1 9	2239.3932	63.7	2328.2583	8	$v_2 + v_{10}$
11 4 7	11 3 8	2239.4552	92.0	2364.2927	4	$v_2 + v_{10}$
12 3 10	11 3 9	2239.6197	70.9	2363.9015	3	$v_2 + v_{10}$
12 3 9	11 3 8	2239.8291	75.7	2364.6665	4	$v_2 + v_{10}$
12 1 12	11 1 11	2239.9199	61.8	2335.5566	5	$v_2 + v_{10}$
11 4 8	11 3 9	2239.9892	92.0	2364.2710	4	$v_2 + v_{10}$
12 2 11	11 2 10	2240.0060	57.6	2349.4162	9	$v_2 + v_{10}$
13 4 10	12 4 9	2240.0673	69.6	2401.5940	1	$v_2 + v_{10}$
7 2 6	6 1 5	2240.2157	86.0	2276.1105	6	$v_2 + v_{10}$
10 4 7	10 3 8	2240.2157	86.0	2347.8603	7	$v_2 + v_{10}$

12 1 12	11 0 11	2240.2681	68.4	2335.5557	5	$v_2 + v_{10}$
12 1 11	11 1 10	2240.5553	74.1	2346.3387	6	$v_2 + v_{10}$
8 4 4	8 3 5	2240.5776	93.1	2319.5818	9	$v_2 + v_{10}$
12 2 10	11 2 9	2240.6212	63.0	2353.9339	3	$v_2 + v_{10}$
8 4 5	8 3 6	2240.6671	93.0	2319.5807	9	$v_2 + v_{10}$
7 4 3	7 3 4	2240.8051	95.1	2307.6709	7	$v_2 + v_{10}$
13 3 11	12 3 10	2240.8382	78.3	2383.2656	3	$v_2 + v_{10}$
8 2 7	7 1 6	2241.0149	90.5	2287.8936	7	$v_2 + v_{10}$
13 3 10	12 3 9	2241.1197	70.4	2384.4419	4	$v_2 + v_{10}$
13 1 13	12 1 12	2241.1388	72.8	2353.4991	3	$v_2 + v_{10}$
5 4 2	5 3 3	2241.1388	72.8	2288.3370	8	$v_2 + v_{10}$
14 4 11	13 4 10	2241.2837	75.1	2422.5179	2	$v_2 + v_{10}$
13 1 13	12 0 12	2241.3866	80.5	2353.4991	3	$v_2 + v_{10}$
13 1 12	12 1 11	2241.6821	49.2	2365.7928	5	$v_2 + v_{10}$
9 2 8	8 1 7	2241.7401	57.3	2301.1242	1	$v_2 + v_{10}$
15 5 10	15 6 10	2241.8434	66.9	2521.1609	1	$v_3 + v_4$
11 5 6	11 6 6	2241.9895	73.5	2439.7558	9	$v_3 + v_4$
14 3 12	13 3 11	2242.0287	71.7	2404.1034	4	$v_2 + v_{10}$
18 5 13	18 6 13	2242.0375	86.5	2598.5387	8	$v_3 + v_4$
10 5 5	10 6 5	2242.0564	76.2	2423.2321	3	$v_3 + v_4$
9 5 4	9 6 4	2242.1308	77.4	2408.2306	8	$v_3 + v_4$
7 5 2	7 6 2	2242.2925	82.1	2382.7772	2	$v_3 + v_4$
14 1 14	13 1 13	2242.3472	62.0	2372.7842	2	$v_2 + v_{10}$
6 5 1	6 6 1	2242.3764	89.0	2372.3188	2	$v_3 + v_4$
4 3 1	3 2 1	2242.6160	87.6	2262.6099	2	$v_2 + v_{10}$
4 3 1	3 2 2	2242.6540	90.2	2262.6120	2	$v_2 + v_{10}$
14 1 13	13 1 12	2242.7770	66.1	2386.5924	6	$v_2 + v_{10}$
11 2 10	10 1 9	2243.0195	60.3	2331.8846	1	$v_2 + v_{10}$
15 1 15	14 1 14	2243.5551	76.4	2393.4185	3	$v_2 + v_{10}$
15 1 15	14 0 14	2243.6752	78.8	2393.4184	3	$v_2 + v_{10}$
15 1 14	14 1 13	2243.8491	64.3	2408.7183	8	$v_2 + v_{10}$
5 3 3	4 2 2	2243.9701	85.4	2270.0438	1	$v_2 + v_{10}$
5 3 2	4 2 3	2244.0818	90.9	2270.0482	1	$v_2 + v_{10}$
7 2 5	6 1 6	2244.3531	93.6	2276.8573	6	$v_2 + v_{10}$

16 1 16	15 1 15	2244.7319	70.7	2415.3682	5	$v_2 + v_{10}$
16 1 15	15 1 14	2244.9316	82.6	2432.1820	2	$v_2 + v_{10}$
7 5 3	7 4 4	2245.2645	92.2	2331.1769	1	$v_2 + v_{10}$
7 5 2	7 4 3	2245.2645	92.2	2331.1776	1	$v_2 + v_{10}$
5 5 0	5 4 1	2245.5644	95.9	2311.8735	1	$v_2 + v_{10}$
5 5 1	5 4 2	2245.5644	95.9	2311.8734	1	$v_2 + v_{10}$
8 2 6	7 1 7	2246.7169	94.5	2289.0945	9	$v_2 + v_{10}$
4 4 1	3 3 0	2247.2786	68.8	2280.9093	1	$v_2 + v_{10}$
4 4 0	3 3 1	2247.2786	68.8	2280.9091	1	$v_2 + v_{10}$
5 4 1	4 3 2	2248.6789	82.4	2288.3372	8	$v_2 + v_{10}$
5 4 2	4 3 1	2248.6789	82.4	2288.3386	8	$v_2 + v_{10}$
9 6 4	9 5 5	2249.0940	96.2	2385.1982	5	$v_2 + v_{10}$
9 6 3	9 5 4	2249.0940	96.2	2385.1983	5	$v_2 + v_{10}$
9 2 7	8 1 8	2249.2912	96.2	2302.9259	2	$v_2 + v_{10}$
7 6 1	7 5 2	2249.4960	92.7	2359.9642	9	$v_2 + v_{10}$
7 6 2	7 5 3	2249.4960	92.7	2359.9642	9	$v_2 + v_{10}$
6 4 2	5 3 3	2250.0597	85.2	2297.2579	7	$v_2 + v_{10}$
7 4 3	6 3 4	2251.4183	89.7	2307.6711	7	$v_2 + v_{10}$
10 2 8	9 1 9	2252.0805	93.6	2318.3486	8	$v_2 + v_{10}$
8 4 4	7 3 5	2252.7548	55.9	2319.5790	9	$v_2 + v_{10}$
5 5 0	4 4 1	2253.0983	81.9	2311.8744	1	$v_2 + v_{10}$
5 5 1	4 4 0	2253.0983	81.9	2311.8744	1	$v_2 + v_{10}$
7 7 0	7 6 1	2253.5528	95.9	2394.0375	4	$v_2 + v_{10}$
7 7 1	7 6 2	2253.5528	95.9	2394.0375	4	$v_2 + v_{10}$
9 4 6	8 3 5	2254.0187	80.8	2333.0229	3	$v_2 + v_{10}$
9 4 5	8 3 6	2254.1137	91.1	2333.0273	3	$v_2 + v_{10}$
6 5 1	5 4 2	2254.4726	81.1	2320.7817	1	$v_2 + v_{10}$
6 5 2	5 4 1	2254.4726	81.1	2320.7817	1	$v_2 + v_{10}$
15 8 8	15 7 9	2254.9846	49.5	2569.6307	9	$v_2 + v_{10}$
15 8 7	15 7 8	2254.9846	49.5	2569.6307	9	$v_2 + v_{10}$
10 4 7	9 3 6	2255.1607	89.6	2347.8604	7	$v_2 + v_{10}$
10 4 6	9 3 7	2255.3497	87.9	2347.8706	7	$v_2 + v_{10}$
7 5 3	6 4 2	2255.8235	79.0	2331.1773	1	$v_2 + v_{10}$
7 5 2	6 4 3	2255.8235	79.0	2331.1771	1	$v_2 + v_{10}$

11 4 8	10 3 7	2256.3001	84.2	2364.2706	4	$v_2 + v_{10}$
12 4 9	11 3 8	2257.3435	90.9	2382.1809	2	$v_2 + v_{10}$
12 4 8	11 3 9	2257.9416	87.7	2382.2234	2	$v_2 + v_{10}$
13 4 10	12 3 9	2258.2727	87.7	2401.5949	1	$v_2 + v_{10}$
14 4 11	13 3 10	2259.0708	82.6	2422.5157	2	$v_2 + v_{10}$
13 4 9	12 3 10	2259.2451	82.5	2401.6725	1	$v_2 + v_{10}$
7 6 2	6 5 1	2260.0445	65.5	2359.9644	9	$v_2 + v_{10}$
7 6 1	6 5 2	2260.0445	65.5	2359.9644	9	$v_2 + v_{10}$
14 4 10	13 3 11	2260.5694	87.3	2422.6442	2	$v_2 + v_{10}$
10 7 4	9 6 3	2267.9930	77.5	2434.0929	4	$v_2 + v_{10}$
10 7 3	9 6 4	2267.9930	77.5	2434.0929	4	$v_2 + v_{10}$
11 7 4	10 6 5	2269.2442	74.0	2450.4199	1	$v_2 + v_{10}$
11 8 3	10 7 4	2272.8325	76.3	2489.4489	9	$v_2 + v_{10}$
11 8 4	10 7 3	2272.8325	76.3	2489.4489	9	$v_2 + v_{10}$
12 8 4	11 7 5	2274.0692	78.0	2507.2628	7	$v_2 + v_{10}$
12 8 5	11 7 4	2274.0692	78.0	2507.2628	7	$v_2 + v_{10}$
13 8 6	12 7 5	2275.2796	76.7	2526.5632	6	$v_2 + v_{10}$
13 8 5	12 7 6	2275.2796	76.7	2526.5632	6	$v_2 + v_{10}$
14 8 6	13 7 7	2276.4644	74.8	2547.3522	7	$v_2 + v_{10}$
14 8 7	13 7 6	2276.4644	74.8	2547.3522	7	$v_2 + v_{10}$
15 8 7	14 7 8	2277.6237	75.2	2569.6318	9	$v_2 + v_{10}$
15 8 8	14 7 7	2277.6237	75.2	2569.6318	9	$v_2 + v_{10}$
16 8 8	15 7 9	2278.7585	77.4	2593.4046	3	$v_2 + v_{10}$
16 8 9	15 7 8	2278.7585	77.4	2593.4046	3	$v_2 + v_{10}$
18 5 14	18 4 14	2294.6483	92.0	2598.6009	8	$v_3 + v_4$
17 5 13	17 4 13	2294.9892	87.4	2571.1791	1	$v_3 + v_4$
15 5 11	15 4 11	2295.6050	82.7	2521.1712	1	$v_3 + v_4$
14 5 10	14 4 10	2295.8443	76.9	2498.5075	8	$v_3 + v_4$
12 5 8	12 4 8	2296.2228	82.8	2457.8068	7	$v_3 + v_4$
11 5 7	11 4 7	2296.3758	72.1	2439.7556	9	$v_3 + v_4$
10 5 6	10 4 6	2296.5143	89.2	2423.2323	3	$v_3 + v_4$
8 6 3	8 5 3	2301.8622	77.4	2424.3911	4	$v_3 + v_4$
9 6 4	9 5 4	2301.9655	62.3	2438.0697	8	$v_3 + v_4$
10 6 5	10 5 5	2302.0753	75.4	2453.2722	3	$v_3 + v_4$

12 6 7	12 5 7	2302.3087	65.1	2488.2544	8	$v_3 + v_4$
5 5 0	4 4 0	2304.5913	57.1	2363.3674	3	$v_3 + v_4$
5 5 1	4 4 1	2304.5913	57.1	2363.3674	3	$v_3 + v_4$
9 7 3	9 6 3	2305.8685	61.9	2471.9683	1	$v_3 + v_4$
6 5 1	5 4 1	2306.0093	57.5	2372.3184	2	$v_3 + v_4$
6 5 2	5 4 2	2306.0093	57.5	2372.3184	2	$v_3 + v_4$
7 5 3	6 4 3	2307.4233	56.5	2382.7769	2	$v_3 + v_4$
7 5 2	6 4 2	2307.4233	56.5	2382.7771	2	$v_3 + v_4$
8 5 4	7 4 4	2308.8336	51.9	2394.7460	4	$v_3 + v_4$
8 5 3	7 4 3	2308.8336	51.9	2394.7467	4	$v_3 + v_4$
6 6 1	5 5 1	2310.7099	63.3	2401.5921	1	$v_3 + v_4$
6 6 0	5 5 0	2310.7099	63.3	2401.5921	1	$v_3 + v_4$
7 6 2	6 5 2	2312.3122	67.4	2412.2322	2	$v_3 + v_4$
7 6 1	6 5 1	2312.3122	67.4	2412.2322	2	$v_3 + v_4$
11 5 6	10 4 6	2313.0364	70.9	2439.7543	9	$v_3 + v_4$
11 5 7	10 4 7	2313.0520	72.2	2439.7563	9	$v_3 + v_4$
8 6 2	7 5 2	2313.9231	58.2	2424.3913	4	$v_3 + v_4$
8 6 3	7 5 3	2313.9231	58.2	2424.3913	4	$v_3 + v_4$
12 5 7	11 4 7	2314.4239	72.7	2457.8036	7	$v_3 + v_4$
12 5 8	11 4 8	2314.4560	78.6	2457.8067	7	$v_3 + v_4$
9 6 4	8 5 4	2315.5418	66.8	2438.0707	8	$v_3 + v_4$
9 6 3	8 5 3	2315.5418	66.8	2438.0707	8	$v_3 + v_4$
13 5 8	12 4 8	2315.7997	80.4	2477.3837	7	$v_3 + v_4$
7 7 0	6 6 0	2316.1132	66.0	2446.0555	6	$v_3 + v_4$
7 7 1	6 6 1	2316.1132	66.0	2446.0555	6	$v_3 + v_4$
14 5 9	13 4 9	2317.1598	73.9	2498.5007	8	$v_3 + v_4$
10 6 4	9 5 4	2317.1680	74.4	2453.2722	3	$v_3 + v_4$
10 6 5	9 5 5	2317.1680	74.4	2453.2721	3	$v_3 + v_4$
14 5 10	13 4 10	2317.2740	80.6	2498.5081	8	$v_3 + v_4$
8 7 2	7 6 2	2317.7910	62.4	2458.2757	8	$v_3 + v_4$
8 7 1	7 6 1	2317.7910	62.4	2458.2757	8	$v_3 + v_4$
15 5 10	14 4 10	2318.4987	69.3	2521.1619	1	$v_3 + v_4$
15 5 11	14 4 11	2318.6969	74.6	2521.1713	1	$v_3 + v_4$
11 6 6	10 5 6	2318.8023	70.7	2469.9989	9	$v_3 + v_4$

11 6 5	10 5 5	2318.8023	70.7	2469.9992	9	$v_3 + v_4$
9 7 3	8 6 3	2319.4332	62.5	2471.9699	1	$v_3 + v_4$
16 5 11	15 4 11	2319.8085	57.0	2545.3747	5	$v_3 + v_4$
16 5 12	15 4 12	2320.1420	78.8	2545.3896	5	$v_3 + v_4$
17 5 12	16 4 12	2321.1156	74.4	2571.1839	1	$v_3 + v_4$
17 5 13	16 4 13	2321.6273	75.8	2571.1795	1	$v_3 + v_4$
18 5 13	17 4 13	2322.3487	77.9	2598.5386	8	$v_3 + v_4$
18 5 14	17 4 14	2323.2159	77.5	2598.6010	8	$v_3 + v_4$

ПРИЛОЖЕНИЕ Б

Таблица 24 – Список интерпретированных интенсивностей, соответствующих
полосе ν_9 молекулы $^{12}\text{C}_2\text{H}_2\text{D}_2$ -транс

J Ka Kc	J' Ka'Kc'	Колебательно- вращательная энергия, см^{-1}	$\delta \cdot 10^{-3}$, см^{-1}	Пропус- кание, %	Интен- сивность, 10^{-2} , $\text{см}^{-2} \cdot \text{атм}^{-1}$	Полу- ширина, 10^{-4} , см^{-1}
1	2	3	4	5	6	7
14 13 2	15 14 1	3681.1420	0.7	77.5	1.092(4)	10.8(1)
14 13 1	15 14 2	3681.1420	0.7	77.5	1.092(4)	10.8(1)
13 13 1	14 14 0	3660.1354	1.1	75.0	1.209(4)	10.1(1)
13 13 0	14 14 0	3660.1354	2.1	75.0	1.209(4)	10.1(1)
14 12 2	15 13 3	3614.2247	0.3	78.6	1.042(3)	10.7(8)
14 12 3	15 13 2	3614.2247	3.3	78.6	1.042(3)	10.7(8)
13 12 1	14 13 2	3593.2047	0.6	76.5	1.142(4)	10.8(1)
13 12 2	14 13 1	3593.2047	0.6	76.5	1.142(4)	10.8(1)
20 10 11	21 11 10	3652.6092	3.1	80.1	1.129(2)	16.49(5)
20 10 10	21 11 11	3652.6092	1.1	80.1	1.129(2)	16.49(5)
12 12 0	13 13 1	3573.6873	0.7	74.7	1.163(4)	8.3(1)
12 12 1	13 13 0	3573.6873	0.7	74.7	1.163(4)	8.3(1)
18 10 9	19 11 8	3594.0826	0.3	79.3	1.53(1)	26.0(3)
18 10 8	19 11 9	3594.0826	2.3	79.3	1.53(1)	26.0(3)
17 10 7	18 11 8	3567.1015	3.1	70.7	1.492(4)	11.91(9)
17 10 8	18 11 7	3567.1015	1.1	70.7	1.492(4)	11.91(9)
16 10 7	17 11 6	3541.6426	0.6	71.1	1.357(2)	9.02(6)
16 10 6	17 11 7	3541.6426	0.6	71.1	1.357(2)	9.02(6)
12 11 1	13 12 2	3511.6578	0.4	69.1	1.531(3)	10.09(6)
12 11 2	13 12 1	3511.6578	3.4	69.1	1.531(3)	10.09(6)
15 10 6	16 11 5	3517.7019	0.7	71.2	1.524(3)	12.83(6)
15 10 5	16 11 6	3517.7019	0.7	71.2	1.524(3)	12.83(6)
11 11 1	12 12 0	3493.5854	2.7	58.5	2.209(8)	10.8(1)
17 14 3	17 15 2	3826.0595	0.7	58.5	2.209(8)	10.8(1)
11 11 0	12 12 1	3493.5854	0.7	58.5	2.209(8)	10.8(1)

17 14 4	17 15 3	3826.0595	2.7	58.5	2.209(8)	10.8(1)
14 10 4	15 11 5	3495.2888	0.7	66.3	1.72(2)	13.49(5)
14 10 5	15 11 4	3495.2888	1.7	66.3	1.72(2)	13.49(5)
16 9 7	17 10 8	3488.2303	0.1	68.5	1.372(7)	6.7(2)
16 9 8	17 10 7	3488.2303	0.1	68.5	1.372(7)	6.7(2)
13 10 4	14 11 3	3474.4047	0.3	64.3	2.26(1)	19.3(2)
13 10 3	14 11 4	3474.4047	0.3	64.3	2.26(1)	19.3(2)
15 9 6	16 10 7	3464.2315	0.4	62.7	1.810(7)	8.9(1)
15 9 7	16 10 6	3464.2315	0.4	62.7	1.810(7)	8.9(1)
12 10 3	13 11 2	3455.0441	0.6	65.1	1.783(5)	9.8(9)
12 10 2	13 11 3	3455.0441	0.6	65.1	1.783(5)	9.8(9)
14 9 5	15 10 6	3441.7128	0.4	62.1	1.876(9)	8.7(2)
14 9 6	15 10 5	3441.7128	0.4	62.1	1.876(9)	8.7(2)
13 9 5	14 10 4	3420.6801	5.9	61.3	1.956(5)	9.42(9)
13 9 5	14 10 5	3420.6801	5.9	61.3	1.956(5)	9.42(9)
11 10 2	12 11 1	3437.2084	0.6	63.8	1.813(4)	9.20(7)
11 10 1	12 11 2	3437.2084	0.6	63.8	1.813(4)	9.20(7)
16 8 9	17 9 8	3442.7828	0.9	55.4	2.712(8)	13.9(1)
16 8 8	17 9 9	3442.7828	0.9	55.4	2.712(8)	13.9(1)
12 9 4	13 10 3	3401.1410	0.4	60.8	2.115(6)	11.0(1)
12 9 3	13 10 4	3401.1410	0.4	60.8	2.115(6)	11.0(1)
10 10 1	11 11 0	3420.8963	2.1	62.8	1.847(5)	9.1(1)
10 10 0	11 11 1	3420.8963	1.1	62.8	1.847(5)	9.1(1)
15 8 8	16 9 7	3418.7410	1.1	48.0	3.02(1)	10.9(1)
15 8 7	16 9 8	3418.7410	1.1	48.0	3.02(1)	10.9(1)
11 9 3	12 10 2	3383.1029	0.1	61.4	2.063(4)	10.27(7)
11 9 2	12 10 3	3383.1029	0.1	61.4	2.063(4)	10.27(7)
10 9 2	11 10 1	3366.5703	0.1	60.1	1.994(5)	9.7(1)
10 9 1	11 10 2	3366.5703	0.1	60.1	1.994(5)	9.7(1)
14 8 6	15 9 7	3396.2062	0.4	43.0	3.45(1)	10.9(1)
14 8 7	15 9 6	3396.2062	2.4	43.0	3.45(1)	10.9(1)
9 9 1	10 10 0	3351.5452	2.5	59.6	2.107(7)	10.2(1)
13 8 6	14 9 5	3375.1772	5.9	39.7	3.96(2)	12.7(1)
13 8 5	14 9 6	3375.1772	0.9	39.7	3.96(2)	12.7(1)

9 9 0	10 10 1	3352.3162	0.5	59.1	2.125(7)	10.7(1)
12 8 4	13 9 5	3355.6527	1.1	35.6	4.31(2)	12.4(2)
12 8 5	13 9 4	3355.6527	1.1	35.6	4.31(2)	12.4(2)
11 8 3	12 9 4	3337.6320	1.1	32.8	4.78(2)	13.2(2)
11 8 4	12 9 3	3337.6320	1.1	32.8	4.78(2)	13.2(2)
10 8 3	11 9 2	3321.1150	0.3	29.1	5.50(4)	14.6(3)
10 8 2	11 9 3	3321.1150	3.3	29.1	5.50(4)	14.6(3)
9 8 2	10 9 1	3306.1016	0.4	25.7	5.57(4)	12.7(3)
9 8 1	10 9 2	3306.1016	0.4	25.7	5.57(4)	12.7(3)
22 11 11	22 12 10	3775.5040	2.4	25.7	5.57(4)	12.7(3)
8 8 1	9 9 0	3292.5918	0.9	24.2	6.07(6)	13.8(4)
8 8 0	9 9 1	3292.5918	2.9	24.2	6.07(6)	13.8(4)
14 10 4	14 11 3	3495.2861	2.1	52.5	3.00(1)	15.27(1)
14 10 5	14 11 4	3495.2861	2.1	52.5	3.00(1)	15.27(1)
9 7 3	10 8 2	3265.5768	0.6	21.9	6.33(6)	13.5(4)
9 7 2	10 8 3	3265.5768	0.6	21.9	6.33(6)	13.5(4)
12 6 6	13 7 7	3280.0994	0.5	26.5	6.21(4)	16.4(2)
12 6 7	13 7 6	3280.0994	0.5	26.5	6.21(4)	16.4(2)
19 4 16	20 5 15	3395.9155	1.7	66.7	1.597(4)	8.73(9)
21 15 6	20 16 5	4021.2527	1.7	66.7	1.597(4)	8.7(9)
8 7 1	9 8 2	3252.0660	0.6	18.2	7.35(7)	14.7(4)
8 7 2	9 8 1	3252.0660	0.6	18.2	7.35(7)	14.7(4)
17 9 8	17 10 7	3513.7053	2.3	77.3	1.004(2)	9.04(8)
17 9 9	17 10 8	3513.7053	1.3	77.3	1.004(2)	9.04(8)
20 4 16	21 5 17	3428.8478	2.4	69.4	1.478(5)	10.5(1)
11 6 6	12 7 5	3262.0276	0.9	21.1	6.94(7)	15.7(4)
11 6 5	12 7 6	3262.0276	0.9	21.1	6.94(7)	15.7(4)
15 9 7	15 10 6	3464.2315	2.3	77.7	1.049(2)	9.35(6)
15 9 6	15 10 5	3464.2315	0.3	77.7	1.049(2)	9.35(6)
18 14 4	17 15 3	3853.0988	1.3	77.7	1.049(2)	9.35(6)
18 4 15	19 5 14	3367.1243	0.1	13.6	9.8(1)	20.3(5)
7 7 1	8 8 1	3240.0530	0.1	13.6	9.8(1)	20.3(5)
7 7 0	8 8 1	3240.0530	0.1	13.6	9.8(1)	20.3(5)
19 4 15	20 5 16	3397.7851	0.1	71.0	1.657(8)	18.1(2)

10 6 4	11 7 5	3245.4673	0.3	17.5	8.09(9)	17.9(5)
10 6 5	11 7 4	3245.4673	0.3	17.5	8.09(9)	17.9(5)
19 14 5	18 15 4	3881.6112	2.3	17.5	8.09(9)	17.9(5)
18 4 14	19 5 15	3368.3960	0.0	63.1	1.888(7)	9.9(1)
17 4 14	18 5 13	3339.7785	1.6	57.8	2.85(2)	20.2(2)
36 0 36	37 0 37	3979.1063	0.1	77.7	1.094(2)	13.8(1)
36 1 36	37 1 37	3979.1063	0.1	77.7	1.094(2)	13.8(1)
36 1 36	37 0 37	3979.1063	0.1	77.7	1.094(2)	13.8(1)
36 0 36	37 1 37	3979.1063	0.1	77.7	1.094(2)	13.8(1)
17 4 13	18 5 14	3340.6652	2.9	69.4	1.479(5)	9.2(1)
9 6 3	10 7 4	3230.4181	0.9	17.2	7.9(1)	16.2(5)
9 6 4	10 7 3	3230.4181	0.9	17.2	7.9(1)	16.2(5)
16 4 13	17 5 12	3313.9967	2.1	65.3	1.711(9)	9.9(1)
12 5 8	13 6 7	3250.3708	0.1	22.2	7.83(8)	21.2(4)
12 5 7	13 6 8	3250.3707	0.1	22.2	7.83(8)	21.2(4)
16 4 12	17 5 13	3314.5606	9.9	56.2	2.401(5)	10.93(8)
8 6 2	9 7 3	3216.8790	0.6	14.5	8.7(1)	17.0(6)
8 6 3	9 7 2	3216.8790	0.6	14.5	8.7(1)	17.0(6)
15 4 12	16 5 11	3289.7371	3.3	51.0	2.723(8)	10.3(1)
16 2 15	17 3 14	3276.7223	0.1	84.7	0.594(5)	7.0(2)
15 4 11	16 5 12	3290.0915	9.9	60.8	1.927(3)	10.05(8)
11 5 6	12 6 7	3232.2677	6.2	19.9	6.95(8)	14.7(4)
11 5 7	12 6 6	3232.2678	6.2	19.9	6.95(8)	14.7(4)
7 6 2	8 7 1	3204.8484	1.1	10.3	11.9(2)	23.1(6)
7 6 1	8 7 2	3204.8484	2.1	10.3	11.9(2)	23.1(6)
16 8 8	16 9 7	3442.7829	4.3	61.4	2.64(1)	22.8(2)
16 8 9	16 9 8	3442.7829	4.3	61.4	2.64(1)	22.8(2)
15 8 8	15 9 7	3418.7409	9.9	61.2	2.031(5)	11.03(9)
15 8 7	15 9 6	3418.7409	9.9	61.2	2.031(5)	11.03(9)
13 8 6	13 9 5	3375.1771	2.8	49.4	2.91(1)	11.0(1)
13 8 5	13 9 4	3375.1771	3.8	49.4	2.91(1)	11.0(1)
12 8 5	12 9 4	3355.6527	0.6	64.8	1.700(4)	9.85(9)
12 8 4	12 9 3	3355.6527	0.6	64.8	1.700(4)	9.85(9)
11 8 3	11 9 2	3337.6322	2.8	61.0	2.23(5)	16.3(8)

11 8 4	11 9 3	3337.6322	3.8	61.0	2.23(5)	16.3(8)
10 8 3	10 9 2	3321.1148	3.9	76.0	1.362(8)	16.9(2)
10 8 2	10 9 1	3321.1148	3.9	76.0	1.362(8)	16.9(2)
9 8 2	9 9 1	3306.1018	2.4	84.9	0.645(9)	12.8(5)
9 8 1	9 9 0	3306.1018	2.4	84.9	0.645(9)	12.8(5)
14 4 11	15 5 10	3267.0047	2.1	59.4	2.090(5)	9.38(8)
14 4 10	15 5 11	3267.2172	2.9	48.0	2.83(1)	9.1(1)
10 5 6	11 6 5	3215.6845	1.8	17.3	6.53(8)	10.8(5)
19 13 6	18 14 5	3808.7121	0.8	17.3	6.53(8)	10.8(5)
10 5 5	11 6 6	3215.6845	1.8	17.3	6.53(8)	10.8(5)
6 6 0	7 7 1	3194.3244	0.8	12.7	9.1(2)	16.3(8)
6 6 1	7 7 0	3194.3244	0.8	12.7	9.1(2)	16.3(8)
13 4 10	14 5 9	3245.8014	1.6	42.6	3.75(7)	15.6(7)
13 4 9	14 5 10	3245.9232	9.9	52.8	2.615(3)	11.66(4)
9 5 4	10 6 5	3200.6183	0.6	14.7	9.8(2)	21.1(6)
9 5 5	10 6 4	3200.6183	0.6	14.7	9.8(2)	21.1(6)
12 4 9	13 5 8	3226.1276	0.0	52.8	2.501(9)	9.9(1)
12 4 8	13 5 9	3226.1936	1.2	37.1	4.20(1)	12.6(1)
8 5 4	9 6 3	3187.0666	0.5	12.4	8.5(1)	14.4(6)
8 5 3	9 6 4	3187.0666	0.5	12.4	8.5(1)	14.4(6)
11 4 8	12 5 7	3207.9824	0.4	38.2	3.51(1)	8.5(1)
7 5 2	8 6 3	3175.0269	1.1	10.4	12.6(3)	27.8(3)
7 5 3	8 6 2	3175.0269	1.1	10.4	12.6(3)	27.8(3)
10 4 7	11 5 6	3191.3525	6.2	51.1	2.40(2)	6.9(3)
10 4 6	11 5 7	3191.3668	1.3	41.9	3.27(2)	8.2(3)
25 10 15	26 10 16	3825.4945	0.2	85.4	0.916(4)	22.6(2)
25 10 16	26 10 17	3825.4945	1.2	85.4	0.916(4)	22.6(2)
6 5 2	7 6 1	3164.4970	0.9	9.9	11.8(3)	23.2(8)
6 5 1	7 6 2	3164.4970	0.9	9.9	11.8(3)	23.2(8)
28 1 28	29 1 29	3626.3930	0.6	15.0	8.14(7)	16.5(3)
28 0 28	29 1 29	3626.3930	2.6	15.0	8.14(7)	16.5(3)
28 0 28	29 0 29	3626.3927	1.6	15.0	8.14(7)	16.5(3)
28 1 28	29 0 29	3626.3927	2.6	15.0	8.14(7)	16.5(3)
27 1 27	28 0 28	3588.2972	4.3	9.3	9.99(8)	13.9(4)

27 1 27	28 1 28	3588.2976	4.3	9.3	9.99(8)	13.9(4)
27 0 27	28 0 28	3588.2972	4.3	9.3	9.99(8)	13.9(4)
27 0 27	28 1 28	3588.2976	4.3	9.3	9.99(8)	13.9(4)
8 4 4	9 5 5	3162.6911	0.7	16.5	8.21(7)	16.3(3)
8 4 5	9 5 4	3162.6912	0.7	16.5	8.21(7)	16.3(3)
11 2 9	10 5 6	3178.0784	3.7	73.0	2.66(5)	36.6(4)
7 4 3	8 5 4	3150.6323	5.9	10.0	10.4(1)	18.6(4)
7 4 4	8 5 3	3150.6323	0.9	10.0	10.4(1)	18.6(4)
12 2 11	13 3 10	3191.8198	9.9	66.6	1.750(1)	13.18(2)
10 6 5	10 7 4	3245.4672	4.3	40.6	3.04(5)	4.3(5)
10 6 4	10 7 3	3245.4672	2.3	40.6	3.04(5)	4.3(5)
9 6 4	9 7 3	3230.4183	2.7	39.5	3.65(8)	9.6(7)
9 6 3	9 7 2	3230.4183	2.7	39.5	3.65(8)	9.6(7)
8 6 2	8 7 1	3216.8791	1.2	57.6	1.811(8)	4.6(1)
8 6 3	8 7 2	3216.8791	1.2	57.6	1.811(8)	4.6(1)
7 6 1	7 7 0	3204.8482	1.2	72.0	1.23(1)	8.7(3)
7 6 2	7 7 1	3204.8482	1.2	72.0	1.23(1)	8.7(3)
10 3 7	11 4 8	3172.6652	2.9	44.9	2.88(3)	7.8(4)
6 4 3	7 5 2	3140.0886	2.5	10.8	9.5(1)	16.0(6)
6 4 2	7 5 3	3140.0886	0.5	10.8	9.5(1)	16.0(6)
9 3 6	10 4 7	3157.4332	2.1	31.8	4.37(3)	10.1(2)
8 3 6	9 4 5	3143.6686	2.5	31.3	4.18(2)	7.9(2)
8 3 5	9 4 6	3143.7710	2.7	45.1	2.98(1)	8.6(1)
16 2 14	17 3 15	3287.7893	3.1	46.5	2.69(2)	6.8(2)
20 11 9	19 12 8	3710.7125	0.1	72.4	1.139(4)	6.1(1)
20 4 17	21 4 18	3426.2356	0.1	72.4	1.139(4)	6.1(1)
4 4 0	5 5 1	3123.5342	0.5	9.1	8.56(9)	10.8(4)
4 4 1	5 5 0	3123.5342	0.5	9.1	8.56(9)	10.8(4)
21 2 20	22 2 21	3413.5471	2.6	58.9	1.963(3)	9.62(5)
21 2 20	22 1 21	3413.5470	3.9	29.5	4.98(2)	12.6(1)
19 4 15	20 4 16	3397.7848	3.7	70.0	1.412(3)	10.09(7)
14 2 12	15 3 13	3239.3407	1.2	43.9	3.05(2)	7.5(2)
7 3 4	8 4 5	3131.6620	3.7	32.0	4.64(2)	11.5(2)
18 14 5	19 14 6	3853.0820	3.7	72.9	1.468(5)	14.6(1)

18 14 4	19 14 5	3853.0820	3.7	72.9	1.468(5)	14.6(1)
19 4 16	20 4 17	3395.9142	2.4	42.0	3.96(2)	1.5(2)
21 1 21	22 1 22	3387.7375	4.9	6.0	12.6(1)	16.6(4)
21 0 21	22 1 22	3387.7375	4.9	6.0	12.6(1)	16.6(4)
21 0 21	22 0 22	3387.7325	4.9	6.0	12.6(1)	16.6(4)
21 1 21	22 0 22	3387.7325	3.9	6.0	12.6(1)	16.6(4)
13 2 11	14 3 12	3217.3750	0.2	53.9	2.22(1)	6.2(2)
20 2 19	21 2 20	3383.4692	2.4	67.4	1.10(1)	1.3(2)
12 2 10	13 3 11	3196.9209	3.7	56.3	2.87(2)	23.5(3)
17 15 2	18 15 3	3904.2377	2.3	70.0	1.321(2)	8.52(6)
12 2 10	13 3 11	3196.9750	2.3	70.0	1.321(2)	8.52(6)
17 15 3	18 15 4	3904.2377	2.3	70.0	1.321(2)	8.52(6)
18 4 14	19 4 15	3368.3958	4.9	57.1	2.341(8)	11.6(1)
18 10 9	19 10 10	3594.0818	3.8	86.0	1.11(1)	35.0(5)
18 10 8	19 10 9	3594.0818	3.8	86.0	1.11(1)	35.0(5)
19 2 18	20 2 19	3354.7408	0.2	53.3	2.38(3)	10.5(5)
11 2 9	12 3 10	3178.0778	4.9	43.0	3.51(1)	11.5(1)
19 2 18	20 1 19	3354.7409	0.2	15.6	7.58(8)	12.4(4)
10 2 8	11 3 9	3160.8037	0.2	38.1	3.87(2)	10.6(1)
17 4 13	18 4 14	3340.6652	2.9	65.0	1.284(8)	3.3(2)
19 0 19	20 1 20	3331.5591	0.1	20.6	8.62(4)	32.5(2)
19 0 19	20 0 20	3331.5615	3.5	48.6	2.58(2)	3.8(3)
19 1 19	20 1 20	3331.5728	3.5	48.6	2.58(2)	3.8(3)
19 1 19	20 0 20	3331.5749	4.3	21.3	8.5(1)	26.2(6)
8 2 7	9 3 6	3129.7194	2.8	44.1	4.14(3)	18.2(2)
18 2 17	19 2 18	3327.3686	1.2	36.2	3.90(3)	8.5(3)
17 4 14	18 4 15	3339.7784	1.2	36.2	3.90(3)	8.5(3)
17 11 6	18 11 7	3624.8408	3.9	69.7	1.83(2)	19.5(4)
17 11 7	18 11 8	3624.8408	4.9	69.7	1.83(2)	19.5(4)
15 15 1	16 15 2	3854.7189	2.7	50.0	2.770(6)	11.3(1)
15 15 0	16 15 1	3854.7189	2.7	50.0	2.770(6)	11.3(1)
16 2 14	17 2 15	3287.7893	1.7	50.0	2.770(6)	11.3(1)
4 3 2	5 4 1	3104.5204	2.6	12.4	8.72(8)	14.1(4)
4 3 1	5 4 2	3104.5204	1.6	12.4	8.72(8)	14.1(4)

8 1 8	9 2 7	3118.5424	2.1	69.6	1.472(5)	11.8(2)
16 4 12	17 4 13	3314.5606	3.3	53.6	2.74(1)	14.5(2)
17 2 16	18 2 17	3301.3560	3.1	32.1	4.58(2)	12.8(2)
8 2 6	9 3 7	3131.0873	1.6	37.3	4.23(3)	15.1(3)
16 4 13	17 4 14	3313.9968	2.9	64.9	1.723(5)	9.8(1)
7 2 6	8 3 5	3117.8067	0.1	37.0	3.61(4)	7.2(4)
17 2 16	18 1 17	3301.3572	0.1	22.4	5.87(3)	10.7(2)
15 8 7	16 8 8	3418.7408	2.3	64.1	2.20(5)	21.1(9)
15 8 8	16 8 9	3418.7408	3.3	64.1	2.20(5)	21.1(9)
15 2 13	16 2 14	3262.7949	1.7	58.4	2.133(4)	10.56(7)
22 10 12	21 11 11	3717.1720	1.2	58.4	2.133(4)	10.56(7)
19 4 16	19 5 15	3395.9154	1.5	41.5	2.99(1)	7.2(2)
12 4 8	12 5 7	3226.1935	4.3	32.1	6.42(5)	25.7(3)
13 4 9	13 5 8	3245.9232	1.2	45.4	3.04(1)	9.1(2)
14 4 10	14 5 9	3267.2171	0.1	33.4	4.48(2)	11.2(1)
6 2 5	7 3 4	3107.3623	2.1	50.2	2.89(1)	11.1(1)
15 4 11	15 5 10	3290.0913	2.5	46.3	3.64(4)	17.5(4)
14 8 6	15 8 7	3396.2074	1.6	24.0	6.35(3)	16.2(2)
14 8 7	15 8 8	3396.2074	1.6	24.0	6.35(3)	16.2(2)
16 4 12	16 5 11	3314.5601	2.6	24.0	6.35(3)	16.1(2)
16 2 15	17 1 16	3276.7222	2.9	32.9	4.62(2)	12.0(2)
16 0 16	17 0 17	3257.2882	1.2	41.4	3.04(2)	7.1(2)
16 1 16	17 0 17	3257.3418	2.3	6.9	10.62(8)	14.0(3)
15 2 14	16 2 15	3253.4945	3.9	45.9	2.80(3)	10.4(7)
21 2 20	21 3 19	3413.5468	1.4	52.5	2.71(2)	13.23(4)
13 9 5	14 9 6	3420.6797	3.1	71.7	1.57(1)	15.3(3)
13 9 5	14 9 5	3420.6797	3.1	71.7	1.57(1)	15.3(3)
14 4 10	15 4 11	3267.2172	1.6	48.2	3.165(7)	14.71(8)
13 1 12	14 2 13	3208.5041	3.1	18.3	6.9(2)	15.2(9)
14 4 11	15 4 12	3267.0045	0.0	55.4	2.45(1)	12.8(2)
19 4 15	19 5 14	3397.7846	1.7	53.7	2.397(5)	9.28(8)
5 2 4	6 3 3	3098.3939	0.1	34.8	4.10(2)	10.3(2)
14 1 13	15 1 14	3229.4699	0.1	53.1	2.334(9)	7.3(1)
20 4 16	20 5 15	3428.8480	0.1	42.3	2.42(2)	1.7(3)

24 10 14	23 11 13	3787.8803	1.2	45.4	3.41(2)	13.56(2)
5 2 3	6 3 4	3098.6428	9.9	45.4	3.41(2)	13.6(2)
15 0 15	16 0 16	3235.1963	9.9	47.4	2.969(3)	12.13(6)
15 2 14	16 1 15	3253.4949	2.6	22.9	7.01(7)	18.0(4)
20 4 17	21 3 18	3426.2356	1.8	74.7	1.113(6)	8.9(2)
13 12 1	14 12 2	3593.2038	1.8	74.7	1.113(6)	8.9(1)
13 12 2	14 12 3	3593.2038	0.8	74.7	1.113(6)	8.9(2)
13 3 10	14 3 11	3228.0026	1.8	74.7	1.113(6)	8.9(2)
14 2 13	15 2 14	3231.7283	1.3	56.6	2.107(8)	8.5(2)
18 0 18	18 1 17	3305.4696	1.8	58.7	1.84(3)	5.6(5)
13 4 9	14 4 10	3245.9232	4.3	61.0	1.710(7)	5.5(1)
13 4 10	14 4 11	3245.8015	0.1	48.9	2.88(1)	10.4(1)
11 1 10	12 2 11	3170.5795	1.6	22.7	5.60(3)	9.5(2)
13 1 12	14 1 13	3208.5038	3.7	23.2	5.89(4)	11.7(2)
6 1 6	7 2 5	3097.4594	0.1	60.6	1.77(1)	5.5(4)
4 2 3	5 3 2	3090.9089	2.6	47.8	2.79(2)	9.6(2)
12 8 4	13 8 5	3355.6521	3.6	22.7	5.86(2)	11.8(2)
10 6 4	9 7 3	3245.4659	2.6	22.7	5.86(2)	11.8(2)
14 1 14	15 1 15	3214.5515	3.6	22.7	5.86(2)	11.8(2)
12 8 5	13 8 6	3355.6521	3.6	22.7	5.86(2)	11.8(2)
13 2 12	14 2 13	3210.8691	3.4	41.3	3.65(1)	11.3(1)
10 1 9	11 2 10	3153.7022	2.7	37.1	3.60(3)	7.8(2)
12 6 6	13 6 7	3280.0999	3.4	42.9	6.32(7)	32.7(4)
12 6 7	13 6 8	3280.0998	3.4	42.9	6.32(7)	32.7(4)
11 9 2	12 9 3	3383.1025	0.1	86.4	0.627(4)	9.9(2)
12 5 8	13 5 9	3250.3693	0.1	23.5	5.57(1)	10.6(1)
17 0 17	17 1 16	3280.7109	0.1	23.5	5.57(1)	10.64(9)
12 5 7	13 5 8	3250.3735	0.1	23.5	5.57(1)	10.6(1)
12 4 8	13 4 9	3226.1924	4.3	27.7	6.048(9)	18.11(7)
18 2 17	18 3 16	3327.3681	1.2	51.1	2.30(1)	5.0(2)
12 4 9	13 4 10	3226.1257	4.3	47.5	4.43(1)	23.0(1)
12 1 11	13 1 12	3188.8587	2.7	51.2	2.436(7)	7.2(1)
13 0 13	14 1 14	3194.9995	3.1	11.1	9.0(2)	16.2(8)
16 1 16	16 2 15	3257.3418	2.5	50.0	2.24(1)	5.0(3)

13 0 13	14 0 14	3194.9979	0.1	19.0	6.28(2)	9.4(1)
3 2 1	4 3 2	3084.9496	0.1	45.9	2.881(9)	7.9(1)
13 1 13	14 1 14	3195.1699	1.6	46.3	3.08(2)	9.6(2)
12 10 3	13 10 4	3455.0415	2.6	46.3	3.08(2)	9.6(2)
12 10 2	13 10 3	3455.0415	0.6	46.3	3.08(1)	9.6(2)
11 8 4	12 8 5	3337.6322	2.7	65.3	1.56(1)	9.1(3)
11 8 3	12 8 4	3337.6322	2.7	65.3	1.56(1)	9.1(3)
19 4 16	20 3 17	3395.9148	3.1	24.9	5.74(4)	13.6(3)
12 2 11	13 2 12	3191.8188	3.1	24.9	5.74(4)	13.6(3)
9 3 7	9 4 6	3157.2068	0.2	44.2	3.53(3)	16.6(3)
8 3 6	8 4 5	3143.6685	3.1	32.9	4.80(2)	13.3(2)
6 3 4	6 4 3	3121.0730	3.5	45.4	2.71(4)	3.2(4)
8 3 5	8 4 4	3143.7711	4.3	45.8	3.05(1)	9.5(1)
9 3 6	9 4 5	3157.4331	4.3	30.2	3.82(5)	2.8(4)
13 2 12	14 1 13	3210.8691	3.6	24.6	5.03(4)	8.6(4)
8 1 7	9 2 8	3124.2879	3.1	42.2	2.72(3)	2.8(4)
11 11 0	12 11 1	3493.5861	0.2	43.1	2.97(2)	8.7(2)
11 11 1	12 11 2	3493.5861	0.2	43.1	2.98(2)	8.7(2)
11 5 7	12 5 8	3232.2667	6.2	36.2	4.27(2)	11.8(2)
11 5 6	12 5 7	3232.2685	6.2	36.2	4.27(2)	11.8(2)
16 0 16	16 1 15	3257.2880	5.2	47.4	2.92(1)	9.2(2)
11 4 7	12 4 8	3208.0162	2.2	58.2	1.908(7)	6.1(1)
15 1 15	15 2 14	3235.2814	0.6	58.2	2.041(6)	9.40(7)
12 0 12	13 0 13	3176.8910	4.7	34.6	3.82(1)	8.1(2)
11 1 11	13 1 13	3177.1342	5.2	34.9	4.13(1)	10.3(2)
11 1 11	13 0 13	3177.1338	4.6	4.7	12.7(1)	17.2(5)
12 6 6	11 7 5	3280.0994	6.1	84.7	0.739(6)	15.2(3)
7 1 6	8 2 7	3111.8093	0.1	30.8	4.71(1)	11.4(1)
11 10 1	12 10 2	3437.2094	5.1	66.8	1.683(6)	10.4(1)
10 8 3	11 8 4	3321.1146	5.1	66.8	1.683(6)	10.4(1)
11 10 2	12 10 3	3437.2094	1.1	66.8	1.683(6)	10.4(1)
10 8 2	11 8 3	3321.1146	5.1	66.8	1.683(6)	10.4(1)
10 2 8	11 2 9	3160.8037	3.8	39.7	3.28(2)	6.3(2)
15 2 14	15 3 13	3253.4948	6.2	30.1	4.95(3)	12.3(2)

10 6 4	11 6 5	3245.4671	8.9	45.9	3.054(7)	10.7(1)
10 6 5	11 6 6	3245.4671	7.9	45.9	3.054(7)	10.7(1)
10 5 5	11 5 6	3215.6849	0.1	34.5	4.42(2)	13.5(2)
10 5 6	11 5 7	3215.6842	0.1	34.5	4.42(2)	13.5(2)
15 0 15	15 1 14	3235.1961	4.8	52.3	2.82(3)	15.6(5)
11 1 11	12 1 12	3160.4488	6.2	43.0	3.84(6)	16.3(6)
4 1 4	5 2 3	3081.9299	1.9	52.1	2.695(3)	12.28(5)
4 1 4	3 3 1	3081.9284	4.6	84.2	0.602(5)	5.44(2)
18 4 15	19 3 16	3367.1270	1.1	84.2	0.602(5)	5.4(2)
10 2 9	11 2 10	3157.9034	5.6	50.7	2.673(7)	12.1(1)
13 2 12	13 3 11	3210.8691	5.1	24.8	5.70(4)	11.6(2)
13 1 13	13 2 12	3195.1696	2.6	50.2	2.697(7)	9.2(1)
19 0 19	18 3 16	3331.5594	4.5	44.8	3.18(3)	10.2(4)
9 2 7	10 2 8	3145.1362	0.2	51.9	2.42(7)	8.5(1)
9 5 4	10 5 5	3200.6184	4.8	39.5	3.92(2)	11.9(2)
9 5 5	10 5 6	3200.6181	0.8	39.5	3.92(2)	11.9(2)
9 3 6	10 3 7	3157.4331	5.4	45.2	3.24(1)	11.2(4)
10 1 10	11 1 11	3145.1183	5.7	36.2	4.21(2)	11.7(2)
10 2 9	11 3 9	3174.1529	4.3	21.9	6.30(5)	12.8(3)
9 2 8	10 2 9	3143.0877	5.4	38.5	3.69(2)	11.2(3)
11 1 11	12 2 11	3177.1342	4.3	35.3	3.62(1)	5.9(2)
10 2 9	12 1 11	3174.1531	4.8	23.2	6.38(5)	14.6(3)
4 1 3	5 2 4	3083.5509	4.5	51.6	2.839(8)	12.7(1)
3 1 3	4 2 2	3076.2667	0.7	62.0	1.838(3)	9.10(6)
9 0 9	10 1 10	3130.4980	4.4	15.4	7.16(4)	10.7(2)
10 2 9	10 3 8	3157.9033	4.1	34.5	3.91(2)	7.9(2)
8 7 2	9 7 3	3252.0663	1.3	71.5	1.49(1)	15.6(3)
8 7 1	9 7 2	3252.0663	4.3	71.5	1.49(1)	15.6(3)
9 2 8	9 3 7	3143.0876	4.6	11.5	10.2(2)	19.4(8)
7 4 3	6 5 2	3150.6313	0.2	42.7	2.74(3)	3.8(3)
8 2 7	8 3 6	3129.7184	3.7	38.0	3.64(1)	8.9(2)
8 1 7	9 1 8	3124.2878	4.9	51.0	2.41(1)	6.0(2)
17 4 14	18 3 15	3339.7787	4.9	66.2	1.389(8)	3.5(2)
8 5 4	9 5 5	3187.0678	0.3	34.2	5.65(8)	20.0(5)

8 5 3	9 5 4	3187.0679	1.3	34.2	5.65(8)	20.0(5)
11 1 11	11 2 10	3160.4492	4.5	46.1	2.93(1)	8.1(1)
8 3 5	9 3 6	3143.7712	6.1	57.1	3.38(2)	29.9(3)
8 3 6	9 3 7	3143.6688	0.0	45.1	3.64(1)	14.7(1)
5 2 4	5 3 3	3098.3938	4.9	39.8	3.53(2)	9.3(3)
4 2 3	4 3 2	3090.9089	0.1	63.5	1.893(4)	10.76(7)
3 2 1	3 3 0	3084.9496	5.1	76.3	1.139(7)	10.4(2)
9 1 9	10 0 10	3131.1469	5.6	10.1	10.22(7)	15.9(3)
6 2 4	6 3 3	3107.8505	5.1	32.5	5.33(4)	18.6(4)
10 1 10	10 2 9	3145.1183	3.8	32.2	4.49(4)	9.3(3)
2 1 2	3 2 1	3072.0131	0.1	49.8	2.89(2)	9.5(2)
8 0 8	9 0 9	3117.6791	5.7	37.4	3.70(2)	9.2(3)
8 2 6	8 3 5	3131.0871	5.4	23.3	6.18(6)	14.8(4)
10 2 9	11 1 10	3157.9033	8.9	43.2	3.49(1)	11.9(1)
8 4 4	7 5 3	3162.6917	5.6	84.5	1.015(6)	25.6(3)
8 1 8	9 1 9	3118.5426	0.1	37.3	3.81(1)	9.3(1)
7 6 2	8 6 3	3204.8482	1.2	64.5	1.533(6)	8.5(1)
7 6 1	8 6 2	3204.8482	1.2	64.5	1.533(6)	8.5(1)
7 1 6	8 1 7	3111.8094	5.2	39.0	3.56(5)	9.8(5)
9 2 7	9 3 6	3145.1360	6.6	17.6	7.57(6)	16.1(3)
7 2 5	8 2 6	3118.6604	5.6	17.6	7.57(6)	16.1(3)
7 5 3	8 5 4	3175.0270	0.9	47.5	2.84(2)	9.4(2)
7 5 2	8 5 3	3175.0270	4.9	47.5	2.84(2)	9.4(2)
2 1 1	3 2 2	3072.4999	4.7	58.3	2.07(1)	9.1(2)
7 0 7	8 1 8	3106.1926	4.5	21.1	5.97(2)	9.8(2)
12 5 7	11 6 6	3250.3705	0.1	72.0	1.664(5)	20.0(1)
7 3 4	8 3 5	3131.6609	6.2	18.8	7.09(4)	13.9(3)
7 3 5	8 3 6	3131.6159	5.1	61.1	1.869(6)	8.2(1)
12 0 12	12 1 11	3176.8909	0.1	32.1	4.29(2)	10.1(2)
10 2 8	10 3 7	3160.8036	5.4	17.3	7.53(7)	14.2(4)
9 1 9	9 2 8	3131.1478	0.1	42.8	3.24(3)	8.7(4)
11 2 9	11 3 8	3178.0780	6.7	26.2	5.15(4)	10.2(3)
7 0 7	8 0 8	3106.1928	4.6	51.2	2.545(8)	8.3(1)
12 2 10	12 3 9	3196.9201	6.2	7.5	12.7(3)	21.7(8)

12 2 10	12 3 9	3196.9747	0.1	41.2	3.78(2)	12.6(2)
6 6 0	7 6 1	3194.3242	1.4	76.9	1.106(3)	10.88(9)
6 6 1	7 6 2	3194.3242	1.4	76.9	1.106(3)	10.88(9)
1 1 0	2 2 1	3069.3367	1.3	48.5	2.904(6)	10.24(9)
13 2 11	13 3 10	3217.3748	6.4	21.5	6.59(6)	13.8(3)
6 1 5	7 1 6	3100.8483	6.5	55.1	2.37(1)	10.7(2)
16 2 14	16 3 13	3287.7891	1.2	16.3	6.49(6)	8.8(4)
6 2 4	7 2 5	3107.8505	0.1	48.2	2.92(1)	10.3(1)
6 4 2	7 4 3	3140.0890	5.7	45.3	3.28(1)	11.1(2)
6 4 3	7 4 4	3140.0882	0.7	45.3	3.28(1)	11.1(2)
6 3 3	7 3 4	3121.0898	6.7	19.2	8.79(4)	21.2(2)
6 3 4	7 3 5	3121.0729	0.4	53.7	2.442(3)	10.31(5)
11 0 11	11 1 10	3160.1056	6.5	39.0	3.84(1)	11.1(1)
6 2 5	7 2 6	3107.3623	0.1	59.7	1.93(1)	7.2(1)
14 1 13	14 2 12	3229.4696	5.2	26.9	5.012(9)	9.1(3)
5 0 5	6 1 6	3087.2937	5.5	28.5	5.10(4)	12.0(3)
6 0 6	7 0 7	3096.0566	0.6	43.3	3.37(7)	9.1(8)
6 1 6	6 2 5	3097.4595	0.5	33.8	4.39(1)	10.9(1)
10 4 6	9 5 5	3191.3673	5.1	84.8	0.890(6)	19.9(3)
5 1 4	6 1 5	3091.4237	5.4	24.7	5.77(3)	11.8(2)
5 1 5	5 2 4	3088.9966	6.4	24.7	5.77(3)	11.7(2)
5 5 0	6 5 1	3155.4751	1.2	75.0	1.229(2)	11.22(4)
5 5 1	6 5 2	3155.4751	1.2	75.0	1.229(2)	11.22(4)
5 2 3	6 2 4	3098.6437	6.4	36.1	4.29(3)	13.2(2)
5 4 2	6 4 3	3131.0560	6.4	36.1	4.29(3)	13.2(2)
5 4 1	6 4 2	3131.0562	6.4	36.1	4.29(3)	13.2(2)
5 3 2	6 3 3	3112.0462	6.4	15.2	7.52(2)	12.4(1)
13 1 12	13 2 11	3208.5039	1.3	11.7	8.31(7)	10.9(3)
5 2 4	6 2 5	3098.3938	8.3	53.3	2.55(3)	12.4(5)
4 1 4	4 2 3	3081.9299	2.9	45.1	2.97(1)	7.6(1)
8 2 7	9 1 8	3129.7184	1.3	53.9	2.528(7)	10.6(1)
5 1 5	6 1 6	3088.9967	4.1	59.3	1.86(1)	5.5(2)
2 1 2	2 2 1	3072.0131	5.7	68.9	1.60(2)	14.6(6)
12 1 11	12 2 10	3188.8586	6.2	18.6	6.65(4)	10.8(3)

2 1 1	2 2 0	3072.4998	6.9	74.7	1.037(6)	5.2(2)
3 0 3	4 1 4	3074.0027	0.0	43.6	3.091(1)	7.57(8)
4 4 0	5 4 1	3123.5343	4.4	70.8	1.32(2)	9.8(5)
11 1 10	11 2 9	3170.5792	1.3	8.7	8.97(7)	9.1(3)
4 2 2	5 2 3	3091.0170	6.6	57.9	2.59(1)	16.5(7)
4 3 1	5 3 2	3104.5240	5.1	59.4	2.77(2)	17.8(2)
4 3 2	5 3 3	3104.5184	6.1	59.4	2.77(2)	17.8(2)
4 2 3	5 2 4	3090.9090	6.2	69.1	1.637(4)	13.4(1)
4 0 4	5 0 5	3079.9327	8.3	51.1	3.04(4)	15.8(6)
9 1 8	9 2 7	3138.2611	6.6	8.2	10.2(1)	13.8(5)
7 1 6	7 2 5	3111.8091	4.8	13.0	8.20(6)	12.1(4)
8 1 7	8 2 6	3124.2877	2.9	19.6	6.84(5)	12.9(3)
2 0 2	3 1 3	3069.5303	6.5	38.7	3.79(1)	10.0(1)
8 0 8	8 1 7	3117.6790	2.9	18.7	6.57(4)	10.3(3)
14 4 11	15 3 12	3267.0046	4.6	75.0	1.300(7)	1.3(2)
12 4 8	11 5 7	3226.1930	5.1	75.2	1.285(7)	14.5(2)
3 1 2	4 1 3	3077.2397	0.6	59.7	2.103(4)	10.00(6)
3 2 1	4 2 2	3084.9496	3.1	76.3	1.006(4)	6.7(1)
3 2 2	4 2 3	3084.9133	0.1	67.9	1.547(6)	9.7(1)
7 0 7	7 1 6	3106.1927	5.5	25.4	5.33(2)	10.3(1)
3 1 3	4 1 4	3076.2665	3.5	68.8	1.33(2)	7.2(5)
9 3 6	8 4 5	3157.4333	0.1	77.8	0.93(5)	7.0(2)
4 1 4	5 0 5	3081.9297	6.2	30.4	4.82(2)	10.9(2)
2 1 1	3 1 2	3072.4997	3.1	73.8	0.99(2)	3.3(7)
2 2 0	3 2 1	3080.4196	4.6	78.1	1.135(7)	16.4(3)
6 2 5	7 1 6	3107.3622	0.2	65.3	1.633(6)	9.1(1)
13 4 10	14 3 11	3245.8014	0.1	67.1	1.404(7)	5.9(2)
5 0 5	5 1 4	3087.2937	7.9	23.1	6.34(6)	16.8(5)
0 0 0	1 1 1	3065.0359	0.1	58.7	2.031(6)	8.6(1)
10 3 7	9 4 6	3172.6656	3.1	77.5	0.928(4)	6.6(2)
23 14 9	23 14 10	4010.6917	4.3	79.6	0.92(1)	9.6(5)
23 14 10	23 14 9	4010.6917	4.3	79.6	0.92(1)	9.6(5)
4 1 4	3 2 1	3081.9298	4.3	79.6	0.92(1)	9.6(5)
20 13 7	20 13 8	3838.7331	0.1	74.7	1.27(1)	13.5(3)

20 13 8	20 13 7	3838.7331	0.1	74.7	1.27(1)	13.5(3)
15 14 2	15 14 1	3776.5385	0.1	74.7	1.27(1)	13.5(3)
15 14 1	15 14 2	3776.5385	0.1	74.7	1.27(1)	13.5(3)
5 2 4	6 1 5	3098.3944	2.8	50.1	2.59(1)	9.6(2)
14 14 1	14 14 0	3754.0269	3.8	50.1	2.59(1)	9.6(2)
14 14 0	14 14 1	3754.0269	3.8	50.1	2.59(1)	9.6(2)
18 13 5	18 13 6	3780.1910	3.1	64.3	1.643(5)	8.0(1)
18 13 6	18 13 5	3780.1910	3.1	64.3	1.643(5)	8.0(1)
14 9 5	14 9 6	3441.7132	4.1	64.3	1.643(5)	8.0(1)
14 9 6	14 9 5	3441.7132	4.1	64.3	1.643(5)	8.0(1)
13 9 5	13 9 5	3420.6799	1.3	68.3	1.43(2)	11.3(4)
13 9 5	13 9 4	3420.6799	1.3	68.3	1.43(2)	11.3(4)
12 4 9	13 3 10	3226.1274	2.2	67.6	1.693(6)	18.1(1)
12 9 3	12 9 4	3401.1413	4.5	65.0	1.485(9)	11.8(2)
12 9 4	12 9 3	3401.1413	4.5	65.0	1.485(9)	11.8(2)
10 9 1	10 9 2	3366.5702	0.6	65.4	1.707(4)	10.10(8)
10 9 2	10 9 1	3366.5702	0.6	65.4	1.707(4)	10.10(8)
13 13 0	13 13 1	3660.1354	1.7	71.3	1.297(3)	9.72(9)
13 13 1	13 13 0	3660.1354	1.7	71.3	1.297(3)	9.72(9)
2 1 2	3 0 3	3072.0131	4.3	57.3	2.134(6)	7.8(1)
16 8 8	16 8 9	3442.7828	0.7	77.8	1.11(1)	18.4(7)
16 8 9	16 8 8	3442.7828	6.7	77.8	1.11(2)	18.4(7)
15 8 7	15 8 8	3418.7411	1.9	67.0	1.522(2)	8.98(4)
15 8 8	15 8 7	3418.7411	1.9	67.0	1.522(2)	8.98(4)
15 4 11	14 5 10	3290.0916	0.6	76.6	0.926(3)	9.36(8)
14 8 7	14 8 6	3396.2065	3.6	42.1	3.13(1)	6.6(2)
14 8 6	14 8 7	3396.2065	3.6	42.1	3.13(1)	6.6(2)
8 3 6	9 2 7	3143.6682	4.6	42.1	3.13(1)	6.6(2)
4 1 4	4 1 3	3081.9286	0.5	42.1	3.13(1)	6.63(2)
9 8 1	9 8 2	3306.1014	6.1	32.0	4.50(3)	11.2(3)
9 8 2	9 8 1	3306.1014	0.7	32.0	4.50(3)	11.2(3)
13 3 11	13 3 10	3227.1042	6.7	32.0	4.50(3)	11.2(3)
8 8 0	8 8 1	3292.5920	0.1	24.4	5.22(3)	10.5(3)
16 12 5	16 12 4	3660.7726	0.1	24.4	5.22(4)	10.5(3)

19 10 10	19 10 9	3622.5679	0.1	24.4	5.22(4)	10.5(3)
8 8 1	8 8 0	3292.5920	0.1	24.4	5.22(4)	10.5(3)
16 12 4	16 12 5	3660.7726	0.1	24.4	5.22(4)	10.5(3)
19 10 9	19 10 10	3622.5679	0.1	24.4	5.22(4)	10.5(3)
18 10 9	18 10 8	3594.0823	4.4	67.8	1.42(1)	7.9(3)
18 10 8	18 10 9	3594.0823	4.4	67.8	1.42(1)	7.9(3)
13 12 1	13 12 2	3593.2045	4.4	67.8	1.42(1)	7.9(3)
13 12 2	13 12 1	3593.2045	4.4	67.8	1.42(1)	7.9(4)
8 7 1	8 7 2	3252.0661	7.4	24.7	5.99(3)	15.2(2)
8 7 2	8 7 1	3252.0661	7.4	24.7	5.99(3)	15.2(2)
7 7 1	7 7 0	3240.0527	0.7	23.7	5.13(3)	7.3(2)
7 7 0	7 7 1	3240.0527	0.7	23.7	5.13(3)	7.3(2)
12 6 7	12 6 6	3280.0994	1.5	61.0	2.120(3)	12.22(6)
12 6 6	12 6 7	3280.0994	1.5	61.0	2.120(3)	12.22(6)
11 6 5	11 6 6	3262.0282	5.5	38.3	4.16(2)	13.0(2)
11 6 6	11 6 5	3262.0282	5.5	38.3	4.16(2)	13.0(2)
9 6 4	9 6 3	3230.4177	5.6	25.1	5.73(4)	12.5(3)
9 6 3	9 6 4	3230.4177	5.6	25.1	5.73(4)	12.5(3)
11 3 9	11 3 8	3189.1553	6.6	25.1	5.73(4)	12.5(3)
9 3 7	9 3 6	3157.2139	7.9	40.6	4.27(6)	23.2(6)
9 5 4	9 5 5	3200.6183	7.9	40.6	4.27(6)	23.2(6)
9 5 5	9 5 4	3200.6184	7.9	40.6	4.27(6)	23.2(6)
8 5 4	8 5 3	3187.0664	7.4	37.1	4.24(6)	15.7(6)
8 5 3	8 5 4	3187.0663	7.4	37.1	4.24(6)	15.7(6)
7 5 3	7 5 2	3175.0270	0.7	33.6	4.91(8)	17.6(7)
7 5 2	7 5 3	3175.0270	5.7	33.6	4.91(8)	17.6(7)
6 5 2	6 5 1	3164.4970	0.5	26.7	5.87(6)	18.2(4)
6 5 1	6 5 2	3164.4970	6.5	26.7	5.87(7)	18.2(4)
5 5 1	5 5 0	3155.4748	3.5	21.1	5.81(4)	9.3(3)
5 5 0	5 5 1	3155.4748	3.5	21.1	5.81(4)	9.3(3)
7 4 3	7 4 4	3150.6318	1.2	48.7	2.54(4)	6.9(5)
7 4 4	7 4 3	3150.6325	1.2	48.7	2.54(4)	6.9(5)
4 4 1	4 4 0	3123.5341	2.4	24.3	1.32(2)	9.8(5)
6 3 4	6 3 3	3121.0730	0.1	72.3	1.21(3)	7.1(1)

10 1 10	9 2 7	3145.1197	1.2	70.7	1.29(2)	6.6(5)
8 2 6	9 1 9	3131.0868	2.2	70.7	1.29(2)	6.6(5)
7 3 4	7 3 5	3131.6618	5.9	39.4	3.21(4)	6.8(4)
6 3 3	6 3 4	3121.0904	4.9	39.4	3.21(4)	6.8(4)
5 3 3	5 3 2	3112.0413	5.9	39.4	3.22(4)	6.8(4)
4 3 2	4 3 1	3104.5204	0.1	37.8	4.87(5)	24.0(5)
12 10 2	12 10 3	3455.0403	6.9	25.4	5.26(2)	11.0(2)
3 3 0	3 3 1	3098.5071	1.9	25.4	5.26(2)	11.0(2)
3 3 1	3 3 0	3098.5074	7.9	25.4	5.26(2)	11.0(2)
4 3 1	4 3 2	3104.5349	8.9	25.4	5.26(2)	11.0(2)
12 10 3	12 10 2	3455.0403	8.9	25.4	5.26(2)	11.0(2)
2 2 1	2 2 0	3080.4123	0.1	71.9	1.236(3)	6.8(1)
2 2 0	2 2 1	3080.4195	2.1	61.9	1.910(3)	9.02(5)
3 2 1	3 2 2	3084.9489	6.7	66.8	1.742(6)	10.8(1)
11 10 1	11 10 2	3437.2082	1.8	70.6	1.386(2)	8.88(4)
11 10 2	11 10 1	3437.2082	1.8	70.6	1.386(2)	8.88(4)
11 3 8	11 3 9	3189.4849	4.8	62.6	2.16(1)	15.7(2)
10 2 9	9 3 6	3157.9028	4.8	62.6	2.16(1)	15.7(2)
10 10 0	10 10 1	3420.8961	3.8	66.1	1.652(6)	9.5(1)
10 10 1	10 10 0	3420.8961	2.8	66.1	1.652(6)	9.5(1)
2 0 2	1 1 1	3069.5304	6.2	75.6	1.044(4)	6.4(1)
5 2 3	6 1 6	3098.6427	2.2	84.8	0.64(1)	7.5(7)
10 4 7	11 3 8	3191.3524	0.1	79.8	0.890(6)	10.1(3)
1 0 1	0 0 0	3066.5375	6.2	86.9	0.77(1)	23.6(5)
12 2 10	13 1 13	3196.9745	6.2	86.9	0.77(1)	23.6(5)
17 4 13	16 5 12	3340.6650	5.2	81.9	0.723(4)	5.1(1)
12 2 11	11 3 8	3191.8200	5.7	71.6	1.204(5)	7.8(1)
3 0 3	2 1 2	3074.0023	1.3	64.8	1.37(1)	6.8(1)
6 3 4	7 2 5	3121.0732	0.6	74.0	13.894(1)	15.40(3)
6 1 5	5 2 4	3100.8483	1.9	68.1	1.384(6)	6.0(2)
13 2 12	12 3 9	3210.8693	0.4	74.4	1.086(2)	6.80(9)
17 2 16	16 3 13	3301.3572	6.5	87.6	0.594(5)	12.1(1)
1 1 0	1 0 1	3069.3367	5.7	46.9	2.915(7)	8.8(1)
2 1 2	1 1 1	3072.0118	1.8	65.6	1.850(5)	12.1(1)

3 1 2	3 0 3	3077.2397	0.7	19.6	6.81(5)	13.3(2)
9 4 6	10 3 7	3176.2644	3.6	71.1	1.346(8)	10.9(2)
4 1 3	4 0 4	3083.5509	6.2	23.4	6.04(4)	13.4(3)
11 2 9	11 2 10	3178.0784	7.9	40.2	3.70(1)	10.4(1)
18 4 14	17 5 13	3368.3952	6.7	72.8	1.665(8)	19.5(2)
12 5 8	13 4 9	3250.3703	4.1	72.9	1.166(7)	6.3(2)
1 1 1	0 0 0	3069.1744	0.3	69.8	1.319(6)	5.6(2)
7 1 6	6 2 5	3111.8093	3.9	53.1	2.519(8)	10.8(4)
3 2 2	2 2 1	3084.9134	0.2	77.5	1.038(4)	11.2(2)
5 0 5	4 1 4	3087.2939	5.4	39.9	3.82(1)	12.0(1)
4 3 1	3 3 0	3104.5204	4.4	61.9	2.040(7)	12.6(1)
4 3 2	3 3 1	3104.5202	3.4	61.9	2.040(7)	12.6(1)
4 2 2	3 2 1	3091.0167	0.6	63.8	1.899(5)	10.77(9)
4 1 3	3 1 2	3083.5508	3.8	64.0	1.944(6)	12.3(1)
8 1 7	7 2 6	3124.2879	0.4	58.5	2.152(3)	10.17(4)
7 4 4	8 3 5	3150.6320	0.7	76.6	0.941(9)	10.6(3)
9 2 7	9 1 8	3145.1360	0.7	13.1	8.35(4)	15.3(2)
7 2 5	7 1 6	3118.6604	5.6	19.6	6.52(4)	11.6(3)
10 2 8	10 1 9	3160.8035	0.0	4.7	11.6(2)	13.2(6)
6 0 6	5 1 5	3096.0565	2.4	21.0	6.03(3)	9.8(2)
5 1 5	4 1 4	3088.9966	1.2	61.6	1.959(5)	9.5(1)
5 2 3	5 1 4	3098.6427	6.1	32.9	4.63(2)	12.0(2)
5 0 5	4 0 4	3087.2937	1.2	59.3	2.009(7)	8.5(2)
5 3 2	4 3 1	3112.0459	3.9	57.4	3.34(1)	24.1(2)
5 3 3	4 3 2	3112.0445	2.9	57.4	3.34(1)	24.1(2)
5 2 4	4 2 3	3098.3939	0.0	53.9	2.42(1)	9.7(1)
4 2 2	4 1 3	3091.0167	8.3	31.0	4.65(2)	10.6(2)
5 2 3	4 2 2	3098.6428	0.6	62.9	1.803(4)	8.95(9)
12 2 10	11 3 9	3196.9745	6.4	74.6	1.097(5)	8.2(2)
3 2 1	3 1 2	3084.9495	6.6	55.1	2.406(8)	10.6(1)
12 2 10	12 1 11	3196.9206	1.2	19.5	6.95(4)	14.0(3)
12 2 10	12 1 11	3196.9740	6.2	17.5	7.15(4)	12.4(2)
20 4 16	19 5 15	3428.8478	6.1	79.1	1.060(7)	16.0(2)
9 1 8	8 2 7	3138.2613	0.9	40.0	3.665(9)	11.2(1)

6 1 6	5 1 5	3097.4594	3.4	44.8	3.27(1)	10.8(1)
13 2 11	13 1 12	3217.3748	0.1	16.7	7.39(8)	13.5(4)
6 5 2	5 5 1	3164.4969	0.4	71.9	1.452(3)	12.81(8)
6 5 1	5 5 0	3164.4969	0.4	71.9	1.452(3)	12.81(7)
3 2 2	3 1 3	3084.9132	6.5	50.0	2.611(6)	8.0(1)
7 0 7	6 1 6	3106.1928	2.3	24.5	6.24(5)	14.8(3)
4 2 3	4 1 4	3090.9088	7.9	51.0	2.815(8)	12.3(1)
5 1 5	4 0 4	3088.9966	3.7	30.1	4.935(10)	13.0(1)
6 2 4	5 2 3	3107.8507	1.4	48.2	2.83(1)	9.2(1)
5 2 4	5 1 5	3098.3938	0.1	34.2	3.96(3)	7.5(3)
6 1 5	5 1 4	3100.8483	3.3	56.6	1.861(7)	4.8(2)
14 2 12	14 1 13	3239.3405	4.9	10.1	10.4(1)	17.1(5)
5 4 2	6 3 3	3131.0564	0.9	86.4	1.01(1)	49.0(5)
7 6 1	6 6 0	3204.8479	0.1	72.0	1.162(9)	7.9(3)
7 6 2	6 6 1	3204.8479	0.1	72.0	1.162(9)	7.9(3)
13 2 11	12 3 10	3217.3748	4.8	59.1	1.95(2)	9.3(3)
7 5 2	6 5 1	3175.0256	7.9	30.6	4.89(5)	12.0(5)
7 0 7	6 0 6	3106.1937	3.9	30.6	4.89(5)	12.0(5)
25 10 16	26 9 17	3825.4979	3.9	30.6	4.89(5)	12.0(4)
7 5 3	6 5 2	3175.0256	7.9	30.6	4.89(5)	12.0(5)
6 1 6	5 0 5	3097.4593	0.6	16.1	6.34(2)	7.0(1)
7 4 4	6 4 3	3150.6319	4.4	38.9	3.67(6)	10.7(6)
7 4 3	6 4 2	3150.6321	1.4	38.9	3.67(6)	10.7(6)
7 2 6	6 2 5	3117.8068	3.4	44.3	2.57(1)	2.6(2)
7 3 5	6 3 4	3131.6158	0.1	52.2	3.49(6)	26.6(9)
15 2 13	15 1 14	3262.7948	1.3	25.9	5.74(3)	13.2(2)
7 2 5	6 2 4	3118.6604	6.7	55.5	2.495(7)	11.9(1)
7 1 6	6 1 5	3111.8092	2.2	40.0	3.67(1)	10.0(2)
8 7 2	7 7 1	3252.0664	3.1	76.1	0.981(3)	9.7(1)
8 7 1	7 7 0	3252.0664	3.1	76.1	0.981(3)	9.7(1)
7 1 7	6 0 6	3107.3107	2.4	22.3	5.52(4)	9.0(3)
2 2 0	1 1 1	3080.4195	1.8	47.9	3.24(1)	14.90(1)
8 6 2	7 6 1	3216.8790	0.1	60.1	2.29(3)	18.2(6)
8 6 3	7 6 2	3216.8790	0.1	60.1	2.29(3)	18.2(6)

8 5 4	7 5 3	3187.0666	8.3	44.0	3.65(3)	15.6(2)
8 5 3	7 5 2	3187.0666	1.3	44.0	3.65(3)	15.6(2)
10 3 7	10 2 8	3172.6652	0.1	24.0	5.73(3)	11.4(2)
12 1 11	12 0 12	3188.8586	4.7	39.3	3.50(1)	8.8(2)
8 4 5	7 4 4	3162.6906	0.2	34.8	4.14(1)	10.6(1)
24 10 15	25 9 16	3787.8667	6.2	34.8	4.14(1)	10.6(1)
8 4 4	7 4 3	3162.6914	0.2	34.8	4.14(1)	10.6(1)
8 2 7	7 2 6	3129.7183	1.2	52.1	2.47(2)	9.0(3)
9 2 8	9 1 9	3143.0875	2.7	27.1	5.28(3)	11.2(2)
8 3 5	7 3 4	3143.7709	3.6	54.6	2.51(1)	13.0(1)
7 5 3	8 4 4	3175.0278	2.9	79.9	1.070(3)	18.6(1)
9 3 6	9 2 7	3157.4330	6.5	15.6	7.40(7)	12.2(4)
9 8 1	8 8 0	3306.1006	3.5	79.6	1.034(7)	17.0(3)
9 8 2	8 8 1	3306.1006	3.5	79.6	1.034(7)	17.0(3)
14 2 12	13 3 11	3239.3406	3.1	50.9	2.50(9)	8.2(1)
8 2 6	7 2 5	3131.0872	2.1	40.1	3.24(2)	6.5(2)
8 1 7	7 1 6	3124.2879	0.4	48.7	2.41(1)	5.9(2)
3 2 2	2 1 1	3084.9133	0.6	43.1	2.87(1)	6.3(2)
11 1 10	10 2 9	3170.5794	0.6	27.7	5.057(8)	13.78(8)
9 1 9	8 1 8	3131.1478	2.9	46.2	2.70(3)	6.5(5)
8 3 5	8 2 6	3143.7710	5.7	27.6	4.63(4)	7.5(4)
13 1 12	13 1 13	3208.5047	2.2	41.8	3.27(1)	9.5(2)
9 5 5	8 5 4	3200.6182	4.7	39.4	3.63(2)	9.5(2)
9 5 4	8 5 3	3200.6182	1.7	39.4	3.63(2)	9.5(2)
6 3 3	6 2 4	3121.0911	7.4	39.5	3.72(2)	10.2(2)
13 1 12	13 0 13	3208.5040	6.2	31.2	4.70(3)	10.7(2)
9 3 7	8 3 6	3157.2078	3.5	33.8	4.83(4)	16.4(3)
5 3 2	5 2 3	3112.0473	6.2	34.7	4.21(1)	11.1(1)
10 0 10	9 1 9	3144.6412	6.4	5.5	10.61(6)	12.1(3)
9 1 9	8 0 8	3131.1477	0.3	16.4	6.26(10)	6.4(6)
23 10 14	24 9 15	3751.7584	6.2	54.5	3.14(3)	23.8(4)
4 3 1	4 2 2	3104.5216	5.2	54.5	3.14(3)	23.8(4)
20 4 16	20 3 17	3428.8476	7.4	24.9	5.40(3)	10.0(2)
10 2 9	11 1 11	3174.1521	4.8	21.7	7.09(5)	16.4(2)

6 3 4	6 2 5	3121.0727	5.8	27.6	5.33(3)	12.1(2)
4 2 3	3 1 2	3090.9094	4.9	39.7	3.95(2)	13.2(2)
10 8 3	9 8 2	3321.1135	6.9	39.7	3.95(2)	13.2(2)
10 8 2	9 8 1	3321.1135	6.9	39.7	3.95(2)	13.2(2)
7 3 5	7 2 6	3131.6158	0.0	34.6	4.45(2)	12.1(2)
8 3 6	8 2 7	3143.6685	6.5	20.6	6.41(5)	12.2(3)
10 1 10	9 1 9	3145.1184	2.8	32.1	4.16(2)	8.0(2)
9 1 8	8 1 7	3138.2612	0.1	35.3	3.96(1)	8.6(1)
9 3 7	9 2 8	3157.2068	6.1	36.3	4.06(2)	12.1(3)
19 4 15	19 3 16	3397.7844	2.2	32.7	4.26(3)	9.3(3)
10 0 10	9 0 9	3144.6414	5.4	31.0	4.07(2)	6.1(3)
10 6 4	9 6 3	3245.4674	8.9	43.1	3.26(3)	10.7(3)
10 6 5	9 6 4	3245.4674	6.9	43.1	3.26(3)	10.7(3)
12 1 11	11 2 10	3188.8588	2.2	35.0	3.86(4)	10.1(4)
12 2 11	12 1 12	3191.8195	6.5	43.0	3.10(5)	10.4(6)
10 1 10	9 0 9	3145.1181	5.1	5.9	10.38(8)	10.7(3)
18 4 14	18 3 15	3368.3956	0.1	20.8	6.92(6)	15.9(4)
10 5 5	9 5 4	3215.6832	4.6	15.4	9.51(8)	20.5(3)
15 2 13	14 3 12	3262.7945	6.6	15.4	9.51(7)	20.5(3)
10 5 6	9 5 5	3215.6831	4.6	15.4	9.51(8)	20.5(3)
10 2 9	9 2 8	3157.9034	0.3	45.9	3.349(7)	14.67(9)
14 1 13	14 0 14	3229.4697	0.7	46.9	3.11(1)	11.2(2)
10 3 7	9 3 6	3172.6654	1.2	50.6	2.547(9)	8.7(1)
17 4 13	17 3 14	3340.6663	6.2	15.7	9.47(5)	20.3(2)
11 0 11	10 0 10	3160.1026	6.7	26.2	8.07(3)	23.3(2)
13 2 12	13 1 13	3210.8690	3.9	33.7	4.54(2)	12.7(1)
11 1 11	10 0 10	3160.4490	3.3	10.9	7.99(6)	9.5(3)
16 4 12	16 3 13	3314.5604	0.1	12.7	7.17(7)	7.2(3)
11 6 6	10 6 5	3262.0277	6.9	41.7	3.63(2)	14.5(3)
11 6 5	10 6 4	3262.0277	6.9	41.7	3.63(2)	14.5(3)
6 2 5	5 1 4	3107.3622	0.4	45.8	2.84(4)	6.9(4)
10 2 9	10 2 9	3174.1529	3.8	33.6	4.39(2)	11.4(2)
11 5 6	10 5 5	3232.2677	4.6	31.2	4.74(3)	11.6(2)
11 5 7	10 5 6	3232.2674	4.6	31.2	4.74(3)	11.6(2)

11 4 7	10 4 6	3208.0165	0.1	53.3	2.87(1)	15.1(2)
13 1 12	12 2 11	3208.5042	2.2	17.8	7.91(3)	18.9(2)
15 4 11	15 3 12	3290.0913	1.9	28.7	5.43(1)	15.2(1)
11 1 11	11 1 11	3177.1342	2.3	29.4	4.28(2)	7.8(2)
11 3 8	10 3 7	3189.4842	2.8	39.6	3.17(2)	7.2(4)
12 8 4	11 8 3	3355.6525	0.1	61.1	1.91(2)	10.2(4)
12 8 5	11 8 4	3355.6525	0.1	61.1	1.91(2)	10.2(4)
12 0 12	11 0 11	3176.8909	5.8	30.3	4.642(9)	11.9(1)
5 2 3	4 1 4	3098.6429	3.5	56.1	2.56(5)	16.1(9)
11 1 10	10 1 9	3170.5793	0.1	32.5	3.98(4)	6.7(3)
11 1 11	11 0 11	3177.1337	4.1	3.0	18.27(9)	32.0(2)
7 2 6	6 1 5	3117.8066	0.2	28.9	5.02(3)	11.2(2)
16 2 14	15 3 13	3287.7892	0.1	48.7	2.734(7)	9.7(1)
14 4 10	14 3 11	3267.2167	7.4	15.2	8.91(9)	18.2(4)
11 2 9	10 2 8	3178.0776	5.6	33.7	8.02(8)	36.3(5)
13 9 5	12 9 3	3420.6798	4.5	76.8	1.071(3)	10.6(1)
13 9 5	12 9 4	3420.6798	4.5	76.8	1.071(3)	10.6(1)
12 6 7	11 6 6	3280.0993	2.9	43.1	3.398(8)	10.66(7)
12 6 6	11 6 5	3280.0993	1.9	43.1	3.398(8)	10.66(7)
12 2 11	11 2 10	3191.8195	3.4	44.0	3.07(2)	7.8(3)
13 4 9	13 3 10	3245.9230	6.4	28.4	4.90(4)	12.1(3)
12 5 7	11 5 6	3250.3713	5.5	30.0	5.08(3)	12.7(2)
12 5 8	11 5 7	3250.3706	4.5	30.0	5.08(3)	12.7(2)
12 4 9	11 4 8	3226.1278	1.4	53.1	2.333(5)	9.6(8)
8 2 7	7 1 6	3129.7184	1.8	38.4	3.42(1)	7.7(2)
15 2 14	15 1 15	3253.4949	0.1	41.5	2.98(2)	6.3(2)
12 4 8	12 3 9	3226.1936	2.1	18.3	6.06(2)	9.90(2)
13 0 13	12 0 12	3194.9992	2.2	42.8	3.04(2)	6.7(2)
13 8 5	12 8 4	3375.1768	5.1	56.8	2.67(2)	18.5(2)
13 8 6	12 8 5	3375.1768	5.1	56.8	2.67(2)	18.5(2)
12 3 9	11 3 8	3207.9127	2.3	46.1	2.56(2)	4.0(3)
12 1 11	11 1 10	3188.8587	3.3	46.1	2.56(2)	4.0(3)
12 3 10	11 3 9	3207.3571	2.3	46.1	2.56(2)	4.0(3)
10 4 6	10 3 7	3191.3665	6.7	24.6	5.45(3)	10.7(2)

9 4 5	9 3 6	3176.2715	4.5	33.5	4.10(5)	8.9(5)
14 4 11	14 3 12	3267.0048	5.5	28.5	4.83(7)	1.1(5)
6 6 1	7 5 2	3194.3250	6.7	39.1	5.36(5)	21.7(4)
5 4 2	5 3 3	3131.0550	5.7	39.1	5.36(5)	21.7(4)
5 4 1	5 3 2	3131.0606	6.7	39.1	5.36(5)	21.7(4)
4 4 0	4 3 1	3123.5347	6.9	51.3	2.42(3)	6.2(4)
4 4 1	4 3 2	3123.5333	6.9	51.3	2.42(3)	6.2(4)
15 4 12	15 3 13	3289.7369	6.5	19.8	6.64(5)	12.3(3)
16 2 15	16 1 16	3276.7221	4.8	52.7	3.06(5)	19.0(7)
14 1 14	13 1 13	3214.5513	3.1	29.8	4.24(3)	5.6(3)
14 0 14	13 0 13	3214.4335	5.1	28.4	5.05(2)	11.8(2)
13 1 12	12 1 11	3208.5040	5.1	33.0	4.75(2)	16.2(3)
14 8 6	13 8 5	3396.2059	5.2	57.0	2.454(7)	13.0(1)
14 8 7	13 8 6	3396.2059	5.2	57.0	2.454(7)	13.0(1)
4 3 1	3 2 2	3104.5213	4.1	37.6	4.35(2)	15.3(2)
18 4 15	18 3 16	3367.1271	6.7	52.0	2.66(1)	10.3(2)
19 4 16	19 3 17	3395.9153	8.3	28.8	5.12(3)	12.1(2)
15 14 2	14 14 1	3776.5290	5.7	29.1	5.06(3)	12.7(2)
15 14 1	14 14 0	3776.5290	4.7	29.1	5.06(3)	12.7(2)
15 9 6	14 9 5	3464.2314	5.9	73.0	1.379(5)	12.5(1)
15 9 7	14 9 6	3464.2314	5.9	73.0	1.379(5)	12.5(1)
17 2 16	17 1 17	3301.3572	4.1	45.8	2.99(1)	9.5(2)
19 10 10	20 9 11	3622.5801	1.4	44.4	3.08(1)	8.7(1)
13 2 11	12 2 10	3217.3748	4.4	44.4	3.08(1)	8.7(1)
10 2 9	10 1 9	3174.1528	7.9	19.5	6.37(5)	11.2(3)
15 0 15	14 1 14	3235.1960	4.1	8.8	8.9(1)	9.9(5)
14 2 13	13 2 12	3231.7289	0.4	46.0	3.05(7)	9.58(9)
15 0 15	14 0 14	3235.1963	0.4	46.0	3.052(7)	9.58(9)
14 4 10	13 4 9	3267.2170	0.0	42.8	3.23(1)	9.1(2)
15 8 8	14 8 7	3418.7409	1.5	56.6	2.16(1)	8.9(2)
15 8 7	14 8 6	3418.7409	1.5	56.6	2.16(1)	8.9(2)
5 3 3	4 2 2	3112.0411	1.3	34.6	4.31(2)	10.9(1)
8 7 2	9 6 3	3252.0673	4.3	34.6	4.31(2)	10.9(2)
12 2 11	11 1 10	3191.8195	5.6	29.9	4.86(3)	10.8(2)

16 15 2	15 15 1	3878.7328	5.2	28.9	5.19(3)	12.7(2)
5 3 2	4 2 3	3112.0472	0.2	28.9	5.19(3)	12.7(2)
16 15 1	15 15 0	3878.7328	5.2	28.9	5.19(3)	12.7(2)
7 2 5	6 1 6	3118.6605	0.0	60.4	2.019(6)	10.1(1)
18 2 17	18 1 18	3327.3680	6.1	55.4	2.89(2)	17.5(3)
16 14 2	15 14 1	3800.5513	5.2	61.7	2.190(7)	14.4(1)
16 14 3	15 14 2	3800.5513	5.2	61.7	2.190(7)	14.4(1)
15 2 14	14 2 13	3253.4949	5.5	37.7	3.79(3)	10.4(3)
16 1 16	15 1 15	3257.3417	1.2	32.7	3.76(1)	5.0(1)
13 2 12	12 1 11	3210.8690	1.9	19.4	5.93(5)	8.5(3)
15 4 12	14 4 11	3289.7370	1.6	44.4	3.12(2)	8.0(2)
6 3 4	5 2 3	3121.0728	4.3	28.7	5.27(3)	12.3(2)
15 4 11	14 4 10	3290.0913	2.7	56.3	2.094(8)	6.9(1)
17 15 2	16 15 1	3904.2350	1.2	69.9	1.55(2)	14.7(4)
17 15 3	16 15 2	3904.2350	1.2	69.9	1.55(2)	14.7(4)
14 2 13	13 1 12	3231.4389	4.9	40.8	3.45(2)	9.0(2)
14 2 13	13 1 12	3231.4894	6.1	26.6	5.56(4)	12.6(3)
17 9 9	16 9 8	3513.7054	5.4	75.1	1.24(1)	16.8(4)
17 9 8	16 9 7	3513.7054	5.4	75.1	1.24(1)	16.8(4)
17 14 4	16 14 3	3826.0746	5.9	25.3	5.36(4)	10.4(3)
17 14 3	16 14 2	3826.0746	5.9	25.3	5.36(4)	10.4(3)
15 2 13	14 2 12	3262.7951	3.6	39.2	4.04(2)	13.0(2)
15 2 14	14 1 13	3253.4947	5.1	16.9	7.96(7)	16.7(3)
8 2 6	7 1 7	3131.0876	3.4	53.5	2.48(2)	12.0(4)
16 4 13	15 4 12	3313.9958	1.2	50.9	2.95(1)	14.8(2)
20 2 19	20 1 20	3383.4692	6.1	66.9	1.67(4)	13.3(1)
12 5 8	12 4 9	3250.3700	6.6	22.7	5.92(2)	11.8(2)
11 5 6	11 4 7	3232.2679	1.3	25.1	6.04(6)	14.4(4)
11 5 7	11 4 8	3232.2672	0.1	36.3	3.86(2)	10.1(2)
18 15 4	17 15 3	3931.2380	4.1	37.6	2.76(2)	0.7(5)
10 5 5	10 4 6	3215.6847	2.1	37.6	2.76(2)	0.7(2)
18 15 3	17 15 2	3931.2380	2.1	37.6	2.76(2)	0.7(5)
10 5 6	10 4 7	3215.6853	6.5	10.0	9.03(4)	13.3(1)
8 5 4	8 4 5	3187.0649	5.1	13.6	9.81(6)	19.3(3)

8 5 3	8 4 4	3187.0672	6.1	13.6	9.81(6)	19.3(3)
7 5 2	7 4 3	3175.0272	5.8	22.4	6.30(4)	12.9(3)
7 5 3	7 4 4	3175.0264	5.8	22.4	6.30(4)	12.9(3)
6 5 2	6 4 3	3164.4969	5.5	32.0	4.68(2)	12.8(2)
6 5 1	6 4 2	3164.4971	0.5	32.0	4.68(2)	12.8(2)
5 5 0	5 4 1	3155.4749	5.2	53.0	2.13(2)	3.7(3)
5 5 1	5 4 2	3155.4748	2.2	53.0	2.13(2)	3.7(3)
7 3 4	6 2 5	3131.6617	3.7	28.9	9.6(1)	43.7(4)
18 14 4	17 14 3	3853.0859	3.8	81.3	0.86(1)	9.8(4)
18 14 5	17 14 4	3853.0859	3.8	81.3	0.86(1)	9.8(4)
16 2 15	15 1 14	3276.7221	9.9	26.7	5.46(2)	13.0(1)
16 2 14	15 2 13	3287.7892	3.1	42.4	3.24(2)	8.1(2)
20 11 10	21 10 11	3710.7137	4.4	63.7	1.69(2)	7.0(4)
21 2 20	21 1 21	3413.5460	1.6	57.0	1.57(5)	4.8(6)
16 10 7	17 9 8	3541.6811	0.0	47.3	2.73(1)	7.6(1)
17 4 14	16 4 13	3339.7786	0.0	47.3	2.73(1)	7.6(1)
17 2 16	16 1 15	3301.3570	4.7	14.7	8.05(7)	14.1(4)
19 15 5	18 15 4	3959.7495	4.7	14.7	8.05(7)	14.1(4)
19 15 4	18 15 3	3959.7495	4.7	14.7	8.05(7)	14.1(4)
19 0 19	18 0 18	3331.5590	4.1	44.8	2.51(3)	4.2(3)
25 13 13	26 12 14	4011.4162	4.1	44.8	2.51(3)	4.2(3)
19 14 6	18 14 5	3881.6026	0.7	47.7	2.91(1)	15.0(2)
19 14 5	18 14 4	3881.6026	4.7	47.7	2.91(1)	15.0(2)
8 3 5	7 2 6	3143.7709	0.1	41.1	3.47(1)	9.1(2)
18 2 17	17 1 16	3327.3680	4.1	27.8	5.07(7)	11.2(5)
18 4 14	17 4 13	3368.3957	5.1	50.1	2.77(2)	10.1(2)
24 13 12	25 12 13	3973.8779	6.1	50.1	2.77(2)	10.1(2)
9 3 6	8 2 7	3157.4334	3.8	25.0	5.61(4)	11.3(3)
20 2 19	19 2 18	3383.4692	3.4	58.9	1.998(9)	7.4(1)
19 4 16	18 4 15	3395.9153	0.3	52.6	2.250(3)	6.49(5)
20 2 19	19 1 18	3383.4687	6.2	26.5	6.33(2)	20.7(1)
19 4 15	18 4 14	3397.7846	1.5	62.8	1.769(9)	8.9(2)
21 13 8	20 13 7	3870.2616	1.3	75.1	1.078(7)	12.0(2)
21 13 9	20 13 8	3870.2616	2.3	75.1	1.078(7)	12.0(2)

9 9 1	10 8 2	3351.5454	0.1	69.0	1.285(8)	7.0(2)
12 6 7	12 5 8	3280.0980	0.1	14.7	9.1(1)	18.2(5)
12 6 6	12 5 7	3280.0998	0.1	14.7	9.1(1)	18.2(5)
11 6 5	11 5 6	3262.0279	4.8	13.9	9.7(1)	20.7(5)
11 6 6	11 5 7	3262.0271	4.8	13.9	9.7(1)	20.7(5)
10 6 4	10 5 5	3245.4670	5.8	16.5	7.21(8)	11.9(5)
10 6 5	10 5 6	3245.4668	5.8	16.5	7.21(8)	11.9(4)
9 6 4	9 5 5	3230.4179	0.7	19.8	7.19(9)	15.6(5)
9 6 3	9 5 4	3230.4180	0.7	19.8	7.19(9)	15.6(5)
10 3 7	9 2 8	3172.6662	0.2	29.3	5.32(3)	14.0(2)
21 2 20	20 2 19	3413.5471	5.9	48.6	2.74(3)	10.2(4)
10 2 8	9 1 9	3160.8044	1.1	69.0	1.34(9)	8.6(3)
21 2 20	20 1 19	3413.5468	0.1	21.5	5.69(3)	8.9(2)
8 4 5	7 3 4	3162.6894	3.7	34.0	4.69(2)	13.3(2)
8 4 4	7 3 5	3162.6922	3.6	22.6	6.47(6)	16.6(4)
9 4 5	8 3 6	3176.2716	0.2	35.5	4.38(2)	12.5(2)
24 14 11	23 14 10	4046.7175	3.1	66.8	1.66(3)	14.0(7)
24 14 10	23 14 9	4046.7175	4.1	66.8	1.66(3)	14.0(7)
24 13 11	23 13 10	3973.8779	1.3	65.4	2.53(1)	25.1(2)
24 13 12	23 13 11	3973.8779	4.3	65.4	2.53(1)	25.1(2)
10 4 7	9 3 6	3191.3522	1.2	40.3	3.51(1)	9.7(2)
10 4 6	9 3 7	3191.3658	5.8	23.4	7.36(6)	19.6(3)
24 12 13	23 12 12	3907.1557	0.1	62.8	1.747(4)	8.89(8)
24 12 12	23 12 11	3907.1557	0.1	62.8	1.747(4)	8.89(8)
8 7 1	8 6 2	3252.0660	6.4	42.8	3.64(2)	12.1(2)
8 7 2	8 6 3	3252.0660	6.4	42.8	3.64(2)	12.1(2)
11 4 8	10 3 7	3207.9821	5.1	24.7	5.64(3)	11.7(2)
11 4 7	10 3 8	3208.0159	4.5	37.2	5.15(5)	22.2(4)
27 1 27	26 0 26	3588.2967	3.7	10.8	10.4(1)	17.7(5)
27 0 27	26 0 26	3588.2967	3.7	10.8	10.4(1)	17.7(5)
27 0 27	26 1 26	3588.2976	3.7	10.8	10.4(1)	17.7(5)
27 1 27	26 1 26	3588.2976	3.7	10.8	10.4(1)	17.7(5)
12 2 10	11 1 11	3196.9267	2.8	38.8	3.43(2)	9.9(2)
12 4 9	11 3 8	3226.1273	2.8	38.8	3.43(2)	9.9(2)

13 4 10	12 3 9	3245.8012	6.9	28.6	5.14(5)	12.7(4)
29 1 29	28 1 28	3665.8185	5.1	39.9	3.65(2)	11.8(2)
29 0 29	28 1 28	3665.8185	5.1	39.9	3.65(2)	11.8(2)
29 1 29	28 0 28	3665.8181	5.1	39.9	3.65(2)	11.8(2)
29 0 29	28 0 28	3665.8181	5.1	39.9	3.65(2)	11.8(2)
14 4 11	13 3 10	3267.0049	2.9	40.3	1.28(3)	9.3(1)
16 8 9	16 7 10	3442.7823	0.7	32.9	5.41(3)	17.6(2)
16 8 8	16 7 9	3442.7823	0.7	32.9	5.41(3)	17.6(2)
14 8 6	14 7 7	3396.2060	7.4	30.9	4.81(3)	11.3(3)
14 8 7	14 7 8	3396.2060	7.4	30.9	4.81(3)	11.3(3)
13 8 5	13 7 6	3375.1770	6.6	30.9	4.93(3)	12.7(2)
13 8 6	13 7 7	3375.1770	6.6	30.9	4.93(3)	12.7(2)
12 8 4	12 7 5	3355.6524	4.3	33.1	4.04(3)	7.8(2)
12 8 5	12 7 6	3355.6524	4.3	33.1	4.04(3)	7.8(2)
11 8 3	11 7 4	3337.6319	5.5	37.3	4.26(2)	14.2(2)
11 8 4	11 7 5	3337.6319	6.5	37.3	4.26(2)	14.2(2)
10 8 3	10 7 4	3321.1157	5.6	17.8	7.03(4)	12.3(2)
10 8 2	10 7 3	3321.1157	6.6	17.8	7.03(4)	12.3(2)
15 4 12	14 3 11	3289.7369	4.5	35.8	4.24(8)	10.9(7)
9 8 1	9 7 2	3306.1023	6.1	48.0	4.06(1)	22.0(1)
9 8 2	9 7 3	3306.1023	5.1	48.0	4.06(1)	22.0(1)
8 8 1	8 7 2	3292.5917	0.1	71.4	1.360(5)	8.6(1)
8 8 0	8 7 1	3292.5917	0.1	71.4	1.360(5)	8.6(1)
14 4 10	13 3 11	3267.2170	1.5	34.8	4.36(2)	12.56(2)
16 4 13	15 3 12	3313.9965	0.1	50.9	2.819(7)	11.2(1)
11 5 7	10 4 6	3232.2666	5.4	29.6	6.39(4)	21.1(2)
11 5 6	10 4 7	3232.2679	1.3	21.8	6.09(5)	10.8(3)
31 0 31	30 1 30	3748.6575	4.1	50.1	3.54(4)	20.0(4)
31 1 31	30 0 30	3748.6573	4.1	50.1	3.54(4)	20.0(4)
31 1 31	30 0 30	3748.6787	5.9	50.3	3.14(7)	17.6(9)
31 0 31	30 1 30	3748.6788	5.9	50.3	3.14(7)	17.6(9)
17 4 14	16 3 13	3339.7785	0.0	43.6	3.23(1)	9.0(1)
18 4 15	17 3 14	3367.1270	3.8	68.8	1.549(6)	10.9(2)
15 4 11	14 3 12	3290.0909	1.5	50.2	2.4(1)	9.0(1)

12 5 7	11 4 8	3250.3718	3.1	37.0	3.49(2)	6.3(2)
19 4 16	18 3 15	3395.9153	3.5	49.7	2.59(2)	8.0(3)
20 4 17	19 3 16	3426.2353	2.6	63.1	1.721(7)	7.3(1)
16 9 8	16 8 9	3488.2300	4.1	54.4	2.35(1)	8.9(2)
16 9 7	16 8 8	3488.2300	4.1	54.4	2.35(1)	8.9(2)
16 4 12	15 3 13	3314.5604	3.3	46.1	3.05(1)	8.9(2)
15 9 6	15 8 7	3464.2314	1.5	53.7	2.631(7)	11.48(9)
15 9 7	15 8 8	3464.2314	1.5	53.7	2.631(7)	11.48(9)
14 9 5	14 8 6	3441.7127	1.9	55.5	2.315(5)	9.52(7)
14 9 6	14 8 7	3441.7127	2.9	55.5	2.315(5)	9.52(7)
13 9 5	13 8 5	3420.6800	0.1	59.7	2.027(8)	9.2(1)
13 9 5	13 8 6	3420.6800	0.1	59.7	2.027(8)	9.2(1)
12 9 4	12 8 5	3401.1401	6.6	61.5	3.16(2)	29.0(3)
12 9 3	12 8 4	3401.1401	6.6	61.5	3.16(2)	29.0(3)
11 9 3	11 8 4	3383.1028	1.1	71.6	1.234(3)	7.27(8)
11 9 2	11 8 3	3383.1028	2.1	71.6	1.234(3)	7.27(8)
10 9 1	10 8 2	3366.5709	5.6	55.9	2.684(7)	14.4(1)
10 9 2	10 8 3	3366.5709	5.6	55.9	2.684(7)	14.4(1)
36 0 36	35 1 35	3979.1064	1.5	69.8	1.484(3)	11.13(9)
36 1 36	35 1 35	3979.1064	1.5	69.8	1.484(3)	11.13(9)
36 1 36	35 0 35	3979.1063	0.5	69.8	1.484(3)	11.13(9)
36 0 36	35 0 35	3979.1063	0.5	69.8	1.484(3)	11.13(9)
12 6 6	11 5 7	3280.0988	0.1	10.7	11.5(2)	21.3(6)
12 6 7	11 5 6	3280.0996	0.1	10.7	11.5(2)	21.3(6)
18 4 14	17 3 15	3368.3958	2.2	57.2	2.41(1)	10.9(2)
22 10 13	22 9 14	3717.1805	5.1	73.5	1.64(1)	19.6(2)
22 10 12	22 9 13	3717.1805	6.1	73.5	1.64(1)	19.6(2)
21 10 12	21 9 13	3684.1608	4.8	68.5	1.655(6)	12.4(1)
21 10 11	21 9 12	3684.1608	5.8	68.5	1.655(6)	12.4(1)
19 4 15	18 3 16	3397.7845	5.2	71.4	1.342(7)	10.2(2)
18 10 9	18 9 10	3594.0821	6.6	63.5	2.49(2)	20.8(3)
18 10 8	18 9 9	3594.0821	6.6	63.5	2.49(2)	20.8(3)
17 10 8	17 9 9	3567.1011	5.2	61.1	1.958(8)	9.4(1)
17 10 7	17 9 8	3567.1011	2.2	61.1	1.958(8)	9.4(1)

16 10 6	16 9 7	3541.6428	8.3	35.6	4.43(3)	12.7(2)
16 10 7	16 9 8	3541.6428	1.3	35.6	4.43(3)	12.7(2)
14 10 5	14 9 6	3495.2887	2.1	66.8	1.686(2)	10.50(5)
14 10 4	14 9 5	3495.2887	2.1	66.8	1.686(2)	10.50(5)
13 10 3	13 9 4	3474.4043	1.8	70.1	1.416(2)	9.69(4)
13 10 4	13 9 5	3474.4043	1.8	70.1	1.416(2)	9.69(4)
12 10 2	12 9 3	3455.0442	6.7	74.9	1.317(9)	17.1(3)
12 10 3	12 9 4	3455.0442	2.7	74.9	1.317(9)	17.1(3)
20 4 16	19 3 17	3428.8478	0.1	66.5	1.695(4)	10.51(9)
9 9 1	8 8 0	3351.5449	4.1	30.5	5.12(3)	12.8(2)
9 9 0	8 8 1	3352.3159	4.1	30.2	4.92(3)	11.7(2)
13 8 6	12 7 5	3375.1768	8.9	12.1	9.2(1)	15.8(6)
13 8 5	12 7 6	3375.1768	5.9	12.1	9.2(1)	15.8(6)
10 9 1	9 8 2	3366.5700	2.2	32.0	4.82(3)	12.1(2)
10 9 2	9 8 1	3366.5700	6.2	32.0	4.82(3)	12.1(2)
14 8 6	13 7 7	3396.2059	2.8	15.6	8.6(1)	16.9(5)
14 8 7	13 7 6	3396.2059	2.8	15.6	8.6(1)	16.9(5)
23 12 12	23 11 13	3871.0920	4.1	30.8	5.86(4)	20.1(3)
23 12 11	23 11 12	3871.0920	4.1	30.8	5.86(4)	20.1(3)
11 9 3	10 8 2	3383.1024	5.1	30.8	5.86(4)	20.1(3)
11 9 2	10 8 3	3383.1024	6.1	30.8	5.86(4)	20.1(3)
18 12 6	18 11 7	3713.3385	6.7	78.6	0.976(4)	11.6(2)
18 12 7	18 11 8	3713.3385	6.7	78.6	0.976(4)	11.6(2)
13 12 1	13 11 2	3593.2039	6.4	37.9	4.21(2)	13.2(2)
13 12 2	13 11 3	3593.2039	5.4	37.9	4.21(2)	13.2(2)
15 8 8	14 7 7	3418.7406	0.1	19.6	7.17(7)	14.6(3)
15 8 7	14 7 8	3418.7406	0.1	19.6	7.17(7)	14.6(3)
12 9 4	11 8 3	3401.1408	0.7	31.5	4.54(3)	10.0(2)
12 9 3	11 8 4	3401.1408	4.7	31.5	4.54(3)	10.0(2)
16 8 9	15 7 8	3442.7825	0.1	26.1	6.62(4)	17.5(3)
16 8 8	15 7 9	3442.7825	0.1	26.1	6.62(4)	17.5(3)
13 9 5	12 8 5	3420.6798	5.2	31.5	4.80(3)	11.8(2)
13 9 5	12 8 4	3420.6798	5.2	31.5	4.80(3)	11.8(2)
23 13 10	23 12 11	3937.8328	3.6	28.1	5.67(3)	14.1(2)

14 9 6	13 8 5	3441.7124	5.6	28.1	5.67(3)	14.1(2)
23 13 11	23 12 12	3937.8328	3.6	28.1	5.67(3)	14.1(2)
14 9 5	13 8 6	3441.7124	3.6	28.1	5.67(3)	14.1(2)
18 13 5	18 12 6	3780.1919	6.9	72.3	1.062(6)	4.3(2)
18 13 6	18 12 7	3780.1919	5.9	72.3	1.062(6)	4.3(2)
15 9 7	14 8 6	3464.2313	4.4	34.9	4.48(2)	11.9(2)
15 9 6	14 8 7	3464.2313	4.4	34.9	4.48(2)	11.9(2)
10 10 0	9 9 1	3420.8962	3.4	27.8	5.72(4)	13.8(3)
10 10 1	9 9 0	3420.8962	6.4	27.8	5.72(4)	13.8(3)
16 9 8	15 8 7	3488.2300	0.1	39.2	4.00(2)	12.2(2)
16 9 7	15 8 8	3488.2300	0.1	39.2	4.00(2)	12.2(2)
11 10 1	10 9 2	3437.2082	6.9	32.4	4.99(3)	13.4(2)
11 10 2	10 9 1	3437.2082	8.9	32.4	4.99(3)	13.4(2)
12 10 3	11 9 2	3455.0439	5.9	28.1	5.31(4)	12.2(3)
12 10 2	11 9 3	3455.0439	8.9	28.1	5.31(4)	12.2(3)
13 10 4	12 9 3	3474.4042	0.5	32.4	4.91(3)	12.6(2)
13 10 3	12 9 4	3474.4042	0.5	32.4	4.91(3)	12.6(2)
14 10 5	13 9 4	3495.2886	1.3	33.8	4.75(6)	12.5(4)
14 10 4	13 9 5	3495.2886	4.3	33.8	4.75(6)	12.5(4)
11 11 0	10 10 1	3493.5851	6.1	24.9	6.20(6)	14.2(4)
11 11 1	10 10 0	3493.5851	6.1	24.9	6.20(6)	14.2(4)
15 10 5	14 9 6	3517.7017	0.1	38.0	4.18(2)	11.9(2)
15 10 6	14 9 5	3517.7017	0.1	38.0	4.18(2)	11.9(2)
12 11 2	11 10 1	3511.6577	3.8	34.9	4.15(3)	9.5(2)
12 11 1	11 10 2	3511.6577	2.7	34.9	4.15(3)	9.5(2)
16 10 7	15 9 6	3541.6423	5.5	35.6	4.53(2)	12.7(2)
16 10 6	15 9 7	3541.6423	2.5	35.6	4.53(2)	12.7(2)
13 11 2	12 10 3	3531.4198	3.7	74.8	1.20(2)	7.8(6)
13 11 3	12 10 2	3531.4198	3.7	74.8	1.20(2)	7.8(6)
17 10 7	16 9 8	3567.1010	4.1	39.3	3.98(2)	11.1(2)
17 10 8	16 9 7	3567.1010	5.1	39.3	3.98(2)	11.1(2)
18 10 8	17 9 9	3594.0825	5.6	49.7	4.19(3)	23.2(3)
18 10 9	17 9 8	3594.0825	4.6	49.7	4.19(3)	23.2(3)
14 11 3	13 10 4	3552.5088	0.1	68.1	1.638(3)	10.97(7)

14 11 4	13 10 3	3552.5088	0.1	68.1	1.638(3)	10.97(7)
19 10 10	18 9 9	3622.5812	6.5	54.1	4.19(3)	28.4(3)
19 10 9	18 9 10	3622.5812	5.5	54.1	4.19(3)	28.4(3)
15 11 5	14 10 4	3575.1081	5.9	66.2	1.774(6)	10.2(1)
15 11 4	14 10 5	3575.1081	5.9	66.2	1.774(6)	10.2(1)
12 12 0	11 11 1	3573.6871	8.9	38.0	4.22(3)	15.6(3)
12 12 1	11 11 0	3573.6871	5.9	38.0	4.22(3)	15.6(3)
20 10 11	19 9 10	3652.6088	5.6	52.9	2.86(1)	13.1(2)
20 10 10	19 9 11	3652.6088	4.6	52.9	2.86(1)	13.1(2)
16 11 5	15 10 6	3599.2159	2.1	66.7	1.646(4)	8.48(9)
16 11 6	15 10 5	3599.2159	2.1	66.7	1.646(4)	8.48(9)
13 12 1	12 11 2	3593.2046	5.7	39.7	3.95(2)	11.6(2)
13 12 2	12 11 1	3593.2046	4.7	39.7	3.95(2)	11.6(2)
21 10 11	20 9 12	3684.1608	1.2	59.4	2.446(6)	14.06(9)
21 10 12	20 9 11	3684.1608	1.2	59.4	2.446(6)	14.06(9)
17 11 7	16 10 6	3624.8306	1.5	68.7	1.569(8)	9.9(2)
17 11 6	16 10 7	3624.8306	1.5	68.7	1.569(8)	9.9(2)
14 12 2	13 11 3	3614.2246	5.7	45.2	3.330(9)	11.7(1)
14 12 3	13 11 2	3614.2246	5.7	45.2	3.330(9)	11.7(1)
22 10 12	21 9 13	3717.1803	4.1	66.1	2.251(6)	19.8(1)
22 10 13	21 9 12	3717.1803	5.1	66.1	2.251(6)	19.8(1)
15 12 3	14 11 4	3636.7477	0.1	50.2	2.725(6)	9.1(9)
15 12 4	14 11 3	3636.7477	0.1	50.2	2.725(6)	9.1(9)
18 11 8	17 10 7	3651.9516	0.3	72.2	1.047(9)	2.5(3)
18 11 7	17 10 8	3651.9516	2.3	72.2	1.047(9)	2.5(3)
23 10 14	22 9 13	3751.7690	4.5	70.2	2.37(2)	26.4(3)
23 10 13	22 9 14	3751.7690	4.5	70.2	2.37(2)	26.4(3)
16 12 5	15 11 4	3660.7742	1.2	53.9	2.484(6)	10.21(9)
16 12 4	15 11 5	3660.7742	1.2	53.9	2.484(6)	10.21(9)
24 10 15	23 9 14	3787.8743	0.2	74.8	2.32(4)	33.1(6)
24 10 14	23 9 15	3787.8743	0.2	74.8	2.32(4)	33.1(6)
17 12 5	16 11 6	3686.3043	4.6	58.3	2.314(7)	10.7(1)
17 12 6	16 11 5	3686.3043	4.6	58.3	2.314(7)	10.7(1)
14 13 2	13 12 1	3681.1420	4.8	40.5	4.05(2)	13.0(2)

14 13 1	13 12 2	3681.1420	4.8	40.5	4.05(2)	13.0(2)
20 11 10	19 10 9	3710.7129	3.1	78.3	1.058(5)	10.2(2)
20 11 9	19 10 10	3710.7129	3.1	78.3	1.058(5)	10.2(2)
18 12 6	17 11 7	3713.3386	2.1	61.8	2.051(4)	11.58(8)
18 12 7	17 11 6	3713.3386	2.1	61.8	2.051(4)	11.58(8)
15 13 3	14 12 2	3703.6505	2.2	44.8	3.56(2)	12.5(2)
15 13 2	14 12 3	3703.6505	5.2	44.8	3.56(2)	12.5(2)
21 11 10	20 10 11	3742.3531	0.3	81.4	0.873(1)	8.98(5)
21 11 11	20 10 10	3742.3531	0.3	81.4	0.873(1)	8.98(5)
19 12 8	18 11 7	3741.8773	0.8	63.9	1.931(4)	11.36(7)
19 12 7	18 11 8	3741.8773	0.8	63.9	1.931(4)	11.36(7)
22 11 11	21 10 12	3775.4997	1.7	81.6	1.109(2)	18.26(8)
22 11 12	21 10 11	3775.4997	1.7	81.6	1.109(2)	18.26(7)
20 12 8	19 11 9	3771.9209	1.4	69.7	1.552(3)	10.24(7)
20 12 9	19 11 8	3771.9209	0.4	69.7	1.552(3)	10.24(7)
17 13 5	16 12 4	3753.1750	0.1	52.2	2.819(9)	11.4(1)
17 13 4	16 12 5	3753.1750	0.1	52.2	2.819(9)	11.4(1)
14 14 1	13 13 0	3754.0280	1.3	47.6	3.22(1)	11.4(1)
14 14 0	13 13 1	3754.0280	1.3	47.6	3.22(1)	11.4(1)
21 12 10	20 11 9	3803.4699	1.9	73.1	1.260(3)	8.18(9)
21 12 9	20 11 10	3803.4699	1.9	73.1	1.260(3)	8.18(9)
18 13 5	17 12 6	3780.1915	2.5	55.3	2.58(1)	11.3(1)
18 13 6	17 12 5	3780.1915	5.5	55.3	2.58(1)	11.3(1)
15 14 2	14 13 1	3776.5377	1.3	50.8	2.83(1)	10.2(2)
15 14 1	14 13 2	3776.5377	1.3	50.8	2.83(1)	10.2(2)
22 12 11	21 11 10	3836.5248	2.1	76.0	1.200(3)	10.74(8)
22 12 10	21 11 11	3836.5248	1.1	76.0	1.200(3)	10.74(8)
19 13 7	18 12 6	3808.7113	4.8	57.2	2.46(1)	11.6(1)
19 13 6	18 12 7	3808.7113	4.8	57.2	2.46(1)	11.6(1)
16 14 2	15 13 3	3800.5489	1.7	53.9	2.646(4)	11.62(6)
16 14 3	15 13 2	3800.5489	1.7	53.9	2.646(4)	11.62(6)
23 12 11	22 11 12	3871.0862	1.7	78.8	1.030(1)	9.79(4)
23 12 12	22 11 11	3871.0862	1.7	78.8	1.030(1)	9.79(4)
20 13 8	19 12 7	3838.7349	3.9	64.0	1.878(7)	9.6(1)

20 13 7	19 12 8	3838.7349	3.9	64.0	1.878(7)	9.6(1)
17 14 3	16 13 4	3826.0617	2.8	58.1	2.330(8)	10.6(1)
17 14 4	16 13 3	3826.0617	3.8	58.1	2.330(8)	10.6(1)
21 13 8	20 12 9	3870.2625	1.3	68.0	1.674(5)	10.6(1)
21 13 9	20 12 8	3870.2625	1.3	68.0	1.674(5)	10.6(1)
18 14 4	17 13 5	3853.0765	7.9	61.8	2.063(8)	10.6(1)
18 14 5	17 13 4	3853.0765	6.9	61.8	2.063(8)	10.6(1)
22 13 10	21 12 9	3903.2945	2.8	72.0	1.280(4)	6.7(1)
22 13 9	21 12 10	3903.2945	3.8	72.0	1.280(4)	6.7(1)
19 14 5	18 13 6	3881.5936	4.9	64.5	1.729(6)	8.2(1)
19 14 6	18 13 5	3881.5936	6.9	64.5	1.729(6)	8.2(1)
23 13 10	22 12 11	3937.8312	2.9	75.7	1.171(1)	8.96(3)
23 13 11	22 12 10	3937.8312	1.9	75.7	1.171(1)	8.96(3)
16 15 1	15 14 2	3878.7228	5.4	62.9	1.993(6)	10.4(1)
16 15 2	15 14 1	3878.7228	3.4	62.9	1.993(6)	10.4(1)
20 14 7	19 13 6	3911.6135	0.1	69.1	1.660(4)	11.67(9)
20 14 6	19 13 7	3911.6135	0.1	69.1	1.660(4)	11.67(9)
17 15 3	16 14 2	3904.2292	0.1	66.4	1.769(5)	10.4(1)
17 15 2	16 14 3	3904.2292	0.1	66.4	1.769(5)	10.4(1)
21 14 8	20 13 7	3943.1364	2.5	72.8	1.348(4)	9.8(1)
21 14 7	20 13 8	3943.1364	3.5	72.8	1.348(4)	9.8(1)
25 13 12	24 12 13	4011.4204	3.6	82.6	0.894(4)	12.4(2)
25 13 13	24 12 12	4011.4204	3.6	82.6	0.894(4)	12.4(2)
18 15 4	17 14 3	3931.2373	0.9	69.8	1.529(3)	9.93(6)
18 15 3	17 14 4	3931.2373	1.9	69.8	1.529(3)	9.93(6)
22 14 9	21 13 8	3976.1627	5.9	75.7	1.255(3)	11.9(1)
22 14 8	21 13 9	3976.1627	7.9	75.7	1.255(3)	11.9(1)
19 15 5	18 14 4	3959.7473	2.3	73.0	1.392(7)	11.1(2)
19 15 4	18 14 5	3959.7473	2.3	73.0	1.392(7)	11.1(2)
23 14 10	22 13 9	4010.6926	2.3	79.2	0.993(2)	9.72(6)
23 14 9	22 13 10	4010.6926	0.3	79.2	0.993(2)	9.72(6)
20 15 6	19 14 5	3989.7595	2.1	76.1	1.198(2)	11.02(6)
20 15 5	19 14 6	3989.7595	2.1	76.1	1.198(2)	11.02(6)
21 15 6	20 14 7	4021.2743	5.8	79.2	1.087(5)	12.9(2)

21 15 7	20 14 6	4021.2743	4.8	79.2	1.087(5)	12.9(2)
---------	---------	-----------	-----	------	----------	---------

ПРИЛОЖЕНИЕ В

Раздел 1

Методы теоретического исследования колебательно-вращательных спектров

Студент:

Группа	ФИО	Подпись	Дата
ОБМ71	Гиниятова Айгерим Болатовна		

Консультант школы отделения (НОЦ) – Экспериментальной физики:

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Профессор ОЭФ ИЯТШ	Лидер Андрей Маркович	д.т.н., доцент		

Консультант – лингвист ОИЯ ШБИП:

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Преподаватель ОИЯ ШБИП	Шайкина Ольга Игоревна			

CHAPTER 1. METHODS OF THEORETICAL STUDY OF VIBRATIONAL - ROTATIONAL SPECTRA

The energy levels and transition frequencies of molecules were considered in the first Chapter. These quantities can be found from the solution of the Schrödinger equation. The solution of the Schrödinger equation will depend on the type of Hamiltonian. Our problem requires Hamiltonian, which will depend on the coordinates and spins of all particles that form molecules and take into account all kinds of interactions between these particles. The construction of such a Hamiltonian is a very complex task. And the solution of the Schrödinger equation with such Hamiltonian is even more difficult. Therefore, it is necessary to use various approximations to solve such problems.

1.1. Effective Hamiltonian

The perturbation theory is used to accurately solve the Schrödinger equation for polyatomic molecules. The original Hamiltonian H of the studied molecule is divided into two parts [10]:

$$H(w) = H_0(w) + h(w), \quad (1.1)$$

where $H_0(w)$ is the Hamilton operator, the solutions of the Schrödinger equation with which it is known, $h(w)$ is a small addition to the operator $H_0(w)$ ($h(w) \ll H_0(w)$), w is a set of variables on which H depends, as well as H_0 and h .

As a result, the Hamiltonian is written in the following form, where the operator h is represented as $\sum_{n=1}^{\infty} H_n(\kappa^n)$:

$$H = H_0 + \sum_{n=1}^{\infty} H_n(\kappa^n), \quad (1.2)$$

where $H_n(\kappa^n)$ – order of smallness κ^n against the operator H_0 ($H_n \ll H_0$ to the order of smallness κ^n).

The operators written in expressions (6) and (7) differ from each other, because the operator of the form $H_n(\kappa^n)$ in the expression (7) is also a function of other variables. Where and h depends on the rotational and vibrational coordinates.

$$H = H_0(w) + h(w, v), \quad (1.3)$$

In this problem, corrections to eigenvalues and eigenfunctions are sought quantities, which in the perturbation theory are formed as a sum of different combinations of matrix elements (numbers) $\langle \psi | h(w) | \psi' \rangle$. However, the matrix elements of operators $h(w, v)$ on the own functions of operators $H_0(w)$ are operators.

This case complicates the solution of the problem, that is, the application of perturbation theory for molecular problems does not lead to an exact solution of the Schrödinger equation.

Therefore, in order to solve the problem, a solution method was formulated - the model for constructing an effective Hamiltonian, which is presented in the next subsection.

As mentioned above, the solution of the Schrödinger equation with Hamiltonian describing polyatomic molecules is difficult or not solved at all. In this case, the model of effective Hamiltonian is used. To do this, you need to construct the Hermite operator H' , which will have the following properties:

1. The solution of the equation with this operator has an explicit form;
2. The set of all solutions (N') of the equation with the operator H' coincides with a subset (N) of the set (A) of all solutions of the equation with the original operator H .

The operator H' , having the specified properties, is called an effective Hamiltonian.

We consider the Hamiltonian of the vibrational-rotational state in expression (6). E_w and $|\psi_w\rangle$ – eigenvalues of energies and eigenfunctions of the operator H_0 , thus $|\psi_w\rangle$ is a complete orthogonal set of functions depending on variables w . Let some arbitrary set of functions $|\alpha\rangle$ depend on the variables p and satisfies the

condition of completeness and orthonormality. Let some arbitrary set of functions $|\alpha\rangle$, depend on variables p and satisfies the condition of completeness and orthonormality. Then functions $|\psi_w, \alpha\rangle = |\psi_w\rangle |\alpha\rangle$ form a full set of orthonormalized functions in the considered Hilbert space in which the operator of a kind (1.1) acts, for finding own values and own functions of the operator (1.1) It is necessary to construct a matrix Ermitov Operator H on functions $|\psi_w, \alpha\rangle$, to diagonal it and perform unitary transformation:

$$H \rightarrow H' = U^+ H U, \quad (1.4)$$

The elements of the diagonal matrix H' are the eigenvalues of the energies of the original operator H .

Native functions will be written in the following form:

$$\varphi_\beta(w, p) = \sum_{\psi, \alpha} U_{\beta, \psi\alpha} |\psi, \alpha\rangle, \quad (1.5)$$

where $U_{\beta, \psi\alpha}$ – elements of the unitary matrix U that diagonalizes the original one.

However, it is impossible to solve problems using this algorithm.

The eigenfunctions of the operator of the initial approximation $|\psi_w\rangle$ form an infinite-dimensional basis. Therefore, $H, H', U_{\beta, \psi\alpha}$ of the matrix are infinite-dimensional. As a result, it makes it difficult to diagonalize the matrix H .

The construction and diagonalization of the matrix H is performed as follows:

1. To build the matrix $\langle \psi | H | \beta \rangle$ on the functions $|\psi\rangle$;
2. To build and diagonalizability matrix $\langle i | \langle \psi | H | \beta \rangle | j \rangle$.

The matrix elements $\langle \psi | H | \beta \rangle$ to be a nonzero.

When building a numeric matrix $\langle i | \langle \psi | H | \beta \rangle | j \rangle$, the procedure for determining the eigenvalues and eigenfunctions of the operator H will be reduced to a simple diagonalization procedure.

The second option-instead of operator H we take a new operator H' :

$$H \rightarrow H' = G^+ H G, \quad (1.6)$$

where G is an arbitrary unitary operator which is chosen so that the operator $(G-I)$ is small compared to the unit one. This condition is feasible if the operator is expressed as a sum of small g operators:

$$G = \exp(i \sum_{n=1}^{\infty} g_n(\kappa^n)), \quad (1.7)$$

where $g_n = g_n(w, p)$ is a small Hermitian operators of order κ^n . Then we construct a matrix $\langle \psi | H' | \beta \rangle$.

The operator G is an arbitrary operator, under which some matrices $\langle \psi | H' | \beta \rangle$ vanish.

For this Hilbert space L_{ψ} wave function $|\psi\rangle$ is divided into two arbitrary subspaces L_{ψ_0} and $L_{\psi'}$ so as to satisfy the following condition:

$$L_{\psi} = L_{\psi_0} + L_{\psi'}, \quad (1.8)$$

All matrix elements are $\langle \psi | H' | \beta \rangle$ divided into the following aggregates of elements:

$$\langle \psi^0 | H' | \beta^0 \rangle, \langle \psi^0 | H' | \beta' \rangle, \langle \psi' | H' | \beta^0 \rangle, \langle \psi' | H' | \beta' \rangle, \quad (1.9)$$

The operator G is chosen so that elements of type $\langle \psi^0 | H' | \beta' \rangle$ and $\langle \psi' | H' | \beta^0 \rangle$ are vanquished.

$$\langle \psi | H' | \beta \rangle = \begin{pmatrix} H_{\psi\phi}^* & 0 & \dots \\ 0 & 0 & \dots \\ \dots & \dots & \dots \end{pmatrix}, \quad (1.10)$$

The H_{eff}^* operator is an effective Hamiltonian operator of the state system.

1.2. Born-Oppenheimer Approach

In the Born-Oppenheimer approximation, questions are considered about the intramolecular potential function and the equilibrium structure of the molecule, which are one of the problems of molecular spectroscopy. The Hamiltonian of a free molecule in the absence of external fields is written as the sum of the energy of the nuclei, electrons, and their Coulomb interactions:

$$H=T_{\text{я}}+T_{\text{e}}+V, \quad (1.11)$$

where $T_{\text{я}}$ and T_{e} are the operators of the kinetic energy of nuclei and electrons, respectively; V is the operator of the potential energy of the molecule.

The Hamiltonian, which is considered in perturbation theory, as mentioned in 1.1, takes into account various small relativistic additives, effects associated with the spin-spin interaction.

For an exact solution of the Schrödinger equation with the Hamiltonian for polyatomic molecules, it is impossible, but to obtain a solution of this equation with a transformed Hamiltonian, which is divided into three parts, different in the order of smallness:

$$H = H_e + \Delta H_1 + \Delta H_2, \quad (1.12)$$

where:

$$H_e = \frac{1}{2m_e} \sum_{i\alpha} P_{i\alpha} + V, \quad (1.13)$$

$$\Delta H_1 = \sum_{\alpha} \frac{P_{\alpha}}{2M} + \frac{1}{2} \sum_{\lambda} P_{\lambda}^2 + \frac{1}{2} \sum_{\alpha\beta} \tilde{\mu} (J_{\alpha} - G_{\alpha})(J_{\beta} - G_{\beta}), \quad (1.14)$$

$$\Delta H_2 = \frac{1}{2M_N} \sum_{\alpha} (\sum_i P_{i\alpha})^2 + \frac{1}{2} \sum_{\alpha\beta} \tilde{\mu}_{\alpha\beta} (L_{\alpha} L_{\beta} - (J_{\beta} - G_{\beta}) L_{\beta} - L_{\alpha} (J_{\beta} - G_{\beta})), \quad (1.15)$$

The solution of the Schrödinger equation in the Born-Oppenheimer approximation is divided into two parts, in which the motions of electrons in the field of slow moving nuclei and the motion of nuclei in the effective field of electrons are considered.

The implementation of the solution of the first problem corresponds to the solution of the stationary Schrödinger equation with the Hamiltonian of the form:

$$H_{el} \varphi_n^{el}(\Delta r_{NK}) = E_n(\Delta r_{NK}) \varphi_n^{el}(\Delta r_{NK}) \equiv V_n(\Delta r_{NK}) \varphi_n^{el}(\Delta r_{NK}), \quad (1.16)$$

The obtained eigenfunctions and eigenvalues of the Hamiltonian H_e depend on the parameter and on the distances between the nuclei Δr_{NK} in the molecule. Some parametrization of points $V_n(\Delta r_{NK})$ is called the potential function of the molecule.

In the Born – Oppenheimer approximation, the mass ratio of the electron and the proton is taken into account, $m_p = 1836m_e$, and, as a result, the motion of the nuclear subsystem occurs more slowly than the electron. Therefore, in some problems, for example, in structural chemistry, the configuration of the nuclei is assumed to be fixed. Therefore, the nuclear configuration of the molecule, which is stable with respect to small oscillations of nuclei, characterizes the molecular structure in the accepted approximation [11–12].

1.3. Combination Difference Method

When analyzing the spectrum of the molecule under study, the method of combinational differences in the ground state is used. The essence of this method lies in the fact that the energy structure of the ground state is known with high accuracy, which is determined from the analysis of microwave spectra. Consequently, when electromagnetic radiation interacts with a molecule, several transitions from the ground vibrational state to the same level of the excited vibrational state occur [13].

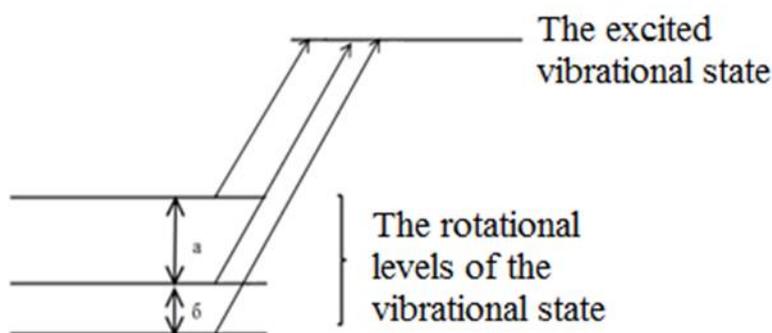


Figure 1 - Illustration of the method of combination differences.

The aim of this work is to find the energies of excited vibrational state. . For its calculation we need to assume about what distance they are spaced from the respective energies of the unexcited state. Distances between the rotational levels of the ground vibrational state are determined with high accuracy. Since accurately known distances between the rotational levels of the ground vibrational state. You

can make a "ruler", the distance between the divisions of which will correspond to the distances between the rotational levels of the main oscillatory state (figure 1).

Next, the resulting "ruler" we will move on the spectrum. Since there were transitions from the ground state to the excited vibrational state, the spectrum should have three lines that are located from each other at the same distance (figure 2). Thus knowing the provisions of the energies of the ground state, the wavelengths of the transitions, we can determine the upper energy levels of the excited States. Moving "ruler " spectrum, may find several lines that will coincide with the divisions of the "ruler".

From the number of lines found, one must find the correct combination of transitions. The described process is one of the ways of interpreting the spectra [14].

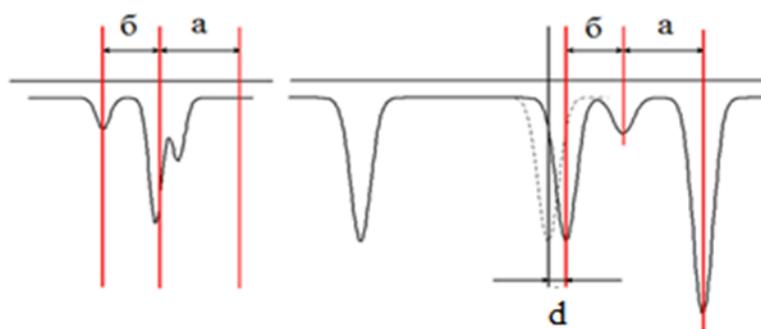


Figure 2 - Illustration of the movement of "ruler" along the spectrum.

1.4. Semiclassical theory of the interaction of radiation with matter

As mentioned in Section 1.1 of this paper, to describe a molecule as a quantum mechanical system, it is necessary to solve the Schrödinger equation with the correct Hamiltonian of this molecule. For a molecule placed in a field, the Hamiltonian is written by expression (1.1). For an unperturbed system, the state is determined from the equation:

$$i\hbar \frac{\delta\Psi}{\delta t} = H\Psi, \quad (1.17)$$

where $\Psi(r, t)$ is an eigenfunction of the Hamiltonian of coordinates and time. The eigenfunctions of the Hamiltonian, which are represented as follows:

$$\Psi(r, t) = \sum_{\alpha} b_{\alpha}^i(t) \varphi_{\alpha}(r), \quad (1.18)$$

where $\varphi_{\alpha}(r)$ are the eigenfunctions of the operator H_0 in equations (1.1). The coefficient $b_{\alpha}^i(t)$ has the form:

$$b_{\alpha}^i(t) = \exp\left(-\frac{i\varepsilon_{\alpha}t}{\hbar} C_l^i(t)\right), \quad (1.19)$$

Substituting the decomposition (1.18) into equation (1.1), we obtain the $C_l^i(t)$ coefficient:

$$\frac{dC_{\alpha}^i(t)}{dt} = \frac{1}{i\hbar} \sum_l h_{\alpha l} \exp\left(i \frac{(E_{\alpha}-E_l)t}{\hbar} C_l^i(t)\right), \quad (1.20)$$

where $h_{\alpha l} = \langle \alpha | h | l \rangle$ is the matrix element of the operator h . When deriving equations (1.20), the transition frequency has the form $w_{\alpha l} = \frac{E_{\alpha}-E_l}{\hbar}$. The detailed derivation of the coefficient is considered in [15] and as a result, the coefficient is written in the expression:

$$C_{\beta}^{\alpha} = -\frac{w_{\alpha\beta}}{2\hbar c} (\vec{A}_0 \vec{D})_{\alpha\beta} \left\{ \frac{\exp(i(w_{\alpha\beta}-w)t-1)}{i(w_{\alpha\beta}-w)} \right\} - \frac{w_{\alpha\beta}}{2\hbar c} (\vec{A}_0 \vec{D})_{\alpha\beta} \left\{ \frac{\exp(i(w_{\alpha\beta}+w)t-1)}{i(w_{\alpha\beta}+w)} \right\}, \quad (1.21)$$

At the moment of absorption, the frequencies of the external field and the transition are relatively equal quantities, i.e. $w = w_{\alpha\beta}$. Consequently, the difference between the frequencies $(w_{\alpha\beta} - w)$ is small, so the second syllable can be neglected in equation (1.21). The square of the coefficient $\left| C_{\alpha}^{\beta} \right|^2(t) = P_{\alpha\beta}(w, t)$ is the probability of the population of the molecule in the stationary state $|\alpha\rangle$ at time t , where $|\beta\rangle$ is the stationary state at the initial time.

The probability of a forced transition at all frequencies w_s is:

$$P_{\alpha\beta}(t) = \int_0^{\infty} P_{\alpha\beta}(w_s, t) dw_s, \quad (1.22)$$

As $t \rightarrow \infty$, where t is the observation time, then (1.22) transforms:

$$P_{\alpha\beta}(t \rightarrow \infty) = \lim_{t \rightarrow \infty} \int_0^\infty dw_s \frac{t w_{\alpha\beta}^2}{2\hbar^2 c^2} \left(\left[(\vec{A}_0 \vec{D})_{\alpha\beta} \right]^2 \frac{\sin^2 \left[\frac{t}{2} (w_{\alpha\beta} - w) \right]}{\left[\frac{t}{2} (w_{\alpha\beta} - w) \right]^2} + \right. \\ \left. + \left[\vec{A}_0 \vec{D} \right]_{\alpha\beta}^2 \frac{\sin^2 \left[\frac{t}{2} (w_{\alpha\beta} + w) \right]}{\left[\frac{t}{2} (w_{\alpha\beta} + w) \right]^2} \right), \quad (1.23)$$

But also $(w_{\alpha\beta} - w)$ is a function of t , \vec{A}_0 is the vector potential and electric field strength vector, \vec{D} is an arbitrary vector. As $t \rightarrow \infty$, the function $(w_{\alpha\beta} - w)$ will look like a peak that has damped oscillations (see Fig.3). Peak height is proportional to t , and width is proportional to $1/t$.

With a sufficiently long observation, the Dirac function is used to determine the intensity:

$$\delta(\alpha - \beta) = \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{2}{\pi} \frac{[\sin(\alpha - \beta) \frac{x}{2}]^2}{(\alpha - \beta)^2}, \quad (1.24)$$

The transition probability for absorption and radiation per unit time, the so-called transition rate constant:

$$\frac{P_{\alpha\beta}(t)}{t} = \frac{|w_s|}{6h\varepsilon_0} \left| \vec{D}_{\alpha\beta} \right| n_s \delta_{\tilde{n}, n-1} + \frac{|w_s|}{6h\varepsilon_0} \left| \vec{D}_{\alpha\beta} \right| n_s \delta_{\tilde{n}, n+1}, \quad (1.25)$$

The quantitative value of the constant $\frac{P_{\alpha\beta}}{t}$ is obtained by integrating over frequency. To begin with, we introduce the following concept $\frac{\sum E_s}{V} = \rho(w_s)$ - the spectral radiation density, where E_s is the field energy.

$$\frac{P_{\alpha\beta}(t)}{t} = B_{\beta \rightarrow \alpha} \rho(w_s) \delta_{\tilde{n}, n-1} + B_{\beta \leftarrow \alpha} \rho(w_s) \delta_{\tilde{n}, n+1}, \quad (1.26)$$

where $B_{\beta \rightarrow \alpha}$ ($B_{\beta \leftarrow \alpha}$) are Einstein coefficients for stimulated absorption (radiation), $A_{\beta \leftarrow \alpha}$ is the coefficient of arbitrary radiation.

When $(w_{\alpha\beta} - w) \rightarrow 0$, then $P_{\alpha\beta}(w, t)$ has a maximum value and is proportional to t^2 :

$$\lim_{(w_s-w) \rightarrow 0} P_{\alpha\beta}(w, t) = \frac{w_{\alpha\beta}^2 (|\vec{A}_0 \vec{D}|)_{\alpha\beta}^2}{4h^2 c^2} t^2 = P_{max}, \quad (1.27)$$

We proceed to consider the intensity of the absorption line. Energy absorbed per unit volume per unit time [17]:

$$E_w = c\rho_w k_w, \quad (1.28)$$

where ρ_w is the radiation density at the frequency w , k_w is the spectral absorption index.

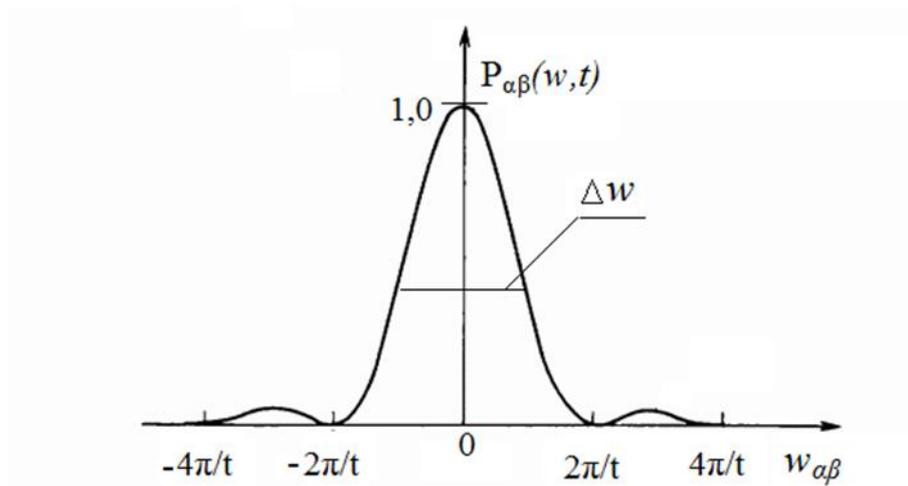


Figure 3 - Dependence of the transition probability $P_{\alpha\beta}(w, t)$ on frequency.

According to the fact that energy is absorbed by quanta, the number of absorbed photons at a given frequency is $N = \frac{E_w}{(\hbar w)}$. The photons absorbed in a unit of volume and in a unit of time in the frequency interval Δw will be equal in number to the number of transitions N_{trs} in a unit of volume and in a unit of time from the state $|\beta\rangle$ to the state $|\alpha\rangle$. At small frequency intervals, the radiation density does not change relatively, then ρ can be replaced by $\rho(w_{\alpha\beta})$.

Then:

$$N_{trs} \approx \frac{c\rho(w_{\alpha\beta})}{\hbar w} \int_{\Delta w} k(w) dw, \quad (1.29)$$

The probability of forced transitions realized by the field, $B_{\beta \leftarrow \alpha} \rho(w_{\alpha\beta})$ and $B_{\beta \rightarrow \alpha} \rho(w_{\alpha\beta})$ gives the number of transitions N_{trs} from the energy level E_β to E_α :

$$N_{trs} = (N_\beta B_{\beta \rightarrow \alpha} - N_\alpha B_{\beta \leftarrow \alpha}) \rho(w_{\alpha\beta}), \quad (1.30)$$

where N_β (N_α) is the number of molecules in a unit volume in the lower (in the upper) quantum state. From equations (1.29) and (1.30) we get:

$$N_{trs} = \int_{\Delta w} k_w dw = \frac{\hbar w_{\alpha\beta}}{c} (N_\beta B_{\beta \rightarrow \alpha} - N_\alpha B_{\beta \leftarrow \alpha}), \quad (1.31)$$

The value of $S_{\alpha\beta}$ is the integral absorption index, i.e. intensity, [$\text{cm}^{-1} \text{s}^{-1}$]. In the absence of external radiation on the volume element, the population of the N_β and N_α levels will be determined by other equations, taking into account the Boltzmann distribution law:

$$\begin{cases} N_\beta = \frac{N}{Z(T)} \exp\left(-\frac{E_\beta}{kT}\right) \\ N_\alpha = \frac{N}{Z(T)} \exp\left(-\frac{E_\alpha}{kT}\right) \end{cases}, \quad (1.32)$$

Here N is the number of particles per unit volume, k is the Boltzmann constant, T is the absolute temperature, E_α (E_β) is the energy of the upper (lower) state of the molecule. The statistical sum Z in thermodynamic equilibrium from the expression (1.32) is determined as a function of temperature:

$$Z(T) = g_i \sum_i \exp\left(-\frac{E_i}{kT}\right), \quad (1.33)$$

where i is all possible states of the molecule.

As a result, equation (1.32) transforms into the following equation [15]:

$$S_{\alpha\beta} = \frac{8\pi^3}{4\pi\epsilon_0 3hc} [1 - \exp\left(-\frac{\hbar c \sigma}{kT}\right)] N \frac{g_\alpha}{Z(T)} \exp\left(-\frac{\hbar c E_\alpha}{kT}\right) |\vec{P}_{\alpha\beta}|^2, \quad (1.34)$$

where $\sigma = (E_\alpha - E_\beta)$ is the transition frequency, g is the statistical weight of the lower state. The macroscopic parameters necessary to calculate the intensity of

the line are known quantities. To determine the energy, frequency of transitions, the matrix element of the dipole moment (1.35):

$$P_{\alpha\beta} = \langle \alpha | P_Z | \beta \rangle, \quad (1.35)$$

It is necessary to know the exact wave functions of the Hamiltonian of the free molecule, which is unknown.

1.5. Effective dipole moment

When performing the calculation of the intensities of the vibrational-rotational lines, one may encounter the calculations of the matrix elements $\langle \Psi_\alpha | P_Z | \Psi_\beta \rangle$. The calculation of matrix elements requires knowledge of exact wave functions, i.e. knowledge of Hamiltonian eigenfunctions:

$$H = \frac{1}{2} \sum_\lambda P_\lambda^2 + \frac{1}{2} \sum_{\alpha\beta} \mu_{\alpha\beta} (J_\alpha - G_\alpha)(J_\beta - G_\beta) - \frac{\hbar^2}{8} \sum_\alpha \mu_{\alpha\alpha} + V(Q), \quad (1.36)$$

The operator of the dipole moment of the molecule is written as an expansion in powers of the vibrational-rotational coordinates (1.36):

$$P_Z = \sum_\alpha k_{Z\alpha} (\mu_\alpha^0 + \sum_\lambda \mu_\alpha^\lambda q_\lambda + \sum_{\lambda, \nu \geq \lambda} \mu_\alpha^{\lambda\nu} q_\lambda q_\nu + \dots), \quad (1.37)$$

where $k_{Z\alpha}$ is the coefficient of the matrix of cosine guides.

The eigenvalues of the Hamiltonian of the form (1.36) can be reduced to the definitions of the eigenvalues of some simple “effective operator”. The implementation of the transition of the operator H to H' was considered in Section 1.1, the conversion to expressions (1.3). In this case, the relationship between the eigenfunctions for the data of the transformed operators is written in the expression:

$$\Psi_\alpha = G \varphi_\alpha, \quad (1.38)$$

If the eigenfunctions of the effective operator H' are known, then instead of performing the calculation of the matrix elements of the operator P_Z on the eigenfunctions of the Hamiltonian H , it is possible to perform calculations of the matrix elements of the operator $P'_Z = G^+ P_Z G$. The solution of the Schrödinger

equation with the operator H' is solved after the following operations:

1. construction of the matrix on the vibrational-rotational functions
2. and its diagonalization.

As a result, the eigenvalues E_α and the eigenvalues of the function $\varphi_\alpha = \sum A_{i\alpha} |i\rangle$, where $|i\rangle$ are the basis functions of the Hamiltonian H' over which column is performed, will be determined. The operator P'_Z is a function of arbitrary oscillatory (q, p) and angular $(k_{\alpha\beta}, J_\alpha)$ variables. The operator P'_Z can be written in the form:

$$P'_Z = \sum_\alpha f^\alpha(q, p) k_{Z\alpha} + \sum_{\alpha\beta} f_\beta^\alpha(q, p) J_\beta k_{Z\alpha} + \sum_{\alpha\beta\gamma} f_{\beta\gamma}^\alpha(q, p) J_\beta J_\gamma k_{Z\alpha} + \dots, \quad (1.39)$$

To determine the effective dipole moment operator, which includes the parameters characterizing the vibrational-rotational state, it is necessary to multiply the decomposition (1.39) by the unit vector $\sum |v\rangle \langle \tilde{v}|$ where summation is introduced over all orthonormal wave functions forming the complete system. As a result, the operator P'_Z will be expressed as follows:

$$P'_Z = \sum_{v\tilde{v}} |v\rangle \langle \tilde{v}| \sum_\alpha [\langle v | f^\alpha(q, p) | \tilde{v} \rangle + \sum_\beta \langle v | f_\beta^\alpha(q, p) | \tilde{v} \rangle J_\beta + \sum_{\beta\gamma} \langle v | f_{\beta\gamma}^\alpha | \tilde{v} \rangle J_\beta J_\gamma + \dots] k_{Z\alpha}, \quad (1.40)$$

which will allow the use of experimental data on line intensities for the calculation of the total operator (1.36) [12].