

Школа Инженерная школа ядерных технологий

Направление подготовки 03.03.02 «Физика»

Отделение школы (НОЦ) Отделение экспериментальной физики

БАКАЛАВРСКАЯ РАБОТА

Тема работы

Построение гамильтониана Уотсона молекул воды

УДК 539.194.001.5

Студент

Группа	ФИО	Подпись	Дата
150Б51	Лю Синжуй		

Руководитель ВКР

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Профессор	Уленеков Олег Николаевич	д.ф.-м.н., профессор		

КОНСУЛЬТАНТЫ ПО РАЗДЕЛАМ:

По разделу «Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение»

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

По разделу «Социальная ответственность»

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

ДОПУСТИТЬ К ЗАЩИТЕ:

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

Запланированные результаты обучения по программе

Код результата	Результат обучения (выпускник способен)	Требования ФГОС, критериев и/или заинтересованных сторон
<i>Общекультурные компетенции</i>		
Р1	Использовать основные этапы и закономерности исторического развития общества, основы философских, экономических, правовых знаний для формирования мировоззренческой, гражданской позиций и использования в различных сферах жизнедеятельности	Требования ФГОС3+ (ОК-1, ОК-2, ОК-3, ОК-4)
Р2	К самоорганизации и самообразованию, работать в коллективе, к коммуникации в устной и письменной формах, в том числе на иностранном языке, толерантно воспринимать социальные, этические и культурные различия, использовать методы и средства физической культуры, приёмы первой помощи и методы защиты в условиях ЧС.	Требования ФГОС3+ (ОК-5, ОК-6, ОК-7, ОК-8, ОК-9)
<i>Общепрофессиональные компетенции</i>		
Р3	Использовать в профессиональной деятельности базовые естественнонаучные знания, современные концепции и ограничения естественных наук, использовать фундаментальные знания разделов общей и теоретической физики, математики для создания моделей и решения типовых профессиональных задач, в том числе с использованием знаний профессионального иностранного языка.	Требования ФГОС3+ (ОПК-1, ОПК-2, ОПК-3, ОПК-7)
Р4	Понимать сущность и значение информации, соблюдать основные требования информационной безопасности, использовать методы, способы, средства получения и хранения информации, решать стандартные задачи на основе информационной и	Требования ФГОС3+ (ОПК-4, ОПК-5, ОПК-6)

	библиографической культуры.	
Р5	Получить организационно-управленческие навыки при работе в научных группах, критически переосмысливать накопленный опыт, изменять при необходимости профиль своей профессиональной деятельности, нести ответственность за последствия своей инженерной деятельности.	Требования ФГОС3+ (ОПК-8, ОПК-9)
<i>Профессиональные компетенции</i>		
Р6	<u>Научно-исследовательская деятельность</u> Проводить научные теоретические и экспериментальные исследования в областях: материаловедения, атомной и ядерной физики, водородной энергетики, физики плазмы с помощью современной приборной базы с использованием специализированных знаний физики и освоенных профильных дисциплин.	Требования ФГОС3+ (ПК-1, ПК-2)
Р7	<u>Научно-инновационная деятельность</u> Применять на практике профессиональные знания теории и методов физических исследований, а также профессиональные знания и умения в результате освоения профильных дисциплин для проведения физических исследований в инновационных областях науки, используя современные методы обработки, анализа и синтеза информации.	Требования ФГОС3+ (ПК-3, ПК-4, ПК-5)
Р8	<u>Организационно-управленческая</u> Использовать на практике теоретические основы организации и планирования физических исследований, участвовать в подготовке и составлении научной документации по установленной форме, понимать и применять на практике методы управления в сфере природопользования	Требования ФГОС3+ (ПК-6, ПК-7, ПК-8)
Р9	<u>Педагогически-просветительская</u> Проектировать, организовывать, анализировать педагогическую деятельность, владеть последовательностью изложения материала с	Требования ФГОС3+ (ПК-9)

	использованием междисциплинарных связей физики с другими дисциплинами, участвовать в информационно-образовательных мероприятиях по пропаганде и распространению научных знаний	
--	--------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------	--

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

Школа Инженерная школа ядерных технологий

Направление подготовки 03.03.02 «Физика»

Отделение школы (НОЦ) Отделение экспериментальной физики

УТВЕРЖДАЮ:

Руководитель ООП

 (Подпись) (Дата) (Ф.И.О.)

ЗАДАНИЕ

на выполнение выпускной квалификационной работы

В форме:

Бакалаврской работы

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

Студенту:

Группа	ФИО
150Б51	Лю Синжкй

Тема работы:

Построение гамильтониана Уотсона молекул воды	
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>Теоретический объект – молекула водяного пара, спектр поглощения, энергии колебательно-вращательных состояний полиады $\mu=4$.</p>
-----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------	--------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------

<p>Перечень подлежащих исследованию, проектированию и разработке вопросов</p> <p><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>	<ul style="list-style-type: none"> – Обзор литературных источников; – Выполнить теоретическое исследование свойств симметрии молекулы воды; – Классифицировать вращательные состояния; – Колебательно-вращательные состояния; – Построить эффективный гамильтониан для системы резонирующих состояний. – Выполнить расчет энергий; – Анализ полученных результатов; <p>Заключение.</p>
------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------	-------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------

Консультанты по разделам выпускной квалификационной работы
(с указанием разделов)

Раздел	Консультант
Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение	Конотопский Владимир Юрьевич, доцент МЕН ИСГТ
Социальная ответственность	Скачкова Лариса Александровна, Старший преподаватель ООД ШБИП

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

Построение гамильтониана Уотсона молекул воды
Планирование научно-исследовательских работ
Теоретические исследования (моделирование, расчеты) свойств веществ или материалов
THE CONSTRUCTION OF WATSON-TYPE HAMILTONIAN OF WATER MOLECULE
Research Planning
Theoretical studies (modeling, calculations) of the properties of substances or materials

Дата выдачи задания на выполнение выпускной квалификационной работы по линейному графику

Задание выдал руководитель / консультант (при наличии):

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Профессор	Уленев Олег Николаевич	д.ф.-м.н., профессор		

Задание принял к исполнению студент:

Группа	ФИО	Подпись	Дата
150Б51	Лю Синжуй		

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

Студенту:

Группа	ФИО
150Б51	Лю Синжуй

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

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

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

Перечень вопросов, подлежащих исследованию, проектированию и разработке:

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

Перечень графического материала (с точным указанием обязательных чертежей):

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

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

Задание выдал консультант:

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

Задание принял к исполнению студент:

Группа	ФИО	Подпись	Дата
150Б51	Лю Синжуй		

**ЗАДАНИЕ ДЛЯ РАЗДЕЛА
«СОЦИАЛЬНАЯ ОТВЕТСТВЕННОСТЬ»**

Студенту:

Группа		ФИО	
150Б51		Лю Синжуй	
Школа	Инженерная школа ядерных технологий	Отделение (НОЦ)	Отделение экспериментальной физики
Уровень образования	Бакалавр	Направление/специальность	03.03.02Физика

Тема ВКР:

Построение гамильтониана Уотсона молекул воды	
Исходные данные к разделу «Социальная ответственность»:	
1. Характеристика объекта исследования (вещество, материал, прибор, алгоритм, методика, рабочая зона) и области его применения	<p>Объектом данного исследования являются высоковозбужденные колебательно-вращательные состояния молекулы водяного пара, принадлежащие полиаде резонирующих состояний $\mu=4$.</p> <p>Может применяться для изучения состава атмосферы планеты</p>
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"> – Гигиенические требования к микроклимату производственных помещений СанПиН 2.2.4-548-96; – Нормы естественного и искусственного освещения предприятий, СНиП 23-05-95; – Допустимые уровни шумов в производственных помещениях. ГОСТ 12.1.003-83. ССБТ;
2. Производственная безопасность: 2.1. Анализ выявленных вредных и опасных факторов 2.2. Обоснование мероприятий по снижению воздействия	<ul style="list-style-type: none"> – Микроклимат; – Повышенная напряженность зрения; – Повышенная напряженность труда в течение смены; – Освещенность;

	<ul style="list-style-type: none"> – Электромагнитные излучения; – Шум.
3. Экологическая безопасность:	<ul style="list-style-type: none"> – анализ воздействия объекта ВКР и области его использования на ОС; – разработка решений по обеспечению экологической безопасности
4. Безопасность в чрезвычайных ситуациях:	<p>Выбор и описание возможных ЧС; типичная ЧС – пожар.</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. разработка превентивных мер по предупреждению ЧС; 2. разработка действий в результате возникшей ЧС и мер по ликвидации её последствий.

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

Задание выдал консультант:

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

Задание принял к исполнению студент:

Группа	ФИО	Подпись	Дата
150Б51	Лю Синжуй		

Школа Инженерная школа ядерных технологий



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

Уровень образования бакалавриат

Направление подготовки 03.03.02 «Физика»

Отделение школы (НОЦ) Отделение экспериментальной физики

Период выполнения _____

Форма представления работы:

бакалаврская работа

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

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

Срок сдачи студентом выполненной работы:

Дата контроля	Название раздела (модуля) / вид работы (исследования)	Максимальный балл раздела (модуля)
01.03.2018	Аналитический обзор литературы	15
01.09.2018	Исследование свойств симметрии молекулы воды. Классификация колебательных состояний.	15
30.12.2018	Классификация колебательно-вращательных уровней. Создание алгоритма подпрограммы на языке программирования FORTRAN.	15
30.04.2019	Построение оператора Watson-типа для диагонального и резонансных блоков. Реализация программы.	20
25.05.2019	Социальная ответственность	15
25.05.2019	Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение	15
25.05.2019	Заключение	5

Составил преподаватель:

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Профессор	Уленков Олег Николаевич	д.ф.-м.н., профессор		

СОГЛАСОВАНО:

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

РЕФЕРАТ

Выпускная квалификационная работа 60 с., 13 рисунка, 12 таблицы, 21 литературных источников.

Ключевые слова: Молекулярная спектроскопия, гамильтониан Уотсона, Колебательно-вращательная волновая функция, резонансные взаимодействия, молекула воды.

Объектом данного исследования являются высоковозбужденные колебательно-вращательные состояния молекулы водяного пара, принадлежащие полиаде резонирующих состояний $\mu=4$.

Целью работы является построение гамильтониана молекулы воды для указанных состояний с учетом взаимодействий.

В процессе исследования использованы сведения из: (1) квантовой механики, а именно, матричная формулировка решения стационарного уравнения Шредингера, принцип суперпозиции состояний, свойства операторов физических величин; (2) теории групп (Вигнер, 1958г.): симметричные свойства нелинейной молекулы типа XY_2 (C_{2v}), теория характеров неприводимых представлений, классификация колебательных мод, неприводимые представления группы вращений, редукция на точечную группу C_{2v} ; (3) следствия колебательно-вращательной теории: построение оператора в симметризованной форме, A-редукция гамильтониана Уотсона, классификация резонансов.

В результате исследования была написана программа на языке FORTRAN, которая позволяет рассчитывать колебательно-вращательную энергетическую структуру молекулы воды для полиады $\mu=4$ с учетом резонансных взаимодействий.

Область применения: астрофизика, планетология и атмосферная оптика.

Полученные результаты могут использоваться при анализе спектроскопических свойств молекулы воды в других диапазонах и аналогичных нелинейных молекул типа X_2Y .

Содержание

РЕФЕРАТ	11
Введение	16
ГЛАВА 1 Симметрия молекул	19
1.1 Элементы симметрии	21
1.2 Молекулярная точечная группа	25
ГЛАВА 2 Симметрия молекул воды	29
2.1 Таблица характеров группы C_{2v}	29
2.2 Резонансные эффекты	34
ГЛАВА 3 Построение гамильтониана уотсона	38
3.1 Гамильтониан.	38
3.2 Выбор базисных функций	42
3.3 Результаты	45
ГЛАВА 4 Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение	48
4.1 Организация и планирование работ	48
4.1.1 Продолжительность этапов работ	49
4.2 Расчет сметы затрат на выполнение проекта	56
4.2.1 Расчет затрат на материалы	56
4.2.2 Расчет заработной платы	56
4.2.3 Расчет затрат на социальный	

налог.....	57
4.2.4 Расчет затрат на электроэнергию.....	57
4.2.5 Расчет амортизационных расходов.....	58
4.2.6 Непосредственно учитываемые расходы.....	59
4.2.7 Расчет прочих расходов.....	59
4.2.8 Полная стоимость исследования.....	60
Вывод.....	60
ГЛАВА 5 Социальная ответственность.....	61
5.1 Введение.....	61
5.2 Правовые и организационные вопросы обеспечения безопасности.....	61
5.2.1. Специальные (характерные для рабочей зоны исследователя) правовые нормы трудового законодательства.....	61
5.2.2 Организационные мероприятия при компоновке рабочей зоны исследователя.....	63
5.3 Производственная безопасность.....	65
5.3.1 Высоковольтное электричество.....	66
5.3.2 Ионизирующие излучения.....	67
5.4 Экологическая безопасность.....	67

5.4.1 Анализ влияния объекта исследования на окружающую среду.....	67
5.4.2. Анализ влияния процесса исследования на окружающую среду.....	68
5.4.3 Обоснование мероприятий по защите окружающей среды.....	68
5.5 Безопасность в чрезвычайных ситуациях.....	69
5.5.1 Пожар.....	69
5.5.2 Затопление.....	71
5.6 Заключение.....	72
5.7 Список литературы.....	72
Заключение.....	74
Список литературы	75

Введение

Актуальность и задачи:

Спектроскопия – раздел физики, посвященный изучению спектров электромагнитного излучения. В более широком смысле – изучение спектров различных видов излучения. Методы спектроскопии используются для исследования энергетической структуры атомов, молекул и макроскопических тел, образованных из них.

Современное развитие лазерных технологий значительно стимулирует изучение теории молекулярной спектроскопии. Среди всех типов исследуемых молекул особенное внимание было обращено на молекулу воды по следующим причинам: с одной стороны, поскольку молекула воды является простейшей нелинейной многоатомной молекулой, ее можно рассматривать как типичную систему для проверки различных вычислительных методов. С другой стороны, теоретическое вычисление колебательно-вращательных энергетических уровней молекулы типа асимметричного волчка H_2O усложняется в связи с присутствием резонансных эффектов, возникающих из-за близости расположения колебательных состояний [1]. По этой причине часто возникает необходимость одновременно вычислять вращательные энергии нескольких колебательных состояний с учетом различных резонансных взаимодействий. Для многоатомной молекулы H_2O резонансные эффекты происходят из-за случайного вырождения, к которому приводит соотношение $\omega_1 \approx 2\omega_2 \approx \omega_3$, где ω_1 , ω_2 и ω_3 – гармонические частоты колебаний, определяемых с помощью нормальных координат q_1, q_2, q_3 [2], которые преобразуются соответственно по

A_1 , A_1 , B_1 неприводимым представлениям группы C_{2v} . Введем $\mu=2\nu_1+\nu_2+2\nu_3$, где ν_1, ν_2, ν_3 –колебательные квантовые числа и найдем набор колебательных состояний, находящихся в резонансе.

Одновременное вычисление уровней энергии трех взаимодействующих низколежащих возбужденных колебательных состояний ($\mu = 2, 3$) молекулы H_2O было успешно выполнено Flaud и Camy-Peyret [3, 4]. Для случая $\mu \geq 4$, когда возникает взаимодействие между более чем тремя возбужденными колебательными состояниями, вычисления становятся намного сложнее.

В рамках данной работы была создана компьютерная программа на языке аналитического программирования FORTRAN. Разработанная программа была использована, чтобы провести теоретический расчёт энергетических колебательно-вращательных уровней молекулы H_2O полиады $\mu=4$. Из-за отсутствия экспериментальных данных об энергетических уровнях состояния (040) в расчет были включены только 5 взаимодействующих состояний (101), (021), (120), (200) и (002) молекулы H_2O .

Цель работы: построение матрицы эффективного гамильтониана Уотсона в базе симметризованных колебательно-вращательных функций для молекулы воды. Основным инструментом для реализации выбрать язык программирования высокоого уровня FORTRAN. Для достижения поставленной цели были определены следующие **задачи**:

1. Рассмотреть симметричные свойства молекулы H_2O .
2. Классифицировать колебательные, вращательные и колебательно-вращательные волновые функции молекулы воды.

3. Построить в симметризованной форме эффективный гамильтониана молекул воды.
4. Написать программу для расчета колебательно-вращательных энергий взаимодействующих состояний полиады $\mu=4$.

1 Симметрия молекул

Симметрия молекул (СМ далее), совокупность операций симметрии, применение которых переводит молекулу в физически тождественный объект (саму в себя). Операции СМ включают преобразования пространства и времени и перестановки тождественных частиц. Выполнение операций СМ не меняет физические законы и общую энергию молекулы. Как следствие, выражающие эти законы уравнения, т. е. уравнения, определяющие свойства молекул и их изменения во времени, инвариантны относительно операций симметрии. При последовательном выполнении нескольких операций симметрии инвариантность сохраняется на каждом шаге, так что совокупность операций симметрии в математическом смысле образует группу.

Наличие симметрии приводит к определённым законам сохранения физической величин. В частности, постулируемые на основе опытных данных однородность и изотропность пространства в отсутствие внешних сил приводят к сохранению полного импульса молекулы и её момента импульса. Неразличимость тождественных частиц, т. е. симметрия относительно их перестановок, влечёт за собой ограничения на структуру соответствующих уравнений движения и их решений. В квантовой механике симметрия определяется той группой преобразований, по отношению к которым инвариантно уравнение Шрёдингера.

При выполнении операций симметрии группы уравнения Шрёдингера оператор Гамильтона не меняется, волновая функция Ψ для любой операции симметрии P переходит в функцию $P\Psi$, также являющуюся решением уравнения Шрёдингера. Получаемые таким образом для всех операций группы функции также являются решением исходного уравнения, а для стационарных состояний они к тому же соответствуют одной и той же энергии. Из них для описания состояний молекулярной системы достаточно знать лишь линейно независимые функции и то, то, как они преобразуются операциями группы. Совокупность линейных операторов (матриц), отвечающих преобразованиям линейно независимых функций при действии операций симметрии, называется представлением группы. Для того чтобы знать о поведении функции под действием операций симметрии, достаточно знать, по какому представлению группы симметрии молекулы она преобразуется, или, другими словами, к какому типу симметрии она относится. Среди всех возможных представлений каждой конечной группы всегда можно выделить такие, к которым с помощью преобразования подобия сводятся все остальные представления. Эти представления носят название неприводимых. Волновые функции, являющиеся решениями уравнения Шрёдингера для конкретной молекулы, преобразуются при операциях симметрии по тому или иному неприводимому представлению группы симметрии этого уравнения. Размерность соответствующего неприводимого представления для стационарной молекулярной системы определяет кратность вырождения состояния.

1.1 Элементы симметрии

(1) Осевая симметрия n-го порядка, C_n :

Если молекула имеет n-кратную ось симметрии, для которой символ Schoenflies является C_n , вращение молекулы на $2\pi/n$ радиан, где $n = 1, 2, 3, \dots; \infty$ вокруг оси создает конфигурацию, которая для стационарного наблюдателя неотличима от исходной. Рисунки 1 (a) - 1 (e) иллюстрируют ось C_2 в H_2O , ось C_3 в CH_3F , ось C_4 в $XeOF_4$, ось C_6 в C_6H_6 и C_∞ ось (поворот на любой угол дает неразличимую конфигурацию) в HCN .

Каждому элементу симметрии соответствует операция симметрии, которой присваивается тот же символ, что и у элемента. Например, C_n также указывает фактическую операцию вращения молекулы на $2\pi/n$ радиан вокруг оси.

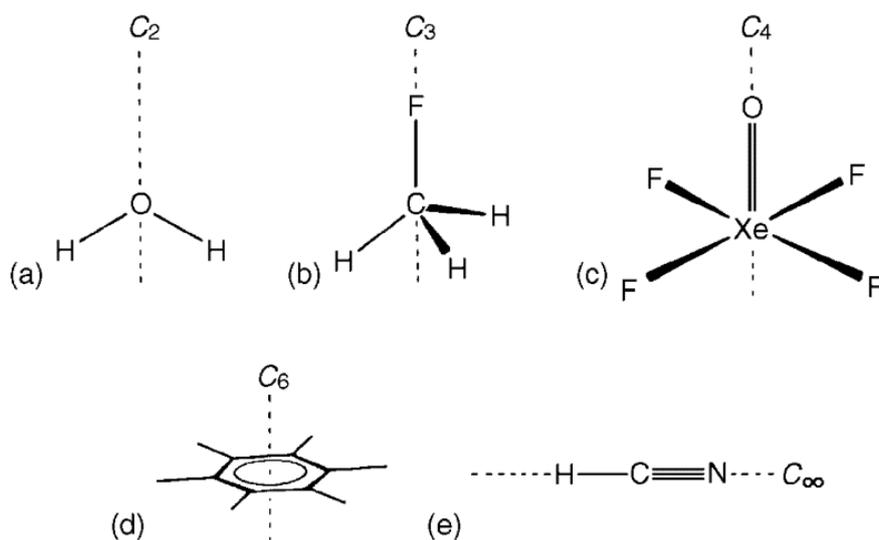


Рис. 1 Примеры осей C_n

(2) Плоскость симметрии, σ

Если молекула имеет плоскость симметрии, для которой символ σ , отражение всех ядер через плоскость на равном расстоянии на противоположной стороне приводит к конфигурации, неотличимой от исходной. На рисунке 2 (а) показаны две плоскости симметрии, $\sigma_v(xz)$ и $\sigma_v(yz)$, из H_2O с использованием условных обозначений осей. Так же, как плоскость yz , плоскость молекулы, является плоскостью симметрии, так и любая плоская молекула имеет хотя бы одну плоскость симметрии. Нижний индекс «v» означает «вертикальный» и подразумевает, что плоскость является вертикальной относительно самой большой оси сгиба, в данном случае C_2 , которая определяет вертикальное направление.

В плоской молекуле BF_3 , на рисунке 2 (b), ось C_3 , проходящая через В и перпендикулярная к фигуре, является самой большой осью сгиба и, следовательно, тремя плоскостями симметрии, перпендикулярными к фигуре и через каждую из В – F облигации, помечены σ_v . Плоскость молекулы также является плоскостью симметрии и обозначена sh , где «h» обозначает «горизонтальный» относительно C_3 .

В молекуле, такой как нафталин, показанной на рисунке 2 (с), нет уникальной оси наибольшего сгиба, и три плоскости не имеют индексов.

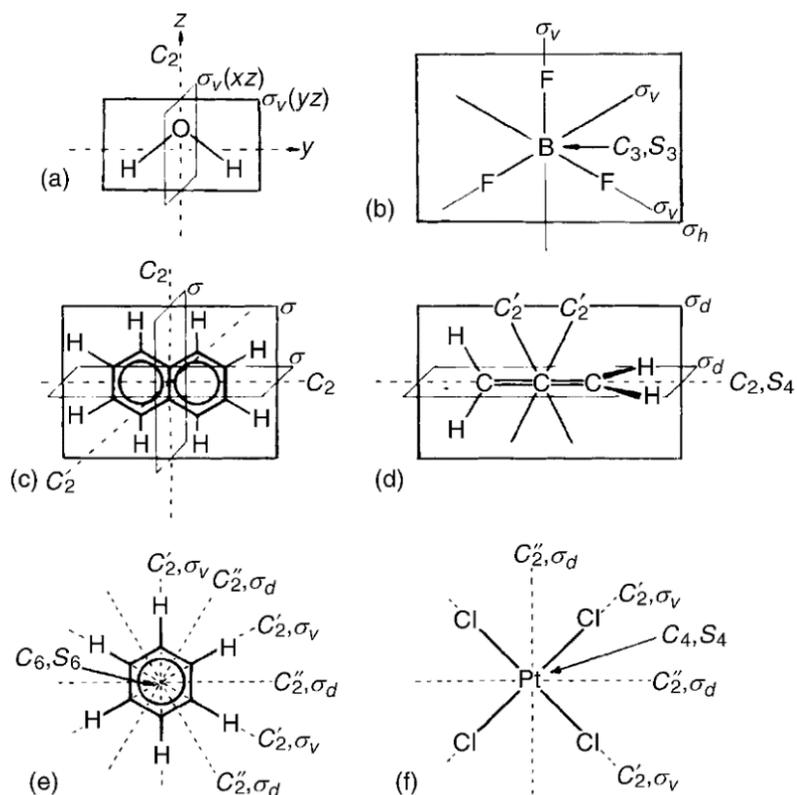


Рис. 2 Плоскости и оси симметрии

Третий нижний индекс 'd', который обозначает 'dihedral', иногда полезен. Его использование иллюстрируется молекулой аллена, показанной на Рис. 2 (d), в которой оси, обозначенные C₂, расположены под углом 90° друг к другу и под углом 45° к плоскости в рисунке. Они называются двугранными осями, которые, в общем, , Оси C₂ расположены под равными углами друг к другу и перпендикулярно главной оси. В целом, главной осью является ось C = C = C, которая является не только осью C₂, но и осью S₄. Плоскости σ_d - это те, которые делят пополам углы между двугранными осями. В таких молекулах, как бензол и квадратная плоскость [PtCl₄], существует выбор меток σ_v и σ_d для

плоскостей, перпендикулярных плоскости молекулы. Рисунки 2 (e) - 2 (f) показывают, что условно плоскости, делящие пополам углы связи, обычно обозначают как σ_d , а сквозные связи - как σ_v .

Операция симметрии σ - это операция отражения ядер поперек плоскости.

(3) Центр инверсии, i

Если молекула имеет центр инверсии (или центр симметрии), то i , отражение каждого ядра через центр молекулы на равном расстоянии на противоположной стороне центра дает конфигурацию, неотличимую от исходной.

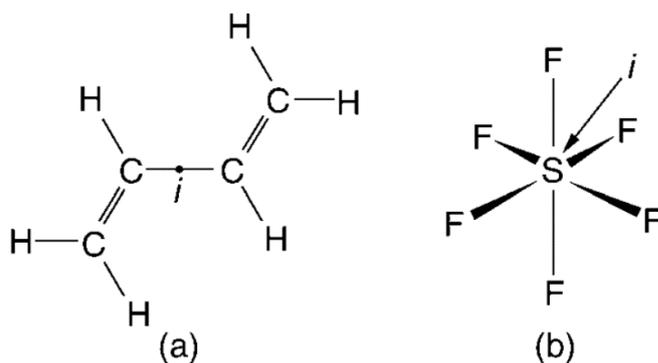


Рис. 3 Центр инверсии

(4) Несобственное вращение, S_n

Для молекулы, обладающей несобственным вращением симметрии S_n , вращение на $2\pi/n$ радиан вокруг оси с последующим отражением через плоскость, перпендикулярную оси и через центр молекулы, дает конфигурацию, неотличимую от исходной конфигурации. Рисунок 2 (d) показывает, что ось $C = C = C$ в аллене является осью S_4 . Плоскость, через которую происходит

отражение, может быть или не быть плоскостью симметрии; в аллене это не так, но в BF_3 , показанном на рисунке 2 (b), плоскость, участвующая в операции S_3 , является плоскостью σ_h . Этот пример также иллюстрирует тот факт, что, если существует плоскость σ_h , перпендикулярная самой большой оси C_n , эта ось также должна быть осью S_n . Мы говорим, что C_n и σ_h порождают S_n , или

$$\sigma_h \times C_n = S_n \quad (1.1)$$

Это уравнение также можно интерпретировать как подразумевающее, что если мы выполняем операцию C_n , за которой следует операция σ_h , результат будет таким же, как и выполнение операции S_n .

Из определения S_n следует, что $\sigma = S_1$ и $i = S_2$; поскольку s и i взяты как отдельные элементы симметрии, символы S_1 и S_2 никогда не используются.

(5) Идентичности, I или E

Все молекулы обладают единичным элементом симметрии, символом которого является I. Операция симметрии I состоит в том, чтобы ничего не делать с молекулой, так что это может показаться слишком тривиальным, чтобы иметь значение, но это необходимый элемент, требуемый правилами теории групп. Поскольку операция C_1 является вращением на 2π радиан, $C_1 = I$ и символ C_1 не используется.

1.2 Молекулярная точечная группа

Все элементы симметрии, которые может иметь любая молекула, составляют точечную группу. Точечные группы следует отличать от пространственных групп. Точечные группы называются так, потому что, когда все операции группы выполняются, по крайней мере одна точка остается

неизменной: в случае аллена это точка в центре молекулы, тогда как в H_2O любая точка на оси C_2 не влияет. Пространственные группы соответствуют свойствам симметрии регулярных расположений молекул в пространстве, таких как те, которые находятся в кристаллах, и здесь мы не будем их касаться.

Многие точечные группы необходимы для охвата всех возможных молекул, и удобно собирать вместе те, которые имеют определенные типы общих элементов. Также удобно при определении групп точек не перечислять все элементы группы. Теоретически необходимо перечислить только генерирующие элементы, из которых могут быть сгенерированы все остальные элементы. На практике более полезно давать больше, чем генерирующие элементы, и это то, что мы будем здесь делать. Конечно, все группы точек содержат элемент идентичности, и это не будет включено в определения группы точек.

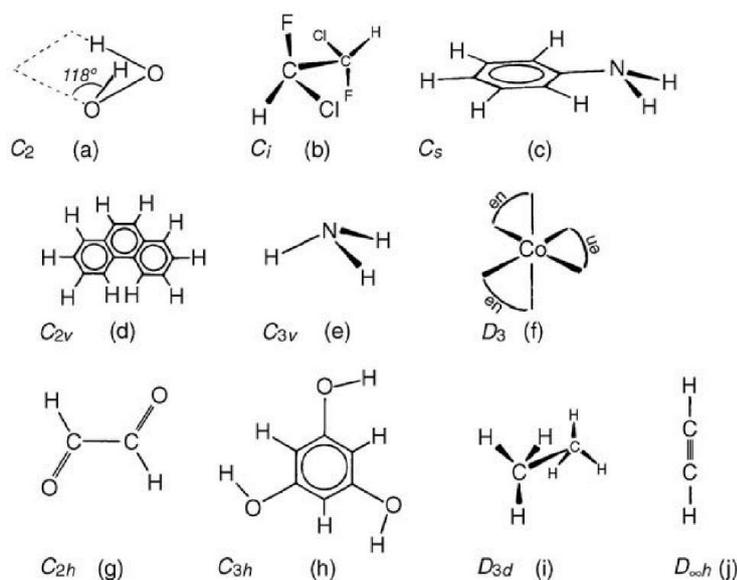


Рис. 4 Примеры молекул, принадлежащих к различным точечным группам.

Ниже перечислены некоторые общие точечные группы:

(1) C_n :

Точечная группа C_n содержит ось симметрии C_n . Подразумевается, что он не содержит элементов σ , i или S_n . Тем не менее, он должен содержать $C_n^2, C_n^3; \dots; C_n^{n-1}$.

Примеры молекул, принадлежащих точечной группе C_n , для которой $n = 1, 2, 3, \dots$, не очень распространены, но перекись водорода (H_2O_2), показанная на Рис.4 (а), принадлежит точечной группе C_2 ; единственным элементом симметрии, кроме I , является ось C_2 , делящая пополам угол 118° между двумя плоскостями O-O-H. Бромхлорфторметан ($CHBrClF$), показанный на рисунке 4, не имеет элемента симметрии, кроме I , и принадлежит к точечной группе C_1 .

(2) S_n :

Точечная группа S_n содержит $S_n^2, S_n^3; \dots; S_n^{n-1}$.

Примеры редки, за исключением группы точек S_2 . Эта группа точек имеет только ось S_2 , но, поскольку $S_2 = i$, она имеет только центр инверсии, и символ, обычно используемый для этой группы точек, - это C_i . Изомер молекулы $ClFHC$ - $CHFCl$, в которой все пары одинаковых атомов H, F или Cl переходят друг в друга, как показано на рис.4 (b), принадлежит точечной группе C_i .

(3) C_{nv} :

Точечная группа C_{nv} содержит ось симметрии C_n и плоскости симметрии $n \sigma$, все из которых содержат ось C_n . Он также содержит другие элементы, которые могут быть сгенерированы из них.

Многие молекулы принадлежат к точечной группе C_{1v} . Помимо $I (= C_1)$ они имеют только плоскость симметрии. Примерами являются фторэтилен и анилин, который имеет пирамидальную конфигурацию вокруг атома азота и плоскость симметрии, разделяющую угол HNH. Вместо C_{1v} обычно используется символ C_s .

(4) D_n :

Точечная группа D_n содержит ось C_n и n C_2 . Оси C_2 перпендикулярны C_n и расположены под равными углами друг к другу. Он также содержит другие элементы, которые могут быть сгенерированы из них.

Молекулы, принадлежащие к точечным группам D_n , не распространены. Они могут быть визуализированы как образованные двумя идентичными фрагментами C_{nv} , соединенными вплотную таким образом, что один фрагмент разнесен относительно другого на любой угол, отличный от $m\pi/n$, где m является целым числом.

(5) C_{nh} :

Точечная группа C_{nh} содержит ось C_n и плоскость σ_h , перпендикулярную C_n . Для n даже точечная группа содержит центр инверсии i . Он также содержит другие элементы, которые могут быть сгенерированы из них.

Точечная группа C_{1h} содержит только плоскость симметрии, в дополнение к I . Поэтому она такая же, как C_{1v} , и обычно ей дается символ C_s .

2 Симметрия молекулы воды

Симметрия молекулы воды характеризуется точечной группой C_{2v} .

Ниже мы приведем таблицу Характеров этой группы.

2.1 Таблица характеров группы C_{2v}

Свойства колебательной волновой функции молекулы H_2O могут сохраняться или не сохраняться под действием того или иного элемента симметрии. Если функция сохраняет знак при преобразовании, т.е. при действии соответствующей операции симметрии, например σ_v , не влияет на волновую функцию, которую мы записываем как

$$\varphi_v \rightarrow (+1)\varphi_v \quad (2.1)$$

И мы говорим, что функция симметрична относительно операции σ_v на группе C_{2v} . Другая возможность в невырожденной точечной группе состоит в том, что волновая функция может изменить знак при выполнении операции:

$$\varphi_v \rightarrow (-1)\varphi_v \quad (2.2)$$

В этом случае мы говорим, что функция является антисимметричной по отношению к операции σ_v на группе C_{2v} . Коэффициент «+1» уравнении (2.1), а также «-1» в уравнении (2.2) известны как характеры, в данном случае, C_{2v} по отношению к операции отражения σ_v .

Можно видеть, что любые два из элемента из C_2 , $\sigma_v(xz)$, $\sigma'_v(yz)$ можно рассматривать как порождающие элементы. Существует четыре возможных комбинации символов +1 или -1 относительно этих генерирующих элементов, +1 и +1, +1 и -1, -1 и +1, -1 и +1, относительно C_2 и $\sigma_v(xz)$. Эти комбинации

вводятся в столбцы 3 и 4 таблицы символов C_{2v} в Рис. 6. Символ по отношению к I всегда должен быть $+1$, а также, как $\sigma'_v(yz)$ генерируется из C_2 и $\sigma_v(xz)$, символ по отношению к $\sigma'_v(yz)$ - произведение символов относительно C_2 и $\sigma_v(xz)$. Каждый из четырех рядов символов называется неприводимым представлением группы. Каждый из них представлен разновидностями симметрии A_1 , A_2 , B_1 или B_2 . Вид A_1 называется полностью симметричным, поскольку все символы $+1$: остальные три вида не являются полностью симметричными.

C_{2v}	I	C_2	$\sigma_v(xz)$	$\sigma'_v(yz)$		
A_1	1	1	1	1	T_z	$\alpha_{xx}, \alpha_{yy}, \alpha_{zz}$
A_2	1	1	-1	-1	R_z	α_{xy}
B_1	1	-1	1	-1	T_x, R_y	α_{xz}
B_2	1	-1	-1	1	T_y, R_x	α_{yz}

Рис. 6 Таблица Характеров группы C_{2v}

Метки видов симметрии являются общепринятыми: A и B указывают симметрию или антисимметрию соответственно для C_2 , а нижние индексы 1 и 2 указывают симметрию или антисимметрию соответственно для σ_v .

В шестом столбце основной части таблицы символов указаны виды симметрии сдвигов (T) молекулы вдоль осей системы координат, связанной с молекулой и поворотов (R) вокруг декартовых осей. На Рис. 7 векторы, прикрепленные к ядрам H_2O , представляют колебания, которые преобразуются

по представлениям группы C_{2v} в соответствии с их поведением при операциях C_2 и $\sigma_v(yz)$ Рис. 7 (а) показывает, что

$$\Gamma(T_x) = B_1; \quad \Gamma(T_y) = B_2; \quad \Gamma(T_z) = A_1; \quad (2.3)$$

и Рис. 7 (б) показывает, что

$$\Gamma(R_x) = B_1; \quad \Gamma(R_y) = B_2; \quad \Gamma(R_z) = A_2; \quad (2.4)$$

Символ Γ , в общем, обозначает «представление...». Здесь это неприводимое представление или симметрия вида.

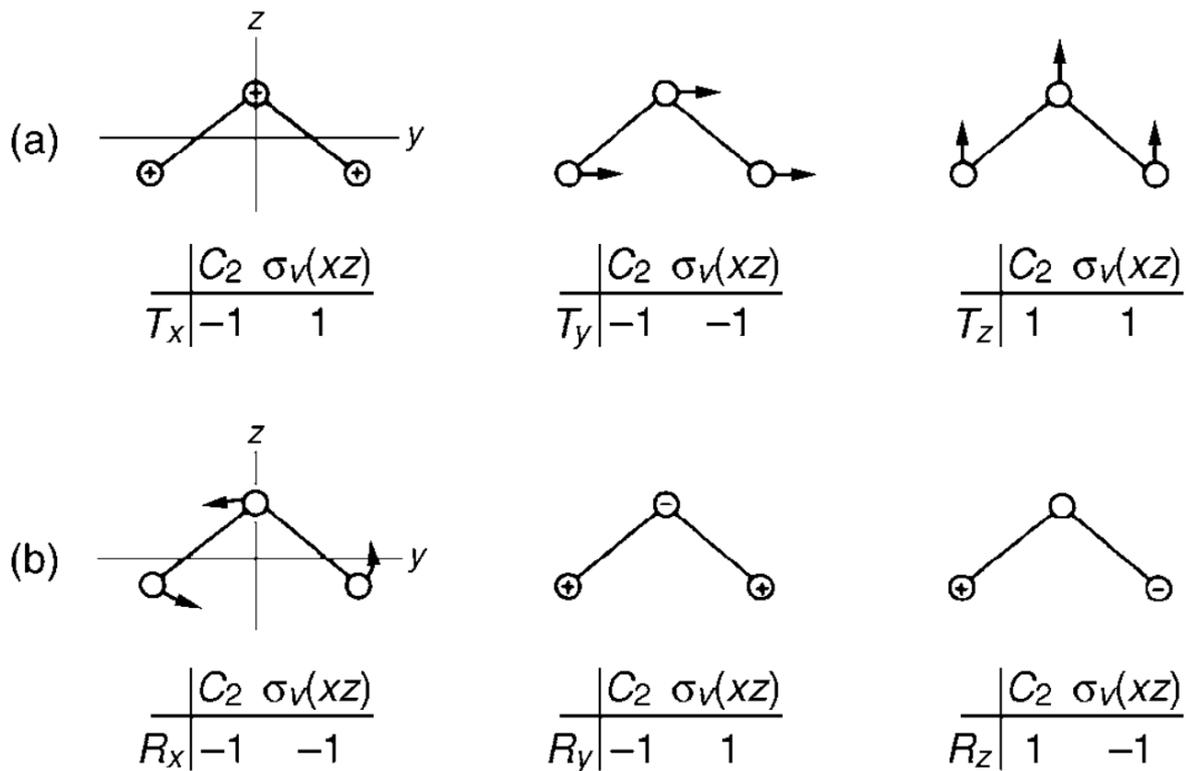


Рис. 7 (а) сдвиги и (б) повороты в молекуле H_2O

N -атомная нелинейная молекула имеет $3N-6$ нормальных мод колебаний.

Это следует из каждого атома, имеющего три степени свободы из-за

необходимости указывать три координаты, скажем, x , y и z , чтобы определить положение каждого из них. Из $3N$ степеней свободы молекулы представляют собой перемещение молекулы в целом вдоль оси x , y или z , а еще три представляют вращение молекулы вокруг каждой из этих осей. Оставшиеся $3N-6$ степеней свободы представляют собой движения ядер относительно друг друга, а именно колебания. Для линейной молекулы существует $3N-5$ нормальных мод колебаний, потому что нет никакой степени свободы, соответствующей вращению вокруг межъядерной оси: нет момента инерции вокруг этой оси.

Следовательно, молекула H_2O имеет три нормальных колебания, которые показаны на Рис. 8, на котором векторы, прикрепленные к ядрам, указывают направления и относительные величины движений. Используя таблицу характеров точечной группы C_{2v} , можно легко определить симметрии колебательных волновых функций ψ_v . Символы трех колебаний в операциях C_2 и $\sigma_v(xz)$ равны соответственно $+1$ и $+1$ для v_1 , $+1$ и $+1$ для v_2 и -1 и -1 для v_3 . Следовательно

$$\Gamma(\psi_{v(1)}) = A_1; \quad \Gamma(\psi_{v(2)}) = A_1; \quad \Gamma(\psi_{v(3)}) = B_2; \quad (2.5)$$

Важно понимать, что присвоение видов симметрии молекулярным свойствам зависит от обозначения осей молекулярно-фиксированной системы координат. Метки осей, используемые для T , R и σ_v в двух последних столбцах таблицы символов, всегда одинаковы, но выбор меток осей для конкретной

рассматриваемой молекулы нелегко стандартизировать. Мулликен (см. Библиографию) предложил во многих случаях условные обозначения для осей, и эти условные обозначения широко используются. Для плоской молекулы C_{2v} принято, что ось C_2 принимается за ось z , а ось x перпендикулярна плоскости. Это соглашение используется здесь для H_2O . Важность использования соглашения может быть проиллюстрирована тем фактом, что если бы, скажем, мы должны были поменять метки осей x и y , то $\Gamma(\psi_{v(3)})$ было бы B_1 , а не B_2 . Однако для неплоской молекулы C_{2v} , такой как CH_2F_2 , хотя естественно, что ось C_2 принимается за ось z , выбор осей x и y является произвольным. Этот пример служит для демонстрации того, насколько важно указать используемое обозначение оси.

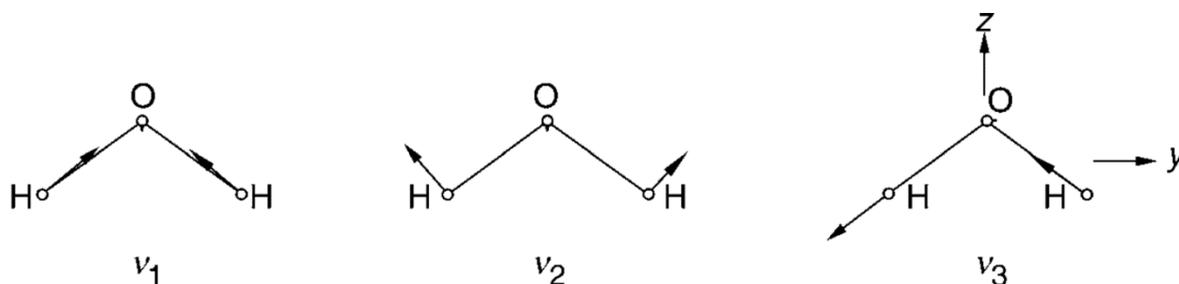


Рис. 8 Нормальные колебания молекулы H_2O

Впоследствии будут возникать ситуации, в которых нам нужно будет знать результат произведения симметрий или, на языке теории групп, получить их прямое произведение. Например, если H_2O возбуждается колебательно одновременно с одним квантом каждый из v_1 и v_3 , виды симметрии волновой функции для этого состояния колебательной комбинации

$$\Gamma(\psi_v) = A_1 \times B_2 = B_2. \quad (2.6)$$

Чтобы получить прямое произведение двух видов, мы умножаем символы под каждым элементом симметрии, используя правила $(+1) \times (+1) = 1$; $(+1) \times (-1) = -1$; $(-1) \times (-1) = 1$; Таким образом, получается результат в уравнении (2.6).

Если H_2O возбуждается, скажем, двумя квантами из ν_3 , то

$$\Gamma(\psi_v) = B_2 \times B_2 = A_1. \quad (2.7)$$

Результаты умножения в уравнениях (2.6) и (2.7) для которых

(а) прямое произведение любого вида с полностью симметричными видами оставляет его неизменным, и

(б) прямое произведение любого вида с самим собой дает полносимметричные виды, которые являются общими для всех невырожденных точечных групп.

Используя правила формирования прямых произведений, можно показать также, что в точечной группе C_{2v}

$$A_2 \times B_1 = B_2 ; \quad A_2 \times B_2 = B_1 \quad (2.7)$$

2.2 Резонансные эффекты

Теоретическая подгонка энергетических колебательно-вращательных молекулы асимметричного волчка типа XY_2 группы C_{2v} часто осложняется резонансными эффектами, возникающими из-за близости уровней, относящихся к различным колебательным состояниям. Следовательно, часто

необходимо одновременно классифицировать вращательные уровни энергии нескольких колебательных состояний с учетом различных взаимодействий. Для многих молекул XU_2 группы C_{2v} резонансные эффекты происходят из близости $\omega_1, 2\omega_2$ и ω_3 , где ω_1, ω_2 и ω_3 являются основными частотами нормальных колебаний q_1, q_2, q_3 симметрии A_1, A_1 и B_1 соответственно. Обозначая $\mu = 2\nu_1 + \nu_2 + 2\nu_3$, где ν_1, ν_2 и ν_3 - колебательные квантовые числа, энергетические уровни, принадлежащие группе колебательных состояний с одинаковым значением, могут находиться в резонансе и должны рассматриваться совместно в модели эффективного гамильтониана. Максимальное число N взаимодействующих колебательных состояний, участвующих в полиаде, быстро увеличивается с ростом μ . Например, $N = 1$ для $\mu = 0, 1$; $N = 3$ для $\mu = 2, 3$; $N = 6$ для $\mu = 4, 5$; $N = 10$ для $\mu = 6, 7$.

Одновременное рассмотрение трех взаимодействующих состояний успешно выполнено Flaud и Camy-Peyret [3, 4] для низколежащих возбужденных колебательных состояний ($\mu = 2, 3$) of H_2O . Для сильно возбужденных колебательных состояний $\mu \geq 4$ фитинг становится более сложным, так как задействовано более трех взаимодействующих состояний.

Мы разработали компьютерную программу, которая может одновременно совмещать энергетические уровни взаимодействующих колебательных состояний в пределах любого числа μ для молекулы типа асимметричного волчка типа XU_2 симметрии C_{2v} . В компьютерной программе учтены возникающие взаимодействия с точностью до четвертого порядка малости в

гамильтониане. Эти взаимодействия можно классифицировать следующим образом:

(А) Ферми-типа взаимодействия между двумя колебательными состояниями одинаковой симметрии, то есть $A_1 \leftrightarrow A_1$ или $B_1 \leftrightarrow B_1$. К ним относятся следующие:

(1) Ферми-резонансное взаимодействие между двумя состояниями с $\Delta v_1 = \pm 1, \Delta v_2 = \mp 2, \Delta v_3 = 0$

(2) резонансное взаимодействие Дарлинга-Деннисона между двумя состояниями с $\Delta v_1 = \pm 2, \Delta v_2 = 0, \Delta v_3 = \mp 2$

(3) Любое другое взаимодействие типа Ферми, происходящее от членов третьего или четвертого порядка в гамильтониане.

(В) Кориолисово взаимодействие между двумя колебательными состояниями различных видов симметрии, то есть $A_1 \leftrightarrow B_1$. К ним относятся следующие:

(1) Кориолисовое взаимодействие между двумя состояниями с $\Delta v_1 = \pm 1, \Delta v_2 = 0, \Delta v_3 = \mp 1$

(2) Кориолисово взаимодействие между двумя состояниями с $\Delta v_1 = 0, \Delta v_2 = \pm 2, \Delta v_3 = \mp 1$.

(3) Любые другие взаимодействия типа Кориолиса, происходящие из членов четвертого порядка в гамильтониане.

Для части гамильтониана, которая диагональна в колебательных квантовых числах, в компьютерной программе используется гамильтониан типа Уотсона с максимум 29 вращательными параметрами для каждого колебательного

состояния. Наблюдаемые уровни энергии можно связать с собственными значениями гамильтоновой матрицы и проводить решение задачи итерационной процедурой с помощью метода наименьших квадратов. Это итерационный метод, включающий диагонализацию гамильтоновой матрицы, полученной из некоторых начальных значений параметров, идентификацию вычисленных собственных значений энергии и уточнение параметров по методу наименьших квадратов.

Мы применили компьютерную программу в теоретическом подходе к энергетическим уровням $H_2^{16}O$ для колебательных состояний с $\mu = 4$. Из-за отсутствия экспериментальных данных об энергетических уровнях состояния (040) были включены только 5 взаимодействующих состояний (101), (021), (120), (200) и (002) из $H^{16}O$. Триста девяносто шесть наблюдаемых уровней энергии этих состояний, о которых сообщали Toth и Margolis [8], и Camy-Peyret и Flaud [4], были установлены одновременно до 96 параметров. Молекулярные константы и параметры взаимодействия, а также волновые функции для этих состояний были определены при подгонке(фитинге).

3 Построение гамильтониана Уотсона

3.1 Гамильтониан

Мы предполагаем, что имеется n_V взаимодействующих состояний, среди которых первые n_B состояния относятся к виду B_1 , а остальные относятся к виду A_1 . Мы будем использовать представление I' , в котором координатные оси x, y, z с фиксированным телом выбраны так, что $z = b, y = c$ и $x = a$. Блок-схема гамильтоновой матрицы показана в Рис.9 для случая $n_V = 5, n_B = 2$. Поскольку гамильтонова матрица вещественная и симметричная, показана только ее верхняя треугольная часть. V -е состояние обозначается цифрой V , где $V = 1, 2, 3, 4, \dots$) нв. Вид государства V обозначен Γ_V . Диагональный блок W_{VV} , который является диагональным во всех колебательных квантовых числах, представляет собой гамильтониан типа Уотсона и определяется как

$$\begin{aligned}
 W_{VV} = E^V + \left[A^V - \frac{1}{2}(B^V + C^V) \right] J_z^2 + \frac{1}{2}(B^V + C^V) J^2 - \Delta_K^V J_z^2 - \Delta_{JK}^V J_z^2 J^2 - \Delta_J^V J^4 + \\
 H_k^V J_z^6 + H_{kj}^V J_z^4 J^2 + H_{JK}^V J_z^2 J^4 + H_J^V J^6 + L_k^V J_z^8 + L_{kj}^V J_z^6 J^2 + L_{kJK}^V J_z^4 J^4 + L_{Jk}^V J_z^2 J^6 + \\
 L_J^V J^8 + \dots \frac{1}{2}(B^V - C^V) J_{xy}^2 - \delta_K^V \{J_z^2, J_{xy}^2\} - 2\delta_J^V J_{xy}^2 J^2 + h_k^V \{J_z^4, J_{xy}^2\} + \dots
 \end{aligned}
 \tag{3.1}$$

Где :

$$\begin{aligned}
 \{A, B\} = AB + BA \\
 J_{xy}^2 = J_x^2 - J_y^2
 \end{aligned}
 \tag{3.2}$$

$E^V, A^V, C^V, B^V, \Delta_K^V, \Delta_{JK}^V, \Delta_J^V, H_k^V, H_{kJ}^V, H_{JK}^V, H_J^V, L_k^V, L_{kJ}^V, L_{kJK}^V, L_{JK}^V, L_J^V, \delta_K^V, \delta_J^V, h_k^V \dots \dots$ -

Это спектроскопические параметры, которые можно получить из эксперимента.

J^2 и J_x, J_y, J_z - операторы, связанные с полным угловым моментом и его компонентами вдоль неподвижных осей тела с

$$J^2 |J, k\rangle = (J^2 + J) |J, k\rangle$$

$$J_z |J, k\rangle = k |J, k\rangle$$

$$(J_x \mp iJ_y) |J, k\rangle = [J(J+1) - k(k \pm 1)]^{1/2} |J, k \pm 1\rangle \quad (3.3)$$

где $|J, k\rangle$ - вращательная волновая функция для симметричного ротора.

W_{VV} имеет ненулевые матричные элементы с $\Delta J = 0; \Delta k = 0, \pm 2$.

Γ_V	v	B_1	B_1	A_1	A_1	A_1
Γ_V	v	1	2	3	4	5
B_1	1	W_{11}	F_{12}	C_{13}	C_{14}	C_{15}
B_1	2		W_{22}	C_{23}	C_{24}	C_{25}
A_1	3			W_{33}	F_{34}	F_{35}
A_1	4				W_{44}	F_{45}
A_1	5					W_{55}

Рис. 9 Гамильтонова матрица для $n_V = 5, n_B = 2$

Различные колебательно-вращательные взаимодействия между n_V -состояниями представлены недиагональными блоками $F_{VV'}$ и $C_{VV'}$ в Рис.9. Блок $F_{VV'}$ представляет взаимодействие типа Ферми между двумя состояниями $V = (v_1, v_2, v_3)$ и $V' = (v_1', v_2', v_3')$ того же симметрия видов. Без ограничения общности $F_{VV'}$ может быть представлен следующей формулой.

$$F_{VV'} = f_{VV'}(F_0^{VV'} + F_k^{VV'} J_z^2 + F_J^{VV'} J^2 + F_{xy}^{VV'} J_{xy}^2) \quad (3.4)$$

где $F_0^{VV'}$, $F_k^{VV'}$, $F_J^{VV'}$, и $F_{xy}^{VV'}$ - параметры взаимодействия, которые должны быть определены из соответствия. $f_{VV'}$ - это колебательный фактор с префиксом компьютерной программы в соответствии с типом взаимодействия типа Ферми:

(1) Для $V' = (v_1 - 1, v_2 + 2, v_3)$:

$$f_{VV'} = \frac{1}{2}[v_1(v_2 + 1)(v_2 + 2)/2]; \quad (3.5)$$

В этом случае терм в $F_0^{VV'}$ возникает в основном из термов первого и третьего порядка в гамильтониане, в то время как термы в $F_k^{VV'}$, $F_J^{VV'}$ и $F_{xy}^{VV'}$ возникают в основном из термов третьего порядка.

(2) Для $V' = (v_1 - 2, v_2, v_3 + 2)$:

$$f_{VV'} = \frac{1}{4}[v_1(v_1 - 1)(v_3 + 1)(v_3 + 2)]; \quad (3.6)$$

В этом случае терм в $F_0^{VV'}$ возникает в основном из членов второго порядка в гамильтониане, в то время как члены в $F_k^{VV'}$, $F_J^{VV'}$ и $F_{xy}^{VV'}$ возникают главным образом из членов четвертого порядка.

(3) Для любых других взаимодействий типа Ферми $f_{VV'}$ устанавливается произвольно равным 1. В его случае член в $F_0^{VV'}$ возникает в основном из

третьего или четвертого порядка в гамильтониане, тогда как члены в $F_k^{VV'}$, $F_j^{VV'}$ и $F_{xy}^{VV'}$ возникают из более высоких (чем четвертый) порядков, и, следовательно, ими можно пренебречь, установив $F_k^{VV'}$, $F_j^{VV'}$ и $F_{xy}^{VV'}$ одинаково равными нулю.

Блок $C_{VV'}$ представляет взаимодействие типа Кориолиса между двумя состояниями $V = (v_1, v_2, v_3)$ и $V' = (v_1', v_2', v_3')$ различных видов симметрии. Без ограничения общности $C_{VV'}$ может быть представлен следующей формулой:

$$C_{VV'} = g_{VV'} [C_y^{VV'} (iJ_y) + C_{xy}^{VV'} (J_x J_z + J_z J_x)] \quad (3.7)$$

где $C_y^{VV'}$, и $C_{xy}^{VV'}$ - параметры взаимодействия, которые должны быть определены из соответствия. $g_{VV'}$ - это колебательный фактор с префиксом компьютерной программы в соответствии с типом взаимодействия типа Кориолиса:

(1) Для $V' = (v_1 - 1, v_2, v_3 + 1)$:

$$g_{VV'} = \frac{1}{2} [v_1 (v_3 + 1)]^{\frac{1}{2}}; \quad (3.8)$$

В этом случае терм в $C_y^{VV'}$ возникает в основном из термов первого порядка в гамильтониане, в то время как терм в $C_{xy}^{VV'}$ возникает в основном из термов второго порядка. Ожидается, что вклады членов третьего и четвертого порядка в гамильтониане будут малы, и поэтому в этом случае ими пренебрегают.

(2) Для $V' = (v_1, v_2 - 2, v_3 + 1)$:

$$g_{VV'} = \frac{1}{2} [v_2 (v_2 - 1) (v_3 + 1) / 2]^{\frac{1}{2}}; \quad (3.9)$$

В этом случае терм в $C_y^{VV'}$ возникает из членов второго порядка в гамильтониане, в то время как терм в $C_{xy}^{VV'}$ возникает главным образом из членов третьего порядка

(3) Для любых других взаимодействий типа Кориолиса $g_{VV'}$ устанавливается произвольно равным 1.

3.2 Выбор базисных функций

В работе рассматриваются пять колебательных состояний.

Поскольку $\Delta J = 0$ для всех неисчезающих матричных элементов, вся гамильтонова матрица распадается на блоки, соответствующие разным значениям J . Для данного J существуют $(2J + 1)$ разные значения K . Следовательно, порядок блока будет $5(2J + 1)$. Чтобы упростить процесс диагонализации, полезно использовать свойства симметрии. В этом случае гамильтонова матрица распадается на четыре подматрицы, каждая из которых имеет порядок $(5/4) (2J + 1)$. Эти подматрицы соответствуют четырем различным видам симметрии $+s$, $-s$, $+a$ и $-a$ для колебательно-вращательных уровней нежесткой молекулы группы C_{2v} . Адаптированные по симметрии базисные колебательно-вращательные волновые функции, $|V, J, K, \gamma\rangle$ даны формулой

$$|V, J, K, \gamma\rangle = \psi_V S(J, K, \gamma) \quad (3.10)$$

где $K = |k|$ и $\gamma = 0$ или 1. ψ_V - колебательная волновая функция, $S(J, K, \gamma)$ - симметризованная вращательная волновая функция, определяемая следующим образом.

$$S(J, K, \gamma) = 2^{-\frac{1}{2}}[|J, k > + (-1)^\gamma |J, k >] \text{ для } K \neq 0$$

$$S(J, 0, 0) = |J, 0 > \quad (3.11)$$

Вращательные функции S могут быть классифицированы на четыре различных вращательных базиса E^+, E^-, O^+, O^- в соответствии со значениями K и γ , как показано в Таблице 1. Комбинации вращательного базиса с вибрационной функцией ψ_V видов Γ_V для получения правильной общей симметрии Γ , для $|V, J, K, \gamma >$ для заданного значения J , показаны в первых четырех столбцы таблицы 2. Последние три столбца таблицы 2 показывают соответственно размерность n_R вращательного базиса, четность квантовых чисел (K_c, K_a) и порядок n_H - гамильтоновой подматрицы. Где $K_c = J, K_a + K_c = J$ или $J+1$.

Таблица 3.1 Вращательная симметрия

Вращательная симметрия	K	γ
E^+	чётная	0
E^-	чётная	1
O^+	нечётная	0
O^-	нечётная	1

Тогда колебательную волновую функцию можно разделить на следующие четыре категории +s, -s, +a и -a как:

Таблица 3.2 Полная симметрия

J	Симметрия			K_a K_c	
	волновая	колебательная	вращательная		
чётная	+s	B_1	O^-	o e	
		A_1	E^+	e e	
	-s	B_1	E^-	e o	
		A_1	O^+	o o	
	+a	B_1	E^+	e e	
		A_1	O^-	o e	
	-a	B_1	O^+	o o	
		A_1	E^-	e o	
	нечётная	+s	B_1	O^+	o e
			A_1	E^-	e e
		-s	B_1	E^+	e o
			A_1	O^-	o o
+a		B_1	E^-	e e	
		A_1	O^+	o e	
-a		B_1	O^-	o o	
		A_1	E^+	e o	

Зависимость оператора диагонального блока от квантовых чисел J, K может быть записана:

$$\begin{aligned}
W_{VV}^{KK} = & E^V + [A^V - \frac{1}{2}(B^V + C^V)]K^2 + \frac{1}{2}(B^V + C^V)(J^2 + J) - \Delta_K^V K^4 - \Delta_{JK}^V K^2(J^2 + \\
& J) - \Delta_J^V (J^2 + J)^2 + H_k^V K^6 + H_{kj}^V K^4(J^2 + J) + H_{jK}^V K^2(J^2 + J)^2 + H^V_J (J^2 + J)^3 + \\
& L_k^V K^8 + \delta_{K,1}(-1)^J \{ [\frac{1}{4}(B^V - C^V) - \delta_K^V + h_k^v + l_k^v](J^2 + J) + [-\delta_J^V + h_{jk}^v](J^2 + \\
& J)^2 + h_J^v (J^2 + J)^3 \}
\end{aligned} \tag{3.12}$$

$$\begin{aligned}
W_{VV}^{KK\pm 2} = & Z_K G(J, K\pm) \{ \frac{1}{2}(B^V - C^V) - \delta_K^V [K^2 + (K\pm 2)^2] - 2\delta_J^V (J^2 + J) + \\
& h_k^v [K^4 + (K\pm 2)^4] + h_{jk}^v [K^2 + (K\pm 2)^2](J^2 + J) + 2h_J^v (J^2 + J)^2 + l_k^v h_k^v [K^6 + \\
& (K\pm 2)^6] \}
\end{aligned} \tag{3.13}$$

$$G(J, K\pm) = \frac{1}{2} [(J \mp K - 1)(J \mp K)(J \pm K + 1)(J \pm K + 2)]^{\frac{1}{2}} \tag{3.14}$$

Где $Z_K = 1$, если $K \neq 0$ для верхнего знака и $K \neq 2$ для нижнего знака; $Z_K = 2^{\frac{1}{2}}$, если $K=0$ для верхнего знака и $K=2$ для нижнего знака.

$$F_{VV}^{KK\pm 2} = Z_K f_{VV} F_{xy}^{VV'} G(J, K\pm) \tag{3.15}$$

$$C_{VV}^{KK\pm 1} = U_K g_{VV'} \times \frac{1}{2} [(J \mp K)(J \pm K + 1)]^{\frac{1}{2}} [\pm C_y^{VV'} + (2K \pm 1)C_{xz}^{VV'}] \tag{3.16}$$

Где $U_K = 0$, если $\gamma' - \gamma = 0$; $U_K = 1$, если $\gamma' - \gamma \neq 0$ и $K \neq 0$ для верхнего знака и $K \neq 1$ для нижнего знака; $U_K = 2^{\frac{1}{2}}$ если $\gamma' - \gamma \neq 0$ и $K \neq 0$ для верхнего знака и $K=1$ для нижнего знака.

3.3 Результаты

Часть полученных результатов для возбуждённого состояния (021) представлена в таблице 3.

Таблица 3.3 Колебательно-вращательные уровни энергии возбуждённого состояния (021) до $J=5$

Вращательные квантовые числа			Полная симметрия волновой функции	Энергия, см ⁻¹
J	K _a	K _c		
0	0	0	+a	6877.731
1	0	1	+a	6904.295
1	1	0	-a	6925.781
1	1	1	+s	6919.865
2	0	2	+a	6957.369
2	1	1	-a	6978.896
2	2	0	+a	7033.618
2	1	2	+s	6961.179
2	2	1	-s	7033.618
3	0	3	+a	7036.842
3	1	2	-a	7058.431
3	2	1	+a	7104.522
3	3	0	-a	7207.604
3	1	3	+s	7023.095

3	2	2	-s	7104.522
3	3	1	+s	7207.604
4	0	4	+a	7142.553
4	1	3	-a	7164.223
4	2	2	+a	7198.883
4	3	1	-a	7302.343
4	4	0	+a	7441.035
4	1	4	+s	7105.545
4	2	3	-s	7198.883
4	3	2	+s	7302.343
4	4	1	-s	7441.035
5	0	5	+a	7274.289
5	1	4	-a	7296.06
5	2	3	+a	7316.549
5	3	2	-a	7420.482
5	4	1	+a	7559.786
5	5	0	-a	7729.633
5	1	5	+s	7208.444
5	2	4	-s	7316.549
5	3	3	+s	7420.482
5	4	2	-s	7559.786
5	5	1	+s	7729.633

4. Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение

4.1 Организация и планирование работ

В процессе организации реализации конкретных проектов необходимо разумно планировать ситуацию с занятостью участников и рабочее время каждого человека. В следующей таблице 4.1 перечислены люди и имена, вовлеченные в работу.

Таблица 4.1 Участники проекта

№ раб.	Исполнители	Имя
1	Научный руководитель (НР)	Бехтерева Елена Сергеевна
2	Исполнитель (И)	Лю Синжуй

При

проведении исследований в выпускной работе необходимо строить рабочие группы для того, что достигнуть и выполнить конкретную цель. Для разных видов работ установите соответствующую должность исполнителя.

Таблица 4.2 Перечень работ и продолжительность их выполнения

Этапы работы	Исполнители	Загрузка исполнителей
Постановка целей и задач, получение исходных данных	НР	НР – 100%
Составление и утверждение ТЗ	НР	НР – 100%
Определите тему и обсудите фактическое применение, связанное с темой.	НР, И	НР – 30% И – 100%

Разработать экспериментальный план и график	НР, И	НР – 100% И – 10%
Обсуждение литературы	НР, И	НР – 30% И – 100%
Выбор структурной схемы устройства	НР, И	НР – 100% И – 50%
Выбор принципиальной схемы устройства	НР, И	НР – 100% И – 80%
Горячая обработка металлических материалов и сбор экспериментальных данных	НР	НР – 100% И – 80%
Создание программы на языке FORTRAN для выполнения численных расчетов	НР, И	НР – 40% И – 80%
Оформление расчетно-пояснительной записки	НР, И	НР – 40% И – 80%
Оформление графического материала	НР, И	НР – 100% И – 80%
Подведение итогов	НР, И	НР – 60% И – 100%

4.1.1 Продолжительность этапов работ

Существует два способа расчета продолжительности этапа работы.

Первый метод - это технология и экономика: этот метод применим к полностью разработанной нормативно-правовой базе для трудоемкости процесса планирования, что, в свою очередь, обусловлено их высокой воспроизводимостью в стабильной среде. Поскольку подрядчики часто не имеют соответствующих стандартов, мы отказываемся от использования этого метода.

Второй метод - опытно-статистический метод, который может быть реализован двумя способами: 1) аналоговый, 2) экспертный. Аналоговый метод возможен только при наличии устаревшего симулятора в поле зрения

исполнителя. В большинстве случаев его можно применять только локально - для отдельных элементов (этап работы). Так что выбирайте экспертный метод для оценки. Экспертные методы пригодны для использования при отсутствии информационных ресурсов, а эксперты в конкретных предметных областях проводят необходимые количественные оценки на основе своего профессионального опыта.

Рассчитайте время, необходимое для каждого шага работы, по следующей формуле:

$$t_{ож} = \frac{t_{min} + 4t_{prob} + t_{max}}{6} \quad (5,1)$$

где t_{min} – минимальная продолжительность работы, дн.;

t_{max} – максимальная продолжительность работы, дн.;

t_{prob} – наиболее вероятная продолжительность работы, дн.

$$T_{рд} = \frac{t_{ож}}{K_{вн}} \cdot K_{д} \quad (5.2)$$

где $t_{ож}$ – продолжительность работы, дн.;

$K_{вн}$ – коэффициент выполнения работ, $K_{вн} = 1,2$;

$K_{д}$ – коэффициент, учитывающий дополнительное время на компенсацию непредвиденных задержек и согласование работ, $K_{д} = 1,1$

Расчет продолжительности этапа в календарных днях ведется по формуле:

$$T_{кд} = T_{рд} \cdot T_{к} \quad (5,3)$$

где $T_{кд}$ – продолжительность выполнения этапа в календарных днях;

$T_{к}$ – коэффициент календарности, решение по формуле:

$$T_{к} = \frac{T_{кал}}{T_{кал} - T_{вд} - T_{пд}} = \frac{365}{365 - 52 - 14} = 1,22 \quad (5, 4)$$

где $T_{кал}$ – календарные дни ($T_{кал} = 365$);

$T_{ВД}$ – выходные дни по кадровым вопросам. Вопросы применения ст. 111 ТК

Этап	Исполнитель и	Продолжительность работ, дни	Трудоемкость работ по исполнителям чел.- дн.
------	------------------	---------------------------------	-------------------------------------------------

$RФ,(T_{ВД} = 52);$

$T_{ПД}$ – праздничные дни по кадровым вопросам. Вопросы применения ст. 112

ТК $RФ,(T_{ПД} = 14).$

Рассчитайте время, необходимое для работы на каждом этапе из таблицы 4.2, и

Иелайте следующие выводы:

					$T_{РД}$		$T_{КД}$	
		t_{min}	t_{max}	$t_{ож}$	НР	И	НР	И
1	2	3	4	5	6	7	8	9
Постановка целей и задач	НР	3	4	3.4	3.116	-	3.802	-
Составление и утверждение ТЗ	НР	2	3	2.4	2.2	-	2.684	-
Определите тему и обсудите фактическое применение, связанное с темой.	НР, И	7	10	8.2	2.255	7.516	2.751	9.170
Разработать экспериментальный план и график	НР, И	2	4	2.8	2.566	0.256	3.131	0.313
Обсуждение литературы	НР, И	3	6	4.2	1.155	3.85	1.4091	4.697
Выбор структурной схемы устройства	НР, И	7	14	9.8	8.983	4.491	10.959	5.479
Выбор принципиальной схемы устройства	НР, И	4	10	6.4	5.866	4.693	7.157	5.725
Горячая обработка металлических материалов и сбор экспериментальных данных	НР	30	40	34	31.16	24.93	38.02	30.41
Экспериментальный анализ данных	НР, И	15	20	17	3.116	12.46	3.802	15.209
Оформление расчетно-пояснительной записки	НР, И	5	6	5.4	1.98	3.96	2.4156	4.8312
Оформление графического материала	НР, И	10	15	12	11	8.8	13.42	10.736
Подведение итогов	НР, И	4	6	4.8	2.64	4.4	3.2208	5.368
Итого:				110.4	76.04	75.36	92.77	91.94

Таблицы 4.3 Трудозатраты на выполнение проекта

Эта	НР	И	Март			Апрель			Май			Июнь		
			10	20	30	40	50	60	70	80	90	100	110	120
1	3.8 02	-	■											
2	2.6 84	-	■											
3	2.7 51	9.1 70	■	■										
4	3.1 31	0.3 13		■	■									
5	1.4 1	4.6 97			■	■								
6	10. 96	5.4 79			■	■								
7	7.1 57	5.7 25				■	■							
8	38. 02	30. 41					■	■	■	■				
9	3.8 02	15. 21								■	■	■		
10	2.4 15	4.8 31										■	■	

4.2 Расчет сметы затрат на выполнение проекта

Стоимость создания проекта включает в себя все затраты, необходимые для реализации каждой из задач, которые составляют эту разработку. Расчет сметной стоимости ее выполнения производится по следующим статьям затрат: материалы и покупные изделия; заработная плата; социальный налог; расходы на электроэнергию (без освещения); амортизационные отчисления; командировочные расходы; оплата услуг связи.

4.2.1 Расчет затрат на материалы

Во-первых, расходы включают материальные затраты, приобретенные продукты, полуфабрикаты и другие материальные ценности, которые непосредственно потребляются при работе объекта проектирования. Для покупки большого количества предметов, например цены листа сплава Э110, мы используем метод взвешивания. Цена за единицу товара принимается за среднюю рыночную цену. Хотя цена на оптовую торговлю будет намного ниже, чем средняя рыночная цена, мало влияет на небольшое количество протестированных образцов.

Таблицы 4.4 Расчет затрат на материалы

Наименование материалов	Единица измерения	Цена за ед., руб.	Кол-во	Сумма, руб.
Бумага	Лис.	150	2	300
Ручка	Шт.	3	20	60
Тетрадь	Шт.	5	20	100
USB жесткий диск	Шт.	3	370	1110
Итого:				1570

Транспортно-заготовительные расходы – 5%

$$C_{\text{тра}} = C_{\text{мат}} \times 5\% = 1570 \text{руб} \times 5\% = 78,5 \text{руб.}, \text{ итого } 1648,5 \text{руб.}$$

4.2.2 Расчет заработной платы

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

$$ЗП_{дн - т} = \frac{МО}{\frac{298}{12}} = \frac{МО}{24,83}$$

Для учета в ее составе премий, дополнительной зарплаты и районной надбавки используется следующий ряд коэффициентов:

$$К_{ПР} = 1,1; К_{доп.ЗП} = 1,188; К_{р} = 1,3.$$

Поэтому необходимо добавить тарифы к базовой зарплате и оценить соответствующий коэффициент. Формула для расчета коэффициента выглядит следующим образом

$$К_{и} = К_{ПР} * К_{доп.ЗП} * К_{р} = 1,1 * 1,188 * 1,3 = 1,699.$$

Таблицы 4.5 Затраты на заработную плату

Исполнитель	Оклад, руб./мес.	ежедневная ставка, руб./раб.день	Затраты времени, раб.дни	Коэффициент	Фонд з/платы, руб.
НР	33 664	1343	76	1,699	173413,53
И	15 470	617	75	1,62	74965,5
Итого:					248379,53

4.2.3 Расчет затрат на социальный налог

Затраты на единый социальный налог (ЕСН), включающий в себя отчисления в пенсионный фонд, на социальное и медицинское страхование, составляют 30 % от полной заработной платы по проекту.

$$С_{соц.} = С_{зп} * 0,3 = 248379,53 * 0,3 = 74513,70 \text{ руб.}$$

4.2.4 Расчет затрат на электроэнергию

Рассчитайте счет за электроэнергию, необходимый для теста. Вам нужно знать местную цену на электроэнергию, мощность устройства и сколько времени использовать, рассчитываемые по формуле:

$$\text{Сэл. об.} = P_{\text{об}} \times t_{\text{об}} \times \text{Ц}_{\text{э}}$$

где $P_{\text{об}}$ – мощность кВт;

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

$\text{Ц}_{\text{э}}$ – цена на 1 кВт·час; $\text{Ц}_{\text{э}} = 5,748$ руб./кВт.час (в ТПУ).

Поскольку спектральные данные были записаны, экспериментальное оборудование работало 24 часа, и данные были получены в режиме реального времени с помощью удаленного компьютера. Поскольку экспериментальный метод имеет излучение частиц высокой энергии, он минимизирует контакт между людьми и оборудованием. Эта операция приведет к тому, что рабочее время экспериментального оборудования будет больше рабочего времени человека.

В таких случаях $t_{\text{об}}$ определяется путем прямого учета, особенно если использование соответствующего оборудования ограничено.

Мощность, потребляемая оборудованием, определяется по формуле:

$$P_{\text{об}} = P_{\text{ном.}} * K_{\text{с}}$$

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

$K_{\text{с}} = 1$ (оборудование малой мощности).

Результаты расчета стоимости электроэнергии следующие таблице

Таблице 4.6

№ п/п	Наименование оборудования	Время работы $t_{\text{об}}$ (ч)	Потребляемая Мощность $P_{\text{об}}$ (кВт)	Цена единицы оборудования $\text{Ц}_{\text{э}}$ (кВт/ч);	Затраты на электроэнергию , руб.
1.	Компьютер	648	0,2	5,748	744,9
2.	Монитор	110	0,09		56,9
	Итого				801,8

4.2.5 Расчет амортизационных расходов

В учете затрат учитывается не только счет за электроэнергию оборудования, но и амортизация оборудования. Используется формула.

$$C_{AM} = \frac{H_A * C_{OB} * t_{pф} * n}{F_D}$$

где H_A – годовая норма амортизации; ($H_A=12,5\%$ по приложению 1)

C_{OB} – балансовая стоимость единицы оборудования с учетом ТЗР.

F_D – действительный годовой фонд времени работы соответствующего оборудования (2408 ч).

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

n – число задействованных однотипных единиц оборудования.

Результаты расчета нормы амортизации в таблице 4.7

Таблицы 4.7

№ п/п	Наименование оборудования	Количество (n).	Цена единицы оборудования, руб (C_{OB})	Общая стоимость оборудования, руб.	Время работы $t_{pф}$ (ч)	Амортизация руб
1.	Компьютер	1	58000	58000	648	1950,1
2.	Монитор	1	13000	13000	110	74,2
3.	USB жесткий диск	3	370	1110	60	3,5
Итого				72110		2027,5

4.2.6 Непосредственно учитываемые расходы

Регистрационный взнос для участия в научной конференции составляет 1000 рублей.

4.2.7 Расчет прочих расходов

$$C_{\text{проч.}} = (C_{\text{мат}} + C_{\text{зп}} + C_{\text{соц}} + C_{\text{эл.об.}} + C_{\text{ам}} + C_{\text{нп}}) \cdot 0,1 = 32804,7 \text{ руб}$$

4.2.8 Стоимость всего проекта

Консолидировать и суммировать расходы по вышеуказанным разделам. Все затраты на этот эксперимент представлены в таблице 4.8 ниже.

Таблицы 4.8 Смета затрат на разработку проекта

Статья затрат	Условное обозначение	Сумма, руб.
Материалы и покупные изделия	$C_{\text{мат}}$	1570
Основная заработная плата	$C_{\text{зп}}$	248379,53
Отчисления в социальные фонды	$C_{\text{соц}}$	75610,4
Расходы на электроэнергию	$C_{\text{эл.}}$	801
Амортизационные отчисления	$C_{\text{ам}}$	2027,5
Непосредственно учитываемые расходы	$C_{\text{нр}}$	1000
прочих расход	$C_{\text{проч.}}$	32908,8
Итого:		361997,3

Таким образом, затраты на исследование составили $C = 360851,8$ руб.

Цена результатов исследования как коммерческого продукта.

Вывод

Этот эксперимент не имеет экономического значения (только для изучения спектра молекул воды). Так как результаты проведенного исследования пока не предполагают практического применения, то оценка экономической эффективности ВКР не возможна.

ГЛАВА 5. СОЦИАЛЬНАЯ ОТВЕТСТВЕННОСТЬ

5.1 Введение

Данный проект заключается в исследование спектра молекул воды. Все работы (обработка данные, разработка алгоритма) выполняются в комнате 337 на третьем этаже корпуса №10 ТПУ. Схема этой системы показана в предыдущих главах. Обработка данных и разработка алгоритма проводится в общественной зоне лаборатории с компьютерами.

Помещение относится к классу помещений без повышенной опасности, так как отсутствуют условия, создающие повышенную или особо повышенную опасность. Отсюда вытекает актуальность данной работы.

В данном разделе рассматривается исследование факторов безопасности в лаборатории.

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

1. Исследование правовых и организационных вопросов обеспечения безопасности.
 2. Исследование производственной безопасности.
 3. Исследование экологической безопасности.
- Исследование безопасности в чрезвычайных ситуациях.

5.2 Правовые и организационные вопросы обеспечения безопасности

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

Лаборатория принадлежит университету ТПУ и является учебной аудиторией.

При исследовании в лаборатории существуют много вредных и опасных факторов производства. При работах с вредными и опасными условиями труда,

а также выполняемых в особых температурных условиях или связанных с загрязнением, работникам бесплатно выдаются прошедшие обязательную, сертификацию или декларирование соответствия специальная одежда, специальная обувь и другие средства индивидуальной защиты, а также смывающие и (или) обезвреживающие средства в соответствии с типовыми нормами. Исследователи допускаются к работе только в спецодежде и средствах индивидуальной защиты.

Для исключения возможности несчастных случаев должны проводиться обучение, инструктажи и проверка знаний работников требований безопасности труда.

На рабочем месте должны быть запасы сырья и материалов, не превышающие сменную потребность. Необходимо знать специфические свойства применяемых веществ и соблюдать установленные правила работы с ними. Производственный процесс должен быть организован так, чтобы не допускать выделения в воздух рабочей зоны пыли и вредных веществ.

Требования по охране труда и обязательная аттестация рабочих мест регламентируются гл. 34 ТК РФ (Трудовой кодекс Российской Федерации от 30.12.2001 N 197-ФЗ (ред. от 01.04.2019)).

Все эксплуатируемые электроустановки должны соответствовать требованиям «Правил технической эксплуатации электроустановок потребителей», и др. нормативных документов. Эксплуатация электрооборудования без заземления не допускается. Помещения опытно-производственной лаборатории обеспечиваются первичными средствами пожаротушения согласно действующим нормам.

Все работники должны уметь пользоваться средствами пожаротушения и уметь оказывать первую помощь при несчастном случае. Не допускается

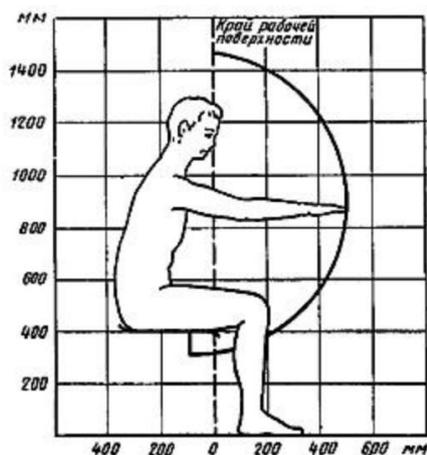
загромождения рабочих мест, проходов, выходов из помещений и здания, доступа к противопожарному оборудованию.

Кроме этого, все исследователи должны приобрести страховку от несчастных случаев, которая составляет не менее 10% от зарплаты. Единовременные и ежемесячные страховые выплаты назначаются, если по заключению учреждения медико-социальной экспертизы застрахованный работник в результате несчастного случая на производстве или профессионального заболевания полностью или частично утратил профессиональную трудоспособность, либо могут быть назначены лицам, имеющим право на получение таких выплат в случае смерти застрахованного.

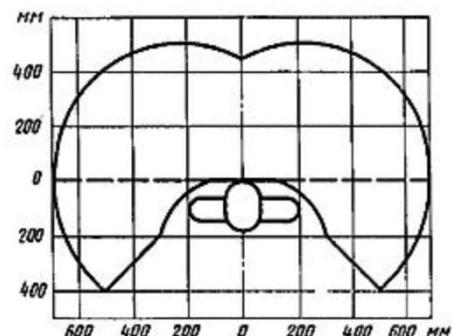
5.2.2 Организационные мероприятия при компоновке рабочей зоны исследователя

Работа в лаборатории в основном выполняется сидя. Согласно ГОСТ 12.2.032-78, конструкция рабочего места и взаимное расположение всех его элементов (сиденье, органы управления, средства отображения информации и т. д.) должны соответствовать антропометрическим, физиологическим и психологическим требованиям, а также характеру работы.

Конструкцией рабочего места должно быть обеспечено выполнение трудовых операций в пределах зоны досягаемости моторного поля. Зоны досягаемости моторного поля в вертикальной и горизонтальной плоскостях для средних размеров тела человека приведены ниже на Рис. .



а) Зона досягаемости моторного поля в вертикальной плоскости



б) Зона досягаемости моторного поля в горизонтальной плоскости

Рис. 10. Зона досягаемости моторного поля

Выполнение трудовых операций "часто" и "очень часто" должно быть обеспечено в пределах зоны лёгкой досягаемости и оптимальной зоны моторного поля, приведённых ниже на Рис. .

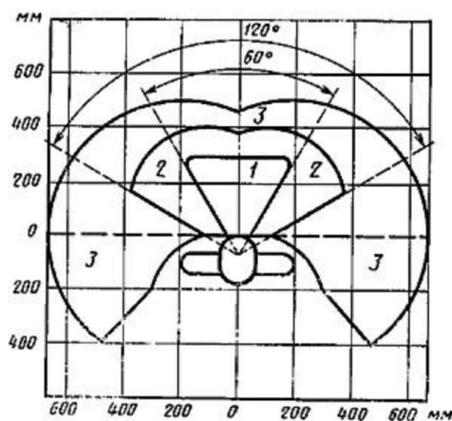


Рис. 11. Зоны досягаемости

1 – зона для размещения наиболее важных и очень часто используемых органов управления;

2 – зона для размещения часто используемых органов управления;

3 – зона для размещения редко используемых органов управления.

Конструкцией рабочего места должно быть обеспечено оптимальное положение работающего. Числовые значения высоты рабочей поверхности, сиденья и пространства для ног определяют по Рис. .

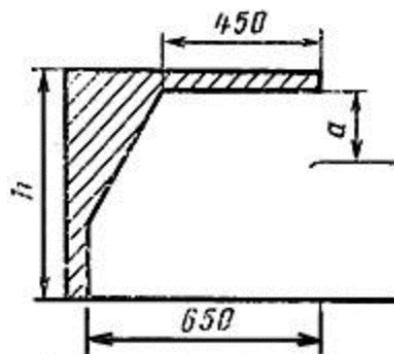


Рис. 12. Параметры конструкции рабочего места
 а – расстояние от сиденья до нижнего края рабочей поверхности не менее 150 мм;
 h – высота пространства для ног не менее 600 мм.

5.3 Производственная безопасность

Согласно документу ГОСТ 12.0.003-2015, неблагоприятные производственные факторы по результирующему воздействию на организм человека делятся на два вида – вредные факторы и опасные факторы. Вредные производственные факторы (ВПФ) – факторы, приводящие к заболеванию, в том числе усугубляющие уже имеющиеся заболевания. А опасные производственные факторы (ОПФ) – факторы, приводящие к травме, в том числе смертельной.

Согласно приведённому выше определению, перечислены опасные и вредные факторы ниже в Табл. 5.1.

Табл. 5.1. Перечень опасные и вредные факторы при исследовании

Фактор (ГОСТ 12.0.003-2015)	Этапы работ			Нормативные документы
	Разработка планов и поиск литературы	Алгоритм записи	Обсуждение результатов	

Ионизирующие излучения	+	+	+	В документе СанПиН 2.6.1.2523-09 даются нормы радиационной безопасности.
Жидкий азот	+	+	+	В документе ГОСТ 9293-74 даются требования безопасности жидкого азота.
Высоковольтное электричество	+	+	+	В документе ГОСТ Р 12.1.019-2017 даются стандарты опасности для электрических приборов высокого напряжения.

5.3.1 Высоковольтное электричество

Детекторы работают под высоким постоянным электрическим напряжением (несколько тысяч вольт). Согласно ГОСТ Р 12.1.019-2017 данная лаборатория относится к третьему классу опасности, т. е. помещения с особой опасностью поражения электрическим током. В прямом контакте с таким электричеством могут возникать ожоги, фибрилляция желудочков сердца и повреждение нервной системы. В тяжёлых случаях может привести к смерти.

Мероприятия по защите исследователя от действия высокого электрического напряжения включает в себя недоступность токоведущих частей путём их надёжной изоляции, применения защитных ограждений (кожухов, крышек, сеток и т. д.). Кроме этого, в системе питания должен устроиться защитное отключение, оградительное устройство и сигнализация.

Согласно ГОСТ 12.1.030–81, надо гарантировать, что все электрооборудование и приборы находятся на своих местах и имеют защитное

заземление с сопротивлением не более 4 Ом, напряжением не более 12 В (шахты), 36 В (стройка) и током не более 0.1 мА.

При работе, которая может подвергаться воздействию высокого напряжения электричества, нужно ещё принимать индивидуальные защиты, например резиновые изоляционные одежды, обуви и перчатки.

5.3.2 Ионизирующие излучения

Ионизирующие излучения – вредный фактор. При исследовании используется радиоизотоп ^{44}Ti в качестве источника позитронов. При аннигиляции позитронов выпускается ещё γ -излучение. В лаборатории используемый источник является слабым, но длительное облучение увеличивает частоту возникновения рака и генетические заболевания.

Согласно СанПиН 2.6.1.2523-09, предел доз для исследователя составляет 20 мЗв в год в среднем за любые последовательные 5 лет, но не более 50 мЗв в год.

По защите исследователя от ионизирующих излучений, необходимо установить свинцовый экран на рабочем столе. Для хранения и использования радиоактивных источников необходимо использовать специализированный контейнер и инструменты. Ещё надо экипировать счётчик Гейгера людям, работающим с радиоизотопом.

5.4 Экологическая безопасность

5.4.1 Анализ влияния объекта исследования на окружающую среду

Разработанный макет лаборатории предполагает использование компьютера. Использование этих устройств напрямую связано с использованием электричества. Развитие энергетики оказывает существенное влияние на окружающую среду, являясь источником различных видов

загрязнения воздуха, воды, земной поверхности и ее недр, а также основным потребителем топливных ресурсов, определяющих уровень его производства.

5.4.2. Анализ влияния процесса исследования на окружающую среду.

Наш компьютер отвечает высоким требованиям безопасности работы. Эти устройства соответствуют требованиям следующих международных стандартов безопасности для электрооборудования, применяемого для измерения, контроля и лабораторных исследований:

- IEC 61010-1, EN 61010-1;
- UL 61010-1, CSA 61010-1.

Основное влияние на окружающую среду заключается в образовании и поступлении твердых отходов в виде отработанных ПК, их компонентов и содержащихся в них вредных веществ.

5.4.3 Обоснование мероприятий по защите окружающей среды

Охрана окружающей среды от загрязнений – не только важнейшая задача улучшения здоровья людей и сохранения природы, но и серьезный фактор увеличения эффективности производства. Загрязнение атмосферы и водных источников приводит к снижению отдачи всех видов производственных ресурсов народного хозяйства: уменьшению производительности труда, эффективности работы оборудования, снижению качества продукции, увеличению расходов здравоохранения, коммунально-бытовое обслуживание. Возникает экономический ущерб от загрязнения окружающей среды в следствие роста заболеваемости населения, ускорения износа машин, зданий, личного имущества граждан, падения продуктивности земельных, водных лесных ресурсов.

Воздействие компьютеров на окружающую среду при эксплуатации регламентировано рядом стандартов. Выделяют две группы стандартов и рекомендаций – по безопасности и эргономике.

При утилизации старых компьютеров происходит их разработка на фракции: металлы, пластмассы, стекло, провода, штекеры. Из одной тонны компьютерного лома получают до 200 кг меди, 480 кг железа и нержавеющей стали, 32 кг алюминия, 3 кг серебра, 1 кг золота и 300 г палладия.

Переработку промышленных отходов производят на специальных полигонах, создаваемых в соответствии с требованиями СНиП 2.01.28-85 и предназначенных для централизованного сбора обезвреживания и захоронения токсичных отходов промышленных предприятий, НИИ и учреждений

5.5 Безопасность в чрезвычайных ситуациях

В данном пункте рассмотрены вероятные ЧС, которые могут возникнуть на рабочем месте при проведении исследований, соответствующие мероприятия по их предотвращению и порядка действия в случае их возникновения.

Рассмотрим следующие наиболее вероятные ЧС – пожар и затопления.

5.5.1 Пожар

Существуют много возможных факторов, которые могут вызвать пожар, в них включаются перегрев приборов, электрическая утечка и т. д.

По ГОСТ 12.0.003-2015, объекты, пожары на которых могут привести к массовому поражению людей, находящихся на этих объектах, и окружающей территории опасными и вредными производственными факторами, а также опасными факторами пожара и их вторичными проявлениями.

Имеется система пожарной безопасности, обеспечивающие минимально возможную вероятность возникновения пожара. Конкретные значения минимально возможной вероятности возникновения пожара определяются

проектировщиками и технологами при паспортизации этих объектов в установленном порядке.

План эвакуации людей при пожаре из помещения, представлен на рисунке 13



РИС 13. Плана эвакуации

Согласно ГОСТ 12.0.004-2015, предотвращение возгорания достигается за счёт исключения легко воспламеняющихся предметов и источников воспламенения, а также для поддержания окружающей среды в условиях, которые препятствуют возгоранию. Во избежание пожара все приборы, выделяющие тепло, должны быть оснащены системой охлаждения для предотвращения перегрева. Необходимо рационально проектировать цепи электропитания и часто их проверять. В помещении надо установить средства противопожарной защиты. Кроме этого, надо максимально возможно применять негорючие и трудногорючие вещества, ограничить их массы и (или) объёма и размещать наиболее безопасным способом.

В случае пожара система противопожарной защиты должна автоматически сигнализировать и звонить пожарникам. В том случае необходимо отключить электричество, правильно размещать опасные химические вещества и радиоактивные материалы, затем эвакуировать от помещения. Пожарным должен честно заявлять об опасных химических веществах и радиоактивных материалах.

5.5.2 Затопление

Томская область имеет влажный климат с большим количеством осадков. В течение этого возможно возникать наводнения. Лаборатория находится в цокольном этаже, что сильно увеличивает риск затопления.

В лаборатории размещено много ценных экспериментальных приборов, образцов и документов. Затопления лаборатории может приводит к серьёзному материальному ущербу. Кроме этого, поскольку в лаборатории существует высоковольтное электрическое питание, наводнение может привести к электрической утечке и соответственно привести к жертвам. Более того, утечка химических и радиоактивных веществ из лаборатории может также вызвать серьёзное экологическое загрязнение.

Защитные меры включают в себя размещение прибора на столе на высоте не менее 0,5 м над землёй, строение дренажной системы вокруг лаборатории и добавление водостойких слоёв.

В случае затопления необходимо отключить электричество, правильно размещать опасные химические вещества и радиоактивные материалы, затем эвакуировать от помещения к высокой местности.

5.6 Заключение

Исследование сопровождается некоторыми опасными факторами, исследователи должны пройти обучение и приобрести страховку от несчастных

случаев перед работой. Компонировка рабочего места должна соответствовать требованиям эргономики и безопасности.

В процессе исследования существуют такие опасные и вредные факторы, как жидкий азот, высоковольтное электричество и ионизирующие излучения. По защите исследователя от этих факторов, должны приниматься индивидуальная защита, система вентиляция, защитное заземление, защитное отключение, свинцовый экран, счётчик Гейгера и т. д.

В процессе исследования используются малое количество нетоксических металлических образцов, жидкий азот долгосрочный слабый источник позитронов. Считаем, что процесс исследования почти не оказывает воздействия на окружающую среду.

В лаборатории могут возникать чрезвычайные ситуации, как пожар, затопление. Для предотвращения возникновения следует принимать систему противопожарной защиты, водонепроницаемые меры и системы защиты от молнии. При возникновении ЧС особое внимание требуется для правильного размещения химических и радиоактивного веществ.

5.7 Список литературы

1. Вышлов, В.А. Техническое регулирование: безопасность и качество / В.А. Вышлов, Б.Г. Артемьев, 2007. – 696 с.
2. ГОСТ 12.2.032-78 ССБТ. Рабочее место при выполнении работ сидя. Общие эргономические требования.
3. ГОСТ 12.1.006-84 ССБТ. Электромагнитные поля радиочастот. Общие требования безопасности.
4. ГОСТ Р 22.3.03-94. Безопасность в ЧС. Защита населения. Основные положения.
5. Трудовой кодекс Российской Федерации от 30.12.2001 N 197-ФЗ (ред. от 01.04.2019)
6. ГОСТ 12.0.003-2015 ССБТ. Опасные и вредные производственные факторы. Классификация.

Заключение

В данной работе проведено рассмотрение свойств симметрии молекулы водяного пара. Выполнена классификация колебательно-вращательных

состояний молекулы на группе C_{2v} . В модели эффективного гамильтониана использованы операторы, отвечающие за взаимодействия типов Ферми и Кориолиса в полиаде $\mu=4$. Разработан алгоритм и написана программа на языке FORTRAN, в основе которой лежит матричная формулировка уравнения Шредингера. Выполнен расчет колебательно-вращательных энергий состояний полиады $\mu=4$ для молекулы H_2O .

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Beardsworth R., Bunke P.R., Jensen P., Kraemer W.P. Rotation-Vibration Energy Levels of H₂O and C₃ Calculated Using the Nonrigid Bender Hamiltonian // J. Mol. Spectrosc. – 1986. – V. 118. – P. 50-63.
2. Camy-Peyret C., Flaud J.M. Vibration-Rotation Intensities in H₂O-Type Molecules Application to the 2ν₂, ν₁ and ν₃ Bands of H₂¹⁶O // J. Mol. Spectrosc. – 1975. – V. 55. – P. 278-310.
3. Flaud J.M., Camy-Peyret C. The Interacting States (020), (100), and (001) of H₂¹⁶O // J. Mol. Spectrosc. – 1974. – V. 51. – P. 142-150.
4. Camy-Peyret C., Flaud J.M. The Interacting States (030), (110), and (011) of H₂¹⁶O // J. Mol. Spectrosc. – 1976. – V. 59. – P. 327-337.
5. Yelyashevich M.A. Rotational Vibrational Energy of Polyatomic Molecules // Tr. Gos. Opt. Inst. – 1938. – V. 106. – P. 938.
6. Kwan Y.Y. The Interacting States of an Asymmetric Top Molecule XY₂ of the Group C_{2v}: Application to Five Interacting States (101), (021), (120), (200), and (002) of H₂¹⁶O // J. Mol. Spectrosc. – 1978. – V. 71. – P. 260-280.
7. R. Beardsworth, P. R. Bunke, Per Jensen and W. P. Kraemer Rotation. Vibration Energy Levels of H₂O and C₃ Calculated Using the Nonrigid Bender Hamiltonian// J. Mol. Spectrosc. – 1986. – V. 118. – P. 50-63
8. R. A. Toth and J. S. Margolis. Line positions of H₂O in the 1.33 to 1.45 micron region // J. Mol. Spectrosc. – 1975. – V. 55. – P. 229
9. C. Camy-Peyret, J. M. Flaud, J. P. Maill-, and G. Guelachvili. Higher ro-vibrational levels of H₂O deduced from high resolution oxygen-hydrogen flame spectra between 6200 and 9100 cm⁻¹// Mot. Phys – 1977. – V. 33 – P. 1641-1650
10. Byrqn T. Darling and David M. Dennison The Water Yapor Molecule// Phys. Rev – 1940. – V. 57 – P. 128-139

11. G. D. Carney, L. A. Curtiss, and S. K. Langhoff. Improved Potential Functions for Bent AB_2 Molecules: Water and Ozone // J. Mol. Spectrosc – 1976 – V. 61, – P. 371-381
12. A. R. Hoy. A Precise Solution of the Rotation Bending Schrödinger Equation for a Triatomic Molecule with Application to the Water Molecule // J. Mol. Spectrosc – 1979. – V. 74 – P. 001-008
13. A. D. Bykov, V. P. Lopasov, Yu. S. Makushkin, L. N. Sinitsa, O. N. Ulenikov, and V. E. Zuev. Rotation-Vibration Spectra of Deuterated Water Vapor in the 9160-9390- cm^{-1} Region // J. Mol. Spectrosc– 1982. – V.94, – P.1-27
14. Макушкин Ю. С., Улеников О. Н., Чеглоков А. Е. Симметрия и ее применение к задачам колебательно-вращательной спектроскопии молекул. Часть 1 // Томск: Издательство ТГУ– 1990. – 224 с.
15. Быков А.Д., Макушкин Ю.С., Улеников О.Н. Изотопозамещение в многоатомных молекулах. // Новосибирск: Наука– 1985,160 с.
16. Бехтерева Е. С. Спектроскопия высокого разрешения и внутренняя динамика молекул // дисс. докт. физ.-мат. наук. Томск– 2008. 310 с.
17. Макушкин Ю. С., Улеников О. Н., Чеглоков А. Е. Симметрия и ее применение к задачам колебательно-вращательной спектроскопии молекул. Часть 2. // Томск: Издательство ТГУ – 1990. – 224 с.
18. Давыдов А. С. Квантовая механика. // Издательство Наука– 1973. – 703 с.
19. Герцберг Г. Колебательные и вращательные спектры многоатомных молекул. М. // Издательство иностранной литературы– 1949, 647 с.
20. Герцберг Г. Колебательные и вращательные спектры многоатомных молекул. под ред. М. А. Ельяшевича. // М.: ИЛ– 1965, 648 с.
21. Банкер Ф. Симметрия молекул и молекулярная спектроскопия. // Москва: Издательство Мир– 1981, 451 с.

