

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

Инженерная школа ядерных технологий
Направление подготовки 03.03.02 Физика
Отделение экспериментальной физики

БАКАЛАВРСКАЯ РАБОТА

Тема работы
Исследование фундаментальных полос ν_{12} в молекулах C_2H_4 и $C_2H_2D_2$-cis УДК 539.196

Студент

Группа	ФИО	Подпись	Дата
0Б61	Какаулин Алексей Николаевич		

Руководитель

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Профессор ИШФВП	Громова Ольга Васильевна	к.ф.-м.н., PhD		

КОНСУЛЬТАНТЫ:

По разделу «Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение»

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Доцент ОСГН ШБИП	Киселева Е.С.	к.э.н		

По разделу «Социальная ответственность»

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Ассистент ООД	Мезенцева И.Л.			

ДОПУСТИТЬ К ЗАЩИТЕ:

Руководитель ООП	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Доцент	Склярова Елена Александровна	кандидат пед. наук, доцент		

Запланированные результаты обучения по программе

Код результата	Результат обучения (выпускник способен)	Требования ФГОС, критериев и/или заинтересован ных 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 ФГОСЗ+ (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 ФГОСЗ+ (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 ФГОСЗ+ (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 библиографической культуры.	Требования ФГОСЗ+ (ОПК-4, ОПК-5, ОПК-6)
Р5	Получить организационно-управленческие навыки при работе в научных группах, критически переосмысливать накопленный опыт, изменять при необходимости профиль своей профессиональной деятельности, нести ответственность за последствия своей инженерной деятельности.	Требования ФГОСЗ+ (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 ФГОСЗ+ (ПК-1, ПК-2)
Р7	<u>Научно-инновационная деятельность</u> Применять на практике профессиональные знания теории и методов физических исследований, а также профессиональные знания и умения в результате освоения	Требования ФГОСЗ+ (ПК-3, ПК-4, ПК-5)

	профильных дисциплин для проведения физических исследований в инновационных областях науки, используя современные методы обработки, анализа и синтеза информации.	
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 использованием междисциплинарных связей физики с другими дисциплинами, участвовать в информационно-образовательных мероприятиях по пропаганде и распространению научных знаний	Требования ФГОС3+ (ПК-9)

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

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

УТВЕРЖДАЮ:
 Руководитель ООП

 (Подпись) _____ Склярова Е.А.
 (Дата) (Ф.И.О.)

**ЗАДАНИЕ
на выполнение выпускной квалификационной работы**

В форме:

Бакалаврской работы

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

Студенту:

Группа	ФИО
ОБ61	Какаулину Алексею Николаевичу

Тема работы:

Исследование фундаментальных полос ν_{12} в молекулах C_2H_4 и $C_2H_2D_2$-cis	
Утверждена приказом директора (дата, номер)	04.02.2020 г., №35-14/с

Срок сдачи студентом выполненной работы:

Срок сдачи студентом выполненной работы:	08.06.2020 г.
--	---------------

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 изотопологи 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>	<ul style="list-style-type: none"> – Обзор литературы. – Интерпретация спектра молекулы C₂H₂D₂-цис. Решение обратной спектроскопической задачи (получение спектроскопических постоянных). – Изучение интенсивностей линий полосы ν₁₂ молекулы C₂H₄ Решение обратной спектроскопической задачи (получение спектроскопических постоянных). – Раздел «Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение» – Раздел «Социальная ответственность»
<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	Киселева Елена Станиславовна, Доцент ОСГН ШБИП
Социальная ответственность	Мезенцева Ирина Леонидовна, Ассистент ООД

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

--

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

Задание выдал руководитель:

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Профессор ИШФВП	Громова Ольга Васильевна	К.ф.-м.н., PhD		

Задание принял к исполнению студент:

Группа	ФИО	Подпись	Дата
ОБ61	Какаулин Алексей Николаевич		

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

Студенту:

Группа	ФИО
ОБ61	Какаулину Алексею Николаевичу

Школа	ИЯТШ	Отделение школы (НОЦ)	ОЭФ
Уровень образования	Бакалавриат	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>	Стоимость материальных ресурсов и специального оборудования определены в соответствии с рыночными ценами г. Томска Оклады в соответствии с окладами «НИ ТПУ»
<i>2. Нормы и нормативы расходования ресурсов</i>	-Тариф на промышленную электроэнергию 5,8 за 1 кВт -районный коэффициент города Томск – 1,3
<i>3. Используемая система налогообложения, ставки налогов, отчислений, дисконтирования и кредитования</i>	- отчисления во внебюджетные фонды 30,2%

Перечень вопросов, подлежащих исследованию, проектированию и разработке:

<i>1. Оценка коммерческого потенциала, перспективности и альтернатив проведения НИ с позиции ресурсоэффективности и ресурсосбережения</i>	-Потенциальные потребители результатов исследования - Проведение анализа конкурентоспособности
<i>2. Планирование и формирование бюджета научных исследований</i>	-цели и результаты проекта; -организационная структура проекта.
<i>3. Определение ресурсной (ресурсосберегающей), финансовой, бюджетной, социальной и экономической эффективности исследования</i>	- структура работ в рамках научного исследования; -разработка графика проведения научного исследования; - бюджет научно-технического исследования.

Перечень графического материала (с точным указанием обязательных чертежей):

<ol style="list-style-type: none"> 1. Карта сегментирования рынка услуг по анализу молекулярных спектров; 2. Оценочная карта; 3. SWOT – анализ; 4. График Гантта; 5. Бюджета затрат научно-технического исследования.
--

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

Задание выдал консультант:

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Доцент ОСГН ШБИП	Киселева Елена Станиславовна	К.Э.Н		10.03.2020

Задание принял к исполнению студент:

Группа	ФИО	Подпись	Дата
ОБ61	Какаулин Алексей Николаевич		10.03.2020

ЗАДАНИЕ ДЛЯ РАЗДЕЛА «СОЦИАЛЬНАЯ ОТВЕТСТВЕННОСТЬ»

Студенту:

Группа	ФИО
0Б61	Какаулин Алексей Николаевич

Школа	ИЯШТ	Отделение (НОЦ)	ОЭФ
Уровень образования	Бакалавриат	Направление/специальность	03.03.02 Физика

Тема ВКР:

Определение параметров потенциальной функции молекулы C₂H₄	
Исходные данные к разделу «Социальная ответственность»:	
1. Характеристика объекта исследования (вещество, материал, прибор, алгоритм, методика, рабочая зона) и области его применения	<p>Объект исследования: спектры молекул C₂H₄ и C₂H₂D₂-дис.</p> <p>Рабочая зона: рабочая поверхность с ПЭВМ.</p> <p>Область применения: теоретические расчеты в лаборатории</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"> - Трудовой кодекс Российской Федерации от 30.12.2001 N 197-ФЗ (ред. от 27.12.2018) - ГОСТ 12.2.032-78 «ССБТ. Рабочее место при выполнении работ сидя. Общие эргономические требования.»
2. Производственная безопасность: 2.1. Анализ выявленных вредных и опасных факторов 2.2. Обоснование мероприятий по снижению воздействия	<ul style="list-style-type: none"> – Отклонение показателей микроклимата – Превышение уровня шума – Отсутствие или недостаток необходимого естественного и искусственного освещения
3. Экологическая безопасность:	– Безотходное производство.
4. Безопасность в чрезвычайных ситуациях:	<ul style="list-style-type: none"> – Сильные морозы – Пожары – Несанкционированное проникновение – Наиболее типичная ЧС: Пожар

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

Задание выдал консультант:

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Ассистент ООД	Мезенцева И.Л.			11.03.2020

Задание принял к исполнению студент:

Группа	ФИО	Подпись	Дата
0Б61	Какаулин Алексей Николаевич		11.03.2020

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) 03.03.02 «Физика»

Уровень образования Бакалавр

Отделение школы (НОЦ) Экспериментальной физики

Период выполнения _____ (осенний / весенний семестр 2019 /2020 учебного года)

Форма представления работы:

Бакалаврская работа

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

КАЛЕНДАРНЫЙ РЕЙТИНГ-ПЛАН выполнения выпускной квалификационной работы

Срок сдачи студентом выполненной работы:	08.06.2020 г.
--	---------------

Дата контроля	Название раздела (модуля)/ вид работы (исследования)	Максимальный балл раздела (модуля)
01.02.2020	Аналитический обзор литературы	10
20.03.2020	Объект и методы исследования; Расчеты и аналитика	40
05.04.2020	Результаты проведенного исследования	30
20.05.2020	Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение	10
25.05.2020	Социальная ответственность	10

СОСТАВИЛ:

Руководитель ВКР

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Профессор	Громова Ольга Васильевна	К.ф.-м.н., PhD		

СОГЛАСОВАНО:

Руководитель ООП

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Доцент	Склярова Елена Александровна	кандидат пед. наук, доцент		

РЕФЕРАТ

Выпускная квалификационная работа 122 с., 8 рис., 24 табл., 59 источников, 5 прил.

Ключевые слова: Молекула C_2H_4 , молекула $C_2H_2D_2$ -цис, молекулярная спектроскопия, спектры высокого разрешения, спектроскопические параметры.

Объектом исследования является (ются) ИК-спектры поглощения молекул C_2H_4 и $C_2H_2D_2$ -цис.

Цель работы – исследование колебательно-вращательного спектра высокого разрешения молекул C_2H_4 и $C_2H_2D_2$ -цис фундаментальной полосы ν_{12} .

В процессе исследования проводились интерпретация спектров с помощью метода комбинационных разностей, на основе полученных результатов интерпретации была решена обратная спектроскопическая задача и получены спектроскопические параметры, получены интенсивности линий по подгонке их формы с помощью профиля Армана-Тран, получены коэффициенты самоуширения и смещения.

В результате исследования спектров молекулы $C_2H_2D_2$ -цис в области $1150-1450\text{ см}^{-1}$ было проинтерпретировано порядка 5600 переходов, принадлежащих $\nu_{12}(B_1)$, $\nu_3(A_1)$, $2\nu_{10}(A_1)$ и $\nu_8+\nu_{10}(A_2)$. Впервые 1666 переходов были определены в полосе ν_3 , 89 переходов в полосе $2\nu_{10}$ и 3 перехода в полосе $\nu_8+\nu_{10}$. При решении обратной спектроскопической задачи получено 89 спектроскопических параметров, восстанавливающих экспериментальные данные с погрешность $d_{rms}=2,59\times 10^{-4}\text{ см}^{-1}$. В результате анализа спектров молекулы C_2H_4 в области полосы ν_{12} , было получено 998 интенсивностей линий (1491 переход), $J^{\text{макс}} = 48$ и $K_a^{\text{макс}} = 17$, в экспериментальных спектрах по подгонке форм линий с помощью профиля Армана-Тран и шести эффективных параметров дипольного момента для полосы ν_{12} . Были получены коэффициенты самоуширения для 253 линий и смещения для 225 линий.

Область применения: астрофизика, планетология и атмосферная оптика.

Экономическая эффективность/значимость работы Полученные результаты используются для пополнения российских и международных баз данных.

В будущем планируется изучение других изотопологов молекулы этилена.

Оглавление

Введение	11
Обзор литературы	13
1 Методы теоретического исследования спектров молекулы	14
1.1 Колебательно-вращательный гамильтониан свободной молекулы	14
1.2 Приближение Борна - Оппенгеймера	20
1.3 Операторная теория возмущений	21
1.4 Метод комбинационных разностей	25
1.5 Принцип работы Фурье-спектрометра	27
2 Анализ молекулы C₂H₂D₂-цис	28
3 Анализ молекулы C₂H₄	38
3.1 Изотопический эффект	38
3.2 Интенсивность линии	39
3.3 Исследование интенсивностей полосы ν_{12} молекулы C ₂ H ₄	41
4 Социальная ответственность	48
5 Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение	61
5.1 Потенциальные потребители результатов исследования	61
5.2 Анализ конкурентных технических решений	62
5.3 SWOT-анализ	64
5.4. Планирование научно-исследовательских работ	67
Структура работ в рамках научного исследования	67
Определение трудоемкости выполнения работ	68
Разработка графика проведения научного исследования	70
5.5 Бюджет научно-технического исследования (НТИ)	72
5.6 Определение ресурсной (ресурсосберегающей), финансовой, бюджетной, социальной и экономической эффективности исследования	77
Заключение	79
Список литературы	80
Приложение А	86
Приложение Б	106
Приложение В	114
Приложение Г	115
Приложение Д	116

Введение

Для полного понимания устройства мира нужно исследовать микромир. Анализ спектров колебательно-вращательной спектроскопии молекул позволяет получить данные о физических характеристиках молекул, определить спектроскопические постоянные, межмолекулярный потенциал. Эти знания применяются для решения ряда прикладных задач (задачи газоанализа, астрофизики, химии).

Как один из важнейших газов на нашей планете, этилен оказывает влияние на химический состав атмосферы и глобального климата. Один из основных растительных гормонов, отвечающий за рост и созревание растений и их плодов. Что позволяет использовать этилен для ускорения созревания плодов в промышленных масштабах. А также образование этилена в клетках животных в процессе перекисного окисления липидов, делает этилен одним из важных предметов для исследований биохимиков, физиологов [1,2]. Этилен влияет на химический состав атмосферы, поэтому его концентрация, источники появления и его поглотители представляют интерес для науки об атмосфере. Этилен является одним из наиболее важных веществ для изучения астрофизики [3–5] и был обнаружен в атмосферах планет-гигантов Солнечной системы и их спутников [6–10]. Наличие этилена на планетах имеющих твердую поверхность, служит одним из сигналов возможного существования форм жизни [11-12]. Помимо прикладного интереса, этилен также важен как пример прототипа в развитии нашего понимания взаимосвязанных спектров, динамики и потенциальных гиперповерхностей многих органических молекул.

Из-за высокой симметрии материнской молекулы этилена получение полной информации затруднительно, так как не все необходимые данные получается извлечь из анализа спектров. Для молекулы C_2H_4 могут не проявляться до половины полос поглощения. По этой причине важно исследовать различные изотопологи, например, дейтеро – и карбоно-замещенных модификаций с симметрией ниже, чем у материнской молекулы. Для дальнейшего развития методов колебательно-вращательной спектроскопии

изучение изотопологов является основной для нахождения соотношений между спектроскопическими и фундаментальными параметрами.

Целью, данной выпускной квалификационной работы является исследование колебательно-вращательного спектра высокого разрешения молекул C_2H_4 и $C_2H_2D_2$ -цис фундаментальной полосы ν_{12} .

Для выполнения данной цели были определены следующие **задачи**:

- Анализ колебательно – вращательного спектра фундаментальной полосы ν_{12} молекулы $C_2H_2D_2$ -цис с последующим решением обратной спектроскопической задачи.
- Определение интенсивностей, коэффициентов самоуширения и смещения линий в полосе ν_{12} для молекулы C_2H_4 .

Обзор литературы

Последняя работа по анализу положений линий полосы ν_{12} для основной модификации этилена (колебательно-вращательные энергетические уровни) была представлена в [13]. Более 2900 переходов с максимальными значениями квантовых чисел $J^{\text{макс}} = 48$ и $K_a^{\text{макс}} = 17$ были определены в полосе ν_{12} и с помощью подгонки получен набор спектроскопических параметров, который воспроизводит 1086 значений колебательно-вращательных энергий (2902 колебательно-вращательных переходов) со среднеквадратичным отклонением $d_{\text{rms}} = 2,31 \times 10^{-4} \text{ см}^{-1}$. Интенсивности отдельных линий полосы ν_{12} изучались ранее в работах [14, 15]. Анализ интенсивности полосы ν_{12} проводился в работе [15] (хотя ее интегральная интенсивность была получена в [16–18]). 525 интенсивностей линий было экспериментально зарегистрировано в [15] ($J^{\text{макс}}=35$ и $K_a^{\text{макс}} = 8$) и проанализировано с использованием профиля Фойгта для отдельно стоящих линий. Позже, в работе [14] были получены эффективные параметры дипольного момента для набора полос ν_{10} , ν_7 , ν_4 и ν_{12} , однако для экспериментальной полосы ν_{12} использовались экспериментальные данные из [15]. Насколько известно, определение параметров самоуширения и смещения для колебательно-вращательных линий полосы ν_{12} на основе экспериментальных данных до сих пор не были представлены в литературе (например, параметр самоуширения в [15] принимался как $0,125 \text{ см}^{-1} \text{ атм}^{-1}$ при 296К для всех линий полосы ν_{12} , что является обобщенным параметром самоуширения для полосы ν_7 из [19-20]).

Что касается $\text{C}_2\text{H}_2\text{D}_2$ -цис-изотополога, то данная молекула обсуждалась ранее в работах [21] - [35]. Для исследования в данной работе была выбрана полоса ν_{12} , которая является второй наиболее сильной полосой после фундаментальной ν_7 , и была проанализирована ранее в работах [23], [26], [31], [33]. Последний раз анализ производился в работе [33], определено около 2000 переходов, принадлежащих данной полосе с максимальными значениями квантовых чисел $J^{\text{макс}} = 45$ и $K_a^{\text{макс}} = 19$.

1 Методы теоретического исследования спектров молекулы

1.1 Колебательно-вращательный гамильтониан свободной

молекулы

Для полного теоретического описания физических явлений, необходимо построение математической модели. В зависимости от цели описания, сложности явления, наличия теорий, модель можно создать разным образом. Но также важно, чтобы математическая модель была физически обоснованной для тех явлений, которые мы пытаемся описать. При использовании некорректных моделей, в лучшем случае мы получим количественное не соответствие, но обычно и качественное. Поэтому для описания спектров молекул необходимо правильно построить гамильтониан молекулы. Выбор вида оператора Гамильтониана напрямую влияет на решение уравнения Шредингера.

Рассматривая молекулы с физической точки зрения, мы можем представить ее как систему, состоящую из электронов и атомных ядер. Поэтому для получения точного описания уровней энергии молекулы необходимо получить решение уравнение Шредингера с гамильтонианом, зависящим не только от координат всех частиц молекулы, но и учитывающим спины и взаимодействия этих частиц. И здесь возникают первые проблемы, если построение такого гамильтониана является сложной задачей, то получение решения с таким гамильтонианом будет еще более сложной задачей. На данный момент существует единственный выход, это применение различных приближений в построении гамильтонианов молекул.

Одним из представлений такого гамильтониана может выступать нерелятивистский гамильтониан вида:

$$H = T_{яд} + T_{эл} + V, \quad (1.1.1)$$

Где $T_{яд}$ и $T_{эл}$ – операторы кинетической энергии ядер и электронов, V – оператор потенциальной энергии молекулы, учитывающий энергию отталкивания между электронами и межъядерное отталкивание, притяжение между электронами и ядрами. Данные операторы можно представить в виде:

$$\begin{aligned}
T_{яд} &= -\frac{\hbar^2}{2} \sum_N \frac{1}{m_N} \left(\frac{\partial^2}{\partial x_N^2} + \frac{\partial^2}{\partial y_N^2} + \frac{\partial^2}{\partial z_N^2} \right), \\
T_{эл} &= -\frac{\hbar^2}{2} \sum_i \frac{1}{m_e} \left(\frac{\partial^2}{\partial x_i^2} + \frac{\partial^2}{\partial y_i^2} + \frac{\partial^2}{\partial z_i^2} \right), \\
V &= \sum_{i,j>i} \frac{e^2}{r_{ij}} + \sum_{N,N'>N} \frac{Z_N Z_{N'}}{r_{N N'}} - \sum_{i,N} \frac{e Z_N}{r_{i N}}
\end{aligned} \tag{1.1.2}$$

Где m_N и m_e – массы ядер и электронов, Z_N и e – заряды ядер и электрона, r_{ab} – расстояние между a -й и b -й частицами. Координаты ядер x_n и координаты электронов x_i заданы в декартовой пространственно – фиксированной системе (ПФС).

Одним из удобнейших способов для описания молекулы является представление функции состояний зависящей от ориентации молекулы в ПФС, а также от расположения ядер молекулы, то есть необходимо выбрать координатную систему в таком виде, чтобы она была связана с молекулой.

Первая из задач появляющихся при исследовании молекул это получение из Гамильтониана, записанного в ПФС, перейти к квантово-механическому Гамильтониану, связанному с системой координат молекулы. Гамильтониан молекулы от обобщенных координат x_n всегда может быть преобразован к системе новых обобщенных координат q_m , если мы знаем закон преобразования координат и их производных.

$$x_n = f_n(q_m), \quad \frac{\partial}{\partial x_n} = f'_n \left(q_m, \frac{\partial}{\partial q_l} \right), \tag{1.1.3}$$

Если для преобразования (1.1.3) якобиан преобразования не является нулем, то для производных всегда существует соотношение типа (1.1.3), при том всегда единственное. Важное уточнение, можно получить бесконечное множество выражений для гамильтониана из-за того, что в формулы переходов общем случае можно задать бесконечным числом способов. Но заметим, что будут существовать преобразования, с помощью которых можно собственные функции одного Гамильтониана перевести в собственные функции другого

Гамильтониана, а, следовательно, все эти гамильтониана будут иметь совпадающий набор собственных значений. Вопрос выбора и преобразования Гамильтониана заключается только в удобности его применения.

В настоящее время одним из наиболее удачных преобразований координат, с помощью которого можно разделить различные движения в молекуле, считается преобразование

$$\begin{aligned}x_{N\alpha} &= R_\alpha + \sum_{\beta} \kappa_{\alpha\beta} r'_{N\beta}, \\x_{i\alpha} &= R_\alpha + \sum_{\beta} \kappa_{\alpha\beta} r'_{i\beta},\end{aligned}\tag{1.1.4}$$

Где $x_{N\alpha}$ и $x_{i\alpha}$ – компоненты векторов, характеризующие положения N-го ядра и i -го электрона в пространственной системе координат. \mathbf{K} – матрица направляющих косинусов углов между осями начальной системы и системы после преобразования. \vec{R} – вектор начала молекулярной системы координат относительно пространственной. Молекулярную систему координат определяют таким образом, чтобы начало координат находилось в центре масс молекулы. Математически это можно записать следующим образом

$$\sum_N m_N r'_{N\beta} + \sum_i m_e r'_{i\beta} = 0,\tag{1.1.5}$$

Здесь $r'_{i\beta}$ – компоненты координат i -го электрона в молекулярной системе. Координаты N-го ядра r' можно выразить следующим образом

$$r'_{N\beta} = r'_{N\beta}{}^e + \sum_{\lambda} m_N^{-1/2} l_{N\beta\lambda} Q_{\lambda},\tag{1.1.6}$$

Где произвольные в общем случае константы $r'_{N\beta}{}^e$ и $l_{N\beta\lambda}$; Q_{λ} – колебательные координаты. Зададим $r'_{N\beta}{}^e$ и $l_{N\beta\lambda}$ таким образом, чтобы выполнялись условия:

- Колебания должны быть нормальными;
- Должны выполняться условия Экарта;
- В положении равновесия главные оси инерции молекулы и оси молекулярной системы совпадают;
- Совпадение $r'_{N\beta}$ и $r'_{N\beta}{}^e$ в положении равновесия;

Данные требования можно записать в математическом виде следующим образом

$$\sum_{N,\beta,\gamma} \varepsilon_{\alpha\beta\gamma} m_N^{1/2} r'_{N\beta} r'_{N\gamma} l_{N\alpha} = 0, \quad (1.1.7)$$

$$\sum_{N,\alpha} l_{N\alpha\lambda} l_{N\alpha\mu} = \delta_{\lambda\mu}, \quad (1.1.8)$$

$$W_{\lambda\mu} = \left(\frac{\partial^2 V}{\partial Q_\lambda \partial Q_\mu} \right)_{Q=0} = 0, \quad \lambda \neq \mu \quad (1.1.9)$$

$$\sum_N m_N r'_{N\alpha} r'_{N\beta} = 0, \quad \alpha \neq \beta \quad (1.1.10)$$

$$\left(\frac{\partial V}{\partial Q_\lambda} \right)_{Q=0} = 0, \quad (1.1.11)$$

Где V потенциальная функция молекулы; $\varepsilon_{\alpha\beta\gamma}$ – антисимметричный тензор

К выше перечисленным 5 условиям добавим условие (1.1.5), которое перепишем в виде

$$\sum_N m_N r'_{N\beta} + \sum_i m_e r'_{i\beta} = 0, \quad (1.1.12)$$

$$\sum_N m_N^{1/2} l_{N\beta\lambda} = 0, \quad (1.1.13)$$

Приведенные $3N$ условия (1.1.10-1.1.12) являются достаточными для определения $3N$ параметров $r'_{N\beta}$, а для определения $3N(3N-6)$ констант форм колебаний $l_{N\beta\lambda}$ хватит $3N(3N-6)$ соотношений (1.1.7-1.1.9) и (1.1.13). Это позволяет записать преобразование координат (1.1.4) в конкретном виде.

Но у данной схемы введения новых координат, описанной с помощью соотношений (1.1.4-1.1.13) есть весомый минус: задача многократно усложняется из-за того, что необходимо знать не только ядерную конфигурацию в каждый момент времени, для определения положения ядер и электронов, но также необходимо расположение электронов относительно ядер (данное следствие вытекает из условия 1.1.12), так как в центр масс молекулы перенесена новая координатная система.

Более удобным определением координат является, отсчитывание $r'_{N\beta}$ и $r'_{i\beta}$ от центра масс не молекулы, а системы ядер. В таком случае координатные оси

зависят только от конфигурации ядер, и их определение не вызывает затруднения в любых случаях. Тогда формулу преобразования координат можно записать в виде

$$\begin{aligned} x_{N\alpha} &= R_\alpha + \sum_{\beta} \kappa_{\alpha\beta} \left(r_{N\beta}^e + \sum_{\lambda} m_N^{-1/2} l_{N\beta\lambda} Q_\lambda - \frac{m_e}{M} \sum_i r_{i\beta} \right), \\ x_{i\alpha} &= R_\alpha + \sum_{\beta} \kappa_{\alpha\beta} \left(r_{i\beta} - \frac{m_e}{M} \sum_j r_{j\beta} \right), \end{aligned} \quad (1.1.14)$$

Где $r_{N\beta}$ и $r_{i\beta}$ – положение ядер и электронов с системой координат фиксированной в центре масс ядер;

$$M = \sum_N m_N + \sum_i m_e,$$

- полная масса молекулы. В таком случае не изменятся и уравнения для определения параметров преобразования $r_{N\beta}^e$ и $l_{N\beta\lambda}$ и примут вид (1.1.7-1.1.11),(1.1.13) (но теперь в них используются $r_{N\beta}^e$ и $r_{i\beta}$, а не $r_{N\beta}'$ и $r_{i\beta}'$), условие (1.1.12) примет вид:

$$\sum_N m_N r_{N\beta}^e = 0, \quad (1.1.15)$$

С помощью преобразования координат (1.1.14), теперь можно узнать закон преобразования операторов $P_{N\alpha} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x_{N\alpha}}$ и $P_{i\alpha} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x_{i\alpha}}$. Данное преобразование проделано в работах [36,37] и выражения для операторов импульсов будут выглядеть следующим образом

$$\begin{aligned} P_{i\alpha} &= \frac{m_e}{M} P_\alpha + \sum_{\beta} \kappa_{\alpha\beta} P_{i\beta}, \\ P_{N\alpha} &= \frac{m_N}{M} P_\alpha + \sum_{\beta} \kappa_{\alpha\beta} \left(\sum_{\lambda} \sqrt{m_N} l_{N\beta\lambda} P_\lambda - \sum_{\gamma\delta} m_N \varepsilon_{\beta\gamma\lambda} r_{N\gamma}^e I_{\lambda\delta}'' N_\delta - \frac{m_e}{M_N} \sum_j P_{j\beta} \right), \end{aligned} \quad (1.1.16)$$

Здесь $M_N = \sum_N m_N$ – масса всех ядер молекулы; P_α – сопряженный импульс координате при рассмотрении поступательного движения молекулы как целого; P_λ – импульс, сопряженный Q_λ и $I_{\lambda\delta}''$ – элементы тензора момента инерции, зависящего от координат Q_λ . Оператор N_α имеет вид

$$N_a = J_a - G_a - L_a,$$

Где J_a - компоненты полного момента;

$$G_a = \sum_{\lambda\mu} \zeta_{\lambda\mu}^\alpha Q_\lambda P_\mu$$

-компоненты колебательного момента

$$L_a = \sum_{\beta\gamma} \varepsilon_{\alpha\beta\gamma} \sum_i r_{i\beta} P_{i\gamma}$$

-компоненты электронного углового момента.

В результате преобразований гамильтониан можно привести к виду [36,37]

$$H = \sum_\alpha \frac{P_\alpha^2}{2M} + \frac{1}{2m_{el}} \sum_{i\alpha} P_{i\alpha}^2 + \frac{1}{2M_N} \sum_\alpha \left(\sum_i P_{i\alpha} \right)^2 + \frac{1}{2} \sum_\lambda P_\lambda^2 + \quad (1.1.17)$$

$$+ \frac{1}{2} \sum_{\alpha\beta} (J_\alpha - G_\alpha - L_\alpha) \tilde{\mu}_{\alpha\beta} (J_\beta - G_\beta - L_\beta) + V - \frac{\hbar^2}{32\pi^2} \sum_\alpha \tilde{\mu}_{\alpha\alpha}$$

Где $\mu_{\alpha\beta}$, – элементы матрицы обратных моментов инерции. В (1.1.17) с помощью первого члена можно описать поступательное движение молекулы, с помощью второго члена можно описать кинетическую энергию электронов молекулы. Третий член возникает из-за несоответствия центра масс ядер и молекулы, и данное явление называется изотопическим сдвигом; четвертый член отвечает за колебательное движение ядерного остова, а пятый член за его вращение. Оператор V – преобразованное выражение (1.1.2), $(\hbar^2/8) \sum_\alpha \tilde{\mu}_{\alpha\alpha}$, $(\hbar^2/8)$ – Уотсоновская добавка [38].

Гамильтониан записанный в выражении (1.1.17) можно назвать гамильтонианом для многоатомной нелинейной молекулы во «внутренних» координатах. Легко заметить, что данный подход, использованный для преобразования гамильтониана вида (1.1.1), можно использовать для выражений более сложного вида. Но важно заметить, что преобразование, проведенное в данном параграфе справедливо только для нелинейных молекул.

1.2 Приближение Борна - Оппенгеймера

В молекулярной физике приближение Борна – Оппенгеймера гласит о том, что движение электронов и ядер можно отдельно описать. Гамильтониан свободной молекулы при рассмотрении простейшего случая, в отсутствии внешних полей, будет состоять из суммы двух компонент: кинетической энергии электронов и ядер, с учетом их кулоновского взаимодействия. Для построения гамильтониана в более сложных ситуациях применяют теорию возмущений. Как хорошо известно, в современной квантовой механике точное решение уравнения Шредингера для многоатомных молекул с гамильтонианом (1.1.1) невозможно, поэтому предпочтительно перейти к гамильтониану (1.2.17). Как было показано в работе [39], гамильтониан (1.2.17) можно разделить на 3 части разного порядка малости:

$$H = H_{эл} + \Delta H_1 + \Delta H_2,$$

Где

$$\begin{aligned} H_{эл} &= \frac{1}{2m_e} \sum_{i\alpha} P_{i\alpha} + V, \\ \Delta H_1 &= \sum_{\alpha} \frac{P_{\alpha}^2}{2M} + \frac{1}{2} \sum_{\lambda} P_{\lambda}^2 + \frac{1}{2} \sum_{\alpha\beta} \tilde{\mu}_{\alpha\beta} (J_{\alpha} - G_{\alpha})(J_{\beta} - G_{\beta}), \\ \Delta H_2 &= \frac{1}{2M_N} \sum_{\alpha} \left(\sum_i P_{i\alpha} \right)^2 + \frac{1}{2} \sum_{\alpha\beta} \tilde{\mu}_{\alpha\beta} (L_{\alpha} L_{\beta} - (J_{\alpha} - G_{\alpha})L_{\beta} - L_{\alpha}(J_{\beta} - G_{\beta})) \end{aligned} \quad (1.2.18)$$

В таком случае решение уравнения Шредингера разобьется на 2 части: первая часть будет описывать движение электронов в поле ядер, вторая часть будет описывать движение ядер в поле электронов.

Первая задача соответствует решению стационарного уравнения Шредингера с гамильтонианом $H_{эл}$:

$$H_{эл} \psi_n^{эл}(\Delta r_{NK}) = E_n(\Delta r_{NK}) \psi_n^{эл}(\Delta r_{NK}) \equiv V_n(\Delta r_{NK}) \psi_n^{эл}(\Delta r_{NK}) \quad (1.2.19)$$

Можно заметить, что для гамильтониана $H_{эл}$ из (1.2.19) собственные функции и собственные значения зависят от расстояний между ядрами Δr_{NK} в молекуле. Если зафиксировать n и параметризовать точки $V_n(\Delta r_{NK})$ для различных r_{NK} , то данная параметризация будет называться потенциальной функцией молекулы.

Электронная задача является достаточно сложной задачей, для решения которой используют ab initio методы, основная проблема которых заключается в их точности по сравнению с экспериментальной точностью. Данные методы отстают по точности от экспериментальных точностей на порядки. Но с каждым годом растет мощность компьютеров, разрабатываются более совершенные методы, а также есть вероятность в скором времени появления квантовых компьютеров, что в совокупности может позволить ab initio методам сравняться по точности с полуэмпирическими. Но в настоящий момент одними из лучших методов для определения ВМПФ молекул являются полуэмпирическими методами, связанными с решением уравнения Шредингера с эффективным гамильтонианом изолированного электронного состояния:

$$H_n^{\text{эфф}} = V_n(\Delta r_{NK}) + \langle \psi_n^{\text{эл}} | \Delta H_1 | \psi_n^{\text{эл}} \rangle \quad (1.2.20)$$

$$+ \langle \psi_n^{\text{эл}} | \Delta H_2 | \psi_n^{\text{эл}} \rangle \quad (1.2.21)$$

$$+ \sum_{m \neq n} \frac{\langle \psi_n^{\text{эл}} | \Delta H_1 + \Delta H_2 | \psi_m^{\text{эл}} \rangle \langle \psi_m^{\text{эл}} | \Delta H_1 + \Delta H_2 | \psi_n^{\text{эл}} \rangle}{E_n - E_m} + \dots \quad (1.2.22)$$

В соответствии с приближением Борна-Оппенгеймера получен гамильтониан (1.2.20), адиабатическое приближение и не адиабатические поправки к приближению Борна – Оппенгеймера соответствуют поправкам (1.2.21) и (1.2.22), соответственно. Появление малых добавок порядка κ^4 параметрам гамильтониана (1.2.20) в результате учета поправок (1.2.21) и (1.2.22) было показано в работах [39,40].

$$H = \frac{1}{2} \sum_{\lambda} P_{\lambda}^2 + \frac{1}{2} \sum_{\alpha\beta} \mu_{\alpha\beta} (J_{\alpha} - G_{\alpha})(J_{\beta} - G_{\beta}) + V, \quad (1.2.23)$$

Где κ – параметр малости $\left(\frac{m_e}{M}\right)^{1/4}$, $\mu_{\alpha\beta}$ – элементы матрицы обратных моментов инерции, усредненные по электронным переменным.

1.3 Операторная теория возмущений

Из-за невозможности решить аналитически уравнение Шредингера для молекул сложнее системы типа H_2^+ возникает проблема для описания

квантовой системы. Данные полученные в результате решения уравнения Шредингера позволяют получить обширную информацию о молекуле такую, как возможные энергии, вероятности переходов, зная собственные функции, средние значения физических величин молекулы. Поэтому приходится использовать другой подход к решению уравнения Шредингера – использование приближенных методов решения, например, теории возмущений [41]. В этом методе используют следующий подход, гамильтониан системы представляют в виде

$$H = H_0 + h$$

Где H_0 – оператор гамильтониана с известными решениями уравнения Шредингера, а h – малая добавка к данному оператору. В таком случае операторы H_0 и h зависят от одних переменных. Другая форма представления разбивает гамильтониан H на слагаемые различного порядка малости.

$$H = H_0 + \sum_{n=1}^{\infty} H_n(\kappa^n) \quad (1.3.24)$$

Символ κ^n указывает на порядок малости оператора H_n по сравнению с оператором H_0 , который можно определить как (κ^n) , где κ – параметр порядка $(m_e/M_n)^{1/4}$; M_n – масса ядер молекулы и m_e – масса электрона. Можно было бы представить гамильтониан h в виде $\sum H_n(\kappa^n)$ и воспользоваться традиционной теорией возмущения для решения уравнения Шредингера. Но тогда полученными результатами нельзя будет пользоваться. Для сохранения физических основ полученные операторы должны быть эрмитовыми. В нашем случае оператор начального приближения H_0 и оператор $H_n(\kappa^n)$ не будут операторами одних и тех же переменных. Оператор нулевого приближения будет зависеть от колебательных переменных, а операторы $H_n(\kappa^n)$ будут зависеть как от колебательных, так и вращательных переменных. И если в классической теории возмущения в итоге получаются сумма чисел, то при применении для операторов получится сумма из комбинаций операторов,

которые не коммутируют в общем случае, а в следствии не являются эрмитовыми.

Один из самых успешных методов для решения задач в молекулярной спектроскопии является метод эффективных операторов [36]. В основе метода лежит идея, о составлении такого эрмитового гамильтониана H' который бы:

- 1) Мог иметь решение уравнения Шредингера в явном виде
- 2) Множество A^* решений уравнения Шредингера с применением эрмитового оператора H' точно совпадает с некоторым подмножеством A' множества A решений УШ с изначальным оператором H

Оператор, который будет удовлетворять данным условиям, называют эффективным на подмножестве A' гамильтонианом.

В работе [36] авторами был разработан способ построения эффективного вращательного гамильтониана. В основе этого способа находится использование операторов проектирования [36,39]. С помощью этого способа авторам удалось определить эффективный оператор в симметризованном виде и получить параметры данного гамильтониана в виде аналитических функций параметров исходного колебательно-вращательного гамильтониана.

Рассмотрим случай, представим оператор Гамильтона в следующем виде:

$$H = H_0(a) + h(a,b) \quad (1.3.25)$$

Где $H_0(a)$ – гамильтониан начального приближения, $h(a,b)$ – оператор возмущений, a и b – переменные от которых зависят гамильтониан нулевой аппроксимации и оператор возмущений. Обозначим собственные значения оператора H_0 , как E_α , а собственные функции этого же оператора, как $|\alpha\rangle$. Пусть функции $|i\rangle$ являются полным набором ортонормированных функций, зависящих от переменных b . Тогда в гильбертовом пространстве функции $|\alpha, i\rangle = |\alpha\rangle |i\rangle$ также образуют полный набор ортонормированных функций.

С помощью унитарного оператора G задачу можно разделить на колебательную и вращательную, и перейти к новому эффективному оператору гамильтона, с тем же набором собственных значений.

$$H_{\text{эфф}} = G^+ HG \quad (1.3.26)$$

Оператор G является произвольным оператором, поэтому его можно выбрать таким образом, чтобы матрица гамильтониана приняла вид блочно-диагональной матрицы.

$$\langle \alpha | H_{\text{эфф}} | \beta \rangle = \begin{pmatrix} H & 0 & 0 & \dots \\ 0 & x & x & \dots \\ 0 & x & x & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots \end{pmatrix} \quad (1.3.27)$$

Для этого необходимо выполнение двух условий:

$$\langle \alpha^0 | H_{\text{эфф}} | \beta' \rangle = \langle \alpha^0 | G^+ HG | \beta' \rangle = 0 \quad (1.3.28)$$

$$\langle \alpha' | H_{\text{эфф}} | \beta^0 \rangle = \langle \alpha' | G^+ HG | \beta^0 \rangle = 0 \quad (1.3.29)$$

Оператор G с помощью разложения в ряд Тейлора можно представить в следующем виде

$$G = \exp\left(i \sum_n g_n(x^n)\right) \quad (1.3.30)$$

$$G^+ = \exp\left(-i \sum_n g_n(x^n)\right) \quad (1.3.31)$$

Распишем формулы (1.3.28-29)

$$\begin{aligned} \langle \alpha^0 | H | \beta' \rangle &= \langle \alpha^0 | G^+ HG | \beta' \rangle = \\ &= \langle \alpha^0 | (\exp(i \sum_n g_n(x^n)) \cdot H \cdot \exp(-i \sum_n g_n(x^n))) | \beta' \rangle = \\ &= \langle \alpha^0 | (1 - i \sum_{n-1} g_n(x^n) + \frac{1}{2}(-i^2)(\sum_{n-1} g_n(x^n))^2 + \dots) \{H_0 + h\} (1 + \\ &+ i \sum_{n-1} g_n(x^n) + \frac{1}{2}(-i^2)(\sum_{n-1} g_n(x^n))^2 + \dots) | \beta' \rangle = 0 \end{aligned} \quad (1.3.32)$$

Разложим (1.3.32) по порядку малости, так как прямое вычисление является затруднительным.

$$\langle \alpha^0 | H_0 | \beta' \rangle = 0 \quad (1.3.33)$$

$$\langle \alpha^0 | h_0 - ig_1 H_0 + H_0 ig_1 | \beta' \rangle = 0 \quad (1.3.34)$$

$$\langle \alpha^0 | h_2 - ig_1 h_1 + H_0 ig_2 - ig_2 H_0 - \frac{1}{2} g_1^2 H_0 - \frac{1}{2} H_0 g_1^2 - ig_1 H_0 ig_1 | \beta' \rangle = 0 \quad (1.3.35)$$

Для случая $\langle \alpha^0 | = \langle 0 |$ первое уравнение примет вид:

$$\langle 0 | ig_1 | \beta' \rangle = \frac{\langle 0 | h | \beta' \rangle}{E_{\beta'} - E_0} \quad (1.3.36)$$

$$\langle 0 | ig_2 | \beta' \rangle = \frac{\langle 0 | h | 0 \rangle \langle 0 | h | \beta' \rangle}{(E_{\beta'} - E_0)^2} - \sum_{\beta \neq 0} \left(\frac{\langle 0 | h | \alpha \rangle \langle \alpha | h | \beta' \rangle}{(E_{\beta'} - E_0)(E_{\alpha} - E_0)} \right) \quad (1.3.37)$$

Теперь собственные значения оператора H можно определить через диагонализацию матрицы для оператора $H_{эфф}$. Данный подход имеет одно важное преимущество, подматрица $\langle i | H_{эфф} | j \rangle$ является конечномерной по индексам $|\alpha\rangle$ и $|\beta\rangle$, поэтому для нахождения энергии определенного вращательного уровня колебательного состояния, нет необходимости диагонализировать всю матрицу $\langle i | \langle \alpha | H_{эфф} | \beta | j \rangle$, будет достаточно рассмотреть только ее подматрицу $\langle i | H_{эфф} | j \rangle$.

1.4 Метод комбинационных разностей

Одним из методов определения энергетических колебательно-вращательных уровней является метод комбинационных разностей. Так как для основного колебательного состояния уровни и положения линий, обычно, очень хорошо известны, то возможно определить уровни возбужденного колебательного состояния.

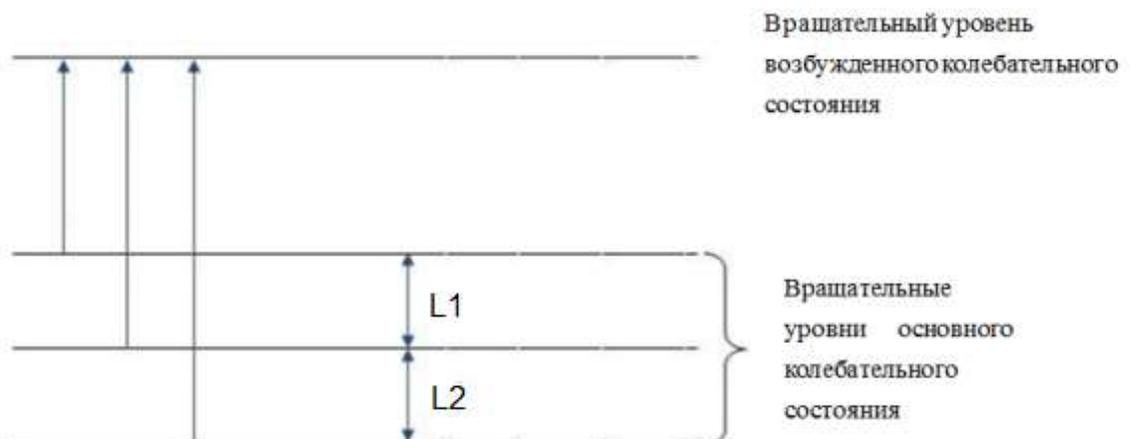


Рисунок. 1.4.1 - Иллюстрация метода комбинационных разностей

Мы хорошо знаем расстояния ($L1$ и $L2$ на рисунке 1.4.1) между основными уровнями колебательного состояния, поэтому возможно составить, так называемую «линейку» или «расческу». Деления «линейки» или зубцы «расчески» будут соответствовать расстояниям $L1$ и $L2$. Рассмотрим следующий случай, мы составили «линейку» из трех делений, дальше эта конструкция движется по спектру, пока какие-либо 3 линии не совпадут с делениями «линейки» (Рисунок 1.4.2). Пройдя весь спектр, мы можем получить некоторый набор совпадений делений и линий в спектре. Теперь из данного набора необходимо найти верную комбинацию. Мы знаем энергию перехода с нижних уровней, поэтому нетрудно найти энергию верхнего уровня. Данный процесс является одним из способов интерпретации линий.

На сегодняшний день данный метод давно автоматизирован с помощью программ, что упрощает задачу. Так как идеальное совпадение делений с линиями практически невозможно, из-за погрешностей спектрометров и преобразований, то задается точность поиска. Поэтому только линии, чьи центры отклоняются от деления «линейки» на величину меньшую точности поиска, окажутся в выборке.

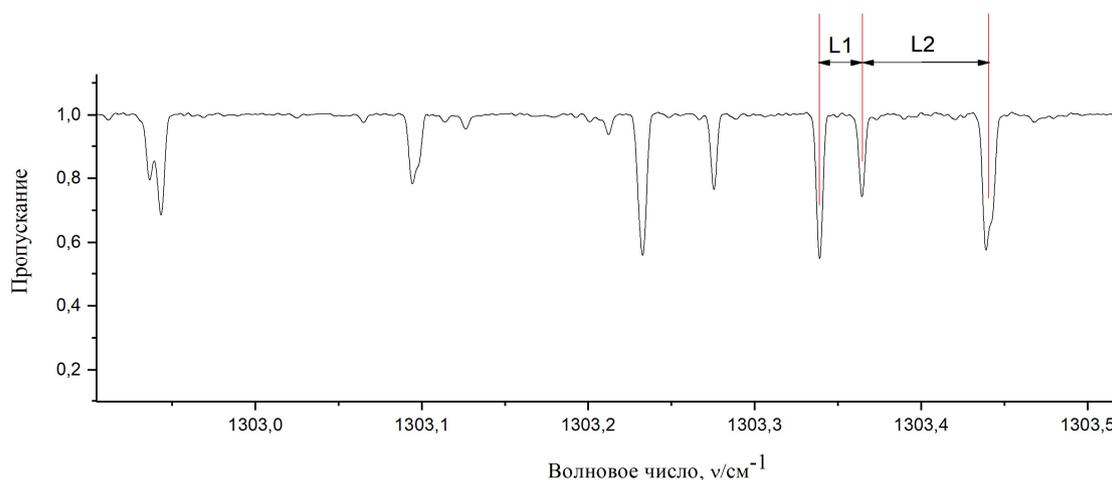


Рисунок 1.4.2 – пример движения «линейки» по спектру

1.5 Принцип работы Фурье-спектрометра

В основе работы Фурье-спектрометра находится интерферометр Майкельсона. Типичная схема интерферометра приведена на рисунке 1.5.1.

Исследуемый пучок света выходит из 1 – источника. В результате попадания света на СД – светоделитель, пучок света разделяется на два пучка, эти два пучка попадают на 3 – зеркала. К – компенсатор разности хода, вызванной тем, что один пучок света проходит через светоделитель три раза, а другой попадает на фотоприемник – 2, после первого прохождения пучка через светоделитель. Результат интерференции регистрируется в фотоприемнике – 2.

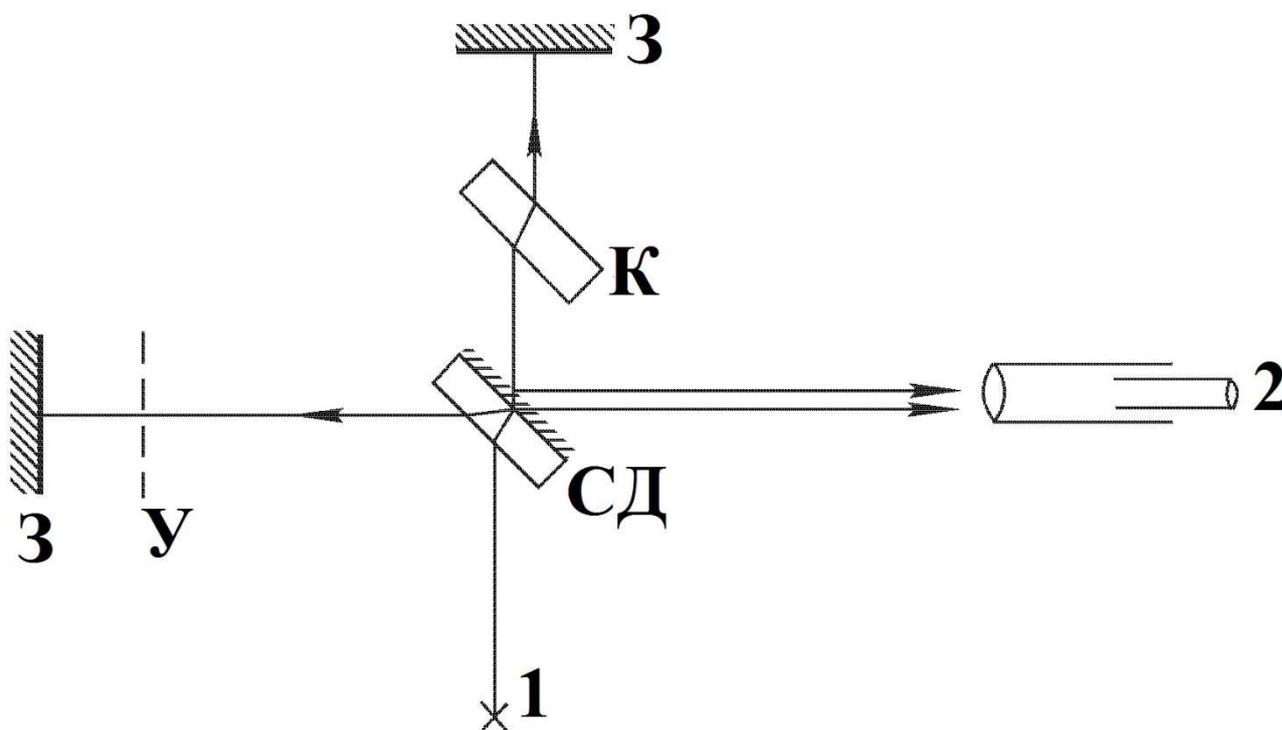


Рисунок 1.5.1 – Оптическая схема интерферометра

Данные полученные с фотоприемника с помощью аналого-цифрового преобразователя (АЦП) преобразуются в цифровую последовательность. В результате такого преобразования получится массив данных, который называется интерферограммой источника. Далее из этих данных с помощью Фурье-преобразования получают спектр в координатах положения зеркала – интенсивность сигнала. Процесс снятия интерферограммы за один рабочий цикл называется сканированием. Одно из зеркал перемещается с помощью У –

устройства изменения разности хода. Также сразу снимается опорная интерферограмма, которая необходима для связи зарегистрированного отсчета с определенной величиной разности хода. Интенсивность светового монохроматического пучка света, попадающего на приемник, меняется по косинусоидальному закону при движении зеркала. При наличии нескольких частот результирующая зависимость будет представлена в виде суммы косинусоидальных волн [42].

2 Анализ молекулы C₂H₂D₂-цис.

Три спектра молекулы C₂H₂D₂-цис были зарегистрированы в газовой фазе в диапазоне волновых чисел от 1050 до 2050 см⁻¹ с помощью инфракрасного спектрометра Bruker IFS 120 с преобразованием Фурье. Образец C₂H₂D₂-цис был приобретен в Cambridge Isotope Laboratories. Идентичность, химическая и изотопная чистота составляла более 99,99%. Эксперимент аналогичен описанным в работах [33], [43]. Таблица 2.1 дает обзор самых важных экспериментальных параметров. Использовался источник ИК-излучения Глобар, светоделитель из KBr, окна из KBr, полупроводниковый детектор на основе теллурида кадмия-ртути (МСТ) и оптическая многолучевая ячейка Уайта из нержавеющей стали с длиной основания в один метр. Образец C₂H₂D₂-цис был зарегистрирован при 20 и 200 Па с длиной пути поглощения $4,0524 \pm 0,002$ м и $24,0524 \pm 0,012$ м с апертурой 1,3 мм и 1,5 мм. 540, 470 и 830 сканов было сделано. Температуру контролировали с помощью резистивного термометра Ahlborn Almemo 2590 (PT100), поддерживая на уровне 24 °С. Оптическое разрешение составляло 0,0025 см⁻¹ и 0,0021 см⁻¹, что приводило к почти Доплеровскому ограничению спектров в сочетании с прямоугольной аподизацией. Поскольку Доплеровское уширение для C₂H₂D₂-цис при 297 К между 1050 и 2050 см⁻¹ находится в диапазоне 0,0024 - 0,0046 см⁻¹, ширина линии полного давления при 200 Па составляет 0,0004 см⁻¹, что практически ничтожно, и ширина инструментальной линии составляет 0,0017 см⁻¹ (произведение номинального инструментального разрешения 0,0025 см⁻¹ и коэффициента прямоугольной аподизации 0,68), таким образом, общая ширина линии находится в диапазоне от 0,0029 до 0,0049 см⁻¹. Ширину линии можно представить в виде сверки Доплеровской ширины, инструментальной ширины и уширение давлением. Калибровка положений спектральных линий проводилась по линиям H₂O [44].

Таблица 2.1 - экспериментальные условия зарегистрированных спектров молекулы C₂H₂D₂ - цис.

Спектр	Разрешение, см ⁻¹	Количество сканов	Оптическая длина пути, м	Апертура, мм	Температура, °С	Давление, мм
I	0,0025	540	4	1,	24±1	20
II	0,0025	470	4	1,3	24±1	200
III	0,0025	830	4	1,5	24±1	200

Молекула C₂H₂D₂-цис представляет собой асимметричный волчок (см. Рис. 2.1) со значением параметра асимметрии $k = (2B - A - C) / (A - C) \approx 0,868$ и с симметрией изоморфной точечной группе симметрии C_{2v}. Двенадцать колебательных мод распределены между четырьмя неприводимыми представлениями группы C_{2v} следующим образом: q₁, q₂, q₃, q₉ и q₁₀ принадлежат неприводимому представлению A₁; q₄ и q₈ ∈ A₂; q₅, q₆, q₁₁ и q₁₂ ∈ B₁; и q₇ ∈ B₂. В A-редукции и Γ'-представлении вращательные операторы J_α и направляющие косинусы k_{Zα} имеют следующую симметрию: J_x и k_{Zx} ∈ A₂; J_y и k_{Zy} ∈ B₁; J_z и k_{Zz} ∈ B₂. Вследствие симметрии молекулы, три типа полос проявляются в спектрах поглощения:

- (1) полосы a-типа с правилами отбора $\Delta J = 0; \pm 1$ и $\Delta K_a =$ четные, $\Delta K_c =$ нечетные, если симметрии $\Gamma_{\text{нижний}}$ и $\Gamma_{\text{верхний}}$ нижнего и верхнего колебательных состояний удовлетворяют условию $\Gamma_{\text{нижний}} \otimes \Gamma_{\text{верхний}} = B_1$;
- (2) полосы b-типа с правилами отбора $\Delta J = 0; \pm 1$ и $\Delta K_a =$ нечетные, $\Delta K_c =$ нечетные, если $\Gamma_{\text{нижний}} \otimes \Gamma_{\text{верхний}} = A_1$; а также
- (3) полосы c-типа с правилами отбора $\Delta J = 0; 1$ и $\Delta K_a =$ нечетные, $\Delta K_c =$ четные, $\Gamma_{\text{нижний}} \otimes \Gamma_{\text{верхний}} = B_2$.

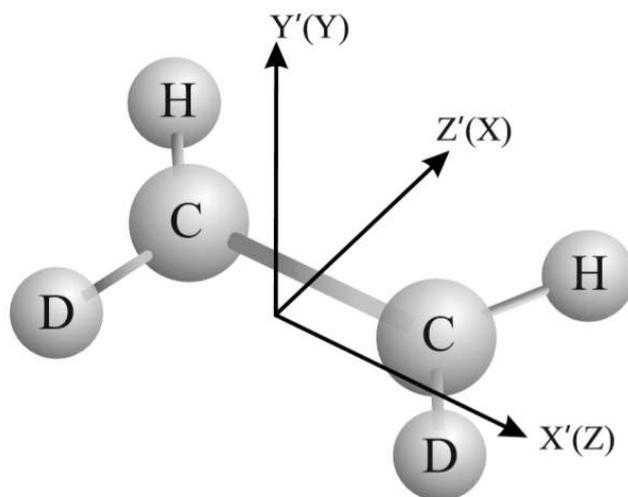


Рисунок 2.1 - ориентация осей для молекулы $C_2H_2D_2$ -цис. Символы со штрихом относятся к осям для группы симметрии C_{2v} , используемой в классификации колебательных мод.

В соответствии с вышесказанным полосы ν_3 , ν_{12} и $2\nu_{10}$ являются полосами типа b , a и b соответственно. Четвертая полоса $\nu_8 + \nu_{10}$, расположенная в той же области, что и три последние полосы, запрещена по симметрии и не проявляется в спектрах поглощения, но учтена из-за сильных резонансных взаимодействий с полосами ν_3 , ν_{12} и $2\nu_{10}$.

В качестве иллюстрации на рис 2.2 представлены спектры I (красный) и III (черный) в области $1150 - 1430 \text{ см}^{-1}$. В спектре I отчетливо видна полоса ν_{12} , другие полосы слабы и не видны в этом спектре. Спектр III в области полосы ν_{12} насыщен, но слабая полоса ν_3 частично видна около положения 1220 см^{-1} слева от полосы ν_{12} . Полоса $2\nu_{10}$ полностью покрыта сильной ν_{12} и не может быть замечена на рисунке. На спектре III отчетливо видны ветви Q (около 1400 см^{-1}) и R , принадлежащие к ν_{12} -й полосе C_2H_3D .

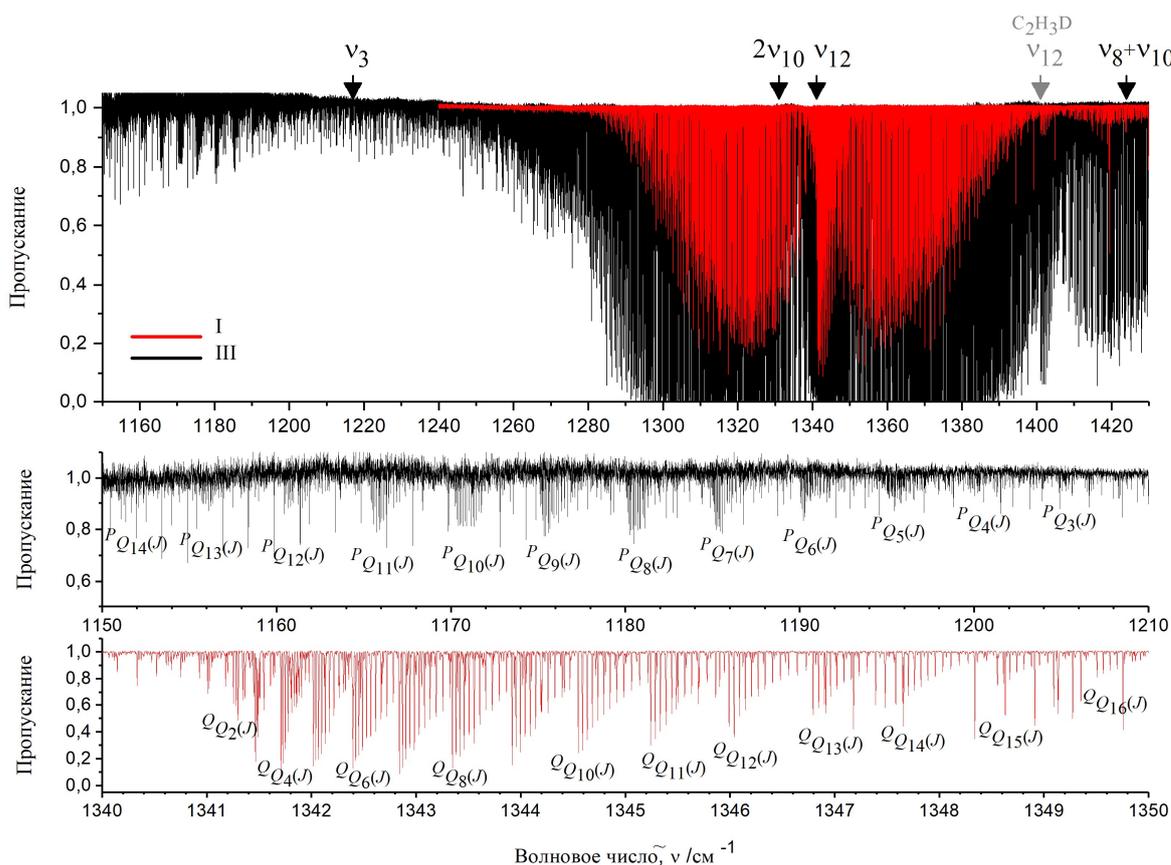


Рисунок 2.2 - На верхней части рисунка представлены спектры I (красный) и III (черный) молекулы $C_2H_2D_2$ - цис в области полос ν_3 , ν_{12} и $2\nu_{10}$. На нижней части рисунка показаны фрагменты Q – ветвей для полос ν_3 и ν_{12} .

Интерпретация переходов были сделаны на основе метода комбинационных разностей основного состояния. Вращательные энергии основного колебательного состояния были рассчитаны на основе параметров, взятых из работы [35] (в столбце 3 таблицы 2.2 приведены спектроскопические параметры). В результате анализа 1666 переходов с максимальными значениями квантовых чисел $J^{\text{макс}} = 30$ и $K_a^{\text{макс}} = 13$ были впервые определены в полосе ν_3 молекулы $C_2H_2D_2$ -цис. Для значительно более сильной полосы ν_{12} было определено 3836 переходов с максимальными значениями квантовых чисел $J^{\text{макс}} = 50$ и $K_a^{\text{макс}} = 21$ (для сравнения, 771/844/2013 переходы с максимальными значениями квантовых чисел $J^{\text{макс}} = 31/31/45$ и $K_a^{\text{макс}} = 13/13/19$ в работах [26], [31], [33]). Для полосы $2\nu_{10}$ были определены 89 переходов (в четыре раза больше, чем в [33]). К сожалению, только один верхний

энергетический уровень, определенный из трех переходов P , Q и R -ветвей, был получен для полосы $\nu_8 + \nu_{10}$.

При анализе переходов полосы ν_{12} было обнаружено, что, начиная со значения квантового числа $J=37$, значения экспериментальных комбинационных разностей отличаются от в 4-5 раз от значений соответствующих комбинационных разностей, которые были рассчитаны с параметрами из [35]. В результате решения обратной спектроскопической задачи были получены новые параметры основного состояния, значения которых приведены в столбце 2 таблицы 2.2.

Таблица 2.2 - спектроскопические параметры (в см^{-1}) основного колебательного состояния молекулы $\text{C}_2\text{H}_2\text{D}_2$ -цис.

Параметр	Данная работа	Работа [35]
A	3,32454048(12)	3,32454251
B	0,847826025(33)	0,84782640
C	0,673768776(36)	0,67376942
$\Delta_k \times 10^4$	0,488018(44)	0,487566
$\Delta_{Jk} \times 10^5$	0,36660(15)	0,36926
$\Delta_J \times 10^5$	0,117637(20)	0,117707
$\delta_k \times 10^5$	0,64643(60)	0,64297
$\delta_J \times 10^6$	0,28801(10)	0,287597
$H_K \times 10^8$	0,3406(25)	0,3302
$H_{KJ} \times 10^9$	-0,3374(89)	-0,380
$H_{JK} \times 10^{10}$		0,527
$H_J \times 10^{12}$	1,49(24)	1,5
$h_{JK} \times 10^{10}$	0,464(50)	
$h_J \times 10^{12}$	0,605(83)	
$L_{KJJ} \times 10^{13}$	0,239(12)	

Продолжение таблицы 2.2

Параметр	Данная работа	Работа [35]
$N_{ик} \times 10^4$	3050	2634
$N_{мп}$	22	22
J^{max}	50	37
K_a^{max}	17	17
$d_{rms} \times 10^4$	1,9	3,2

Новый набор параметров основного состояния дает возможность воспроизвести все начальные экспериментальные комбинационные разности с точностью, близкой к экспериментальной точности. Последняя строка таблицы 2.2 показывает значения d_{rms} , которые соответствуют воспроизведенным исходным данным. Наконец, определение переходов было сделано с новым набором спектроскопических параметров основного состояния. Список всех проанализированных переходов представлен в приложениях А-Г (также с этими результатами можно ознакомиться в работе [45]).

Данные из приложений А-Г затем использовались для определения спектроскопических параметров полос ν_3 , $2\nu_{10}$, ν_{12} , $\nu_8+\nu_{10}$. Значения параметров, полученные из этих данных, представлены в столбцах 3–6 таблицы 2.3. Значения параметров, представленных без скобок, привязаны к значениям соответствующих параметров основного колебательного состояния. Значение d_{rms} составляет $2,59 \cdot 10^{-4} \text{ см}^{-1}$, это значение близко к экспериментальной погрешности. В таблице 2.4 представлены полученные параметры резонансного взаимодействия между состояниями $(\nu_3=1)$, $(\nu_{12}=1)$, $(\nu_{10}=2)$ и $(\nu_8=\nu_{10}=1)$ молекулы $\text{C}_2\text{H}_2\text{D}_2$ -цис.

Таблица 2.3 - Спектроскопические параметры (в см⁻¹) изучаемых колебательных состояний молекулы C₂H₂D₂-дис.

Параметр	Основное состояние	($\nu_3=1$)	($\nu_{10}=2$)	($\nu_8= \nu_{10}=1$)	($\nu_{12}=1$)
E		1217,93111(38)	1330,6046(38)	1423,9862(80)	1341,150514(38)
A	3,32454048(12)	3,3345410(814)	3,293817(82)	3,22159(93)	3,361940(83)
B	0,847826025(33)	0,85190324(78)	0,836710(91)	0,82132(56)	0,85218598(78)
C	0,673768776(36)	0,6741860(67)	0,670829(31)	0,673444(31)	0,6727340(84)
$\Delta_k \times 10^4$	0,488018(44)	0,4684(22)	0,488018	0,488018	0,4987(49)
$\Delta_{Jk} \times 10^5$	0,36660(15)	0,3667(69)	0,36660	0,36660	0,3965(53)
$\Delta_J \times 10^5$	0,117637(20)	0,12246(43)	0,117637	0,117637	0,12203(40)
$\delta_k \times 10^5$	0,64643(60)	0,64643	0,64643	0,64643	0,64643
$\delta_J \times 10^6$	0,28801(10)	0,3824(29)	0,28801	0,28801	0,2943(23)
$H_K \times 10^8$	0,3406(25)	0,3406	0,3406	0,3406	0,3406
$H_{KJ} \times 10^9$	-0,3374(89)	-0,3374	-0,3374	-0,3374	-0,3374
$H_J \times 10^{12}$	0,149	0,149	0,149	0,149	0,149
$h_{JK} \times 10^{10}$	0,464	0,464	0,464	0,464	0,464
$h_J \times 10^{12}$	0,605	0,605	0,605	0,605	0,605
$L_{KJJ} \times 10^{13}$	0,239	0,239	0,239	0,239	0,239

Таблица 2.4 - Полученные параметры резонансного взаимодействия (в см⁻¹) молекулы C₂H₂D₂-цис.

Параметр	Значение	Параметр	Значение	Параметр	Значение
$^{1,2}F_0$	2,284(93)	$^{1,2}F_K$	0,01128(80)	$^{1,2}F_J \times 10^2$	0,1872(83)
$^{1,2}F_{KK} \times 10^4$	0,668(65)	$^{1,2}F_{KJ} \times 10^4$	-0,3106(77)	$^{1,2}F_{JJ} \times 10^5$	-0,1023(74)
$^{1,2}F_{KKK} \times 10^6$	-0,111(13)	$^{1,2}F_{JK} \times 10^8$	0,586(72)	$^{1,2}F_{xy} \times 10^2$	-0,3109(66)
$^{1,2}F_{Kxy} \times 10^4$	0,1570(78)	$^{1,2}F_{KKxy} \times 10^6$	-0,2973(82)	$^{1,2}F_{KKKxy} \times 10^9$	0,801(39)
$^{1,3}C^I_K \times 10^3$	0,477(66)				
$(2B\zeta^x)^{2,3}$	1,39(21)	$^{2,3}C^I_K \times 10^3$	-0,397(62)	$^{2,3}C^I_J \times 10^3$	-0,1309(18)
$^{2,3}C^I_{KK} \times 10^4$	-0,3732(52)	$^{2,3}C^I_{JK} \times 10^5$	0,1609(89)	$^{2,3}C^I_{JJ} \times 10^7$	0,1972(85)
$^{2,3}C^I_{KKK} \times 10^7$	0,5598(88)	$^{2,3}C^I_{KKJ} \times 10^8$	0,460(33)	$^{2,3}C^I_{KJJ} \times 10^9$	-0,696(32)
$^{2,3}C^2$	0,0149(47)	$^{2,3}C^2_{K2} \times 10^3$	0,1114(25)	$^{2,3}C^2_J \times 10^4$	-0,2194(96)
$^{2,3}C^2_{KK} \times 10^6$	0,371(31)	$^{2,3}C^2_{JJ2} \times 10^8$	0,358(39)	$^{2,3}C^2_{KKK} \times 10^8$	-0,1398(38)
$^{2,3}C^2_{KKJ} \times 10^9$	0,1385(96)	$^{2,3}C^2_{KJJ} \times 10^{10}$	-0,1755(95)		
$(2C\zeta^y)^{1,4}$	0,203(13)	$^{1,4}C^I_K \times 10^3$	0,353(20)	$^{1,4}C^I_J \times 10^4$	0,1672(17)
$^{1,4}C_{KK1} \times 10^6$	-0,626(96)	$^{1,4}C^I_{KKK} \times 10^8$	0,475(29)	$^{1,4}C^I_{KKJ} \times 10^9$	-0,9617(49)
$^{1,4}C_{K2} \times 10^5$	0,792(65)	$^{1,4}C^2_J \times 10^5$	0,427(20)	$^{1,4}C^2_{KJ} \times 10^7$	-0,1421(71)
$^{1,4}C_{JJ2} \times 10^8$	-0,1034(64)	$^{1,4}C^2_{KKJ} \times 10^{10}$	0,3684(25)		
$(2C\zeta^y)^{2,4}$	0,042672(86)	$^{2,4}C^I_K \times 10^3$	0,1960(86)	$^{2,4}C^I_J \times 10^4$	-0,1053(45)
$^{2,4}C^I_{KK} \times 10^5$	-0,4042(92)	$^{2,4}C^I_{KJ} \times 10^6$	0,1075(78)	$^{2,4}C^I_{KKK} \times 10^8$	-0,519(60)
$^{2,4}C^I_{KKJ} \times 10^8$	0,1728(69)	$^{2,4}C^I_{KJJ} \times 10^{10}$	-0,631(31)	$^{2,4}C^2 \times 10^2$	0,359(15)
$^{2,4}C_{K2} \times 10^5$	0,512(64)	$^{2,4}C^2_J \times 10^5$	0,1861(83)	$^{2,4}C^2_{KK} \times 10^6$	-0,1009(48)

Продолжение таблицы 2.4

Параметр	Значение	Параметр	Значение	Параметр	Значение
${}^{2,4}C_{JJ2} \times 10^8$	-0,1003(39)	${}^{2,4}C^2_{KKK} \times 10^{10}$	0,298(74)	${}^{2,4}C^2_{KJJ} \times 10^{11}$	0,154(22)
$(2A\zeta^z)^{3,4}$	-0,4766(77)	${}^{3,4}C^l_K \times 10^4$	-0,547(82)	${}^{3,4}C^l_J \times 10^4$	-0,721(57)
${}^{3,4}C^l_{KK} \times 10^6$	0,417(23)	${}^{3,4}C^l_{JJ} \times 10^7$	0,530(20)	${}^{3,4}C^2 \times 10^3$	0,637(23)
${}^{3,4}C^2_K \times 10^4$	-0,1356(61)	${}^{3,4}C^2_J \times 10^6$	0,193(20)	${}^{3,4}C^2_{KK} \times 10^7$	0,510(21)

3 Анализ молекулы C₂H₄.

3.1 Изотопический эффект

Изотопический эффект описывает, как меняются молекулы веществ при замещении одной изотопической модификации ядер на другую. Данный эффект используется не только в колебательно-вращательной спектроскопии, но также и в физике сверхпроводников, физике молекул. Но данный эффект вызывает наибольший интерес именно при исследовании молекулярных колебательно-вращательных спектров.

Как было показано в работе [46], гамильтониан $H^{\text{изотоп}}$ любой изотопической модификации молекулы можно записать в виде

$$H^{\text{изотоп}} = H + \Delta H \quad (3.1.1)$$

Как видно, гамильтониан $H^{\text{изотоп}}$ состоит из гамильтониана H - материнской молекулы и ΔH - добавочного оператора, появившегося в следствии изотопического замещения

$$\Delta H = - \sum_{N=1}^K \sum_{\alpha} \frac{\mu_N}{2m_N} P_{N\alpha}^2 \quad (3.1.2)$$

Где $P_{N\alpha} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x_{N\alpha}}$ оператор N -го атома в декартовой системе координат и

$$\mu_N = \frac{m'_N - m_N}{m'_N} \quad (3.1.3)$$

Где m'_N - масса N -го атома после изотопозамещения, m_N - масса изначального N -го атома.

Абсолютное максимальное значение μ_N обозначим, как ε

$$\varepsilon = \max |\mu_N| = \max \left| \frac{m'_N - m_N}{m'_N} \right| \quad (3.1.4)$$

Для применения теории возмущений необходимо, чтобы выполнялось условие $\varepsilon \ll 1$, поэтому рассмотрим только те случаи изотопических замещений для которых будет выполняться данное условие. В таком случае, H будет рассматриваться, как нулевое приближение, а ΔH – незначительное

возмущение. Тогда собственные значения оператора $H^{\text{изотоп}}$ примут известную форму [47].

$$E_{\nu}^{\text{изотоп}} = E_{\nu}^{\text{основн}} + \langle \tilde{\nu} | \Delta H | \tilde{\nu} \rangle + \sum_{\nu' \neq \nu} \frac{\langle \tilde{\nu} | \Delta H | \nu' \rangle \langle \nu' | \Delta H | \tilde{\nu} \rangle}{E_{\nu}^{\text{основн}} - E_{\nu'}^{\text{основн}}} \quad (3.1.5)$$

Где $E_{\text{основн}}$ и $|\tilde{\nu}\rangle$ собственные значения и собственные функции гамильтониана основной молекулы.

Сдвиг центра полосы из-за изотопического замещения можно определить

$$\Delta\nu_{\nu \leftarrow \nu'} = f(\tilde{\nu}) - f(\nu') \quad (3.1.6)$$

Где ν' – центр полосы колебательно-вращательного перехода основной молекулы; $\tilde{\nu}$ - центр полосы изотопозамещенной молекулы. Из уравнений (3.1.5-3.1.6) видно, что, если мы знаем волновую функцию гамильтониана материнской молекулы и оператор ΔH , определяемого уравнением (3.1.2), то возможно определить сдвиг $\Delta\nu$ колебательно-вращательной полосы из-за изотопического замещения.

3.2 Интенсивность линии

При пересечении параллельным монохроматическим пучком электромагнитного излучения имеющего интенсивность $I_0(\tilde{\nu})$ и волновым числом $\tilde{\nu}$ газ с толщиной поглощающих молекул l с концентрацией c' , то интенсивность излучения прошедшего через газ $I_{tr}(\tilde{\nu})$ (интенсивность пропускания) можно описать законом Бугера-Ламберта-Бера.

$$I_{tr}(\tilde{\nu}) = I_0(\tilde{\nu}) \exp[-lc'\varepsilon(\tilde{\nu})] \quad (3.2.1)$$

Где $\varepsilon(\tilde{\nu})$ - неперов логарифм, также являющийся коэффициентом поглощения. Через отношение интенсивности пропускания к начальной интенсивности можно получить коэффициент пропускания, то есть

$$\tau = \frac{I_{tr}(\tilde{\nu})}{I_0(\tilde{\nu})} = \exp[-lc'\varepsilon(\tilde{\nu})] \quad (3.2.2)$$

Если поглощающие молекулы в газе находятся в тепловом равновесии при температуре T , то при переходе из начального состояния с энергией E в

конечное с энергией E' интегральный коэффициент поглощения для электрического дипольного перехода можно представить в виде [48]

$$I(f \leftarrow i) = \int_{Line} \varepsilon(\tilde{\nu}) d\tilde{\nu} = \frac{8\pi^3 N_A \tilde{\nu}_i \exp(-E'/kT) [1 - \exp(-hc\tilde{\nu}_{if}/KT)]}{(4\pi\varepsilon_0)3hcQ(T)} S(f \leftarrow i) \quad (3.2.3)$$

Где N_A – число Авогадро, k – постоянная Больцмана, постоянная планка h , скорость света c в вакууме, диэлектрическая проницаемость вакуума ε_0 , волновые числа переходов $\tilde{\nu}_{if} = (E - E')/hc$ и функция распределения $Q(T)$, которую можно записать в виде

$$Q(T) = \sum_w g_w \exp[-E_w/kT] \quad (3.2.4)$$

В уравнении (3.2.4) E_w – энергия вырожденного состояния, а g_w полное вырождение состояния w . Определить интенсивность $S(f \leftarrow i)$ электрического дипольного перехода можно как

$$S(f \leftarrow i) = \sum_{\Phi, \Phi'} \sum_{A=X,Y,Z} |\langle \Phi | \mu_A | \Phi' \rangle|^2, \quad (3.2.5)$$

Где Φ и Φ' – собственные функции молекулярного гамильтониана, соответствующие собственным значениям энергий E и E' , соответственно. Для решения применяется пространственно-фиксированная координатная система с началом координат в молекулярном центре масс. В случае вырождения, то есть если существует две и более собственной функций, соответствующих одному и тому же собственному значению E , то путем добавления индивидуальных вероятностей перехода для всех переходов между вырожденными состояниями можно получить интенсивность. μ_A – компонента молекулярного дипольного момента вдоль A оси (A может быть равно X, Y, Z) в ПФС, которую можно записать как

$$\mu_A = \sum_j q_j A_j, \quad (3.2.6)$$

Где q_j – заряд j -ой частицы в молекуле, а A_j – координата j -ой частицы молекулы, j – номер каждого ядра и электрона в молекуле.

3.3 Исследование интенсивностей полосы ν_{12} молекулы C_2H_4

Одиннадцать экспериментальных спектров были измерены в области 700-2100 cm^{-1} с помощью инфракрасного спектрометра с преобразованием Фурье Bruker IFS125HR (прототип Zürich ZP2001) в лаборатории Технического университета Брауншвейга. Использовались источники ИК-излучения Глобар, светоделители KBr, ртутно-кадмиево-теллуридный (МСТ313) полупроводниковый детектор и оптические ячейки (типа Уайта) с окнами KBr.

Таблица 3.3.1 – экспериментальные данные зарегистрированных спектров молекулы C_2H_4 .

Спектры	Разрешение, cm^{-1}	Количество сканов	Оптическая длина пути, м	Апертура, мм	Температура, $^{\circ}C$	Давление, Па
I	0,0016	300	4	1,15	23,4 \pm 0,4	10
II	0,003	1200	4	1,7	23,2 \pm 0,8	20
III	0,003	840	8	1,7	23,6 \pm 0,5	400
IV	0,0021	500	0,01328	1,7	21,4 \pm 0,5	1000
V	0,0021	200	0,01328	1,7	21,65 \pm 0,25	2000
VI	0,0021	640	0,01328	1,7	21,85 \pm 0,25	4000
VII	0,0021	240	0,01328	1,7	21,65 \pm 0,25	6000
VIII	0,0021	500	0,01328	1,7	21,7 \pm 0,3	8000
IX	0,0021	620	0,01328	1,7	21,6 \pm 0,5	10000
X	0,0021	180	0,01328	1,7	21,6 \pm 0,3	12000
XI	0,0021	500	0,01328	1,7	21,45 \pm 0,45	15000

Образец этилена, изготовленный Linde AG с чистотой 99,99%, очищали с помощью циклов замораживания-откачки-оттаивания и регистрировали при давлениях от 10 до 1500 Па с длиной пути поглощения 4,0524 \pm 0,002 м, 8,0524 \pm 0,004 м и 13,28 \pm 0,02. Температуру контролировали с помощью резистивного термометра Ahlborn Almemo 2590 (PT100) во время регистрации спектров.

Для анализа интенсивностей линий были использованы три спектра I – III чистого этилена C_2H_4 (для экспериментальных условий при различных длинах пути и давлениях см. таблицу 3.3.1). Обзорный спектр I показан в верхней части рис. 3.3.1.

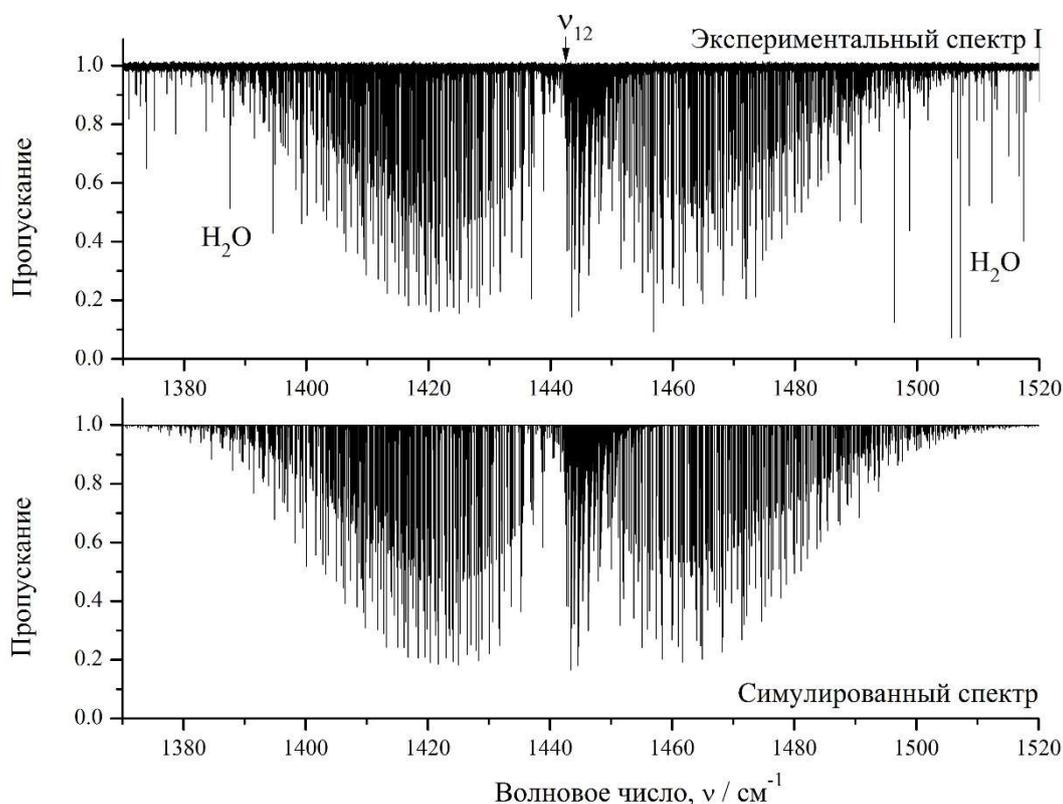


Рисунок 3.3.1- Обзорный спектр I молекулы $^{12}C_2H_4$ в области полосы ν_{12} (условия эксперимента см. в таблице 3.3.1).

Определение переходов в экспериментальных спектрах было сделано на основе метода комбинационных разностей основного состояния и данных из работы [25]. Экспериментальные интенсивности изученных линий были обработаны с помощью профилем Армана-Тран и функцией формы линии прямоугольной аподизации [32,33] для температуры 296,4 К. Экспериментальные значения интенсивностей линий были получены для 998 линий / 1491 переходов (в приложение Д приведена небольшая часть переходов. С полным списком переходов можно ознакомиться в работе [49]).

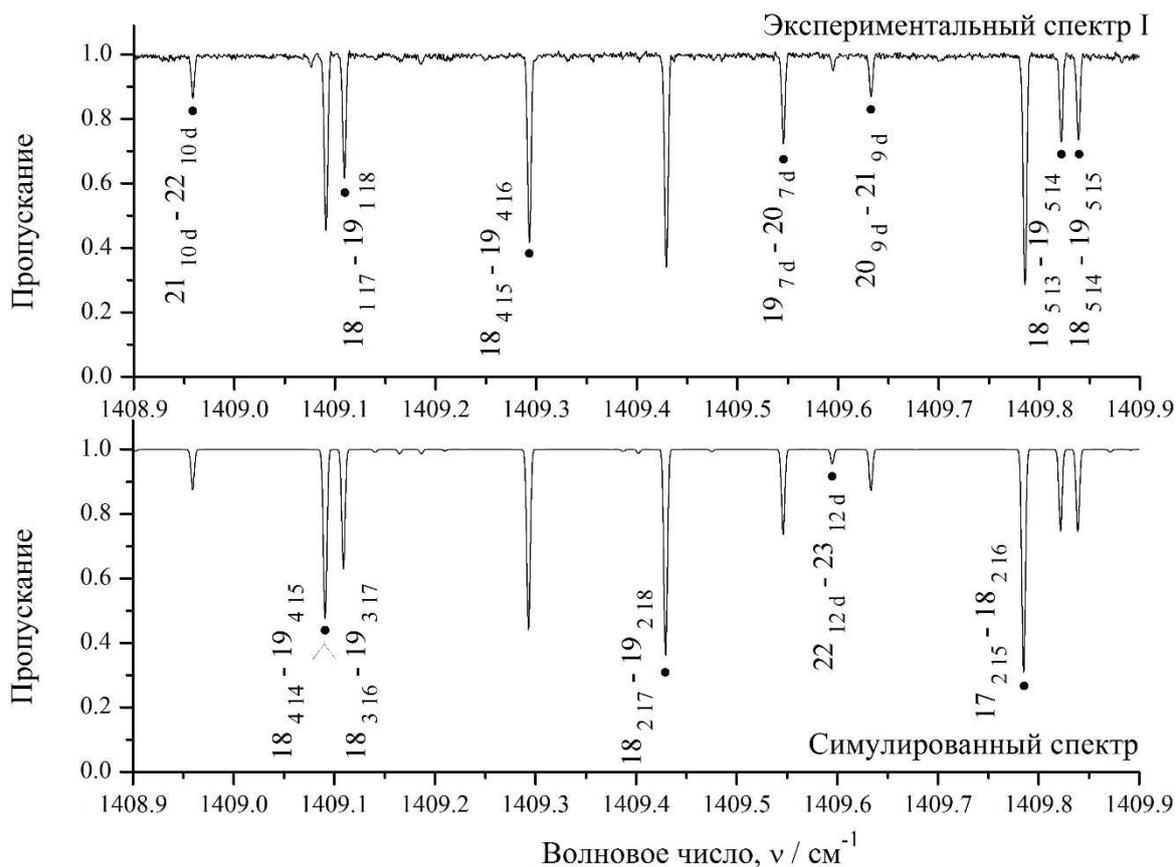


Рисунок 3.3.2 - Фрагмент экспериментального спектра I высокого разрешения (верхняя часть) $^{12}\text{C}_2\text{H}_4$ в области P -ветви полосы ν_{12} . В нижней части рисунка представлен смоделированный спектр.

Все полученные экспериментальные линии интенсивностей были использованы в качестве начальных данных параметрами $(\nu_{12} = 1)\mu_{zm}$ ($m = 1 - 8$) оператора эффективного дипольного момента.

Результаты решения обратной задачи по определению параметров эффективного дипольного момента представлены в столбце 3 таблицы 3.3.2. Набор из полученных 6 эффективных параметров дипольного момента воспроизводит 998 начальную интенсивность линий ($J^{\text{макс}} = 48$ и $K_a^{\text{макс}} = 17$) с $d_{\text{rms}} = 2,31\%$. Значения в скобках параметров μ_{zm} представляют собой 1σ статистический доверительный интервал, значение d_{rms} было получено в соответствии с формулой

$$d_{\text{rms}} = \left\{ \frac{1}{n} \sum_i \left(100 \cdot \frac{S_{\nu_i}^{N(\text{exp})} - S_{\nu_i}^{N(\text{calc})}}{S_{\nu_i}^{N(\text{exp})}} \right)^2 \right\}^{1/2} \quad (3.3.1)$$

где n - количество линий, используемых в подгонке. Для иллюстрации качества подгонки в столбце 7 таблицы 3.3.3 представлены значения отклонений (в процентах).

$$\delta_v^S = 100 \cdot \frac{(\text{exp}) S_{v_1}^N - (\text{calc}) S_{v_1}^N}{(\text{exp}) S_{v_1}^N} \quad (3.3.2)$$

между экспериментальными значениями интенсивностей линий и рассчитанными с помощью параметров из столбца 3 таблицы 3.3.2. Нижние части рис. 3.3.1–3.3.2 показаны смоделированные спектры в соответствующих спектральных областях. В результате, был получен список линий из 19186 переходов (область $1000\text{--}1700 \text{ см}^{-1}$, минимальная интенсивность линий $\sim E\text{-}37 \text{ см}^{-1} / (\text{молек} \cdot \text{см}^{-2})$, $J^{\text{макс}} = 53$, $K_a^{\text{макс}} = 20$, $|\Delta K_a| + |\Delta K| \leq 9$).

Таблица – 3.3.2 Эффективные параметры дипольного момента полосы ν_{12} $^{12}\text{C}_2\text{H}_4$

Оператор	Параметр	значение
k_{zz}	$(\nu_{12}=1) \mu_{z1}$	0,053575(27)
$\{k_{zz}, J^2\}$	$(\nu_{12}=1) \mu_{z2} / 10^{-6}$	0,476(59)
$\{k_{zz}, J_z^2\}$	$(\nu_{12}=1) \mu_{z3} / 10^{-5}$	0,421(42)
$\frac{1}{2} [\{k_{zx}, iJ_y\} - \{ik_{zy}, J_x\}]$	$(\nu_{12}=1) \mu_{z4} / 10^{-3}$	-0,34766(93)
$\frac{1}{2} [\{k_{zx}, J_x J_y + J_z J_x\} - \{ik_{zy}, i(J_y J_z + J_z J_y)\}]$	$(\nu_{12}=1) \mu_{z5} / 10^{-5}$	0,333(35)
$\frac{1}{2} [\{k_{zx}, iJ_y\} + \{ik_{zy}, J_x\}]$	$(\nu_{12}=1) \mu_{z6} / 10^{-3}$	0,2881(33)
$\frac{1}{2} [\{k_{zx}, J_x J_y + J_z J_x\} + \{ik_{zy}, i(J_y J_z + J_z J_y)\}]$	$(\nu_{12}=1) \mu_{z7}$	
$\{k_{zz}, J_{xy}^2\}$	$(\nu_{12}=1) \mu_{z8}$	

Для изучения полуширин линий и сдвигов давлением были зарегистрированы восемь дополнительных спектров $^{12}\text{C}_2\text{H}_4$ для более высоких давлений, до 15000 Па, в ячейке меньшего размера, 1.328 см (условия

эксперимента см. в таблице 3.3.1) и проанализированы с помощью одновременной подгонки к нескольким линиям поглощения, зарегистрированным при разных условиях, профилем Армана-Тран. Наборы линий ($J K_a = K_a' K_c \leftarrow (J' K_a' K_c')$), $K_a' = 0, 1, 2, 3, 4, 5$ были проанализированы во всех трех ветвях полосы ν_{12} и определены коэффициенты самоуширения для 253 линий, а также коэффициенты смещения давлением 225 линий были получены используя спектры IV –XI в таблице 3.3.1. Значения коэффициентов самоуширения $\gamma_{сам}$ и смещения $\delta_{сам}$, полученные из подгонки в соответствии с формулами:

$$\gamma = \gamma_{сам} \times P \quad (3.3.3)$$

$$\delta = \delta_{сам} \times P \quad (3.3.4)$$

показаны в столбцах 8 и 10 таблицы 3.3.3 вместе с их экспериментальными неопределенностями, которые приведены в столбцах 9 и 11. Чтобы проиллюстрировать качество результатов, в верхней части Рис. 3.3.3 показана зависимость давления от полуширины на полувывоте для переходов oP_0 (10) и oR_6 (11) в полосе ν_{12} . В нижней части рис. 3.3.3 представлены измеренные полуширины на полувывоте и максимальный сдвиг линии в зависимости от давления для тех же переходов oP_0 (10) и oR_6 (11) в полосе ν_{12} $^{12}\text{C}_2\text{H}_4$, что можно считать хорошей иллюстрацией правильности полученных результатов.

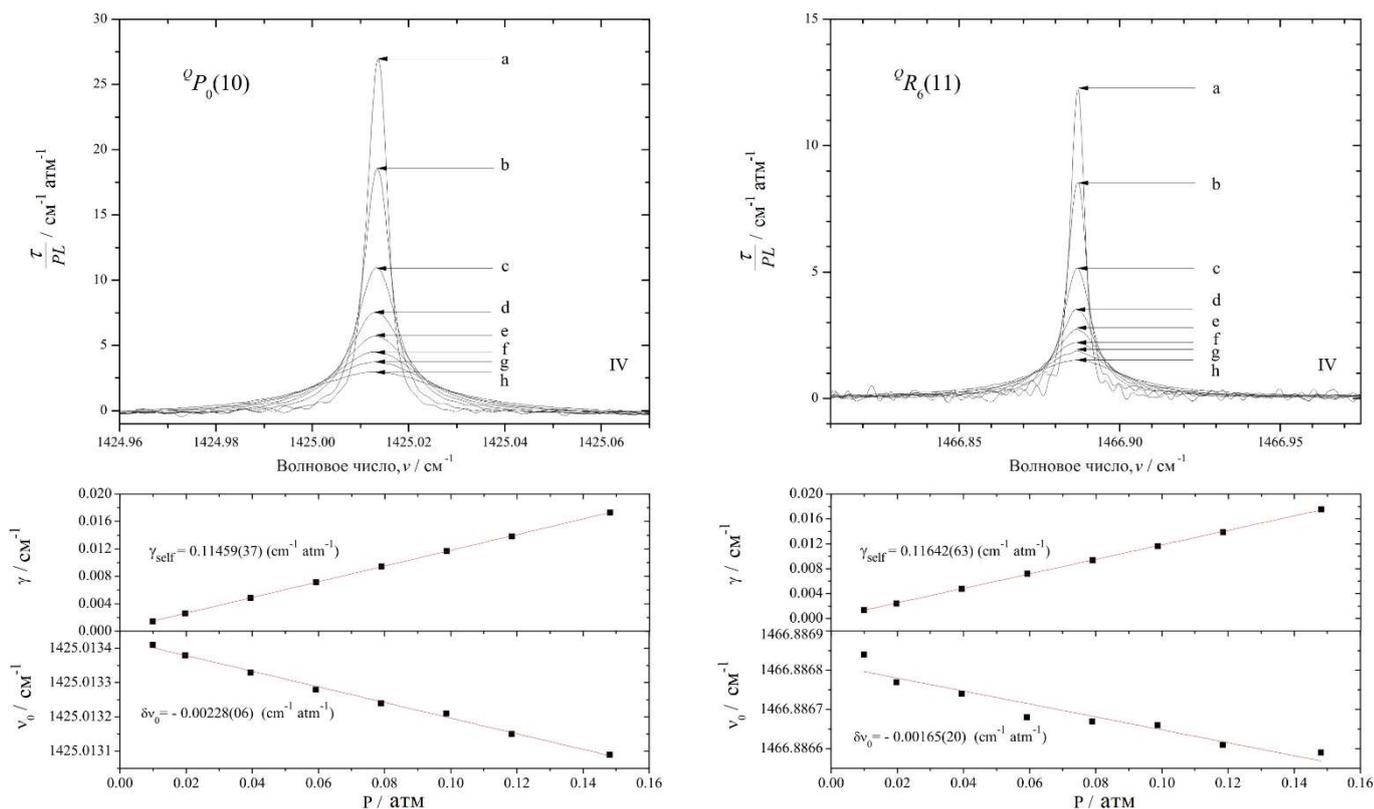


Рисунок 3.3.3 - Верхняя часть: примеры линии ИК спектров, записанных при различных давлениях для переходов ${}^0P_0(10)$ и ${}^0R_0(11)$ в полосе ν_{12} ${}^{12}\text{C}_2\text{H}_4$ (условия эксперимента см. в таблице 3.3.1). Нижняя часть: измеренные значения полуширины и максимального сдвига линии при различных давлениях при температуре 294,65 К.

Таблица 3.3.3 - Небольшая часть дополнительного материала для молекулы $^{12}\text{C}_2\text{H}_4$.

J	K_a	K_c	J	K_a	K_c	ν , cm^{-1}	δ , 10^{-4}cm^{-1}	S_ν^N (расчетная), $\text{cm}^{-1}/(\text{молек} \cdot \text{cm}^{-2})$	S_ν^N (экспр), $\text{cm}^{-1}/(\text{молек} \cdot \text{cm}^{-2})$	δ_ν^S , %	$\gamma_{\text{сам}}$ 10^{-3}cm^{-1} атм $^{-1}$	$\Delta\gamma_{\text{сам}}$ 10^{-3}cm^{-1} атм $^{-1}$	$\delta\nu_0$ 10^{-3}cm^{-1} атм $^{-1}$	$\Delta\delta\nu_0$ 10^{-3}cm^{-1} атм $^{-1}$
13	2	11	14	2	12	1416,74632	3	0,6623E-20	0,65536E-20	-1,1	111,022	0,294	-1,374	0,317
14	0	14	15	0	15	1416.76577	0	0,27046E-20	0,28105E-20	3,8	104,200	1,659	-1,653	0,277
14	1	14	15	1	15	1416.84262	0	0,26845E-20	0,28029E-20	4,2	106,345	0,621	-3,934	0,330
14	5	9	15	5	10	1416.87937	6	0,15858E-20						
14	5	10	15	5	11	1416.87937	-7	0,15855E-20	0,32470E-20	2,3	106,946	1,350	-6,438	0,512
13	1	12	14	1	13	1417.17639	2	0,29072E-20	0,30016E-20	3,1	120,120	1,280	-4,910	0,376
13	3	10	14	3	11	1417.39495	2	0,24840E-20	0,24890E-20	0,2	116,690	1,326	-6,434	0,520
13	2	12	14	2	13	1417.83943	0	0,26974E-20	0,27581E-20	2,2	116,635	1,881	-0,557	0,031
13	4	9	14	4	10	1418.07008	0	0,48048E-20	0,47500E-20	-1,2	108,905	1,601	-3,102	0,255
13	4	10	14	4	11	1418.09990	0	0,20555E-20	0,20231E-20	-1,6	113,813	1,121	-1,281	0,094

4 Социальная ответственность

Введение

Данная работа представляет собой исследование спектров молекул C_2H_4 и $C_2H_2D_2$ -цис для получения информации о интенсивностях линий и их положений. Результаты работы будут использоваться, в первую очередь, для пополнения спектроскопических баз данных, например, HITRAN, GEISA. Которые, в свою очередь, широко используются для решения многочисленных как теоретических, так и прикладных задач астрофизики, планетологии, атмосферной оптики, и т.д.

В силу теоретического характера работы для ее исполнения применялся письменный труд и так же активная работа с применением ЭВМ. Как следствие, в лаборатории, где расположены рабочие места за персональными компьютерами могут быть следующие вредные факторы: а) Отклонение показателей микроклимата; б) превышение уровня шума; в) недостаточная освещенность рабочей зоны. Лаборатория располагается на территории города Томска, по адресу Проспект Ленина 2, корпус 18а, кабинет 27.

1. Правовые и организационные вопросы обеспечения безопасности.

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

Правовые нормы трудового законодательства, относительно работы в описанных выше условиях регулируются таким документом как, трудовой кодекс Российской Федерации от 30.12.2001 N 197-ФЗ (ред. от 27.12.2018) [50]. Таким образом, нормальная продолжительность рабочего времени не может превышать 40 часов в неделю, а режим работы предусматривает продолжительность рабочей недели, в данном случае шестидневная рабочая неделя. Как следствие, применяется следующий режим работы: с понедельника по пятницу 7 часов в день, в субботу 5 часов в день. Оплата труда производится в размере не меньше МРОТ, и нормы труда установлены в

соответствии с уровнем техники, технологии, организации производства и труда.

1.2 Организационные мероприятия при компоновке рабочей зоны исследователя.

Рациональная планировка рабочего места должна обеспечивать: наилучшее размещение орудий и предметов труда, не допускать общего дискомфорта, уменьшать утомляемость работника, повышать его продуктивность труда.

Согласно ГОСТ 12.2.032-78 «ССБТ. Рабочее место при выполнении работ сидя. Общие эргономические требования.» [51], должны быть соблюдены требования о размере зоны досягаемости моторного поля в вертикальной и горизонтальной плоскостях, высоты рабочей поверхности, пространства для ног и рабочего сиденья. Отрегулировано размещение средств отображения информации, именно мониторов ЭВМ: под углом $\pm 15^\circ$ от нормальной линии взгляда и в горизонтальной плоскости под углом $\pm 15^\circ$ от сагиттальной плоскости.

2. Производственная безопасность.

2.1. Анализ вредных и опасных факторов, которые могут возникнуть на рабочем месте при проведении исследований.

В ходе анализа рабочего места при проведении исследований было выявлено, что в лаборатории возможно наличие таких вредных и опасных факторов, как недостаточная освещенность рабочего помещения, как естественным, так и искусственным освещением. Так же возможны нарушения температуры, давления, влажности и конвекции воздуха. В дополнение потенциальное превышение уровня шума от рабочего компьютерного оборудования так же может послужить вредом. Все вышеописанные факторы объединены в таблице 4.2.1 и классифицированы в соответствии с ГОСТ 12.0.003-2015 [52].

Таблица 4.2.1 - Возможные опасные и вредные факторы

Факторы (ГОСТ 12.0.003-2015)	Этапы работ		Нормативные документы
	Разра- ботка	Эксплуата ция	
1. Отклонение показателей микроклимата	+	+	1. ГОСТ 12.1.003-2014 ССБТ. Шум. Общие требования безопасности. [53]
2. Превышение уровня шума	+	+	2. СанПиН 2.2.1/2.1.1.1278–03. Гигиенические требования к естественному, искусственному и совмещённому освещению жилых и общественных зданий. [56] 3. СанПиН 2.2.4.548–96. Гигиенические требования к микроклимату производственных помещений. [55]
3. Недостаточная освещенность рабочей зоны	+	+	

Рассмотрим факторы таблицы 1 подробнее.

1) Отклонение показателей микроклимата.

Причиной отклонения от норм микроклиматических условий могут быть аномальные природные условия, такие как аномальные морозы или жара. Также несоблюдение защитных мер: попадание прямых солнечных лучей, отсутствие вентиляции воздуха в помещении, повышение влажности воздуха или перегрев рабочих поверхностей в помещении.

Повышенная влажность воздуха затрудняет терморегуляцию организма, т.к. происходит снижения испарения пота, а пониженная влажность вызывает пересыхание слизистых оболочек дыхательных путей.

В таблицах 4.2.2-4.2.3 представлены оптимальные и допустимые параметры рабочей зоны для различных категорий работ. В нашем случае, категория работ - Па, т.е. работы, связанные с постоянной ходьбой, выполняемые стоя или сидя, но не требующие перемещения тяжестей.

Таблица 4.2.2 - Оптимальные и допустимые параметры температуры для рабочей зоны

Период года	Категория работ по уровню энерготрат, Вт	Температура воздуха, °С		Температура поверхностей, °С
		диапазон ниже оптимальных величин	диапазон выше оптимальных величин	
Холодный	Па (175-232)	17,0-18,9	21,1-23,0	16,0-24,0
Теплый	Па (175-232)	18,0-19,9	22,1-27,0	17,0-28,0

Таблица 4.2.3 - Оптимальные и допустимые параметры скорости движения воздуха для рабочей зоны

Период года	Категория работ по уровню энерготрат, Вт	Относительная влажность воздуха, %		Скорость движения воздуха, м/с		
		Оптимальная	Допустимая на рабочих местах	Оптимальная	для диапазона температур воздуха ниже оптимальных величин, не более	для диапазона температур воздуха выше оптимальных величин, не более
Холодный	Па (175-232)	40-60	15-75	0,2	0,1	0,3
Теплый	Па (175-232)	40-60	15-75	0,2	0,1	0,4

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

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

2) Превышение уровня шума

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.

Повышенный шум на рабочем месте оказывает вредное влияние на организм работника в целом, вызывая неблагоприятные изменения в его органах и системах. Длительное воздействие такого шума способно привести к развитию у работника потери слуха, увеличению риска артериальной гипертензии, болезней сердечно-сосудистой, нервной системы и др. При этом специфическим клиническим проявлением вредного действия шума является стойкое нарушение слуха (тугоухость), рассматриваемое как профессиональное заболевание.

Для определения допустимого уровня шума на рабочих местах используется ГОСТ 12.1.003-2014 ССБТ. «Шум. Общие требования безопасности.» [53], СН 2.2.4/2.1.8.562–96. «Шум на рабочих местах, в помещениях жилых, общественных зданий и на территории застройки» [54]. В таблице 4.2.4 приведены допустимые уровни звукового давления на рабочем месте согласно нормам, из СН 2.2.4/2.1.8.562–96.

Таблица 4.2.4 - Допустимы уровни звукового давления на рабочем месте,
согласно [54]

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

В первую очередь следует использовать средства коллективной защиты. По отношению к источнику возбуждения шума коллективные средства защиты подразделяются на средства, снижающие шум в источнике его возникновения, и средства, снижающие шум *на пути его распространения* от источника до защищаемого объекта.

Внутри здания тихие помещения необходимо располагать вдали от шумных так, чтобы их разделяло несколько других помещений или ограждение с хорошей звукоизоляцией.

Снижение шума с помощью звукоизоляции. Для защиты 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. Средства индивидуальной защиты (СИЗ) применяются в том случае, если другими способами обеспечить допустимый уровень шума на рабочем месте не удастся.

Принцип действия СИЗ – защитить наиболее чувствительный канал воздействия шума на организм человека – ухо. СИЗ включают в себя

противошумные вкладыши (беруши), наушники, шлемы и каски, специальные костюмы. Однако для работы с ПЭВМ в СИЗ нет необходимости.

3) Отсутствие или недостаток необходимого и искусственного освещения

Утомляемость органов зрения может быть связана как с недостаточной освещенностью, так и с чрезмерной освещенностью, а также с неправильным направлением света.

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

в) Приведение допустимых норм с необходимой размерностью

СанПиН 2.2.1/2.1.1.1278–03. «Гигиенические требования к естественному, искусственному и совмещённому освещению жилых и общественных зданий» [55] определяет наименьшую освещенность рабочих поверхностей в производственных помещениях в зависимости от вида производимой деятельности. В соответствии с СП 52.13330.2016 «Естественное и искусственное освещение. Актуализированная редакция СНиП 23-05-95*» [56] все зрительные работы делятся на 8 разрядов и 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 с выше обозначенным документом, для четвертого разряда зрительной работы приведены в таблице 4.2.5. 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.

Таблица 4.2.5 – 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	200
			Средний	Темный	500	200
		в	Малый	Светлый	400	200
			Средний	Светлый	400	200

г) Предлагаемые средства защиты (коллективные и индивидуальные) для минимизации воздействия фактора

Естественного освещения в лаборатории по условиям зрительной работы, 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 СП 52.13330.2016[57]. Согласно СП 52.13330.2016 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. Необходимо учитывать, пульсацию светового потока, слепящее действие, а также возникновение стробоскопического эффекта. Для уменьшения коэффициента пульсации люминесцентные лампы включают в разные фазы трехфазной электрической сети.

2.2. Обоснование мероприятий по защите исследователя от действия опасных и вредных факторов.

Строгое выполнение организационных и технических мероприятий при проведении работ с электроустановками, очень важно в целях предупреждения электротравматизма, кроме этого используют средства защиты, к которым относятся: электрическая изоляция токоведущих частей, защитное заземление и отключение, электрическое разделение сети.

Преднамеренное соединение с землей металлических нетоковедущих частей, которые могут оказываться под напряжением, называют защитным заземлением (ГОСТ 12.1.019 – 2017[58]). Чтобы защитить человека от поражения электрическим током, защитное заземление должно удовлетворять ряду требований, изложенных в ПУЭ и ГОСТ 12.1.030 – 81 “ССВТ. Электробезопасность. Защитное заземление. Зануление” [59]. Эти требования зависят от напряжения электроустановок и мощности источника питания. К средствам защиты относятся: электрическая изоляция токоведущих частей, защитное заземление и отключение, электрическое разделение сети.

К электрозащитным средствам относятся:

СКЗ от поражения электротоком:

изолирующие штанги всех видов (оперативные, измерительные, для наложения заземления); указатели напряжения всех видов (высокого, низкого) и классов напряжений (с газоразрядной лампой, бесконтактные, импульсного типа, с лампой накаливания и др.); бесконтактные сигнализаторы наличия напряжения; защитные ограждения (щиты, ширмы, изолирующие накладки, колпаки); изолированный инструмент;

СИЗ от поражения электротоком: изолирующие и электроизмерительные клещи; переносные заземления; диэлектрические галоши, изолирующие боты и перчатки, каски защитные диэлектрические, изолирующие подставки, ковры.

Лаборатория относится к помещению без повешенной 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.

Факторы пожарной и взрывной природы

Источниками пожаровзрывоопасности в лаборатории могут быть любые электроприборы. При работе с электроприборами не исключено оплавление изоляционных проводов, их оголение, что влечет за собой короткое замыкание, перегрузку электронных схем, которые, перегреваясь, сгорают с разбрызгиванием искр.

По пожарной опасности помещения подразделяют на категории А, Б, В, Г, Д. Данная лаборатория согласно НПБ 105-03 относится к категории В, поскольку в помещении есть деревянные столы.

По степени огнестойкости данное помещение относится к 1 -й степени огнестойкости по СНиП 21-01-97 (выполнено из кирпича, которое относится к трудно сгораемым материалам). Возникновение пожара при работе с электронной аппаратурой может быть по причинам электрического характера. Причины возникновения пожара электрического характера: короткое замыкание, перегрузки по току, искрение и электрические дуги, статическое электричество и т. п. Не реже одного раза в квартал необходимо производить очистку от пыли агрегатов и узлов, кабельных каналов и межпольного пространства.

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; курение в строго отведенном месте; содержание путей и проходов для эвакуации людей в свободном состоянии.

Пожарная безопасность обеспечивается наличием огнетушителей:

Огнетушитель углекислотный (ОУ-2). ОУ-2 предназначен для тушения загораний веществ, горение которых не может происходить без доступа воздуха, загораний электроустановок, находящихся под напряжением не более 10 000 В, жидких и газообразных веществ (класс В,С,Е), загораний в архивах, музеях, картинных галереях. Огнетушитель химический водно-пенный (ОХВП-10). ОХВП-10 предназначен для тушения начальных загораний твердых веществ и легковоспламеняющихся жидкостей, за исключением щелочных металлов и веществ, горение которых происходит без доступа воздуха. Запрещается использовать огнетушитель ОХВП-10 для тушения загоревшихся электроустановок, находящихся под напряжением.

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.

3. Экологическая безопасность.

3.1. Анализ влияния процесса исследования на окружающую среду.

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.

3.2. Обоснование мероприятий по защите окружающей среды.

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 634009, г. Томск, ул. Войкова, 70 компанией ООО «Пирс». Предварительно макулатура должна быть отчищена от посторонних предметов, таких как, например, скрепки.

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

4. Безопасность в чрезвычайных ситуациях.

4.1. Анализ вероятных ЧС, которые могут возникнуть на рабочем месте при проведении исследований.

Лаборатория расположена в городе Томск с континентально-циклоническим климатом и природные явления (землетрясения, наводнения, засухи, ураганы и т. д.), в данном городе отсутствуют.

Возможными ЧС на объекте в данном случае, могут быть сильные морозы и несанкционированное проникновение на рабочее место.

Для Сибири в зимнее время года характерны морозы и метели. В результате порывов ветра могут быть обрывы линий электропитания, из-за чего возможны перебои в электроснабжении; перегрузки, которые могут стать причиной пожара. Для предотвращения подобных ситуаций необходима организация системы аварийного электропитания, по возможности проведение линии электроснабжения под землей. Низкие температуры могут привести к авариям систем теплоснабжения.

4.2. Обоснование мероприятий по предотвращению ЧС и разработка порядка действия в случае возникновения ЧС.

В случае переморозки труб должны быть предусмотрены запасные газовые обогреватели с катализатором. Их количества и мощности должно

хватать для того, чтобы работа на производстве не прекратилась. Необходимо иметь суточный запас воды на складе, чтобы избежать обезвоживания персонала. В случае перебоев в расписании движения общественного транспорта должен быть предоставлен транспорт служебный.

Возможно несанкционированное проникновение на рабочее место. Угрозы могут быть как ложным, так и действительными, поэтому необходимы меры предосторожности по этому поводу. В качестве мер безопасности приняты следующие действия - установка системы видеонаблюдения и круглосуточной охраны, сохранение конфиденциальной информации о охранной системе. Для защиты от несанкционированного проникновения также должна быть введена пропускная система. Необходимо так же проводить информирование должностных лиц и тренировки по отработке действий на случай экстренной эвакуации. Помещение лаборатории закрывается на замок, ведется охрана вахтовым методом. В помещении установлена сигнализация.

Выводы по разделу

В разделе ВКР социальная ответственность был проведен анализ возможных опасных и вредных факторов на рабочем месте исследователя. Были предложены превентивные меры и меры безопасности. Так же проведен анализ безопасности предприятия по отношению к экологии и безопасность в случае чрезвычайных ситуаций. В результате анализа было подтверждено, что все необходимые меры для обеспечения безопасности сотрудников в лаборатории приняты, например, все элементы, порождающие шум изолированы. Так же в лаборатории установлены широкие пластиковые окна, которые обеспечивают необходимый уровень освещения и вентиляции воздуха. Установлена оптимальная система освещения для обеспечения искусственного белого света. В случае ЧС в лаборатории присутствует план эвакуации, огнетушитель. Лаборатория закрывается на сигнализацию и корпус находится под вахтовой охраной.

5 Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение

Цель дипломной работы: исследование колебательно-вращательного спектра высокого разрешения молекул C_2H_2 и $C_2H_2D_2$ -цис полос ν_{12} .

Целью данного раздела является оценка с позиции ресурсоэффективности исследования спектров молекул C_2H_4 и $C_2H_2D_2$ - цис с помощью полуэмпирических методов. Данный раздел, предусматривает рассмотрение следующих задач:

Задачи данного раздела:

1. Определить потенциальных потребителей
2. Провести SWOT-анализ работы
3. Распределить затраты времени и средств на выполнение работы.

5.1 Потенциальные потребители результатов исследования

Результатом исследования является идентификация линий, интенсивности линий экспериментального спектра, а также набор спектроскопических параметров модели спектра поглощения молекул C_2H_4 и $C_2H_2D_2$. Полученные данные будут использоваться для пополнения как российских (ИВС Спектроскопия атмосферных газов), так и международных баз данных (NITRAN, GEISA). Последние, в свою очередь, широко используются для решения многочисленных как теоретических, так и прикладных задач астрофизики, планетологии, атмосферной оптики, и т.д.

Сегментировать рынок услуг по анализу молекулярных спектров поглощения можно согласно таблице 5.1.1

Таблица 5.1.1 – Карта сегментирования рынка услуг по анализу молекулярных спектров.

	Идентифицированные линии спектра	Спектроскопические параметры
Исследовательские центры университетов		

Продолжение таблицы 5.1.1

	Идентифицированные линии спектра	Спектроскопические параметры
Научные центры		
Базы спектроскопических данных		

Таким образом, потенциальные потребители итогового продукта - спектроскопические базы данных, такие как HITRAN, GISA, а также другие научные лаборатории смежной области.

5.2 Анализ конкурентных технических решений

Полуэмпирические методы исследования обрели большую популярность в связи с высокой точностью получаемых результатов. Полуэмпирические методы более 50 лет являются основным источником знаний, получаемых в молекулярной спектроскопии. Но для получения информации необходимо затратить большое количество времени для интерпретации спектров.

С другой стороны, с каждым годом все сильнее развиваются теоретические способы получения информации, например, *ab initio* методы. Сейчас они могут достаточно хорошо определить положение линий для 2-х атомных молекул или симметричных волчков, но для молекул с большим числом атомов точность результатов уступает экспериментальным на несколько порядков. И также необходимы вычислительные машины высокой мощности для обработки большого количества данных.

Таблица 5.2.1 – Оценочная карта для сравнения конкурентных технических исследований

Критерии оценки	Вес критерия	Баллы		Конкурентоспособность	
		Б _Ф	Б _{К1}	К _{КФ}	К _{К1}
1	2	3	4	6	7
Технические критерии оценки ресурсоэффективности					
1) Удобство в эксплуатации (соответствует требованиям потребителей)	0,2	4	4	0,8	0,8
2) Точность получаемых результатов	0,3	5	2	1,5	0,6
3) Энергоэкономичность	0,05	4	3	0,2	0,15
4) Надежность	0,1	4	3	0,4	0,2
5) Простота получения информации	0,05	3	4	0,15	0,2
6) Безопасность	0,05	5	5	0,25	0,25
Экономические критерии оценки эффективности					
1) Конкурентоспособность продукта	0,05	5	3	0,25	0,15
2) Уровень проникновения на рынок	0,02	5	5	0,1	0,1
3) Цена	0,03	4	4	0,12	0,12
4) Предполагаемый срок эксплуатации	0,02	4	4	0,08	0,08
5) Финансирование научной разработки	0,08	4	3	0,32	0,24
6) Срок выхода на рынок	0,05	5	2	0,25	0,1
Итого	1	52	38	4,42	2,99

Таким образом, конкурентоспособность разработки составила 4,42, в то время как у ab initio методов 2,99, что свидетельствует о конкурентоспособности научно-технической разработки по таким показателям как: точность получаемых результатов, энергоэкономичность, надежность конкурентоспособность, финансирование научной разработки и срок выхода на рынок.

5.3 SWOT-анализ

SWOT – Strengths (сильные стороны), Weaknesses (слабые стороны), Opportunities (возможности) и Threats (угрозы) – представляет собой комплексный анализ внутренних и внешних факторов научно-исследовательского проекта, направленный на оценку рисков и конкурентоспособности проекта на рынке.

Сильными сторонами данной научно-исследовательской работы можно назвать следующие особенности:

- Моделирование с помощью метода наименьших квадратов.
- Использование программного обеспечения, созданного командой лаборатории.
- Точность полученных результатов совпадает с точностью экспериментальных данных
- Результаты могут использовать в областях астрофизики, астрономии и других областях.

Слабыми сторонами данной научно-исследовательской работы можно назвать следующие свойства и особенности:

- Для полной интерпретации спектров необходимо затратить большое количество человеко-часов.
- Для выполнения работы необходимы высококвалифицированные люди
- Отсутствие доступа к коллективным исследованиям;
- Программное обеспечение с закрытым исходным кодом;
- Большой срок поставки экспериментальных данных.

К возможностям данной работы можно отнести:

- Возможность улучшения программного обеспечения;
- Появление дополнительного спроса на результаты исследования;
- Использование научно-исследовательские достижений;
- Возможность появления новых методов анализа;

К угрозам данной работы можно отнести:

- Отсутствие спроса на новые технологии производства
- Ограничения на экспорт технологии;
- Задержки финансирования;
- Ограничение точности;
- Повышение издержек;

Для более подробного рассмотрения перспектив разработки в таблице 5.3.2 представлена интерактивная матрица проекта, в которой показано соотношение сильных сторон проекта с его возможностями.

	<p>Сильные стороны научно-исследовательского проекта:</p> <p>С1. Моделирование с помощью МНК.</p> <p>С2. Использование собственного программного обеспечения.</p> <p>С3. Уникальная, но широко распространенная модель.</p> <p>С4. Результаты применимы в любом исследовании атмосферы.</p> <p>С5. Функциональная мощность.</p>	<p>Слабые стороны научно-исследовательского проекта:</p> <p>Сл1. Длительный период при некоторых видах исследований.</p> <p>Сл2. Длительный период обучения персонала.</p> <p>Сл3. Отсутствие доступа к коллективным исследованиям</p> <p>Сл4. Большой срок поставки эксперим. данных.</p> <p>Сл5. Программное обеспечение с закрытым исходным кодом</p>
--	---	--

Продолжение таблицы 5.3.1

<p>Возможности:</p> <p>В1. Появление дополнительного спроса на результаты исследования</p> <p>В2. Использование научно-исследовательские достижений ТПУ</p> <p>В3. Возможность появления новых методов анализа</p> <p>В4. Возможность улучшения программного обеспечения</p>	<p>По результатам анализа интерактивной матрицы проекта полей «Сильные стороны и возможности» можно сделать вывод о том, что нужно расширить 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 новые технологии производства</p> <p>У2. Ограничения на экспорт технологии</p> <p>У3. Задержки финансирования</p> <p>У4. Ограничение точности</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</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>

Таблица 5.3.2 – связь сильных сторон с возможностями

Сильные стороны проекта						
Возможности проекта		C1	C2	C3	C4	C5
	B1	+	+	+	+	0
	B2	+	+	+	+	0
	B3	-	-	+	+	+
	B4	+	0	-	+	+

Таким образом, приведённый анализ показал, что технология имеет хорошие шансы на коммерциализацию, с учетом проявляемого интереса партнеров и удачных исследований.

5.4. Планирование научно-исследовательских работ

Структура работ в рамках научного исследования

В данном разделе показано распределение времени и трудового вклада участников исследовательской работы.

Планирование комплекса предполагаемых работ осуществлялось в следующем порядке:

- разработка задания;
- Подбор и изучение материалов по теме;
- Получение экспериментальных данных;
- Интерпретация спектра C_2H_4 ;
- Интерпретация спектра $C_2H_2D_2$;
- Изучение интенсивностей линий
- Анализ результатов;
- оформление отчёта по ВКР;
- подготовка к защите ВКР.

Для выполнения научных исследований сформированна рабочая группа, для определения общего содержания работ, уточнения целей и разработки последовательных действий составлен перечень работ (таблица 5.4.1).

Таблица 5.4.1 – Перечень этапов, работ и распределение исполнителей

Этапы работы	Вес	Исполнители	Трудовой вклад
Разработка задания	0.1	Научный руководитель (НР)	НР – 100%
Подбор и изучение материалов по теме	0.3	Научный руководитель (НР) Инженер (И)	НР – 30% И – 70%
Получение экспериментальных данных	0.2	Научный руководитель (НР)	НР – 100%
Интерпретация спектра C_2H_4	0.1	Инженер (И)	И – 100%
Интерпретация спектра $C_2H_2D_2$	0.1	Инженер (И)	И – 100%
Изучение интенсивностей линий	0.2	Научный руководитель (НР) Инженер (И)	НР – 10% И – 90%
Анализ результатов	0.05	Научный руководитель (НР) Инженер (И)	НР – 40% И – 60%
Оформление отчёта по ВКР	0.1	Научный руководитель (НР) Инженер (И)	НР – 5% И – 95%
Подготовка к защите ВКР	0.05	Научный руководитель (НР) Инженер (И)	НР – 10% И – 90%
Итого вклад	1	Научный руководитель (НР) – 39.4% Инженер – 60.6%	

Определение трудоемкости выполнения работ

Для определения трудоёмкости реализации научного исследования выпускной квалификационной работы используется экспертный способ, основным показателем которого является человеко-день. Для расчёта предлагаемого значения трудоёмкости используют следующую формулу

$$t_{\text{ож}} = \frac{3t_{\text{min}} + 2t_{\text{max}}}{5}$$

где $t_{\text{ож}}$ – ожидаемая трудоемкость выполнения работы в чел.-дн.;

t_{min} – минимально возможная трудоемкость выполнения заданной работы, чел.-дн.;

t_{max} – максимально возможная трудоемкость выполнения заданной работы, чел.-дн.

Произведём оценку трудоёмкости выполнения научного исследования для научного руководителя:

$$t_{\text{ож}} = \frac{3 \cdot 15 + 2 \cdot 35}{5} = 16 \text{ чел.-дн.}$$

Произведём оценку трудоёмкости выполнения научного исследования для инженера:

$$t_{\text{ож}} = \frac{3 \cdot 60 + 2 \cdot 120}{5} = 84 \text{ чел.-дн.}$$

После расчётов ожидаемой трудоёмкости работ, определим продолжительность каждой работы в рабочих днях $T_{\text{рд}}$, учитывая параллельность выполнения работ несколькими исполнителями, по следующей формуле:

$$T_{\text{рд}} = \frac{t_{\text{ож}}}{K_{\text{вн}}} \cdot K_{\text{д}}$$

где $T_{\text{рд}}$ – продолжительность одного этапа работы, раб.дн.;

$K_{\text{вн}}$ – коэффициент выполнения работ, учитывающий влияние внешних факторов на соблюдение определённых длительностей, в частности, возможно $K_{\text{д}} = 1$;

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

Произведём расчёт продолжительности работы выполнения научного исследования для научного руководителя:

$$T_{\text{рд}} = \frac{30}{1} \cdot 1 = 30 \text{ раб.дн.}$$

Произведём расчёт продолжительности работы выполнения научного исследования для инженера:

$$T_{\text{рд}} = \frac{84}{1} \cdot 1 = 84 \text{ раб.дн.}$$

Показатели трудоемкости можно найти в таблице 5.4.2

Таблица 5.4.2 - Временные показатели проведения научного исследования

Название работы	Трудоемкость работ			Исполнители	Длительность работ в рабочих днях $T_{\text{кд}}$
	t_{min} , чел-дни	t_{max} , чел-дни	$t_{\text{ож}}$, чел-дни		
Разработка задания	1	11	5	Р, И	3
Подбор и изучение материалов по теме	12	24	16,8	И	15
Получение экспериментальных данных	10	19	13,6	Р, И	11
Интерпретация спектра C_2H_4	10	19	13,6	Р, И	14
Интерпретация спектра $\text{C}_2\text{H}_2\text{D}_2$	9	21	13,8	И	11
Изучение интенсивностей линий	10	18	13,2	И	8
Анализ результатов	4	10	6,4	Р, И	4
Оформление отчёта по ВКР	15	30	21	Р, И	12
Подготовка к защите ВКР	3	10	5,8	Р, И	4
Итого	74	162	101,6	И	82

Разработка графика проведения научного исследования

Диаграмма Ганта – горизонтальный ленточный график, на котором работы по теме представляются протяженными во времени отрезками $T_{\text{кд}}$, характеризующимися датами начала и окончания выполнения данных работ.

Построим ленточный график проведения научных работ в форме диаграммы Ганта. Для построения диаграммы необходимо перевести рабочие дни в календарные дни, для чего воспользуемся следующим соотношением:

$$T_{кд} = T_{кд} \cdot k_{кал}$$

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

$k_{кал}$ – коэффициент календарности:

$$k_{кал} = \frac{T_{кал}}{T_{кал} - T_{вых} - T_{пр}}$$

где $T_{кал}$ – количество календарных дней в году;

$T_{вых}$ – количество выходных дней в году;

$T_{пр}$ – количество праздничных дней.

Рассчитаем коэффициент календарности:

$$k_{кал} = \frac{366}{366 - 93 - 25} = 1,476$$

Построим таблицу по результатам расчётов, в которой укажем трудоёмкости работ, название работы, а также укажем длительность работ в рабочих и календарных днях, таблица 5.4.3.

Таблица 5.4.3 – Перечень этапов, работ и распределение исполнителей

№ раб	Вид работ	Исполнители	$T_{кд}$, кал. дн.	Продолжительность														
				февр			март			апр			май					
				1	2	3	1	2	3	1	2	3	1	2	3			
1	Разработка задания	Р, И	3															
2	Подбор и изучение материалов по теме	И	22															
3	Получение экспериментальных данных	Р, И	16															
4	Интерпретация спектра C2H4	Р, И	21															
5	Интерпретация спектра c2h2d2	И	16															
6	Изучение интенсивностей линий	И	12															

Продолжение таблицы 5.4.3

№ раб	Вид работ	Исполнители	$T_{кд}$, кал.	Продолжительность			
				февр	март	апр	май
7	Анализ результатов	Р, И	6				
8	Оформление отчёта по ВКР	Р, И	18				
9	Подготовка к защите ВКР	Р, И	6				
Р, С	С	Р – руководитель, И – инженер					

5.5 Бюджет научно-технического исследования (НТИ)

Расчет материальных затрат НТИ

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.

Работа полностью теоретическая, поэтому в материальные затраты включаются затраты на канцелярские принадлежности, диски, картриджи и т.п.

Таблица 5.5.1 – Материальные затраты

Материал	Единица измерения	Количество	Цена за ед., руб.	Затраты на материалы, (3 _м), руб.
Бумага	Упаковка	0,5	200	100
Шариковые ручки	Шт.	5	40	200
Итого				300

Расчет затрат на специальное оборудование для научных (экспериментальных) работ

Для осуществления исследования по тематике данной ВКР необходимо наличие персонального компьютера или ноутбука.

Таблица 5.5.2 – Расчет бюджета затрат на приобретение спецоборудования для научных работ

Наименование оборудования	Кол-во единиц оборудования	Цена единицы оборудования, тыс. руб.	Общая стоимость оборудования, тыс. руб.
Персональный компьютер (ноутбук)	1	30	30
Компьютерная мышь	1	1	1
Итого:			31

Основная заработная плата исполнителей темы

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 5.5.4.

Полная заработная плата включает в себя основную и дополнительную (12-20 % от $Z_{осн}$):

$$Z_{зн} = Z_{осн} + Z_{доп}$$

где $Z_{осн}$ - основная заработная плата;

$Z_{доп}$ - дополнительная заработная плата.

Основная заработная плата ($Z_{доп}$) руководителя (лаборанта, инженера) от предприятия (при наличии руководителя от предприятия) рассчитывается по следующей формуле:

$$Z_{осн} = Z_{дн} \cdot T_p$$

где $Z_{осн}$ - основная заработная плата одного работника;

T_p - продолжительность работ, выполняемых научно-техническим работником, раб. дн.;

$Z_{дн}$ - среднедневная заработная плата работника, руб.

Среднедневная заработная плата рассчитывается по формуле:

$$Z_{дн} = \frac{Z_M \cdot M}{F_D}$$

где Z_M - месячный должностной оклад работника, руб. (окладом инженера выступает стипендия, 2200 руб.);

M - количество месяцев работы без отпуска в течение года: при отпуске в 24 рабочих дня $M=11,2$ месяца, 5-дневная неделя; при отпуске в 48 рабочих дня $M=10,4$ месяца, 6-дневная неделя;

F_D - действительный годовой фонд рабочего времени научно-технического персонала, раб.дн. (таблица 5.5.3).

Месячный должностной оклад

$$Z_M = Z_{б} \cdot (1 + k_{np} + k_D) \cdot k_p$$

где $Z_{б}$ - базовый оклад, руб.;

k_p - районный коэффициент, равный для Томска 1,3;

k_{np} - премиальный коэффициент, равный 0,3;

k_d - коэффициент доплат и надбавок составляет примерно 0,2.

Таблица 5.5.3 – Баланс рабочего времени

Показатели рабочего времени	Руководитель	Инженер
Календарное число дней	366	366
Количество нерабочих дней		
- выходные дни	52	52
- праздничные дни	14	14
Потери рабочего времени		
- отпуск	48	48
- невыходы по болезни	-	-
Действительный годовой фонд рабочего времени	252	252

Таблица 5.5.4 – Расчёт основной заработной платы

Исполнители	Z_o , руб.	k_{np}	k_d	k_p	Z_M , руб.	$Z_{он}$, руб.	T_p , раб.дн.	$Z_{осн}$, руб.
Руководитель	38 000	0,3	0,2	1,3	74100	3058	26	79508
Инженер	2200	-	-	1,3	2860	118	82	9676
Итого $Z_{осн}$								89184

Отчисления во внебюджетные фонды (страховые отчисления)

Статья включает в себя отчисления во внебюджетные фонды:

$$Z_{внеб} = k_{внеб} \cdot (Z_{осн} + Z_{дон}) = 0,302 \cdot 89184 \text{ руб.} = 26933,56 \text{ руб.}$$

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

Накладные расходы

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 82 дня или 492 часа.

Электроэнергетические затраты за время работы над проектом можно рассчитать, как

$$Q_3 = W \cdot P \cdot t = 5,8 \cdot 0,22 \cdot 492 = 627,8 \text{ руб.}$$

где W – тариф на электроэнергию (5,8 рублей за 1 кВт/ч);

P – электроэнергетические затраты компьютера за весь период работы (компьютер – 0.22 кВт);

t – время работы над проектом в часах.

Итого, электроэнергетические затраты на компьютеры составляют 627,8 рублей за весь период исследовательской работы.

Формирование бюджета затрат научно-исследовательского проекта

Определение бюджета затрат на научно-исследовательский проект по каждому варианту исполнения приведен в табл. 5.5.5.

Таблица 5.5.5 - Расчет бюджета затрат НИИ

Наименование статьи	Сумма, руб.
1. Материальные затраты НИИ	300
2. Затраты на специальное оборудование для научных (экспериментальных) работ	31000
3. Затраты по основной заработной плате исполнителей темы	89184
4. Затраты по дополнительной заработной плате исполнителей темы	0
5. Отчисления во внебюджетные фонды	26933,56
6. Накладные расходы	627,8
7. Бюджет затрат НИИ	148045,39

По данным таблицы 5.5.5 видно, что большую часть бюджета потребляет основная заработная плата исполнителей. Это характерно для

теоретического исследования, в которое не вовлечены дорогостоящие установки и образцы.

5.6 Определение ресурсной (ресурсосберегающей), финансовой, бюджетной, социальной и экономической эффективности исследования

С помощью интегрального критерия ресурсоэффективности определим ресурсоэффективность полуэмпирического метода исследования и теоретического. Формула для его определения имеет следующий вид:

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

где I_{pi} – интегральный показатель ресурсоэффективности;

a_i – весовой коэффициент проекта;

b_i – балльная оценка проекта, устанавливается экспериментальным путем по выбранной шкале оценивания.

Таблица 5.6.1 – Оценка характеристик проекта

Критерии	Весовой коэффициент	Полуэмпирический метод	Теоретический метод
1. Быстродействие	0,30	3	4
2. Надежность	0,20	4	1
3. Удобство в эксплуатации	0,20	4	3
4. Энергосбережение	0,10	5	3
5. Материалоемкость	0,20	4	5
Итого:	1,00	3,8	3,3

Для разрабатываемого проекта интегральный показатель ресурсоэффективности – 3,8, а для конкурентного 3,3. Полученное значение интегрального показателя свидетельствует о достаточно хорошей эффективности реализации проекта.

Выводы по главе «Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение»:

1. Таким образом были определены потенциальные потребители итогового продукта. Ими оказались спектроскопические базы данных, такие как HITRAN, GISA, а также другие научные лаборатории смежной области.

2. Проведен SWOT-анализ продукта. Анализ показал, что технология, находясь на этапе разработки, имеет хорошие шансы на коммерциализацию, с учетом проявляемого интереса партнеров и удачных исследований.

3. Помимо прочего, продемонстрировано, что в календарных днях длительность работ для руководителя составляет 26 дней, а для инженера – 82 дней. Временные показатели в календарном плане-графике показывают, что наиболее продолжительной работой является «Построение моделей и проведение тестовых расчетов»

После формирования бюджета затрат на проектирование суммарные капиталовложения составили 148045,39 рублей.

4. Значение интегрального показателя эффективности ИР составляет 3,8, по сравнению с 3,3, и является наиболее высоким, что означает, что техническое решение, рассматриваемое в ИР, является наиболее эффективным вариантом исполнения.

5. Таким образом, капиталовложения в размере 148045,39 рублей дают возможность провести исследование интенсивностей и положения молекулы этилена и ее изотополога. В последствии результаты данной научно-исследовательской работы дают возможность для проведения более глубоких исследований молекулы и ее изотопологов.

Заключение

В результате анализа спектров молекулы $C_2H_2D_2$ -цис в области 1150-1450 cm^{-1} было проинтерпретировано порядка 5600 переходов, принадлежащих $\nu_{12}(B_1)$, $\nu_3(A_1)$, $2\nu_{10}(A_1)$ и $\nu_8+\nu_{10}(A_2)$. Впервые 1666 переходов были определены в полосе ν_3 , 89 переходов в полосе $2\nu_{10}$ и 3 перехода в полосе $\nu_8+\nu_{10}$. При решении обратной спектроскопической задачи получено 89 спектроскопических параметров, восстанавливающих экспериментальные данные с погрешностью $d_{rms}=2,59 \times 10^{-4} cm^{-1}$. В результате анализа спектров молекулы C_2H_4 в области полосы ν_{12} , было получено 998 интенсивностей линий (1491 переход), $J^{max} = 48$ и $K_a^{max} = 17$, в экспериментальных спектрах по подгонке форм линий с помощью профиля Армана-Тран и шести эффективных параметров дипольного момента для полосы ν_{12} . Были получены коэффициенты самоуширения для 253 линий и смещения для 225 линий.

Список литературы

1. Abele F.B. Ethylene: an urban air pollutant. / F.B. Abele, H.E. Heggetad, J Air Pollut Control Assoc 1973– 23:517–21.
2. ACE–FTS observation of a young biomass burning plume: first reported measurements of C_2H_4 , C_3H_6O , H_2CO and PAN by infrared occultation from space. / P.F. Coheur, H. Herbin, C. Clerbaux, D. Hurtmans, C. Wespes, M. Carleer, S. Turquety, C.P. Rinsland, J. Remedios, D. Hauglustaine, C.D. Boone, P.F. Bernath // *Atm Chem Phys* 2007– 7:5437–46.
3. Betz L. Ethylene in IRC.10216. *Astrophys J* 1981– 244: L103–5.
4. Thermal infrared imaging spectroscopy of Shoemaker–Levy 9 impact sites: spatial and vertical distributions of NH_3 , C_2H_4 , and $10\ \mu m$ dust emission. / C.A. Griffith, B. Bézard, T.K. Greathouse, D.M. Kelly, J.H. Lacy, K.S. Noll // *Icarus* 1997– 128:275–93.
5. Detection of C_2H_4 in Neptune from ISO/PHTS observations. / B. Schulz, T. Encrenaz, B. Bézard, P. Romani, E. Lellouch, S.K. Atreya // *Astron Astrophys* 1999– 350: L13–17.
6. Saslaw W.C. On the chemistry of Jupiter’s upper atmosphere. / W.C. Saslaw, R.L. Wildey // *Icarus* 1967– 7:85–93.
7. A tentative identification of C_2H_4 in the spectrum of Saturn. / T. Encrenaz, M. Combes, Y. Zeau, L. Vapillon, J. Berenze // *Astron Astrophys J* 1975– 42:355–6.
8. Bar-Nun A. The photochemistry of hydrocarbons in Titan’s atmosphere. / A. Bar-Nun, M. Podolak // *Icarus* 1979– 38:115–22.
9. Infrared observations of the saturnian system from Voyager 1 / R.A. Hanel, B.J. Conrath, F.M. Flasar, V. Kunde, W. Maguire, J. Pearl, et al. // *Science* 1981– 212:192–200.
10. C_3H_8 and C_3H_4 in Titan’s atmosphere. / W.C. Maguire, R.A. Hanel, D.E. Jennings, V.G. Kunde, R.E. Samuelson // *Nature* 1981– 292:683–6.

11. Интернет-коллекции по молекулярной спектроскопии. / Ю.Л. Бабилов, А. Барб, В.Ф. Головки, С.Н. Михайленко, Вл.Г. Тютюрев – Тр. RCDL. 2001 – С. 183-187.
12. Атмосфера экзопланеты ГЖ 1214 Б / Н.П. Емец // Наука и мир – 2014. – Т. 1, №3. – С. 25-26.
13. High resolution spectroscopic study of C₂H₄: reanalysis of the ground state and ν_4 , ν_7 , ν_{10} and ν_{12} vibrational bands. / O.N. Ulenikov, O.V. Gromova, Yu.S. Aslapovskaya, V.M. Horneman // J Quant. Spectrosc. Radiat. Transf. 2013– 118:14–25.
14. Global frequency and intensity analysis of the $\nu_{10} / \nu_7 / \nu_4 / \nu_{12}$ band system of ¹²C₂H₄ at 10 μm using the D_{2h} Top Data System. / A. Alkadrou, M.T. Bourgeois, M. Rotger, V. Boudon, J. Vander Auwera // J Quant. Spectrosc. Radiat. Transf. 2016– 182:158–71
15. Rotger M. Line positions and intensities in the ν_{12} band of ethylene near 1450 cm^{-1} : an experimental and theoretical approach. / M. Rotger, V. Boudon, J. Vander Auwera // J Quant. Spectrosc. Radiat. Transf. 2008– 109:952–62.
16. Nakanaga T. Infrared intensities and coriolis interactions in ethylene. / T. Nakanaga, S. Kondo, S. Saeki. // J Chem. Phys. 1979– 70:2471–8.
17. Vibrational intensities. VI. Ethylene and its deuterioisotopes. / R.C. Golike, I.M. Mills, W.B. Person, Jr.B. Crawford. // J Chem. Phys. 1956– 25:1266–75.
18. Thorndike A.M. The experimental determination of the intensities of infra-red absorption bands. / A.M. Thorndike, A.J. Wells, E.B. Wilson // J Chem. Phys. 1947– 15:157–65
19. Blanquet G.H. Diode-laser measurements of N₂ -broadening coefficients in the ν_7 band of C₂H₄. / G.H. Blanquet, J. Walrand, J.P. Bouanich // J Mol. Spectrosc. 2000– 201:56–61.
20. Infrared heterodyne spectroscopic measurements of transition frequencies and intensities of ethylene and isotopic ethylene (¹³C¹²CH₄) between 840 and 980 cm^{-1} / V. Morozhenko, T. Kostiuk, D. Buhl, T. Hewagama, T.A. Livengood, A. Kollyukh , W.E. Blass. //J Quant. Spectrosc. Radiat. Transf. 2002– 72:101–15.

21. Crawford B.L. The Potential Function of Ethylene. / B.L. Crawford, J.E. Lancaster, R.G. Inskeep. // J Chem. Phys. 1953– 21:678-86.
22. Microwave spectra of deuterated ethylenes: Dipole moment and r_z structure. / E. Hirota, Y. Endo, S. Saito, K. Yoshida, I. Yamaguchi, K. Machida. // J Mol. Spectrosc. 1981– 89:223-31.
23. Hegelund F. The infrared spectrum of gaseous cis-d₂-ethylene below 1400 cm⁻¹. / F. Hegelund, F.M. Nicolaisen. // J Mol. Spectrosc. 1987– 126:32-87.
24. Hegelund F. Coriolis perturbations in the infrared spectrum of the $\nu_4 + \nu_7$ and $\nu_7 + \nu_8$ bands of cis-d₂-ethylene. / F. Hegelund, F.M. Nicolaisen // J Mol. Spectrosc. 1988– 128:321-33.
25. Hegelund F. Infrared study of the CD- and CH stretching regions of cis-d₂-ethylene. / F. Hegelund, F.M. Nicolaisen // J Mol. Spectrosc. 1988– 132:216-37.
26. Analysis of the coriolis interaction of the ν_{12} band with $2\nu_{10}$ of cis-d₂-ethylene by high-resolution Fourier transform infrared spectroscopy. / K.L. Goh, T.L. Tan, P.P. Ong, H.H. Teo. // Chem. Phys. Lett 2000– 325:584-8.
27. Tan T.L. High-resolution infrared analysis of the ν_7 band of cis-ethylene-d₂ (cis-C₂H₂D₂). / T.L. Tan, G.B. Lebron // J Mol. Spectrosc. 2010– 261:87-90.
28. Tan T.L. Analysis of the Coriolis interaction between ν_6 and ν_4 bands of ethylene-cis-d₂ (cis-C₂H₂D₂) by high-resolution FTIR spectroscopy. / T.L. Tan, M.G. Gabona // J Mol. Spectrosc. 2012– 272:51-4.
29. Tan T.L. High-resolution FTIR spectroscopic analysis of the Coriolis interaction in the $\nu_7 + \nu_8$ band of ethylene-cis-d₂ (cis-C₂H₂D₂). / T.L. Tan, M.G. Gabona // J Mol. Spectrosc. 2012– 275:5-8.
30. Gabona M.G. Coriolis interaction of the $\nu_2 + \nu_{12}$ band with $\nu_2 + 2\nu_{10}$ of cis-C₂H₂D₂ by high resolution FTIR spectroscopy. / M.G. Gabona, T.L. Tan. // J Mol. Spectrosc. 2014– 299:31-4.
31. Ng L.L. Coriolis interaction of the ν_{12} and $2\nu_{10}$ bands of ethylene-cis-1,2-d₂ (cis-C₂H₂D₂) by high-resolution FTIR spectroscopy. / L.L. Ng, T.L. Tan, M.G. Gabona. // J Mol. Spectrosc. 2015– 316:90-94.

32. The Coriolis-interacting ν_6 and ν_4 bands of ethylene-cis-1,2-d₂ (cis-C₂H₂D₂) by high-resolution synchrotron Fourier transform infrared (FTIR) spectroscopy. / T.L. Tan, M.G. Gabona, A. Wong, D.R.T. Appadoo, D. McNaughton. // *J Mol. Spectrosc.* 2016– 329:8-12.
33. Re-analysis of the high resolution FTIR spectrum of C₂H₂D₂-cis in the region of 1280-1400 cm⁻¹. / O.N. Ulenikov, O.V. Gromova, E.S. Bekhtereva, I.A. Konov, Yu.V. Chertavskikh, C. Maul, S. Bauerecker // *J Quant. Spectrosc. Radiat. Transf.* 2016– 170:69-82.
34. High-resolution synchrotron FTIR spectroscopic analysis of the Coriolis interaction between the $\nu_{10} = 1$ and $\nu_8 = 1$ states of ethylene-cis-1,2-d₂. / L.L. Ng, T.L. Tan, A. Wong, D.R.T. Appadoo, D. McNaughton // *Mol. Phys.* 2016 – 114:2798-807.
35. Improved rovibrational constants for the $\nu_7 = 1$ state of ethylene-cis-1,2-d₂ (cis- C₂H₂D₂) by high-resolution synchrotron FTIR spectroscopy. / T.L. Tan, L.L. Ng, M.G. Gabona, G. Aruchunan, A. Wong, D.R.T. Appadoo. // *J Mol. Spectrosc.* 2017– 331:23-27.
36. Ю.С. Макушкин, Симметрия и ее применение к задачам колебательно-вращательной спектроскопии молекул / Ю.С. Макушкин, О.Н. Улеников, А.Е. Чеглоков – Томск, Изд-во ТГУ, 1990. - части 1 и 2.
37. Makushkin Yu. S. On the transformation of the complete electron-nuclear hamiltonian of a polyatomic molecule to the intramolecular coordinates. / Yu. S. Makushkin, O. N. Ulenikov. // *Journal of Molecular Spectroscopy*, 1977– 68:1-20.
38. Watson J. K. G. Simplification of the molecular vibration-rotation hamiltonian. *Mol. Phys.*, 1968–15(5):479-490.
39. Papousek D. Molecular vibrational rotational spectra. / D. Papousek, M. R. Aliev. // *Academia*, Prague, 1982 – 324p.
40. Philip R. Bunker and Per Jensen. *Molecular symmetry and spectroscopy*. NRC Research Press, Ottawa, Ontario, Canada, 2 editions, 1998 – 747 p.
41. Ландау Л.Д. Квантовая механика. Нерелятивистская теория. / Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц. // Москва «Наука», 4 испр. edition, 1969 – 767 стр.

42. Тарасевич Б.Н. Основы ИК спектроскопии с преобразованием Фурье. Подготовка проб в ИК спектроскопии.: учеб. пособие / Б.Н. Тарасевич – Москва, МГУ, 2012. – 22 с.
43. Precise ro-vibrational analysis of molecular bands forbidden in absorption: The $\nu_8 + \nu_{10}$ band of the $^{12}\text{C}_2\text{H}_4$ molecule. / O.N. Ulenikov, O.V. Gromova, E.S. Bekhtereva, N.V. Kashirina, S. Bauerecker, V.M. Horneman. // J Mol. Spectrosc. 2015– 313:4-13.
44. The HITRAN2016 Molecular Spectroscopic Database. / I.E. Gordon, L.S. Rothman, Hill, R.V. Kochanov, Y. Tan, P.F. Bernath, et al. // J Quant. Spectrosc. Radiat. Transf. 2017– 203:3-69.
45. Ulenikov O.N. Ro-vibrational analysis of the $^{12}\text{C}_2\text{H}_2\text{D}_2$ -cis molecule spectra in the region of 1150–1450 cm^{-1} : The ν_{12} , ν_3 , $2\nu_{10}$ and $\nu_8+\nu_{10}$ bands / O.N. Ulenikov, O.V. Gromova and E.S. Bekhtereva et al. // Journal of Quantitative Spectroscopy & Radiative Transfer. 2020 – 250: article 107021
46. Выков А. Д. On isotope effects in polyatomic molecules / А. Д. Выков, Yu. S. Makushkin, O. N. Ulenikov // Journal of Molecular Spectroscopy. 1981. — Vol. 85, no. 2. — P. 462–479.
47. Ландау Л. Д. Квантовая механика / Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц. — М.: Наука, 1974. — 752 с.
48. Intensities and Collision Broadening Parameters from Infrared Spectra / M. A. H. Smith [et al.]. —Vol. 3 / ed. by K. N. Rao. — Molecular Spectroscopy: Modern Research. —1985. — 112 p.
49. Ulenikov O.N. Extended analysis of the ν_{12} band of $^{12}\text{C}_2\text{H}_4$ for astrophysical applications: Line strengths, widths, and shifts / O.N. Ulenikov, E.S. Bekhtereva, and O.V. Gromova, et al. // Journal of Quantitative Spectroscopy & Radiative Transfer. 2019– 233:57–66
50. Трудовой кодекс Российской Федерации от 30.12.2001 N 197-ФЗ (ред. от 27.12.2018)
51. ГОСТ 12.2.032-78 «ССБТ. Рабочее место при выполнении работ сидя. Общие эргономические требования.»

52. ГОСТ 12.0.003-2015 Система стандартов безопасности труда (ССБТ). Опасные и вредные производственные факторы. Классификация
53. ГОСТ 12.1.003-2014 ССБТ. «Шум. Общие требования безопасности.».
54. СН 2.2.4/2.1.8.562–96. «Шум на рабочих местах, в помещениях жилых, общественных зданий и на территории застройки»
55. СанПиН 2.2.1/2.1.1.1278–03. «Гигиенические требования к естественному, искусственному и совмещённому освещению жилых и общественных зданий»
56. СП 52.13330.2016 «Естественное и искусственное освещение. Актуализированная редакция СНиП 23-05-95*»
57. ГОСТ 12.1.019-2017 Система стандартов безопасности труда (ССБТ). Электробезопасность. Общие требования и номенклатура видов защиты.
58. ГОСТ 12.1.030 – 81 “ССБТ. Электробезопасность. Защитное заземление. Зануление”
59. СНиП 21-01-97. Пожарная безопасность зданий и сооружений.

Приложение А

Таблица А.1 – колебательно-вращательные уровни (в см⁻¹) для ($v_{12}=1$) колебательного состояния молекулы С₂Н₂Д₂-дис.

<i>J</i>	<i>K_a</i>	<i>K_c</i>	<i>E</i>	Δ	δ	<i>J</i>	<i>K_a</i>	<i>K_c</i>	<i>E</i>	Δ	δ
0	0	0	1341,1505		0	10	8	3	1591,0295	1	0
1	0	1	1342,6763	2	2	10	8	2	1591,0295	1	0
1	1	1	1345,1829	0	0	10	9	2	1634,9901	1	0
1	1	0	1345,3619		1	10	9	1	1634,9901	1	0
2	0	2	1345,7176	2	-1	10	10	1	1684,0904		-3
2	1	2	1348,0552	1	0	10	10	0	1684,0904		-3
2	1	1	1348,5920	0	0	11	0	11	1437,0697	1	0
2	2	1	1356,1116	0	0	11	1	11	1437,3093	1	0
2	2	0	1356,1208	0	0	11	1	10	1448,3121	1	0
3	0	3	1350,2572	0	0	11	2	10	1451,1997	0	-1
3	1	3	1352,3582	1	1	11	2	9	1455,9446	2	-1
3	1	2	1353,4310	2	-1	11	3	9	1465,6887	1	0
3	2	2	1360,6855	0	0	11	3	8	1466,4871	1	0
3	2	1	1360,7314	1	-1	11	4	8	1483,8226	2	1
3	3	1	1373,6718	7	1	11	4	7	1483,8721	0	0
3	3	0	1373,6718	7	-2	11	5	7	1507,0117	7	9
4	0	4	1356,2679	0	0	11	5	6	1507,0117	7	-6
4	1	4	1358,0852	1	0	11	6	6	1535,4298	2	0
4	1	3	1359,8716	1	0	11	6	5	1535,4298	2	0
4	2	3	1366,7766	1	1	11	7	5	1569,0494	2	0
4	2	2	1366,9131	2	1	11	7	4	1569,0494	2	0
4	3	2	1379,7891		0	11	8	4	1607,8441	1	0
4	3	1	1379,7911	2	-1	11	8	3	1607,8441	1	0

4	4	1	1397,9393	1	1	11	9	3	1651,7960	1	-1
4	4	0	1397,9393	1	1	11	9	2	1651,7960	1	-1
5	0	5	1363,7168	0	0	11	10	2	1700,8900	1	0
5	1	5	1365,2291	0	0	11	10	1	1700,8900	1	0
5	1	4	1367,9019	1	-1	11	11	1	1755,1110	1	0
5	2	4	1374,3780	0	0	11	11	0	1755,1110	1	0
5	2	3	1374,6905	1	0	12	0	12	1453,9614	1	0
5	3	3	1387,4424	2	0	12	1	12	1454,1245	2	-1
5	3	2	1387,4508	1	0	12	1	11	1466,7930	1	0
5	4	2	1405,5844	1	1	12	2	11	1469,1055	1	-2
5	4	1	1405,5844	1	0	12	2	10	1475,2006	2	0
5	5	1	1428,9129	0	0	12	3	10	1484,0951	1	0
5	5	0	1428,9129	0	0	12	3	9	1485,3600	1	-1
6	0	6	1372,5694	1	1	12	4	9	1502,2898	1	0
6	1	6	1373,7819	0	0	12	4	8	1502,3875	1	0
6	1	5	1377,5080	0	0	12	5	8	1525,4315		2
6	2	5	1383,4820	1	0	12	5	7	1525,4348		-1
6	2	4	1384,0850	1	-1	12	6	7	1553,8152	2	1
6	3	4	1396,6344	1	1	12	6	6	1553,8152	2	0
6	3	3	1396,6592	1	0	12	7	6	1587,4128	1	1
6	4	3	1414,7650	3	2	12	7	5	1587,4128	1	1
6	4	2	1414,7650	3	-1	12	8	5	1626,1928	2	0
6	5	2	1438,0849	1	1	12	8	4	1626,1928	2	0
6	5	1	1438,0849	1	1	12	9	4	1670,1340	1	-1
6	6	1	1466,5862	1	0	12	9	3	1670,1340	1	-1
6	6	0	1466,5862	1	0	12	10	3	1719,2196	1	0
7	0	7	1382,7939	2	1	12	10	2	1719,2196	1	0
7	1	7	1383,7425	1	1	12	11	2	1773,4336	1	-1

7	1	6	1388,6701	1	-1	12	11	1	1773,4336	1	-1
7	2	6	1394,0794	0	-1	12	12	1	1832,7607	1	0
7	2	5	1395,0671	1	-1	12	12	0	1832,7607	1	0
7	3	5	1407,3669	0	-1	13	0	13	1472,1858	1	0
7	3	4	1407,4285	1	0	13	1	13	1472,2954	1	0
7	4	4	1425,4846	8	6	13	1	12	1486,6302	1	0
7	4	3	1425,4846	8	-7	13	2	12	1488,4335	1	-1
7	5	3	1448,7910	1	1	13	2	11	1496,0325	1	-1
7	5	2	1448,7910	1	1	13	3	11	1504,0155	2	0
7	6	2	1477,2847	0	0	13	3	10	1505,9015	1	-2
7	6	1	1477,2847	0	0	13	4	10	1522,3148	3	1
7	7	1	1510,9509	0	0	13	4	9	1522,4955	1	0
7	7	0	1510,9509	0	0	13	5	9	1545,4054	1	0
8	0	8	1394,3664	0	0	13	5	8	1545,4137	3	1
8	1	8	1395,0158	1	-2	13	6	8	1573,7455	2	2
8	1	7	1401,3640	1	0	13	6	7	1573,7455	2	0
8	2	7	1406,1602	1	-1	13	7	7	1607,3154	1	1
8	2	6	1407,9334	1	1	13	7	6	1607,3154	1	1
8	3	6	1419,6408	0	0	13	8	6	1646,0770	2	1
8	3	5	1419,7743	1	0	13	8	5	1646,0770	2	1
8	4	5	1437,7457	1	1	13	9	5	1690,0049	2	0
8	4	4	1437,7495	1	0	13	9	4	1690,0049	2	0
8	5	4	1461,0336	1	1	13	10	4	1739,0801	1	-1
8	5	3	1461,0336	1	0	13	10	3	1739,0801	1	-1
8	6	3	1489,5163	1	0	13	11	3	1793,2860	2	1
8	6	2	1489,5163	1	0	13	11	2	1793,2860	2	1
8	7	2	1523,1756	1	0	13	12	2	1852,6057	1	0
8	7	1	1523,1756	1	0	13	12	1	1852,6057	1	0

8	8	1	1561,9974	1	-1	13	13	1	1917,0230		1
8	8	0	1561,9974	1	-1	13	13	0	1917,0230		1
9	0	9	1407,2731	0	0	14	0	14	1491,7458	0	0
9	1	9	1407,7603	0	0	14	1	14	1491,8187	1	0
9	1	8	1415,5594	0	0	14	1	13	1507,7982	1	0
9	2	8	1419,7143	2	-1	14	2	13	1509,1689	1	-1
9	2	7	1422,2809	1	0	14	2	12	1518,4056	1	-1
9	3	7	1433,4549	0	0	14	3	12	1525,4384	1	0
9	3	6	1433,7170	1	0	14	3	11	1527,9532	1	0
9	4	6	1451,5534	1	0	14	4	11	1543,8971	1	0
9	4	5	1451,5635	1	0	14	4	10	1544,2142	1	0
9	5	5	1474,8156	1	1	14	5	10	1566,9372	1	1
9	5	4	1474,8156	1	-1	14	5	9	1566,9543	1	1
9	6	4	1503,2829	1	0	14	6	9	1595,2239	3	3
9	6	3	1503,2829	1	0	14	6	8	1595,2239	3	-2
9	7	3	1536,9325	1	0	14	7	8	1628,7593	1	0
9	7	2	1536,9325	1	0	14	7	7	1628,7593	1	0
9	8	2	1575,7477	2	0	14	8	7	1667,4981	1	0
9	8	1	1575,7477	2	0	14	8	6	1667,4981	1	0
9	9	1	1619,7149	1	0	14	9	6	1711,4098	1	0
9	9	0	1619,7149	1	0	14	9	5	1711,4098	1	0
10	0	10	1421,5076	0	0	14	10	5	1760,4726	1	0
10	1	10	1421,8534	1	0	14	10	4	1760,4726	1	0
10	1	9	1431,2215	1	0	14	11	4	1814,6683	2	0
10	2	9	1434,7313	1	-1	14	11	3	1814,6683	2	0
10	2	8	1438,2956	1	0	14	12	3	1873,9795	1	0
10	3	8	1448,8060	0	0	14	12	2	1873,9795	1	0
10	3	7	1449,2796	1	-1	14	13	2	1938,3892		0

10	4	7	1466,9112	1	0	14	13	1	1938,3892		0
10	4	6	1466,9347	1	0	14	14	1	2007,8799		1
10	5	6	1490,1405	3	4	14	14	0	2007,8799		1
10	5	5	1490,1405	3	-2	15	0	15	1512,6439	1	0
10	6	5	1518,5867	1	1	15	1	15	1512,6918	1	0
10	6	4	1518,5867	1	1	15	1	14	1530,2810	1	0
10	7	4	1552,2232	1	0	15	2	14	1531,2988	2	0
10	7	3	1552,2232	1	0	15	2	13	1542,2812	1	0
24	10	14	2058,8814	2	0	27	7	21	2049,0507	2	-1
24	11	14	2112,8257	1	-1	27	7	20	2049,1552	2	-4
24	11	13	2112,8257	1	-1	27	8	20	2086,7575	2	2
24	12	13	2171,9338	2	-2	27	8	19	2086,7620		-6
24	12	12	2171,9338	2	-2	27	9	19	2129,9492	3	2
24	13	12	2236,1733	1	4	27	9	18	2129,9492	3	-1
24	13	11	2236,1733	1	4	27	10	18	2178,4744	3	0
24	14	11	2305,5146	3	1	27	10	17	2178,4744	3	0
24	14	10	2305,5146	3	1	27	11	17	2232,2596	2	0
24	15	10	2379,9328	2	0	27	11	16	2232,2596	2	0
24	15	9	2379,9328	2	0	27	12	16	2291,2423	3	-3
24	16	9	2459,4028	1	-1	27	12	15	2291,2423	3	-3
24	16	8	2459,4028	1	-1	27	13	15	2355,3804	1	0
24	17	8	2543,8999	1	0	27	13	14	2355,3804	1	0
24	17	7	2543,8999	1	0	27	14	14	2424,6337	1	1
24	18	7	2633,3976	2	4	27	14	13	2424,6337	1	1
24	18	6	2633,3976	2	4	27	15	13	2498,9754	1	-1
24	19	6	2727,8659		3	27	15	12	2498,9754	1	-1
24	19	5	2727,8659		3	27	17	11	2662,8062	1	0
25	0	25	1795,4068	5	1	27	17	10	2662,8062	1	0

25	1	25	1795,4068	5	-4	27	18	10	2752,2364	3	2
25	1	24	1827,5814	0	1	27	18	9	2752,2364	3	2
25	2	24	1827,6053	3	0	27	19	9	2846,6302		0
25	2	23	1855,9978	1	2	27	19	8	2846,6302		0
25	3	23	1856,4280	2	1	28	0	28	1906,3992	3	0
25	3	22	1878,5773	1	1	28	1	28	1906,3992	3	-6
25	4	22	1882,0172	3	0	28	1	27	1942,7511	4	0
25	4	21	1894,3682	3	-1	28	2	27	1942,7575	1	1
25	5	21	1906,8530	2	3	28	2	26	1975,5854	1	1
25	5	20	1910,9152	2	0	28	3	26	1975,7303	2	1
25	6	20	1934,5578	2	0	28	3	25	2003,5567	1	1
25	6	19	1935,1014	2	2	28	4	25	2005,1068	2	-1
25	7	19	1967,1491	1	0	28	4	24	2024,0356	1	3
25	7	18	1967,1870	2	-1	28	5	24	2032,8378	4	3
25	8	18	2005,1340	7	-3	28	5	23	2040,3231	2	0
25	8	17	2005,1356	8	-5	28	6	23	2060,1189	1	4
25	9	17	2048,5238	2	1	28	6	22	2061,2895	2	-2
25	9	16	2048,5238	2	0	28	7	22	2092,3683	2	-1
25	10	16	2097,1983	3	0	28	7	21	2092,5348	2	-5
25	10	15	2097,1983	3	0	28	8	21	2129,9219	3	6
25	11	15	2151,0953	2	0	28	8	20	2129,9290	5	-7
25	11	14	2151,0953	2	0	28	9	20	2172,9997	4	3
25	12	14	2210,1660	1	-2	28	9	19	2172,9997	4	-3
25	12	13	2210,1660	1	-2	28	10	19	2221,4369	3	0
25	13	13	2274,3747	3	3	28	10	18	2221,4369	3	0
25	13	12	2274,3747	3	3	28	11	18	2275,1567	2	0
25	14	12	2343,6900	2	3	28	11	17	2275,1567	2	0
25	14	11	2343,6900	2	3	28	12	17	2334,0881	1	-4

25	15	11	2418,0850	2	0	28	12	16	2334,0881	1	-4
25	15	10	2418,0850	2	0	28	14	15	2467,4030	2	0
25	16	10	2497,5333	2	-7	28	14	14	2467,4030	2	0
25	16	9	2497,5333	2	-7	28	15	14	2541,7140	2	-2
25	17	9	2582,0108	1	1	28	15	13	2541,7140	2	-2
25	17	8	2582,0108	1	1	28	17	12	2705,4907		0
25	18	8	2671,4875	2	-1	28	17	11	2705,4907		0
25	18	7	2671,4875	2	-1	28	18	11	2794,8940		3
25	19	7	2765,9338	0	1	28	18	10	2794,8940		3
25	19	6	2765,9338	0	1	28	19	10	2889,2573	1	2
26	0	26	1831,0634	3	-1	28	19	9	2889,2573	1	2
26	1	26	1831,0634	3	-4	29	0	29	1946,0763	2	7
26	1	25	1864,6331	1	1	29	1	29	1946,0763	2	-9
26	2	25	1864,6487	0	0	29	1	28	1983,8182		0
26	2	24	1894,5444	2	1	29	2	28	1983,8214	1	1
26	3	24	1894,8467	1	0	29	2	27	2018,0896	2	0
26	3	23	1918,9662	2	1	29	3	27	2018,1882	2	1
26	4	23	1921,6376		-3	29	3	26	2047,7519	2	1
26	4	22	1936,1096	1	0	29	4	26	2048,9070	3	0
26	5	21	1952,2683	3	2	29	4	25	2070,1109	3	0
26	6	21	1974,9241	4	0	29	5	25	2077,4205	4	0
26	6	20	1975,6280	1	3	29	5	24	2086,9192	3	0
26	7	20	2007,3109	1	0	29	6	24	2104,9015	1	3
26	7	19	2007,3746	1	-3	29	6	23	2108,0611	2	-7
26	8	19	2045,1623	9	-1	29	7	23	2137,2591	1	-2
26	8	18	2045,1650	9	-5	29	7	22	2137,5151	4	-5
26	9	18	2088,4580	2	1	29	8	22	2174,6564	4	5
26	9	17	2088,4580	2	0	29	8	21	2174,6675	4	-7

26	10	17	2137,0620	1	0	29	9	21	2217,6125	6	9
26	10	16	2137,0620	1	0	29	9	20	2217,6125	6	-1
26	11	16	2190,9061	1	-1	29	10	20	2265,9514	1	1
26	11	15	2190,9061	1	-1	29	10	19	2265,9514	1	1
26	12	15	2249,9352	3	-2	29	11	19	2319,5988	2	1
26	12	14	2249,9352	3	-2	29	11	18	2319,5988	2	1
26	13	14	2314,1105	1	10	29	12	18	2378,4738	3	-3
26	13	13	2314,1105	1	10	29	12	17	2378,4738	3	-3
26	14	13	2383,3961	1	1	29	14	16	2511,7046	2	1
26	14	12	2383,3961	1	1	29	14	15	2511,7046	2	1
26	15	12	2457,7658	1	0	29	15	15	2585,9822	2	-1
26	15	11	2457,7658	1	0	29	15	14	2585,9822	2	-1
26	17	10	2621,6463	2	1	29	16	14	2665,3259		14
26	17	9	2621,6463	2	1	29	16	13	2665,3259		14
26	18	9	2711,1009	2	2	29	17	13	2749,6993		-1
26	18	8	2711,1009	2	2	29	17	12	2749,6993		-1
26	19	8	2805,5222		1	29	18	12	2839,0730		1
26	19	7	2805,5222		1	29	18	11	2839,0730		1
27	0	27	1868,0611	3	-4	30	0	30	1987,0963	3	-1
27	1	27	1868,0611	3	0	30	1	30	1987,0963	3	-1
27	1	26	1903,0230	1	2	30	1	29	2026,2188	1	1
27	2	26	1903,0329	1	-1	30	2	29	2026,2243	2	0
27	2	25	1934,4052	1	1	30	2	28	2061,9229	3	4
27	3	25	1934,6154	2	0	30	3	28	2061,9869	1	0
27	3	24	1960,6284	1	1	30	3	27	2093,2199	0	0
27	4	24	1962,6777	3	-2	30	4	27	2094,0686	2	0
27	4	23	1979,3487	1	-1	30	4	26	2117,5324	1	0
27	5	23	1988,4396	2	-9	30	5	26	2123,5308	3	1

27	5	22	1995,4251	2	0	30	5	25	2135,1680	2	-3
27	6	22	2016,7600	1	3	30	6	25	2152,7239		13
27	6	21	2017,7694	3	2	30	6	24	2155,3712	3	-5
15	3	13	1548,3511	1	0	18	11	8	1915,5140	1	-1
15	3	12	1552,3042	1	0	18	11	7	1915,5140	1	-1
15	4	12	1567,0348	1	0	18	12	7	1974,7742	1	-1
15	4	11	1567,5649	1	0	18	12	6	1974,7742	1	-1
15	5	11	1590,0304	1	1	18	13	6	2039,1399	1	0
15	5	10	1590,0640	1	0	18	13	5	2039,1399	1	0
15	6	10	1618,2537	7	6	18	14	5	2108,5911	2	2
15	6	9	1618,2537	7	-6	18	14	4	2108,5911	2	2
15	7	9	1651,7470	1	1	18	15	4	2183,1075	1	1
15	7	8	1651,7470	1	1	18	15	3	2183,1075	1	1
15	8	8	1690,4579	1	0	18	16	3	2262,6689	3	1
15	8	7	1690,4579	1	0	18	16	2	2262,6689	3	1
15	9	7	1734,3499	1	-1	18	17	2	2347,2534	1	-3
15	9	6	1734,3499	1	-1	18	17	1	2347,2534	1	-3
15	10	6	1783,3977	0	-1	18	18	1	2436,8395		-1
15	10	5	1783,3977	0	-1	18	18	0	2436,8395		-1
15	11	5	1837,5814	1	-1	19	0	19	1609,6432	1	-1
15	11	4	1837,5814	1	-1	19	1	19	1609,6516	1	-1
15	12	4	1896,8828	1	0	19	1	18	1633,3105	1	0
15	12	3	1896,8828	1	0	19	2	18	1633,5689	0	0
15	13	3	1961,2837	1	0	19	2	17	1651,9641	1	0
15	13	2	1961,2837	1	0	19	3	17	1654,6415	2	-2
15	14	2	2030,7662	1	0	19	3	16	1664,6447	1	-1
15	14	1	2030,7662	1	0	19	4	16	1675,0175	1	0
15	15	1	2105,3119	2	0	19	4	15	1677,5791	1	0

15	15	0	2105,3119	2	0	19	5	15	1698,0737	1	1
16	0	16	1534,8816	1	0	19	5	14	1698,3998	1	1
16	1	16	1534,9129	1	0	19	6	14	1725,9564	2	1
16	1	15	1554,0720	1	0	19	6	13	1725,9775	2	2
16	2	15	1554,8122	1	0	19	7	13	1759,1865	5	2
16	2	14	1567,6170	1	-1	19	7	12	1759,1874	5	2
16	3	14	1572,7408	1	-1	19	8	12	1797,7218	1	1
16	3	13	1577,9139	1	0	19	8	11	1797,7218	1	1
16	4	13	1591,7238	2	0	19	9	11	1841,4910	1	0
16	4	12	1592,5708	2	0	19	9	10	1841,4910	1	0
16	5	12	1614,6883	1	0	19	10	10	1890,4470	1	0
16	5	11	1614,7516	2	0	19	10	9	1890,4470	1	0
16	6	11	1642,8377	8	3	19	11	9	1944,5587	1	0
16	6	10	1642,8402	2	0	19	11	8	1944,5587	1	0
16	7	10	1676,2808	2	2	19	12	8	2003,8007	1	0
16	7	9	1676,2808	2	1	19	12	7	2003,8007	1	0
16	8	9	1714,9583	1	0	19	13	7	2068,1511	1	0
16	8	8	1714,9583	1	0	19	13	6	2068,1511	1	0
16	9	8	1758,8267	1	0	19	14	6	2137,5886	1	-1
16	9	7	1758,8267	1	0	19	14	5	2137,5886	1	-1
16	10	7	1807,8568	2	0	19	15	5	2212,0930	2	1
16	10	6	1807,8568	2	0	19	15	4	2212,0930	2	1
16	11	6	1862,0264	1	0	19	16	4	2291,6427	1	0
16	11	5	1862,0264	1	0	19	16	3	2291,6427	1	0
16	12	5	1921,3159	0	0	19	17	3	2376,2161		-2
16	12	4	1921,3159	0	0	19	17	2	2376,2161		-2
16	13	4	1985,7066	1	0	19	18	2	2465,7909	1	-1
16	13	3	1985,7066	1	0	19	18	1	2465,7909	1	-1

16	14	3	2055,1802	2	1	20	0	20	1637,2482	7	-1
16	14	2	2055,1802	2	1	20	1	19	1662,3613	1	0
16	15	2	2129,7171	1	0	20	2	19	1662,5389	2	1
16	15	1	2129,7171	1	0	20	2	18	1682,7417	1	0
16	16	1	2209,2979		-1	20	3	18	1684,8037	2	-1
16	16	0	2209,2979		-1	20	3	17	1696,7052	1	-1
17	0	17	1558,4603	1	0	20	4	17	1705,8186	1	1
17	1	17	1558,4805	1	-1	20	4	16	1709,8915	3	-1
17	1	16	1579,1711	1	0	20	5	16	1729,0067	1	1
17	2	16	1579,7000	1	0	20	5	15	1729,5302	2	1
17	2	15	1594,3698	1	0	20	6	15	1756,7969	2	1
17	3	15	1598,5948	1	-1	20	6	14	1756,8353	1	1
17	3	14	1605,2068	2	0	20	7	14	1789,9332	8	2
17	4	14	1617,9572	1	0	20	7	13	1789,9350	7	2
17	4	13	1619,2533	2	0	20	8	13	1828,4042	2	1
17	5	13	1640,9140	1	1	20	8	12	1828,4042	2	0
17	5	12	1641,0278	2	-2	20	9	12	1872,1289	2	0
17	6	12	1668,9804		1	20	9	11	1872,1289	2	0
17	6	11	1668,9859		0	20	10	11	1921,0519	1	-1
17	7	11	1702,3634	2	2	20	10	10	1921,0519	1	-1
17	7	10	1702,3634	2	0	20	11	10	1975,1380	1	-2
17	8	10	1741,0010	1	0	20	11	9	1975,1380	1	-2
17	8	9	1741,0010	1	0	20	12	9	2034,3595	1	-1
17	9	9	1784,8415	1	0	20	12	8	2034,3595	1	-1
17	9	8	1784,8415	1	0	20	13	8	2098,6927	1	1
17	10	8	1833,8506	2	0	20	13	7	2098,6927	1	1
17	10	7	1833,8506	2	0	20	14	7	2168,1151	1	1
17	11	7	1888,0037	1	0	20	14	6	2168,1151	1	1

17	11	6	1888,0037	1	0	20	15	6	2242,6057	1	2
17	12	6	1947,2794	1	-1	20	15	5	2242,6057	1	2
17	12	5	1947,2794	1	-1	20	16	5	2322,1425	0	0
17	13	5	2011,6585	1	-1	20	16	4	2322,1425	0	0
17	13	4	2011,6585	1	-1	20	17	4	2406,7036	1	0
17	14	4	2081,1216	1	1	20	17	3	2406,7036	1	0
17	14	3	2081,1216	1	1	20	18	3	2496,2655		-2
17	15	3	2155,6490	2	1	20	18	2	2496,2655		-2
17	15	2	2155,6490	2	1	20	19	2	2590,8045		3
17	16	2	2235,2204	2	-2	20	19	1	2590,8045		3
17	16	1	2235,2204	2	-2	20	20	1	2690,2955		1
17	17	1	2319,8153		-3	20	20	0	2690,2955		1
17	17	0	2319,8153		-3	21	0	21	1666,1956		-1
18	0	18	1583,3806		-1	21	1	21	1666,1995		3
18	1	18	1583,3937		-1	21	1	20	1692,7392	1	0
18	1	17	1605,5822	1	0	21	2	20	1692,8600	2	1
18	2	17	1605,9545	2	0	21	2	19	1714,8135	1	1
18	2	16	1622,4976	1	-1	21	3	19	1716,3701	2	-1
18	3	16	1625,8999	2	-1	21	3	18	1730,2666	2	0
18	3	15	1634,1309	1	-1	21	4	18	1738,1132	2	1
18	4	15	1645,7256	2	0	21	4	17	1743,3730	2	0
18	4	14	1647,6203	1	-1	21	5	17	1761,5039	2	2
18	5	14	1668,7090	1	1	21	5	16	1762,3161	2	-2
18	5	13	1668,9051	1	1	21	6	16	1789,2100	2	0
18	6	13	1696,6854	1	1	21	6	15	1789,2778	1	1
18	6	12	1696,6965	1	1	21	7	15	1822,2410	3	3
18	7	12	1729,9978	3	3	21	7	14	1822,2442		0
18	7	11	1729,9978	3	-1	21	8	14	1860,6377	1	0

18	8	11	1768,5882	1	1	21	8	13	1860,6377	1	-1
18	8	10	1768,5882	1	1	21	9	13	1904,3113	1	0
18	9	10	1812,3957	1	0	21	9	12	1904,3113	1	0
18	9	9	1812,3957	1	0	21	10	12	1953,1965	1	0
18	10	9	1861,3802	1	-1	21	10	11	1953,1965	1	0
18	10	8	1861,3802	1	-1	21	11	11	2007,2536	1	0
30	7	24	2183,7105	1	0	33	14	19	2704,2402	3	3
30	7	23	2184,0785	2	-9	33	16	18	2857,5424	8	1
30	8	23	2220,9623	5	8	33	16	17	2857,5424	8	1
30	8	22	2220,9755	4	-4	34	0	34	2164,5590	0	0
30	9	22	2263,7885	9	4	34	1	34	2164,5590	0	0
30	9	21	2263,7898	5	-1	34	1	33	2209,2156	4	2
30	10	21	2312,0193	2	0	34	2	33	2209,2156	4	-1
30	10	20	2312,0193	2	-1	34	2	32	2250,5453	3	1
30	11	20	2365,5870	1	1	34	3	32	2250,5618	3	0
30	11	19	2365,5870	1	1	34	3	31	2287,9943	1	-2
30	12	19	2424,4001	3	-3	34	4	31	2288,2169	1	0
30	12	18	2424,4001	3	-3	34	4	30	2319,9901	4	-1
30	14	17	2557,5389	3	3	34	5	30	2322,6253	3	-1
30	14	16	2557,5389	3	3	34	5	29	2343,6591	1	0
30	15	16	2631,7796	3	-2	34	6	29	2353,7644	6	-3
30	15	15	2631,7796	3	-2	34	6	28	2362,7912	5	8
30	16	15	2711,0892	5	3	34	10	25	2511,8608	5	8
30	16	14	2711,0892	5	3	34	10	24	2511,8608	5	-2
30	17	14	2795,4322	2	-1	34	11	24	2565,0248	1	2
30	17	13	2795,4322	2	-1	34	11	23	2565,0248	1	1
30	18	13	2884,7737		4	34	12	23	2623,5271	3	3
30	18	12	2884,7737		4	34	12	22	2623,5271	3	3

31	0	31	2029,4540	2	-2	34	14	21	2756,2077	2	0
31	1	31	2029,4540	2	-2	34	14	20	2756,2077	2	0
31	1	30	2069,9630	4	1	35	0	35	2212,2697	1	1
31	2	30	2069,9657	3	1	35	1	35	2212,2697	1	1
31	2	29	2107,0609	3	1	35	1	34	2258,3066	3	1
31	3	29	2107,1248	1	0	35	2	34	2258,3066	3	-1
31	3	28	2139,9697	5	2	35	2	33	2301,0338		3
31	4	28	2140,5854	2	0	35	3	33	2301,0466		0
31	4	27	2166,2563	2	-1	35	3	32	2339,9519	1	0
31	5	27	2171,1170	1	0	35	4	32	2340,1085	2	-1
31	5	26	2185,0106		15	35	4	31	2373,7258	3	-1
31	6	26	2200,5319	2	0	35	5	31	2376,3025	4	-2
31	6	25	2204,5506	2	-7	35	5	30	2399,3761	0	0
31	7	25	2231,6838	2	9	35	6	30	2407,8713	2	-3
31	7	24	2232,1081	3	-8	35	10	26	2565,7182	7	1
31	8	23	2268,8407	3	6	35	10	25	2565,7102		2
31	9	23	2311,5319	1	4	35	11	25	2618,7603	3	2
31	9	22	2311,5343	3	-2	35	11	24	2618,7603	3	1
31	10	22	2359,6429	3	2	35	12	24	2677,1670	4	-3
31	10	21	2359,6429	3	0	35	12	23	2677,1670	4	-3
31	11	21	2413,1226	1	1	35	14	21	2809,7095	3	1
31	11	20	2413,1226	1	1	35	14	22	2809,7095	3	1
31	12	20	2471,8677	1	-2	36	0	36	2261,3172	1	1
31	12	19	2471,8677	1	-2	36	1	36	2261,3172	1	1
31	14	18	2604,9058	2	1	36	1	35	2308,7336	2	0
31	14	17	2604,9058	2	1	36	2	35	2308,7336	2	-1
31	15	17	2679,1069	3	-2	36	2	34	2352,8547	1	0
31	15	16	2679,1069	3	-2	36	3	33	2393,2260	1	-1

31	16	16	2758,3804	4	4	36	4	33	2393,3363	3	-1
31	16	15	2758,3804	4	4	36	4	32	2428,7133	1	-2
31	17	15	2842,6889	1	-1	36	5	32	2429,6452	3	1
31	17	14	2842,6889	1	-1	36	5	31	2456,4227	2	-1
31	18	14	2931,9943		-2	36	6	31	2463,4449	2	-2
31	18	13	2931,9943		-2	36	6	30	2476,8950	4	6
32	0	32	2073,1507	1	-1	36	10	27	2621,1361		8
32	1	32	2073,1507	1	-1	36	11	26	2674,0470		2
32	1	31	2115,0436	3	3	36	11	25	2674,0470		0
32	2	31	2115,0460		-9	36	12	25	2732,3517	3	-3
32	2	30	2153,5660	3	2	36	12	24	2732,3517	3	-3
32	3	30	2153,6006	3	1	36	14	22	2864,7448	6	-4
32	3	29	2188,0096	1	0	36	14	23	2864,7448	6	-4
32	4	29	2188,4517	3	-2	37	0	37	2311,7013	1	1
32	4	28	2216,2519	1	0	37	1	37	2311,7013	1	1
32	5	28	2220,1553	1	-1	37	1	36	2360,4964	1	1
32	5	27	2236,4265	2	1	37	2	36	2360,4964	1	-1
32	6	27	2250,0516	3	-3	37	2	35	2406,0088	1	0
32	6	26	2255,5342	3	-5	37	3	35	2406,0110		7
32	9	24	2360,8453	4	11	37	3	34	2447,8207	4	4
32	9	23	2360,8484	3	-7	37	4	34	2447,8984	2	-1
32	10	23	2408,8233	2	3	37	4	33	2484,9627	2	-1
32	10	22	2408,8233	2	0	37	5	33	2485,7025	3	-2
32	11	22	2462,2068	2	2	37	5	32	2514,7550	1	-1
32	11	21	2462,2068	2	2	37	6	32	2520,4646	3	-2
32	12	21	2520,8772	3	-4	37	6	31	2536,3782	3	3
32	12	20	2520,8772	3	-4	37	11	27	2730,8837	3	-1
32	14	19	2653,8063	4	3	37	11	26	2730,8837	3	-4

32	14	18	2653,8063	4	3	37	12	26	2789,0810	3	2
32	15	18	2727,9634	6	-8	37	12	25	2789,0810	3	2
32	15	17	2727,9634	6	-8	38	0	38	2363,4214	1	1
32	16	17	2807,1987	6	8	38	1	38	2363,4214	1	1
32	16	16	2807,1987	6	8	38	1	37	2413,5942	0	0
32	17	16	2891,4689	4	-5	38	2	37	2413,5942	0	0
32	17	15	2891,4689	4	-5	38	2	36	2460,4957	8	-1
33	0	33	2118,1858	1	-1	38	3	36	2460,4978	8	3
33	1	33	2118,1858	1	-1	38	3	35	2503,7370	2	1
33	1	32	2161,4609	3	0	38	4	35	2503,7943	2	0
33	2	32	2161,4609	3	2	38	4	34	2542,4844		-4
33	2	31	2201,3897	1	0	38	5	34	2543,0418		-9
33	3	31	2201,4131	1	0	38	5	33	2574,3396	3	1
33	3	30	2237,3488	1	0	38	6	33	2578,9127	0	-1
33	4	30	2237,6636	1	0	38	6	32	2597,4133	1	1
33	4	29	2267,4992	1	0	38	11	28	2789,2682	7	-2
33	5	29	2270,6429	1	-3	38	11	27	2789,2682	7	-7
33	5	28	2289,3239	1	0	38	12	27	2847,3525	3	1
33	6	28	2301,1475	3	-3	38	12	26	2847,3525	3	0
33	6	27	2308,2932	4	-6	39	0	39	2416,4772	1	4
33	7	27	2331,5344	1	2	39	1	39	2416,4772	1	4
33	8	25	2368,9116	4	-3	39	1	38	2468,0266	0	0
33	10	24	2459,5622	3	5	39	2	38	2468,0266	0	0
33	10	23	2459,5622	3	-1	39	2	37	2516,3153	9	-1
33	11	23	2512,8405	1	1	39	3	37	2516,3166	9	1
33	11	22	2512,8405	1	1	39	3	36	2560,9779	1	1
33	12	22	2571,4304	3	0	39	4	36	2561,0279	1	3
33	12	21	2571,4304	3	0	39	4	35	2601,2897	2	0

33	14	20	2704,2402	3	3						
21	11	10	2007,2536	1	0	24	8	16	1966,6712	6	-2
21	12	10	2066,4515	1	-2	24	9	16	2010,1441	2	0
21	12	9	2066,4515	1	-2	24	9	15	2010,1441	2	-1
21	13	9	2130,7651	1	1	24	10	15	2058,8814	2	0
21	13	8	2130,7651	1	1	39	5	35	2601,7011	2	0
21	14	8	2200,1705	1	1	39	5	34	2635,1549	2	-1
21	14	7	2200,1705	1	1	39	6	34	2638,7735		4
21	15	7	2274,6456	2	0	39	6	33	2659,9401	2	1
21	15	6	2274,6456	2	0	39	12	28	2907,1642	6	-3
21	16	6	2354,1683	1	0	39	12	27	2907,1642	6	-3
21	16	5	2354,1683	1	0	40	0	40	2470,8674	1	1
21	17	5	2438,7157	1	1	40	1	40	2470,8674	1	1
21	17	4	2438,7157	1	1	40	1	39	2523,7935	3	3
21	18	4	2528,2636	0	-1	40	2	39	2523,7935	3	3
21	18	3	2528,2636	0	-1	40	2	38	2573,4669	4	-2
21	19	3	2622,7874	2	2	40	3	38	2573,4680	2	1
21	19	2	2622,7874	2	2	40	3	37	2619,5442	2	2
21	20	2	2722,2605		2	40	4	36	2661,3868	2	5
21	20	1	2722,2605		2	40	5	36	2661,6870	1	-2
21	21	1	2826,6680		-2	40	5	35	2697,1918	4	-6
21	21	0	2826,6680		-2	40	6	35	2700,0333		7
22	0	22	1696,4852	6	-2	40	6	34	2723,8977	1	0
22	1	22	1696,4877	9	2	40	11	30	2910,6485	7	8
22	1	21	1724,4478	1	1	40	11	29	2910,6485	7	-6
22	2	21	1724,5293	1	1	41	0	41	2526,5923	0	1
22	2	20	1748,1724	1	0	41	1	41	2526,5923	0	1
22	3	20	1749,3264	3	-1	41	1	40	2580,8935	3	1

22	3	19	1765,2808	3	0	41	2	40	2580,8935	3	1
22	4	19	1771,8865	3	4	41	2	39	2631,9507		0
22	4	18	1778,6317	2	0	41	3	39	2631,9512	2	0
22	5	18	1795,5580	3	-1	41	3	38	2679,4366		2
22	5	17	1796,7729	1	1	41	4	38	2679,4456		4
22	6	17	1823,1985	1	1	41	4	37	2722,7823	2	2
22	6	16	1823,3140	2	0	41	5	37	2723,0034	3	-1
22	7	16	1856,1131	2	0	41	5	36	2760,4509	3	-2
22	7	15	1856,1198	1	2	41	6	36	2762,6840	3	4
22	8	15	1894,4249	2	1	41	2	39	2789,2270	4	2
22	8	14	1894,4249	2	-2	42	0	42	2583,6510	2	0
22	9	14	1938,0402	2	2	42	1	42	2583,6510	2	0
22	9	13	1938,0402	2	2	42	1	41	2639,3266	2	-1
22	10	13	1986,8820	3	0	42	2	41	2639,3266	2	-1
22	10	12	1986,8820	3	0	42	2	40	2691,7658	2	0
22	11	12	2040,9059	1	-1	42	3	40	2691,7664	2	3
22	11	11	2040,9059	1	-1	42	3	39	2740,6557	3	3
22	12	11	2100,0773	3	-3	42	4	39	2740,6629	-	4
22	12	10	2100,0773	3	-3	42	4	38	2785,4831	2	2
22	13	10	2164,3691	1	3	42	5	38	2785,6542	2	1
22	13	9	2164,3691	1	3	42	5	37	2824,9442	-	12
22	14	9	2233,7553	1	1	42	6	37	2826,7301	4	0
22	14	8	2233,7553	1	1	42	8	34	2855,8720		-5
22	15	8	2308,2134		0	43	0	43	2642,0431	3	-3
22	15	7	2308,2134		0	43	1	43	2642,0431	3	-3
22	16	7	2387,7202	1	0	43	1	42	2699,0925		-2
22	16	6	2387,7202	1	0	43	2	42	2699,0925		-2
22	17	6	2472,2525	1	2	43	2	41	2752,9120	5	0

22	17	5	2472,2525	1	2	43	3	41	2752,9120	5	-2
23	0	23	1728,1173		0	43	3	40	2803,2014	4	1
23	1	23	1728,1183		-3	43	4	40	2803,2068	-	7
23	1	22	1757,4898	1	0	43	4	39	2849,4932	4	2
23	2	22	1757,5444	1	1	43	5	38	2890,6746	4	-1
23	2	21	1782,8189	1	0	44	0	44	2701,7690	2	-2
23	3	21	1783,6609	2	0	44	1	44	2701,7690	2	-2
23	3	20	1801,6998	2	0	44	1	43	2760,1908	0	0
23	4	20	1807,1263	2	4	44	2	43	2760,1908	0	0
23	4	19	1815,5819	2	1	44	2	42	2815,3888	1	0
23	5	19	1831,1581	1	3	44	3	42	2815,3888	1	-1
23	5	18	1832,8858	1	1	44	3	41	2867,0740	1	0
23	6	18	1858,7634	1	2	44	4	41	2867,0771		-1
23	6	17	1858,9550	3	1	44	4	40	2914,8164		5
23	7	17	1891,5529	0	0	44	5	39	2957,6597	4	-5
23	7	16	1891,5651	1	0	45	0	45	2762,8284	1	-2
23	8	16	1929,7684	3	2	45	1	45	2762,8284	1	-2
23	8	15	1929,7684	3	-3	45	1	44	2822,6211	2	1
23	9	15	1973,3170	2	1	45	2	44	2822,6211	2	1
23	9	14	1973,3170	2	0	45	2	43	2879,1958	2	-1
23	10	14	2022,1098	2	0	45	3	43	2879,1958	2	-1
23	10	13	2022,1098	2	0	45	5	40	2932,2750		13
23	11	13	2076,0964	3	0	45	6	40	2932,2768		12
23	11	12	2076,0964	3	0	46	0	46	2825,2251	3	5
23	12	12	2135,2379	2	-2	46	1	46	2825,2251	3	5
23	12	11	2135,2379	2	-2	46	1	45	2886,3832	2	0
23	13	11	2199,5049	3	3	46	2	45	2886,3832	2	0
23	13	10	2199,5049	3	3	46	2	44	2944,3328	2	-1

23	14	10	2268,8699	1	1	46	3	44	2944,3328	2	-1
23	14	9	2268,8699	1	1	46	3	43	2998,8005		4
23	15	9	2343,3089	1	0	46	4	43	2998,8012	9	1
23	15	8	2343,3089	1	0	47	0	47	2888,9918	1	2
23	17	7	2507,3137	1	0	47	1	47	2888,9918	1	2
23	17	6	2507,3137	1	0	47	1	46	2951,4788	1	1
23	18	6	2596,8297	1	1	47	2	46	2951,4788	1	1
23	18	5	2596,8297	1	1	47	2	45	3010,7997		-1
23	19	5	2691,3181	3	-1	47	3	45	3010,7997		-1
23	19	4	2691,3181	3	-1	47	3	44	3066,6535		5
23	20	4	2790,7473		1	47	4	44	3066,6535		-1
23	20	3	2790,7473		1	48	1	47	3017,9127		8
24	0	24	1761,0914	7	2	48	2	47	3017,9127		8
24	1	24	1761,0914	7	-6	48	2	46	3078,5968	3	-1
24	3	21	1791,8672	1	0	48	3	46	3078,5968	3	-1
24	2	23	1791,9036	3	1	48	3	45	3135,8330	8	4
24	2	22	1818,7584	1	1	48	4	45	3135,8330	8	2
24	3	22	1819,3639	2	0	49	1	48	3085,7082	3	-3
24	1	23	1839,4781	1	0	49	2	48	3085,7082	3	-3
24	4	21	1843,8835	2	0	49	2	47	3147,7251	3	-3
24	4	20	1854,1760	2	0	49	3	47	3147,7251	3	-2
24	5	20	1868,2818	2	2	49	3	46	3206,3385	4	-2
24	5	19	1870,3697	3	3	49	4	46	3206,3385	4	-1
24	6	19	1895,9026	1	0	50	2	48	3218,1896	2	2
24	6	18	1896,2129	2	-1	50	3	48	3218,1896	2	3
24	7	18	1928,5640	1	1	50	3	47	3278,1714		-2
24	7	17	1928,5858	2	0	50	4	47	3278,1714		0
24	8	17	1966,6704	6	-1						

Приложение Б

Таблица Б.1 - колебательно-вращательные уровни (в см^{-1}) для ($\nu_3=1$) колебательного состояния молекулы $\text{C}_2\text{H}_2\text{D}_2$ -дис.

J	K_a	K_c	E	Δ	δ	J	K_a	K_c	E	Δ	δ
3	3	1	1250,1804	2	3	9	5	4	1350,9378	4	0
3	3	0	1250,1804	4	0	9	6	4	1379,1300	0	1
4	2	3	1243,4166	2	-2	9	6	3	1379,1300	0	1
4	3	2	1256,3000	2	2	9	7	3	1412,4568	2	-1
4	3	1	1256,3017	2	0	9	7	2	1412,4568	2	-1
4	4	1	1274,2729	3	3	9	8	2	1450,9028	1	1
4	4	0	1274,2729	3	3	9	8	1	1450,9028	1	1
5	2	3	1251,3382	5	-4	9	9	1	1494,4550	2	1
5	3	3	1263,9553	2	-1	9	9	0	1494,4550	2	1
5	3	2	1263,9638	2	0	10	2	9	1311,4158	2	-2
5	4	2	1281,9200	4	1	10	2	8	1314,9191		2
5	4	1	1281,9200	4	0	10	3	8	1325,3408	2	1
5	5	0	1305,0225	2	3	10	3	7	1325,8187	3	1
5	5	1	1305,0225	2	3	10	4	7	1343,2652	2	1
6	2	5	1260,1344		1	10	5	6	1366,2667	2	2
6	3	4	1273,1503	1	-1	10	5	5	1366,2671	2	0
6	3	3	1273,1751	4	-3	10	6	5	1394,4379	2	1
6	4	3	1291,1032	2	1	10	6	4	1394,4379	2	1
6	4	2	1291,1037	7	2	10	7	4	1427,7518	2	0
6	5	2	1314,1969	1	2	10	7	3	1427,7518	2	0
6	5	1	1314,1969	1	2	10	8	3	1466,1889	2	0
6	6	0	1342,4231	1	0	10	8	2	1466,1889	2	0
6	6	1	1342,4231	1	0	10	9	2	1509,7346	2	1
7	2	6	1270,7404		3	10	9	1	1509,7346	2	1

7	2	5	1271,8056	2	-1	10	10	1	1558,3760	3	1
7	3	5	1283,8870		4	10	10	0	1558,3760	3	1
7	3	4	1283,9486	1	0	11	2	10	1327,8856	4	-2
7	4	4	1301,8255	3	1	11	2	9	1332,5706	3	-4
7	4	3	1301,8265	3	-2	11	3	9	1342,2298	2	-1
7	5	3	1324,9058	2	1	11	3	8	1343,0368	2	0
7	5	2	1324,9058	2	1	11	4	8	1360,1816	3	0
7	6	2	1353,1247	1	1	11	4	7	1360,2316	4	-2
7	6	1	1353,1247	1	1	11	5	7	1383,1419	3	-1
7	7	1	1386,4682	2	1	11	5	6	1383,1433	4	-2
7	7	0	1386,4682	2	1	11	6	6	1411,2855	3	-1
8	2	7	1282,8304	1	1	11	6	5	1411,2855	3	-2
8	2	6	1284,5211	2	-3	11	7	5	1444,5825	1	-1
8	3	6	1296,1648	3	0	11	7	4	1444,5825	1	-1
8	3	5	1296,2994	2	0	11	8	4	1483,0080	3	-2
8	4	5	1314,0908	2	2	11	8	3	1483,0080	3	-2
8	4	4	1314,0947	1	1	11	9	3	1526,5455	2	0
8	5	4	1337,1517	2	0	11	9	2	1526,5455	2	0
8	5	3	1337,1517	2	-1	11	10	2	1575,1805	1	1
8	6	3	1365,3596	2	0	11	10	1	1575,1805	1	1
8	6	2	1365,3596	2	0	11	11	1	1628,9000	3	3
8	7	1	1398,6961	1	0	11	11	0	1628,9000	3	3
8	7	2	1398,6961	1	0	12	2	11	1345,7888	3	-1
8	8	1	1437,1486	1	0	12	2	10	1351,8272	3	0
8	8	0	1437,1486	1	0	12	3	10	1360,6439	1	0
9	2	8	1296,3932	1	1	12	3	9	1361,9266	3	-1
9	2	7	1298,8962	2	2	12	4	9	1378,6548	4	1
9	3	7	1309,9837	2	-3	12	4	8	1378,7534	4	-2

9	3	6	1310,2482	2	1	12	5	8	1401,5676	2	-1
9	4	6	1327,9022	3	-4	12	5	7	1401,5713	3	-1
9	4	5	1327,9130	3	2	12	6	7	1429,6760	4	0
9	5	5	1350,9378	4	2	12	6	6	1429,6760	4	0
17	6	11	1544,8792	4	-1	19	7	12	1634,7732	3	-3
17	7	11	1577,9331	4	-1	19	8	12	1672,9389	3	2
17	7	10	1577,9331	4	-3	19	8	11	1672,9389	3	2
17	8	10	1616,2020	1	-1	19	9	11	1716,2937	2	1
17	8	9	1616,2020	1	-1	19	9	10	1716,2937	2	1
17	9	9	1659,6286	1	0	19	10	10	1764,7929	4	1
17	9	8	1659,6286	1	0	19	10	9	1764,7929	4	1
17	10	8	1708,1803	3	-2	19	11	9	1818,3838	1	2
17	10	7	1708,1803	3	-2	19	11	8	1818,3838	1	2
17	11	7	1761,8306	1	-3	19	12	8	1877,1125	2	5
17	11	6	1761,8306	1	-3	19	12	7	1877,1125	2	5
17	12	6	1820,5715	1	3	19	13	7	1940,8850	2	2
17	12	5	1820,5715	1	3	19	13	6	1940,8850	2	2
17	13	5	1884,3711	2	-1	20	3	18	1561,3826	4	0
17	13	4	1884,3711	2	-1	20	3	17	1573,2083		2
18	2	16	1499,0894	1	0	20	4	17	1582,2806		1
18	3	16	1502,4930	1	1	20	4	16	1586,0990	4	1
18	3	15	1510,6410	2	-2	20	5	16	1605,2120	3	0
18	4	15	1522,1476		3	20	5	15	1605,7460	3	1
18	4	14	1524,0989	5	1	20	6	15	1632,7172	2	0
18	5	14	1544,8903	3	1	20	6	14	1632,7565	2	2
18	5	13	1545,0899	3	2	20	7	14	1665,5285	4	5
18	6	13	1572,5873	3	5	20	7	13	1665,5297	4	-4
18	6	12	1572,5980	3	-1	20	8	13	1703,6295	5	-2

18	7	12	1605,5752	4	0	20	8	12	1703,6295	5	-3
18	7	11	1605,5755	4	0	20	9	12	1746,9402	2	3
18	8	11	1643,7968	1	-1	20	9	11	1746,9402	2	3
18	8	10	1643,7968	1	-1	20	10	11	1795,4060	2	-2
18	9	10	1687,1905	1	1	20	10	10	1795,4060	2	-2
18	9	9	1687,1905	1	0	20	12	9	1907,6825	3	9
18	10	9	1735,7179	3	-1	20	12	8	1907,6825	3	9
18	10	8	1735,7179	3	-1	20	13	8	1971,4379	5	2
18	11	8	1789,3454	3	-2	20	13	7	1971,4379	5	2
18	11	7	1789,3454	3	-2	21	3	19	1592,9386	2	1
18	12	7	1848,0756	4	2	21	3	18	1606,7607	3	0
18	12	6	1848,0756	4	2	21	4	18	1614,6047	3	2
18	13	6	1911,8634		8	21	4	17	1619,6847	2	1
18	13	5	1911,8634		8	21	5	17	1637,7255	3	0
19	3	17	1531,2297	2	2	21	5	16	1638,5566	2	1
19	3	16	1541,1533	2	1	21	6	16	1665,1419	2	2
19	4	16	1551,4568	0	1	21	6	15	1665,2105	2	0
19	4	15	1554,2344	1	-1	21	7	15	1697,8473	2	0
19	5	15	1574,2660	3	0	21	7	14	1697,8494	3	0
19	5	14	1574,5980	4	0	21	8	14	1735,8727	4	1
19	6	14	1601,8670	2	2	21	8	13	1735,8727	4	0
19	6	13	1601,8882	3	0	21	9	13	1779,1311	3	2
19	7	13	1634,7724	3	-1	21	9	12	1779,1311	3	2
12	7	6	1462,9510	2	1	15	2	13	1418,8968	5	-3
12	7	5	1462,9510	2	0	15	3	13	1424,9284	2	1
12	8	5	1501,3620	2	0	15	3	12	1428,7569	3	-2
12	8	4	1501,3620	2	0	15	4	12	1443,4218		0
12	9	4	1544,8888	3	0	15	4	11	1443,9590	2	-1

12	9	3	1544,8888	3	0	15	5	11	1466,1858	2	0
12	10	3	1593,5157	2	1	15	5	10	1466,2201	3	0
12	10	2	1593,5157	2	1	15	6	10	1494,1318	3	0
12	11	2	1647,2284	3	2	15	6	9	1494,1330	2	-1
12	11	1	1647,2284	3	2	15	7	9	1527,3028	4	0
12	12	1	1706,0132	1	-1	15	7	8	1527,3028	4	0
12	12	0	1706,0132	1	-1	15	8	8	1565,6448	2	-2
13	2	12	1365,1118	2	-4	15	8	7	1565,6448	2	-2
13	2	11	1372,6574	1	1	15	9	7	1609,1229	1	-1
13	3	11	1380,5727	4	-3	15	9	6	1609,1229	1	-1
13	3	10	1382,5066	0	-1	15	10	6	1657,7130	3	-1
13	4	10	1398,6862	0	1	15	10	5	1657,7130	3	-1
13	4	9	1398,8694	3	2	15	11	5	1711,3956	3	-1
13	5	9	1421,5477	3	1	15	11	4	1711,3956	3	-1
13	5	8	1421,5559	1	0	15	12	4	1770,1573	2	2
13	6	8	1449,6117	6	0	15	12	3	1770,1573	2	2
13	6	7	1449,6117	6	-2	15	13	3	1833,9784	5	-2
13	7	7	1482,8590	1	0	15	13	2	1833,9784	5	-2
13	7	6	1482,8590	1	0	16	2	15	1431,4801	3	-2
13	8	6	1521,2516	1	-1	16	2	14	1444,2261	4	-1
13	8	5	1521,2516	1	-1	16	3	14	1449,3272	1	1
13	9	5	1564,7654	3	1	16	3	13	1454,4088	4	4
13	9	4	1564,7654	3	1	16	4	13	1468,1202	2	-1
13	10	4	1613,3822	2	0	16	4	12	1468,9803	2	0
13	10	3	1613,3822	2	0	16	5	12	1490,8516	2	1
13	11	3	1667,0865	7	-2	16	5	11	1490,9160	2	2
13	11	2	1667,0865	7	-2	16	6	11	1518,7234	4	2
13	12	2	1725,8651	4	1	16	6	10	1518,7254	5	-5

13	12	1	1725,8651	4	1	16	7	10	1551,8432	4	-1
14	2	13	1385,8427		-2	16	7	9	1551,8432	4	-2
14	3	12	1402,0054	2	-2	16	8	9	1590,1522	3	0
14	3	11	1404,7848	3	1	16	8	8	1590,1522	3	0
14	4	11	1420,2759	3	2	16	9	8	1633,6066	3	-1
14	4	10	1420,5973	4	3	16	9	7	1633,6066	3	-1
14	5	10	1443,0857	1	0	16	10	7	1682,1791	2	-1
14	5	9	1443,1029	2	-2	16	10	6	1682,1791	2	-1
14	6	9	1471,0961	4	2	16	11	6	1735,8473	3	-1
14	6	8	1471,0961	4	-3	16	11	5	1735,8473	3	-1
14	7	8	1504,3087	4	-2	16	12	5	1794,5988	3	2
14	7	7	1504,3087	4	-2	16	12	4	1794,5988	3	2
14	8	7	1542,6788	2	0	16	13	4	1858,4098	5	-2
14	8	6	1542,6788	2	0	16	13	3	1858,4098	5	-2
14	9	6	1586,1765	4	1	17	2	16	1456,3671	2	-1
14	9	5	1586,1765	4	1	17	2	15	1470,9708	2	0
14	10	5	1634,7809	1	-2	17	3	15	1475,1872	2	1
14	10	4	1634,7809	1	-2	17	3	14	1481,7139	2	1
14	11	4	1688,4759	2	3	17	4	14	1494,3648	4	-1
14	11	3	1688,4759	2	3	17	4	13	1495,6861	2	2
14	12	3	1747,2461	2	0	17	5	13	1517,0856	3	0
14	12	2	1747,2461	2	0	17	5	12	1517,2010	3	-2
15	2	14	1407,9690	2	-1	17	6	12	1544,8737	2	2
21	10	12	1827,5592	2	-1	24	10	14	1933,2692	2	-6
21	10	11	1827,5592	2	-1	24	11	14	1986,7434	2	-2
21	11	11	1881,1526	1	0	24	11	13	1986,7434	2	-2
21	11	10	1881,1526	1	0	24	12	13	2045,3041	2	-1
21	12	10	1939,7849	5	1	24	12	12	2045,3041	2	-1

21	12	9	1939,7849	5	1	25	5	21	1783,3225	1	1
21	13	9	2003,5217		-8	25	6	20	1810,6277	3	-3
21	13	8	2003,5217		-8	25	6	19	1811,1205	2	-1
22	5	18	1671,8018	2	2	25	7	19	1842,8051	6	-9
22	5	17	1673,0552	0	0	25	7	18	1842,8450	5	-3
22	6	17	1699,1430	3	-1	25	8	18	1880,4167	1	2
22	6	16	1699,2608	4	-1	25	8	17	1880,4174	5	-1
22	7	16	1731,7288	2	-2	25	9	17	1923,3823	11	10
22	7	15	1731,7357	3	1	25	9	16	1923,3823	11	9
22	8	15	1769,6700	4	1	25	10	16	1971,5940	3	-3
22	8	14	1769,6700	4	0	25	10	15	1971,5940	3	-5
22	9	14	1812,8693	5	7	25	11	15	2025,0243	3	-3
22	9	13	1812,8693	5	7	25	11	14	2025,0243	3	-3
22	10	13	1861,2532	2	-2	25	12	14	2083,5498	4	0
22	10	12	1861,2532	2	-2	25	12	13	2083,5498	4	0
22	11	12	1914,8057	3	-2	26	6	21	1850,9467	2	0
22	11	11	1914,8057	3	-2	26	6	20	1851,7025	0	-2
22	12	11	1973,4218	4	-7	26	8	19	1920,4608		2
22	12	10	1973,4218	4	-7	26	8	18	1920,4618		-8
23	5	19	1707,4332	3	2	26	10	17	2011,4637	3	-6
23	6	18	1734,7237	2	0	26	10	16	2011,4637	3	-12
23	6	17	1734,9187	2	-3	26	11	16	2064,8483	3	4
23	7	17	1767,1809	4	1	26	11	15	2064,8483	3	4
23	7	16	1767,1933	2	0	26	12	15	2123,3332	3	1
23	8	16	1805,0240	8	-2	26	12	14	2123,3332	3	1
23	8	15	1805,0240	8	-6	27	6	22	1892,8416	7	0
23	9	15	1848,1558	7	9	27	6	21	1893,9702	3	2
23	9	14	1848,1558	7	9	27	8	19	1962,0786		1

23	10	14	1896,4898	2	0	27	10	18	2052,8799	5	0
23	10	13	1896,4898	2	0	27	10	17	2052,8806		-8
23	11	13	1950,0039	1	-2	27	12	16	2164,6549	2	1
23	11	12	1950,0039	1	-2	27	12	15	2164,6549	2	1
23	12	12	2008,5953	2	0	28	6	23	1936,3052	4	-4
23	12	11	2008,5953	2	0	28	6	22	1937,9482	4	5
24	5	20	1744,6106	2	1	28	8	21	2005,2601	4	1
24	7	18	1804,2055	4	2	28	10	19	2095,8388	4	1
24	7	17	1804,2277	3	-2	28	12	17	2207,5169	4	9
24	8	17	1841,9387	5	-3	28	12	16	2207,5169	4	9
24	8	16	1841,9387	5	-6	29	6	24	1981,3302	1	1
24	9	16	1884,9929	8	12	29	8	22	2050,0215		2
24	9	15	1884,9929	8	12	30	8	23	2096,3626		8
24	10	15	1933,2692	2	-5						

Приложение В

Таблица В.1 - колебательно-вращательные уровни (в см^{-1}) для ($\nu_{10}=2$) колебательного состояния молекулы $\text{C}_2\text{H}_2\text{D}_2$ -дис.

J	K_a	K_c	E	Δ	δ	J	K_a	K_c	E	Δ	δ
5	3	3	1375,9480	3	0	20	5	16	1708,3475	3	2
6	3	4	1384,9144	1	-1	21	5	17	1740,0522	3	0
7	2	5	1383,1109	1	2	22	5	18	1773,2129	3	-9
7	3	5	1395,4398	2	1	24	6	19	1871,6778	4	1
8	2	6	1395,4419	3	4	26	7	20	1979,7385	4	-5
8	3	6	1407,2407	4	1	27	6	21	1989,8947	1	1
9	2	7	1409,2794	3	-5	27	7	21	2020,4192	-	7
9	3	7	1420,7205	3	0	28	6	22	2031,1809	1	2
10	3	8	1435,6831	5	4	28	7	22	2062,9694	1	-2
14	4	11	1528,6350	4	3	29	6	23	2075,4016	3	5
15	4	12	1550,7643	3	3	30	7	23	2150,8908	5	-8
16	4	13	1574,8313	3	3	33	6	27	2268,5568	3	-3
18	5	14	1650,0093	5	-6	34	6	28	2320,9552	2	0
19	5	15	1678,7262	3	-5	35	6	29	2374,7518	2	2
5	3	3	1375,9480	3	0	20	5	16	1708,3475	3	2

Приложение Г

Таблица Г.1 – Определенные переходы для полосы $\nu_8+\nu_{10}$ молекулы $C_2H_2D_2$ -дис.

J	K_a	K_c	J'	K_a'	K_c'	Положение линии, cm^{-1}	Пропускание, %	Энергия верхних уровней, cm^{-1}	Среднее значение, cm^{-1}	δ , ($10^{-4} cm^{-1}$)
25	2	23	26	6	21	1303,6563	42,3	1934,8470	1934,8468	0
			25	6	19	1343,4090	55,9	1934,8465		
			24	6	19	1382,4711	51,3	1934,8468		

Приложение Д

Таблица Д.1 - Расширенный анализ полосы ν_{12} молекулы $^{12}\text{C}_2\text{H}_4$ для астрофизических приложений: интенсивности линий, самоуширения и сдвиги давлением.

J	K_a	K_c	J	K_a	K_c	ν , cm^{-1}	δ , 10^{-4}cm^{-1}	S_v^N (расчетная), $\text{cm}^{-1}/(\text{молек} \cdot \text{cm}^{-2})$	S_v^N (экспр), $\text{cm}^{-1}/(\text{молек} \cdot \text{cm}^{-2})$	δ_v^S , in%	$\gamma_{\text{сам}}$ 10^{-3}cm^{-1} атм $^{-1}$	$\Delta_{\gamma_{\text{сам}}}$ 10^{-3}cm^{-1} атм $^{-1}$	$\delta \nu_0$ 10^{-3}cm^{-1} атм $^{-1}$
25	4	21	26	4	22	1396,5248	3	0,12659E-20	0,12827E-20	1,3	1,750	-5,621	0,416
25	2	23	26	2	24	1397,0096	0	0,14329E-20	0,14328E-20	0,0	8,295	-5,330	0,799
24	4	20	25	4	21	1398,2893	3	0,64798E-21	0,64834E-21	0,1	6,457	-3,226	0,139
24	2	22	25	2	23	1398,5604	1	0,74458E-21	0,76245E-21	2,3	2,882	-7,093	0,457
24	4	21	25	4	22	1399,0310	0	0,14494E-20	0,14362E-20	-0,9	2,133	-8,047	1,131
23	4	19	24	4	20	1400,0719	2	0,17839E-20	0,18264E-20	2,3	3,201	-1,627	0,046
23	4	20	24	4	21	1400,7129	0	0,73647E-21	0,75704E-21	2,7	6,495	-5,908	0,154
22	4	18	23	4	19	1401,8677	2	0,89139E-21	0,90712E-21	1,7	1,261	-4,813	0,731
22	4	19	23	4	20	1402,4067	0	0,20143E-20	0,20034E-20	-0,5	2,217	-5,491	0,534
22	2	21	23	2	22	1402,7990	1	0,24905E-20	0,25125E-20	0,9	3,551	-1,090	0,102
21	3	18	22	3	19	1402,9041	4	0,11971E-20	0,11562E-20	-3,5	0,044	-2,681	0,943
21	2	19	22	2	20	1403,2548	2	0,29107E-20	0,29338E-20	0,8	0,880	-0,130	0,118
21	4	17	22	4	18	1403,6714	2	0,23966E-20	0,23633E-20	-1,4	0,571	-3,506	0,491
21	4	18	22	4	19	1404,1120	0	0,10002E-20	0,98395E-21	-1,7	3,699	-1,231	0,727
21	1	20	22	1	21	1404,2964	0	0,12589E-20	0,12703E-20	0,9	1,670	-5,640	0,670
21	2	20	22	2	21	1404,4521	-1	0,12383E-20	0,12155E-20	-1,9	4,598	-1,758	0,517
20	3	17	21	3	18	1404,6425	4	0,13762E-20	0,13826E-20	0,5	0,781	-5,349	0,816
20	2	18	21	2	19	1404,8509	3	0,14484E-20	0,14368E-20	-0,8	1,964	-2,533	0,126
20	4	16	21	4	17	1405,4786	1	0,11699E-20	0,11560E-20	-1,2	0,014	-8,338	0,015

20	3	18	21	3	19	1405,7155	0	0,13079E-20	0,13227E-20	1,1	2,030	-5,980	0,623
20	4	17	21	4	18	1405,8286	0	0,26722E-20	0,26563E-20	-0,6	0,693	-3,703	0,214
20	1	19	21	1	20	1405,9062	0	0,14521E-20	0,14552E-20	0,2	1,933	-2,287	0,348
20	2	19	21	2	20	1406,1079	0	0,33173E-20	0,32984E-20	-0,6	2,586	-2,595	0,394
19	3	16	20	3	17	1406,4084	3	0,15610E-20	0,15796E-20	1,2	1,098	-5,233	0,434
19	2	17	20	2	18	1406,4699	3	0,38762E-20	0,39471E-20	1,8	1,507	-0,764	0,122
20	1	20	21	1	21	1406,7339	-2	0,15276E-20	0,15317E-20	0,3	5,534	-2,852	0,077
19	4	15	20	4	16	1407,2857	1	0,30732E-20	0,30125E-20	-2,0	0,949	-2,493	0,374
19	3	17	20	3	18	1407,3978	0	0,14856E-20	0,14963E-20	0,7	3,030	-2,830	0,189
19	4	16	20	4	17	1407,5558	0	0,12955E-20	0,12892E-20	-0,5	0,103	-3,164	0,389
19	2	18	20	2	19	1407,7666	0	0,16146E-20	0,16151E-20	0,0	0,900	-1,301	0,024
18	3	15	19	3	16	1408,2000	3	0,17466E-20	0,17378E-20	-0,5	1,587	-3,832	0,480
19	0	19	20	0	20	1408,4071	-1	0,40313E-20	0,39024E-20	-3,3	0,468	-4,198	0,276
18	4	15	19	4	16	1409,2930	0	0,33772E-20	0,33712E-20	-0,2	1,173	-2,533	0,292
18	2	17	19	2	18	1409,4294	0	0,42313E-20	0,42268E-20	-0,1	0,286	-1,837	0,096
17	2	15	18	2	16	1409,7858	3	0,49040E-20	0,48871E-20	-0,3	0,538	-1,580	0,465
18	5	13	19	5	14	1409,8218	0	0,11868E-20	0,12350E-20	3,9	1,362	-4,741	0,485
18	5	14	19	5	15	1409,8389	0	0,11855E-20	0,12116E-20	2,2	1,927	-2,171	0,503
18	1	18	19	1	19	1410,1085	-1	0,19275E-20	0,19386E-20	0,6	3,489	-1,140	0,134
17	4	13	18	4	14	1410,8922	0	0,37590E-20	0,36760E-20	-2,3	0,850	-3,142	0,402
17	4	14	18	4	15	1411,0394	0	0,15964E-20	0,15949E-20	-0,1	1,266	-4,482	0,531
17	2	16	18	2	17	1411,0972	0	0,20134E-20	0,20693E-20	2,7	1,078	-5,587	0,682
16	2	14	17	2	15	1411,4849	3	0,23163E-20	0,23409E-20	1,1	1,300	-2,872	0,206
17	5	12	18	5	13	1411,5816	0	0,13033E-20	0,13401E-20	2,7	7,511	-1,954	0,376
17	0	17	18	0	18	1411,7637	-1	0,49855E-20	0,50093E-20	0,5	1,072	-2,601	0,363
17	1	17	18	1	18	1411,7934	-1	0,21304E-20	0,21611E-20	1,4	1,315	-3,040	0,123
16	3	13	17	3	14	1411,8462	3	0,20978E-20	0,21166E-20	0,9	0,858	-2,090	0,307
16	3	14	17	3	15	1412,5131	1	0,20217E-20	0,20434E-20	1,1	1,650	-7,380	0,767

16	4	12	17	4	13	1412,6903	0	0,17489E-20	0,17228E-20	-1,5	0,773	-5,781	0,471
16	2	15	17	2	16	1412,7711	0	0,51533E-20	0,50863E-20	-1,3	1,039	-1,824	0,306
16	4	13	17	4	14	1412,7942	0	0,40546E-20	0,40736E-20	0,5	1,116	-8,090	0,592
15	2	13	16	2	14	1413,2116	3	0,58716E-20	0,58075E-20	-1,1	0,529	-3,285	0,273
16	5	12	17	5	13	1413,3505	-1	0,14114E-20	0,14525E-20	2,8	1,123	-6,008	0,102
16	0	16	17	0	17	1413,4359	0	0,23379E-20	0,23437E-20	0,2	1,069	-4,560	0,721
15	2	14	16	2	15	1414,4522	0	0,23926E-20	0,24436E-20	2,1	0,770	-2,053	0,332
15	4	11	16	4	12	1414,4854	0	0,43716E-20	0,43152E-20	-1,3	0,856	-3,247	0,336
14	2	12	15	2	13	1414,9656	3	0,26936E-20	0,26980E-20	0,2	1,955	-7,802	0,231
15	1	15	16	1	16	1415,1600	0	0,25154E-20	0,25233E-20	0,3	0,123	-2,283	0,594
14	2	13	15	2	14	1416,1413	0	0,59692E-20	0,59894E-20	0,3	0,755	-3,500	0,159
14	4	10	15	4	11	1416,2784	0	0,19792E-20	0,20122E-20	1,6	1,245	-5,916	0,430
14	4	11	15	4	12	1416,3252	0	0,46048E-20	0,44999E-20	-2,3	0,718	-3,619	0,042
13	2	11	14	2	12	1416,7463	3	0,66234E-20	0,65536E-20	-1,1	0,294	-1,374	0,317
14	0	14	15	0	15	1416,7658	0	0,27046E-20	0,28105E-20	3,8	1,659	-1,653	0,277
14	1	14	15	1	15	1416,8426	0	0,26845E-20	0,28029E-20	4,2	0,621	-3,934	0,330
14	5	10	15	5	11	1416,8794	-7	0,15855E-20	0,32470E-20	2,3	1,350	-6,438	0,512
13	1	12	14	1	13	1417,1764	2	0,29072E-20	0,30016E-20	3,1	1,280	-4,910	0,376
13	3	10	14	3	11	1417,3950	2	0,24840E-20	0,24890E-20	0,2	1,326	-6,434	0,520
13	2	12	14	2	13	1417,8394	0	0,26974E-20	0,27581E-20	2,2	1,881	-0,557	0,031
13	4	9	14	4	10	1418,0701	0	0,48048E-20	0,47500E-20	-1,2	1,601	-3,102	0,255
13	4	10	14	4	11	1418,0999	0	0,20555E-20	0,20231E-20	-1,6	1,121	-1,281	0,094
13	0	13	14	0	14	1418,4229	0	0,66662E-20	0,65552E-20	-1,7	3,268	-2,953	0,247
13	1	13	14	1	14	1418,5256	0	0,28286E-20	0,28915E-20	2,2	0,371	-2,981	0,561
12	2	10	13	2	11	1418,5526	2	0,29430E-20	0,29867E-20	1,5	0,577	-1,328	0,386
13	5	8	14	5	9	1418,6511	3	0,16396E-20	0,33568E-20	2,3	0,953	-3,485	0,173
12	1	11	13	1	12	1418,8399	2	0,30460E-20	0,31159E-20	2,2	0,549	-2,050	0,229
12	3	9	13	3	10	1419,2444	2	0,25510E-20	0,25370E-20	-0,6	1,221	-6,434	0,520

12	3	10	13	3	11	1419,4936	1	0,25142E-20	0,25333E-20	0,8	0,574	-8,080	1,330
12	2	11	13	2	12	1419,5472	1	0,65395E-20	0,64657E-20	-1,1	0,766	-3,916	0,519
12	4	8	13	4	9	1419,8615	0	0,21072E-20	0,21509E-20	2,0	1,513	-6,623	0,804
12	4	9	13	4	10	1419,8796	0	0,49113E-20	0,47427E-20	-3,6	0,144	-3,661	0,599
12	1	12	13	1	13	1420,2097	0	0,29404E-20	0,29924E-20	1,7	0,755	-1,904	0,594
11	2	9	12	2	10	1420,3828	2	0,69969E-20	0,69174E-20	-1,1	1,660	-0,704	0,146
11	1	10	12	1	11	1420,5290	2	0,31402E-20	0,32385E-20	3,0	1,380	-1,850	0,121
11	3	9	12	3	10	1421,2649	3	0,25505E-20	0,54263E-20	0,2	1,323	-0,887	0,023
11	0	11	12	0	12	1421,7224	0	0,71505E-20	0,69497E-20	-2,9	0,864	-4,303	0,192
11	1	11	12	1	12	1421,8958	0	0,30127E-20	0,31468E-20	4,3	1,130	-2,578	0,243
10	2	8	11	2	9	1422,2341	2	0,29990E-20	0,30361E-20	1,2	2,840	-0,651	0,125
10	3	7	11	3	8	1422,9248	1	0,25564E-20	0,25905E-20	1,3	0,337	-5,573	0,239
10	2	9	11	2	10	1422,9939	1	0,67214E-20	0,65633E-20	-2,4	0,420	-2,785	0,236
10	0	10	11	0	11	1423,3676	0	0,31057E-20	0,31962E-20	2,8	0,777	-5,938	0,013
9	2	7	10	2	8	1424,1023	2	0,68589E-20	0,68001E-20	-0,9	1,345	-3,229	0,224
9	3	6	10	3	7	1424,7547	1	0,24836E-20	0,25445E-20	2,4	1,835	-4,500	0,273
9	0	9	10	0	10	1425,0139	0	0,72252E-20	0,70896E-20	-1,9	0,366	-2,279	0,058
9	1	9	10	1	10	1425,2771	0	0,30130E-20	0,30527E-20	1,3	2,155	-1,568	0,298
9	5	4	10	5	5	1425,7757	0	0,14957E-20	0,31182E-20	4,1	1,339	-1,757	0,531
8	2	6	9	2	7	1425,9819	2	0,28173E-20	0,28511E-20	1,2	8,715	-3,620	0,274
8	2	7	9	2	8	1426,4838	1	0,63931E-20	0,63959E-20	0,0	0,609	-1,456	0,184
8	2	7	9	2	8	1426,4838	1	0,63931E-20	0,63895E-20	-0,1	0,609	-1,456	0,184
8	3	5	9	3	6	1426,5788	0	0,23537E-20	0,23901E-20	1,5	0,759	-1,391	0,367
8	0	8	9	0	9	1426,6664	1	0,30310E-20	0,30729E-20	1,4	1,115	-2,480	0,042
8	1	8	9	1	9	1426,9742	0	0,29305E-20	0,29969E-20	2,2	0,978	-3,443	0,387
8	4	4	9	4	5	1427,0392	7	0,18511E-20	0,63169E-20	2,3	0,547	-3,271	0,168
7	1	6	8	1	7	1427,5445	2	0,29275E-20	0,30543E-20	4,2	1,060	-2,110	0,306
8	5	3	9	5	4	1427,5664	0	0,13400E-20	0,26892E-20	0,3	6,450	-6,490	0,371

7	2	5	8	2	6	1427,8659	1	0,61406E-20	0,60543E-20	-1,4	1,143	-0,879	0,292
7	2	6	8	2	7	1428,2451	1	0,25762E-20	0,25764E-20	0,0	2,026	-1,212	0,182
7	0	7	8	0	8	1428,3311	1	0,67779E-20	0,67412E-20	-0,5	1,593	-1,717	0,355
7	3	4	8	3	5	1428,3986	0	0,21623E-20	0,21604E-20	-0,1	0,709	-2,450	0,290
7	4	3	8	4	4	1428,8380	1	0,38400E-20	0,54848E-20	0,0	0,419	-0,541	0,106
6	3	3	7	3	4	1430,2156	0	0,19050E-20	0,19805E-20	3,8	1,949	-4,892	0,441
6	1	6	7	1	7	1430,3848	0	0,25852E-20	0,26763E-20	3,4	1,148	-1,820	0,220
6	4	2	7	4	3	1430,6405	1	0,13717E-20	0,45273E-20	-1,0	0,417	-2,092	0,268
6	5	2	7	5	3	1431,1595	0	0,83863E-21	0,17157E-20	2,2	1,285	-4,379	0,627
5	1	4	6	1	5	1431,1882	1	0,24239E-20	0,24789E-20	2,2	0,807	-3,270	0,234
5	2	3	6	2	4	1431,6222	1	0,48326E-20	0,48976E-20	1,3	0,729	1,793	0,312
5	0	5	6	0	6	1431,7203	1	0,57462E-20	0,57337E-20	-0,2	1,200	-3,440	0,170
5	2	4	6	2	5	1431,7989	0	0,20502E-20	0,20839E-20	1,6	6,256	-4,922	0,752
5	1	5	6	1	6	1432,0991	0	0,23214E-20	0,23870E-20	2,8	0,591	-1,793	0,481
5	4	1	6	4	2	1432,4459	0	0,23797E-20	0,34027E-20	0,1	0,160	-7,379	0,340
5	5	0	6	5	1	1432,9621	0	0,47161E-21	0,98246E-21	4,0	1,758	-6,991	0,945
4	1	3	5	1	4	1433,0378	1	0,20776E-20	0,21609E-20	3,9	2,750	-2,580	0,349
4	0	4	5	0	5	1433,4523	1	0,21500E-20	0,21874E-20	1,7	1,888	1,112	0,071
4	2	2	5	2	3	1433,4857	0	0,16949E-20	0,17648E-20	4,0	3,189	-3,908	0,100
4	2	3	5	2	4	1433,5907	0	0,39310E-20	0,39430E-20	0,3	0,550	-3,675	0,320
4	1	4	5	1	5	1433,8199	0	0,19988E-20	0,20483E-20	2,4	5,622	-1,013	0,002
4	4	0	5	4	1	1434,2549	0	0,57401E-21	0,19745E-20	3,1	0,148	-4,424	0,085
3	1	2	4	1	3	1434,9037	1	0,16741E-20	0,16970E-20	1,3	1,420	-1,130	0,276
3	0	3	4	0	4	1435,2104	1	0,41627E-20	0,41922E-20	0,7	1,668	-1,037	0,394
3	2	1	4	2	2	1435,3376	0	0,29122E-20	0,29886E-20	2,6	1,725	-1,222	0,122
2	2	1	3	2	2	1437,2012	0	0,16525E-20	0,17196E-20	3,9	2,543	-2,507	0,154
4	4	0	4	4	1	1443,4106	0	0,22752E-20	0,74167E-20	-2,3	0,932	-5,066	0,111
5	4	1	5	4	2	1443,4366	0	0,41478E-20	0,59680E-20	0,7	0,586	-5,084	0,229

7	4	3	7	4	4	1443,5054	0	0,27149E-20	0,38915E-20	0,3	1,009	-3,809	0,281
10	4	7	10	4	6	1443,6468	0	0,15363E-20	0,15783E-20	2,7	4,105	-2,885	0,119
11	4	8	11	4	7	1443,7019	0	0,54647E-21	0,57066E-21	4,2	2,685	-6,586	0,877
12	4	9	12	4	8	1443,7580	0	0,10568E-20	0,10911E-20	3,1	7,383	-6,789	0,305
13	4	10	13	4	9	1443,8114	0	0,37436E-21	0,84186E-21	1,9	2,878	-2,689	0,338
13	4	9	13	4	10	1443,9115	0	0,86836E-21	0,86324E-21	-0,6	1,642	-2,948	0,100
5	5	1	5	5	0	1443,9465	0	0,23368E-20	0,46225E-20	-1,1	2,397	-2,750	0,251
7	5	3	7	5	2	1444,0144	0	0,15309E-20	0,31230E-20	2,0	0,599	-2,508	0,246
9	5	5	9	5	4	1444,1047	0	0,10457E-20	0,21235E-20	1,5	6,506	-5,935	0,752
15	4	11	15	4	12	1444,1912	0	0,57954E-21	0,57813E-21	-0,2	3,289	-2,606	0,226
3	0	3	2	0	2	1447,9345	1	0,30772E-20	0,31559E-20	2,5	4,175	-2,364	0,010
4	1	3	3	1	2	1450,2389	1	0,15184E-20	0,15125E-20	-0,4	3,040	-2,100	0,605
5	0	5	4	0	4	1451,5346	0	0,47266E-20	0,47996E-20	1,5	6,046	-4,156	0,258
5	4	1	4	4	0	1452,5923	0	0,12437E-20	0,17803E-20	0,0	2,119	-4,866	0,534
6	1	6	5	1	5	1452,9264	0	0,22736E-20	0,23535E-20	3,4	0,620	-1,440	0,172
6	0	6	5	0	5	1453,2976	1	0,23083E-20	0,23545E-20	2,0	1,022	-4,306	0,196
6	1	5	5	1	4	1454,1245	2	0,21015E-20	0,21513E-20	2,3	2,120	-6,110	0,751
6	4	2	5	4	1	1454,4587	0	0,93265E-21	0,30463E-20	-2,1	0,842	-1,451	0,270
7	1	7	6	1	6	1454,6448	0	0,25287E-20	0,25776E-20	1,9	0,990	-7,280	0,360
6	5	1	5	5	0	1454,9621	0	0,43156E-21	0,88719E-21	2,7	1,666	-1,028	0,113
7	0	7	6	0	6	1455,0309	1	0,59269E-20	0,59232E-20	-0,1	0,781	-1,808	0,401
7	1	6	6	1	5	1456,0620	2	0,22998E-20	0,23826E-20	3,5	1,910	-3,810	0,449
7	4	3	6	4	2	1456,3330	0	0,28815E-20	0,41018E-20	-0,4	0,905	-3,072	0,337
8	1	8	7	1	7	1456,3546	0	0,27261E-20	0,27527E-20	1,0	1,220	-4,640	0,247
7	5	2	6	5	1	1456,8326	0	0,75583E-21	0,15440E-20	2,1	2,566	-2,702	0,323
9	1	9	8	1	8	1458,0555	0	0,28661E-20	0,29515E-20	2,9	0,859	-2,290	0,269
8	4	4	7	4	3	1458,2153	-3	0,14582E-20	0,48621E-20	0,0	9,788	-5,447	0,332
9	0	9	8	0	8	1458,4096	0	0,66492E-20	0,65766E-20	-1,1	0,597	-3,098	0,300

8	5	3	7	5	2	1458,7102	0	0,99738E-21	0,19814E-20	-1,2	1,500	-1,508	0,664
---	---	---	---	---	---	-----------	---	-------------	-------------	------	-------	--------	-------