

**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
<b>Анализ колебательно-вращательных спектров молекулы C<sub>2</sub>D<sub>4</sub> в диапазоне 450-750 см<sup>-1</sup></b> УДК 539.194:530.145.6

Студент

Группа	ФИО	Подпись	Дата
0Б41	Меркулова Мария Андреевна		

Руководитель

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Профессор ИШФВП	Громова О.В.	К.ф.-м.н.		

**КОНСУЛЬТАНТЫ:**

По разделу «Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение»

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Доцент отделения социально- гуманитарных наук	Меньшикова Е.В.	К.ф.н.		

По разделу «Социальная ответственность»

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Профессор отделения общетехнических дисциплин	Федорчук Ю.М.	Д.т.н.		

**ДОПУСТИТЬ К ЗАЩИТЕ:**

Руководитель ООП	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата

## ПЛАНИРУЕМЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ ОБУЧЕНИЯ

Код результата	Результат обучения (компетенции выпускника)	Требования ФГОС, критериев и/или заинтересованных сторон
<i>Общекультурные (универсальные) компетенции</i>		
P1	Способен самостоятельно приобретать новые знания, использовать современные образовательные и информационные технологии, совершенствовать и развивать свой профессиональный уровень, поддерживать здоровый образ жизни	Требования ФГОС ( <i>ОК-1, ОК-2, ОК-7, ОК-8, ОК-11, ОК-19</i> ) [2], Критерий 5 АИОР (п. 1.1, 2.6), согласованный с требованиями международных стандартов <i>EUR-ACE</i> и <i>FEANI</i>
P2	Способен к поиску, обработке и интерпретации с использованием современных информационных технологий данных, необходимых для формирования суждений по соответствующим социальным, научным и этическим проблемам как в коллективе, так и индивидуально (на родном и иностранном языке)	Требования ФГОС ( <i>ОК-3, ОК-4, ОК-8, ОК-14, ОК-15, ПК-10, ПК-12, ПК-13,</i> ), Критерий 5 АИОР (пп. 2.1, 2.2, 2.3), согласованный с требованиями международных стандартов <i>EUR-ACE</i> и <i>FEANI</i>
P3	Способен критически переосмысливать свой накопленный социальный и профессиональный опыт, изменять при необходимости профиль своей профессиональной деятельности, следовать этическим и правовым нормам и нести ответственность за последствия своей инженерной деятельности	Требования ФГОС ( <i>ОК-5, ОК-6, ОК-7, ОК-9, ОК-10, ПК-5, ПК-18</i> ), Критерий 5 АИОР (пп. 2.4, 2.5), согласованный с требованиями международных стандартов <i>EUR-ACE</i> и <i>FEANI</i>
<i>Профессиональные компетенции</i>		
P4	Способен к овладению и применению базовых знаний в области естественных наук и математики для решения профессиональных задач, к усвоению основных педагогических моделей, форм и приемов педагогического воздействия на личность; закономерностей педагогического	Требования ФГОС ( <i>ОК-1, ОК-9, ОК-10, ОК-11, ПК-1, ПК-2, ПК-10</i> ), Критерий 5 АИОР (п. 1.1), согласованный с требованиями международных стандартов <i>EUR-ACE</i> и <i>FEANI</i>
P5	Способен применить в проектах по тематике, заданной заинтересованными организациями, экспериментальные методы	Требования ФГОС ( <i>ОК-12, ПК-3, ПК-4, ПК-6, ПК-14</i> ), Критерий 5

	исследования конденсированного состояния вещества, методы анализа поверхности твердых тел и тонких пленок	АИОР (п. 1.1, 1.4, 2.2, 2.6), согласованный с требованиями международных стандартов <i>EUR-ACE</i> и <i>FEANI</i>
P6	Способен применить в проектах по тематике, заданной заинтересованными организациями, современную электронику в электрофизических и плазменных установках, а также учесть взаимодействие излучения и плазмы с веществом, современные достижения водородной энергетики и плазменных технологий	Требования ФГОС ( <i>ОК-10, ОК-11, ПК-1, ПК-2</i> ), Критерий 5 АИОР (п. 1.1), согласованный с требованиями международных стандартов <i>EUR-ACE</i> и <i>FEANI</i>
P7	Способен применить в проектах по тематике, заданной заинтересованными организациями, базовые естественнонаучные и математические знания при получении и исследовании наноматериалов	Требования ФГОС ( <i>ОК-12, ПК-3, ПК-4, ПК-6, ПК-14</i> ), Критерий 5 АИОР (п. 1.1, 1.4, 2.2, 2.6), согласованный с требованиями международных стандартов <i>EUR-ACE</i> и <i>FEANI</i>
P8	Способен понимать сущность и значение информации в развитии современного информационного общества, к применению на практике полученных знаний при обработке, анализе и синтезе полученных физических данных в соответствии с профилем профессиональной деятельности	Требования ФГОС ( <i>ОК-12, ОК-16, ОК-21, ПК-1, ПК-2, ПК-5, ПК-6, ПК-7</i> ), Критерий 5 АИОР (п. 1.1), согласованный с требованиями международных стандартов <i>EUR-ACE</i> и <i>FEANI</i>
P9	Способен понимать и использовать на практике теоретические основы планирования и организации физических исследований, представлять результаты и применять на практике методы управления в сфере природопользования	Требования ФГОС ( <i>ОК-12, ПК-3, ПК-4, ПК-6, ПК-7, ПК-8, ПК-9, ПК-14</i> ), Критерий 5 АИОР (п. 1.1, 1.4, 2.2, 2.6), согласованный с требованиями международных стандартов <i>EUR-ACE</i> и <i>FEANI</i>
P10	Способен формировать суждения о значении и последствиях своей профессиональной деятельности с учетом социальных, правовых, этических и природоохранных аспектов, при необходимости применить ресурсо- и энергосберегающие технологии	Требования ФГОС ( <i>ОК-10, ОК-11, ПК-1, ПК-2, ПК-7, ПК-9</i> ), Критерий 5 АИОР (п. 1.1), согласованный с требованиями международных стандартов <i>EUR-ACE</i> и <i>FEANI</i>

**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

УТВЕРЖДАЮ:  
 Руководитель ООП

\_\_\_\_\_  
 (Подпись)      \_\_\_\_\_ (Дата)      Лидер А.М.  
 (Ф.И.О.)

**ЗАДАНИЕ**  
**на выполнение выпускной квалификационной работы**

В форме:

Бакалаврской работы
---------------------

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

Студенту:

Группа	ФИО
ОБ41	Меркулова Мария Андреевна

Тема работы:

Анализ колебательно-вращательных спектров молекулы C <sub>2</sub> D <sub>4</sub> в диапазоне 450-750 см <sup>-1</sup>	
Утверждена приказом директора (дата, номер)	31.01.2018, № 533/с

Срок сдачи студентом выполненной работы:	
--	--

**ТЕХНИЧЕСКОЕ ЗАДАНИЕ:**

<p><b>Исходные данные к работе</b>  <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:                  Изотопическая модификация молекулы C<sub>2</sub>H<sub>4</sub>:                  изотополог C<sub>2</sub>D<sub>4</sub></p>				
<p><b>Перечень подлежащих исследованию, проектированию и разработке вопросов</b>  <i>(аналитический обзор по литературным источникам с целью выяснения достижений мировой науки техники в рассматриваемой области; постановка задачи исследования, проектирования, конструирования; содержание процедуры исследования, проектирования, конструирования; обсуждение результатов выполненной работы; наименование дополнительных разделов, подлежащих разработке; заключение по работе).</i></p>	<p>Обзор литературы.                  Анализ спектра молекулы C<sub>2</sub>D<sub>4</sub>.                  Решение обратной спектроскопической задачи (получение спектроскопических и резонансных параметров).                  Раздел «Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение»                  Раздел «Социальная ответственность»</p>				
<p><b>Перечень графического материала</b>  <i>(с точным указанием обязательных чертежей)</i></p>					
<p><b>Консультанты по разделам выпускной квалификационной работы</b>  <i>(с указанием разделов)</i></p> <table border="1" style="width: 100%;"> <thead> <tr> <th align="center">Раздел</th> <th align="center">Консультант</th> </tr> </thead> <tbody> <tr> <td>Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и</td> <td align="center">Меньшикова Е.В.</td> </tr> </tbody> </table>		Раздел	Консультант	Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и	Меньшикова Е.В.
Раздел	Консультант				
Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и	Меньшикова Е.В.				

ресурсосбережение	
Социальная ответственность	Федорчук Ю.М.
<b>Названия разделов, которые должны быть написаны на русском и иностранном языках:</b>	

<b>Дата выдачи задания на выполнение выпускной квалификационной работы по линейному графику</b>	
---	--

**Задание выдал руководитель:**

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Профессор ИШФВП	Громова О.В.	К.ф.-м.н.		

**Задание принял к исполнению студент:**

Группа	ФИО	Подпись	Дата
0Б41	Меркулова М.А.		

**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  
Период выполнения: весенний семестр 2017/2018 учебного года

Форма представления работы:

<b>Бакалаврская работа</b> (бакалаврская работа, дипломный проект/работа, магистерская диссертация)
--

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

Срок сдачи студентом выполненной работы:	
--	--

Дата контроля	Название раздела (модуля) / вид работы (исследования)	Максимальный балл раздела (модуля)
...	...	...
...	...	...

Составил преподаватель:

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Профессор ИШФВП	Громова О.В.	К.ф.-м.н.		

**СОГЛАСОВАНО:**

Руководитель ООП	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата

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

Студенту:

Группа	ФИО
0Б41	Меркулова Мария Андреевна

Институт	Физико-технический	Кафедра	Общей физики
Уровень образования	бакалавр	Направление/специальность	03.03.02 Физика / Физика конденсированного состояния

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

1. <i>Стоимость ресурсов научного исследования (НИ): материально-технических, энергетических, финансовых, информационных и человеческих</i>	<i>Стоимость материалов и оборудования Зарботная плата участников проекта</i>
2. <i>Нормы и нормативы расходования ресурсов</i>	<i>Нормы рабочего времени</i>
3. <i>Используемая система налогообложения, ставки налогов, отчислений, дисконтирования и кредитования</i>	<i>Ставка налога отчислений во внебюджетные средства</i>

**Перечень вопросов, подлежащих исследованию, проектированию и разработке:**

1. <i>Оценка коммерческого и инновационного потенциала НТИ</i>	<i>SWOT - анализ</i>
2. <i>Планирование процесса управления НТИ: структура и график проведения, бюджет, риски и организация закупок</i>	<i>Планирование НТИ Подсчет бюджета</i>

**Перечень графического материала (с точным указанием обязательных чертежей):**

1. Матрица SWOT
2. Альтернативы проведения НТИ
3. График проведения и бюджет НТИ
4. Оценка ресурсной, финансовой и экономической эффективности НТИ

Дата выдачи задания для раздела по линейному графику

**Задание выдал консультант:**

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Доцент отделения социально-гуманитарных наук	Меньшикова Е.В.	К.ф.н.		

**Задание принял к исполнению студент:**

Группа	ФИО	Подпись	Дата
0Б41	Меркулова Мария Андреевна		

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

Инженерная школа ядерных технологий  
Кафедра общей физики  
Направление подготовки 03.03.02 «Физика»

**ЗАДАНИЕ ДЛЯ РАЗДЕЛА  
«СОЦИАЛЬНАЯ ОТВЕТСТВЕННОСТЬ»**

Студенту:

Группа	ФИО
0Б41	Меркулова Мария Андреевна

Школа	Инженерная школа ядерных технологий	Кафедра	Общей физики
Уровень образования	бакалавр	Направление/специальность	Физика

**Тема дипломной работы: Анализ колебательно-вращательного спектра высокого разрешения полосы  $\nu_{10}$  молекулы  $C_2D_4$  в диапазоне 450-750  $cm^{-1}$ .**

**Исходные данные к разделу «Социальная ответственность»:**

Целью данной выпускной квалификационной работы являлось изучение тонкой структуры спектра полосы  $\nu_{10}$  в многоатомной молекуле  $C_2D_4$  в диапазоне 450-750  $cm^{-1}$ .

Описание рабочего места на предмет возникновения вредных проявлений факторов производственной среды (для обслуживающего персонала необходимо обеспечить оптимальные, в крайнем случае, допустимые значения метеоусловий на рабочем месте, обеспечить комфортную освещенность рабочего места, уменьшить до допустимых пределов шум от вентиляции);

опасных проявлений факторов производственной среды (в связи с присутствием электричества для питания персонального компьютера и освещенности лаборатории, необходимо предусмотреть, если есть, то перечислить средства коллективной и индивидуальной защиты от электро-, пожаро- и взрывоопасности);

необходимо предусмотреть мероприятия по предотвращению негативного воздействия на окружающую природную среду используемых энергетических проявлений и образующихся отходов: электромагнитные поля от персонального компьютера, отработанные картриджи, принтеры и др. оргтехника;

- необходимо обеспечить устойчивую работу вашего производственного участка при возникновении чрезвычайных ситуаций, характерных для Сибири – сильные морозы, пурга, человеческий фактор, диверсия (рассмотреть минимум 2 ЧС – 1 природную, 1 техногенную).

**Перечень вопросов, подлежащих исследованию, проектированию и разработке:**

Анализ выявленных вредных факторов проектируемой производственной среды в следующей последовательности:

а) приводится перечень всех используемых в работе реагентов, их агрегатное состояние, класс опасности (токсичности), механизм воздействия их на организм человека, единицы измерения количества (концентрации); приводится перечень средств коллективной и индивидуальной защиты персонала, а также защиты окружающей среды;

б) приводятся данные по оптимальным и допустимым значениям микроклимата на рабочем месте, перечисляются методы обеспечения этих значений; приводится 1 из расчетов (расчет освещенности на рабочем месте, расчет потребного воздухообмена на рабочем месте, расчет необходимого времени эвакуации рабочего персонала);

в) приводятся данные по реальным значениям шума на рабочем месте, разрабатываются или, если уже есть, перечисляются мероприятия по защите персонала от шума, при этом приводятся значения ПДУ, средства коллективной защиты, СИЗ;

г) приводятся данные по реальным значениям электромагнитных полей на рабочем месте, в том числе от компьютера или процессора, если они используются, перечисляются СКЗ и СИЗ;

д) приведение допустимых норм с необходимой размерностью (с ссылкой на соответствующий нормативно-технический документ);

е) предлагаемые средства защиты (сначала коллективной защиты, затем – индивидуальные защитные



средства)
. Анализ выявленных опасных факторов проектируемой производённой среды в следующей последовательности а) приводятся данные по значениям напряжения используемого оборудования, классификация помещения по электробезопасности, допустимые безопасные для человека значения напряжения, тока и заземления (в т.ч. статическое электричество, молниезащита - источники, средства защиты); перечисляются СКЗ и СИЗ; б) приводится классификация пожароопасности помещений, указывается класс пожароопасности вашего помещения, перечисляются средства пожарообнаружения и принцип их работы, средства пожаротушения, принцип работы, назначение (какие пожары можно тушить, какие – нет), маркировка; пожаровзрывобезопасность (причины, профилактические мероприятия).
. Охрана окружающей среды: организация безотходного производства (приводится перечень отходов при эксплуатации установки, перечисляются методы улавливания, переработки, хранения и утилизации образовавшихся на вашем производстве промышленных отходов).
. Защита в чрезвычайных ситуациях: а) Приводятся возможные для Сибири ЧС; Возможные ЧС: морозы, диверсия разрабатываются превентивные меры по предупреждению ЧС; разработка мер по повышению устойчивости объекта к данной ЧС; разработка действий в результате возникшей ЧС и мер по ликвидации её последствий
. Правовые и организационные вопросы обеспечения безопасности: специальные (характерные для проектируемой рабочей зоны) правовые нормы трудового законодательства (приводится перечень ГОСТов, СНиПов и др. законодательных документов, использованных в своей работе);
<b>Перечень графического материала:</b> 1) Пути эвакуации 2) План размещения светильников на потолке рабочего помещения

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

**Задание выдал консультант:**

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Профессор отделения общетехнических дисциплин	Федорчук Ю.М.	Д.т.н.		

**Задание принял к исполнению студент:**

Группа	ФИО	Подпись	Дата
0Б41	Меркулова Мария Андреевна		

## РЕФЕРАТ

Выпускная квалификационная работа выполнена на 104 с., содержит 12 рис., 16 табл., 1 прил. с использованием 26 источников.

Ключевые слова:  $C_2D_4$ , этилен, спектры высокого разрешения, спектроскопические параметры, теория изотопозамещения, модель эффективного гамильтониана.

Целью данной выпускной квалификационной работы являлось изучение тонкой структуры спектра полосы  $\nu_{10}$  в многоатомной молекуле  $C_2D_4$  в диапазоне  $450 - 750 \text{ см}^{-1}$ .

Интерпретация экспериментального инфракрасного спектра проводилась на основе метода комбинационных разностей. На основе полученной квантовой информации об энергетических переходах было получено решение обратной спектроскопической задачи.

В результате анализа экспериментально зарегистрированного спектра было проинтерпретировано более 1000 колебательно-вращательных переходов. Данный диапазон спектра высокого разрешения молекулы  $C_2D_4$  был зарегистрирован впервые. А также фундаментальная полоса  $\nu_{10}$  была проинтерпретирована впервые в силу своей слабой интенсивности. Максимальные значения для квантовых переходов составляют  $J_{\max} = 36$  и  $K_a^{\max} = 22$ .

В результате решения обратной спектроскопической задачи были определены 9 параметров (колебательных, вращательных и параметров центробежного искажения различных порядков). Полученные из эксперимента данные использовались в варьировании спектроскопических параметров. Данный набор параметров позволяет воспроизводить исходные экспериментальные колебательно-вращательные энергии с точностью  $\delta = 2,44 \cdot 10^{-4} \text{ см}^{-1}$ .

Найденные параметры будут использованы для пополнения российских и международных спектральных баз данных.

Область применения: астрофизика, планетология и атмосферная оптика.

В будущем предполагается проведение исследований для определения интенсивностей спектральных линий и на основе полученных данных определить более точное значение дипольного момента молекулы  $C_2D_4$ , а также планируется изучение других изотопологов молекулы этилен с целью определения её поверхности потенциальной энергии.

## Оглавление

Введение.....	14
1. Общая информация о молекуле этилена и ее зотопологов.....	16
2. Методы теоретического исследования спектров молекулы.....	19
2.1. Правила отбора.....	19
2.2. Модель эффективного гамильтониана.....	20
2.3. Метод комбинационных разностей.....	30
2.4. Фурье-спектрометр.....	32
2.4.1. Гармонические и ангармонические колебания.....	32
2.4.2. Колебания многоатомных молекул.....	37
3. Расчеты и аналитика.....	39
3.1. Теоретическая обработка спектров.....	39
3.2. Решение обратной спектроскопической задачи.....	41
4. Финансовый менеджмент.....	43
4.1. Определение возможных альтернатив проведения научных исследований.....	43
4.2. Потенциальные потребители результатов исследования.....	43
4.2.1 SWOT-анализ.....	44
4.3. Планирование процесса управления НИИ: структура и график проведения, бюджет, риски и организация закупок.....	48
4.3.1. Планирование научно-исследовательских работ.....	48
4.3.2. Бюджет научного исследования.....	51
4.3.3. Расчет основной заработной платы.....	53
4.3.4. Отчисления на социальные нужды.....	54
4.3.5. Накладные расходы.....	54
5. Социальная ответственность.....	56
5.1. Анализ выявленных вредных факторов производственной среды...56	
5.1.1. Микроклимат.....	56
5.1.2. Освещенность.....	57
5.1.3. Шум.....	62

5.1.4. Электромагнитные поля.....	63
5.2. Анализ выявленных опасных факторов производственной среды...66	
5.2.1. Электробезопасность.....	66
5.2.2. Факторы пожарной и взрывной природы.....	68
5.3. Охрана окружающей среды.....	71
5.4. Защита в случае ЧС.....	72
5.5. Промышленная санитария.....	73
5.6. Правовые и организационные вопросы обеспечения безопасности.....	74
Заключение.....	76
Список используемой литературы.....	77
Приложение 1.....	80

## Введение

Колебательно–вращательные спектры поглощения высокого разрешения дают наиболее полную информацию о характере внутримолекулярных взаимодействий, состояний и свойствах молекул. Определяемые экспериментальные параметры спектральных линий содержат информацию о важнейших структурных и динамических параметрах молекул таких как: структурные постоянные, внутримолекулярное силовое поле, межмолекулярный потенциал, электрический и магнитный моменты.

Молекула этилена является наиболее распространенным объектом в природе и, следовательно, интенсивно исследовалась в лабораторных условиях. Вместе с тем, для многих как чисто академических, так и прикладных задач, возникает необходимость иметь информацию не только об основном изотопологе,  $C_2H_4$ , но и о других его модификациях. Большая часть изотопических модификаций молекулы этилена никогда ранее не исследовалась или была исследована недостаточно, для некоторых из них объектами изучения были только некоторые сильные фундаментальные полосы.

Анализ спектров позволяет определить систему уровней энергии молекулы, найти спектроскопические постоянные, из которых могут быть определены структурные параметры. Определив уровни энергии, можно получить точные значения межатомных расстояний, частот колебаний и силовых постоянных, энергий диссоциаций и других величин, характеризующих структуру многоатомных молекул.

Целью данной выпускной квалификационной работы являлось изучение тонкой структуры спектра полосы  $\nu_{10}$  в многоатомной молекуле  $C_2D_4$  в диапазоне  $450 - 750 \text{ см}^{-1}$ .

Для достижения данной цели были поставлены следующие задачи:

1. Интерпретация колебательно – вращательного спектра полосы  $\nu_{10}$  в диапазоне  $450 - 750 \text{ см}^{-1}$ ;

2. Определение значений энергий верхних колебательно – вращательных уровней для состояния ( $\nu_{10}=1$ );

3. Определение спектроскопических параметров гамильтониана, описывающего вращательную структуру состояния ( $\nu_{10}=1$ ).

Методология и методы исследования:

Для решения вышеперечисленных задач были использованы методы квантовой механики, теории групп, операторной теории возмущений и теории неприводимых тензорных систем, метод комбинационных разностей.

Научная новизна работы определяется следующим фактором: проведен анализ тонкой структуры зарегистрированного впервые спектра высокого разрешения молекулы  $C_2D_4$  в районе полосы  $\nu_{10}$ .

## 1. Общая информация о молекуле этилена и ее изотопологах

На сегодняшний день современные технологии позволяют записывать спектры высокого разрешения с точностью около  $0,002-0,004 \text{ см}^{-1}$ , эта точность намного выше, чем при начальном развитии спектроскопической науки. Хорошо известно, что анализ колебательно-вращательных спектров позволяет определить энергетическую структуру уровней исследуемой молекулы. Определение энергии молекулярной структуры сильно зависит от точности эксперимента, который может вызвать некоторые погрешности в получении внутренних характеристик молекулы, например, при определении точности геометрической структуры молекулы.

В течение многих лет молекула этилена была предметом многочисленных спектроскопических исследований высокого разрешения как в микроволновом, так и в инфракрасном спектральных областях (лабораторные исследования высокого разрешения этилена и его изотопологов в течение последних пяти лет проводились, в частности, в работах [1-8]). Что касается  $\text{C}_2\text{D}_4$ , этот изотополог (как упоминалось, например, в [9]), а также другие виды дейтерированного этилена должны быть всегда включены в анализ атмосферы Титана. По многим причинам спектры высокого разрешения  $\text{C}_2\text{D}_4$  обсуждались ранее в работах [10,11-18]. Для молекулы  $\text{C}_2\text{D}_4$  наиболее изученным является диапазон, в котором локализована полоса  $\nu_{12}$  [10,11,15,18]. Анализ полосы  $\nu_7$  представлен в [12], исследование четырех фундаментальных полос  $\nu_{10}$ ,  $\nu_7$ ,  $\nu_4$ ,  $\nu_{12}$  было рассмотрено в [13]. Таким образом, данные инфракрасных спектров этилена и его различных изотопов постоянно обновляются в базе данных HITRAN [22] для наземных атмосферных исследований.



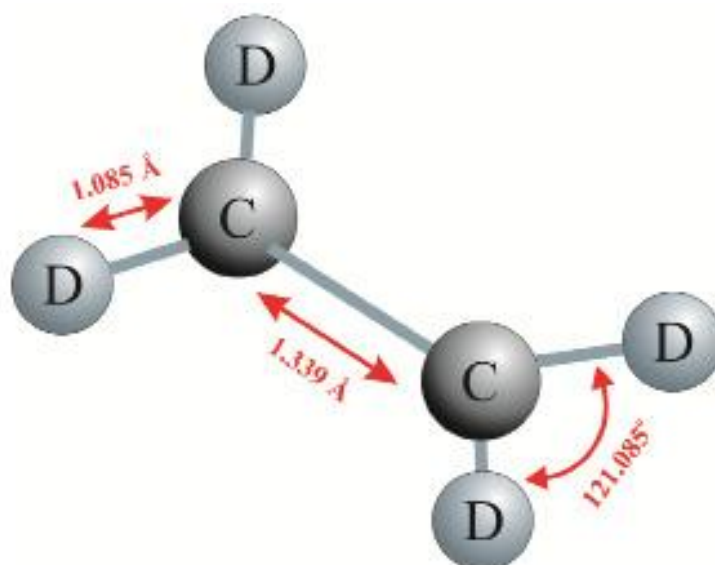


Рис. 1. Конфигурация молекулы  $C_2D_4$ .

Молекула  $C_2D_4$  это молекула типа ассиметричного волчка, группа симметрии данной молекулы изоморфна точечной группе симметрии  $D_{2h}$ . Равновесная конфигурация молекулы представлена на рисунке 1, где угол между связями составляет  $\alpha = 121^\circ$ , а длины связи C=C и C-D соответственно равны 1,339 и 1,085 Å. Данная молекула имеет 12 типов колебаний которые представлены на рисунке 2. Свойства симметрии данной молекулы представлены в таблице 1:

Таблица 1. Типы симметрии и характеры неприводимых представлений.

Пред.	$E$	$\sigma_{x'y'}$	$\sigma_{x'z'}$	$\sigma_{y'z'}$	$i$	$C_2(z')$	$C_2(y')$	$C_2(x')$	Вращ.	Колеб.
$A_g$	1	1	1	1	1	1	1	1		$q_1, q_2, q_3$
$A_u$	1	-1	-1	-1	-1	1	1	1		$q_4$
$B_{1g}$	1	1	-1	-1	1	1	-1	-1	$J_y, k_{zy}$	$q_5, q_6$
$B_{1u}$	1	-1	1	1	-1	1	-1	-1		$q_7$
$B_{2g}$	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	$J_x, k_{zx}$	$q_8$
$B_{2u}$	1	1	-1	1	-1	-1	1	-1		$q_9, q_{10}$
$B_{3g}$	1	-1	-1	1	1	-1	-1	1	$J_z, k_{zz}$	
$B_{3u}$	1	1	1	-1	-1	-1	-1	1		$q_{11}, q_{12}$

Как показано в таблице, набор неприводимых представлений и характеры групп симметрии представлены в первых десяти столбцах; в последних двух столбцах можно увидеть симметрии колебательных координат,  $q_{\lambda}$ , вращательные операторы  $J_{\alpha}$  и направляющие косинусы  $k_{z\alpha}$  соответственно.

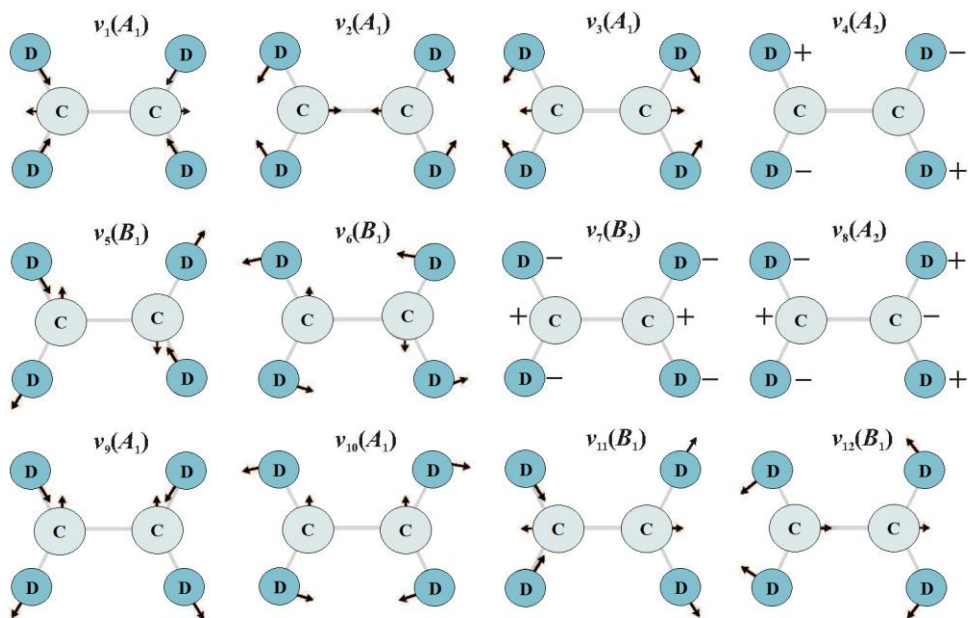


Рис. 2. Типы колебаний молекулы  $C_2D_4$  (группа симметрии  $D_{2h}$ ).

## 2. Методы теоретического исследования спектров молекулы

### 2.1. Правила отбора

Из таблицы 1 можно увидеть, что переходы поглощения возможны только между колебательными состояниями ( $\nu \Gamma$ ) и ( $\nu' \Gamma'$ ), чьи симметрии  $\Gamma$  и  $\Gamma'$  имеют разные индексы « $u$ » и « $g$ ». Кроме того, переходы возможны только из начального колебательного состояния на верхние колебательные состояния  $B_{1u}$ ,  $B_{2u}$  и  $B_{3u}$  типа. Переходы в верхние колебательные состояния  $A_u$  – типа запрещены симметрией и могут проявляться в спектре только благодаря резонансам типа Кориолиса. Также, из столбца 10 можно увидеть, что переходы из основного колебательного состояния на состояния  $A_g$ ,  $B_{1g}$ ,  $B_{2g}$  или  $B_{3g}$  типа являются запрещенными из – за свойств симметрии, а также из – за отсутствия взаимодействия между состояниями  $u$  и  $g$  типа. Помимо прочего, из таблицы 1 можно вынести следующий вывод:

1. Полосы  $B_{1u} \leftarrow A_g$  принадлежат к  $c$  – типу, для которых действуют правила отбора:  $\Delta J = 0, \pm 1$  и  $\Delta K_a = \pm(2n + 1)$ ,  $\Delta K_c = \pm 2n$ , где  $n = 0, 1, 2, \dots$ ;

2. Полосы  $B_{2u} \leftarrow A_g$  принадлежат к  $b$  – типу, для которых действуют правила отбора:  $\Delta J = 0, \pm 1$  и  $\Delta K_a = \pm 1$ ,  $\Delta K_c = \pm 1$ ;

3. Полосы типа  $B_{3u} \leftarrow A_g$  принадлежат к  $a$  – типу, для которых действуют правила отбора:  $\Delta J = 0, \pm 1$  и  $\Delta K_a = 0$ ,  $\Delta K_c = \pm 1$ .

В нашем случае, полосы  $\nu_7$ ,  $\nu_{10}$ ,  $\nu_{12}$  и  $\nu_4$  могут быть определены как полосы  $c$  – типа,  $b$  – типа,  $a$  – типа и запрещенная симметрией полоса соответственно.

Следует так же заметить, что все четыре полосы сильно взаимодействуют друг с другом. Из этого следует, что теоретический анализ всех четырех полос должен быть выполнен с помощью модели эффективного гамильтониана, которая учитывает резонансные взаимодействия между колебательными состояниями [19].

## 2.2. Модель эффективного гамильтониана

Для того чтобы описать состояние квантовой системы, необходимо знать решение уравнения Шредингера. Причем решение этого уравнения очень сильно зависит от того, в каком виде выбирается гамильтониан молекулы  $H$ . Поэтому далее перейдем к задаче построения данного гамильтониана и методам решения уравнения Шредингера.

Для теоретического описания какого-либо природного явления необходимо построить математическую модель этого явления. Данная модель, как и любая другая, может быть построена по-разному, однако при этом должны быть учтены те или иные особенности, процессы, реально происходящие в природе. В связи с этим возникает проблема выбора физически обоснованных математических моделей изучаемых объектов. Использование неподходящих моделей может привести к ошибкам и погрешностям, очень часто не только количественным, но и качественным. Применительно к описанию спектров молекул эта задача сводится прежде всего к построению правильного гамильтониана, описывающего систему колебательно-вращательных состояний молекулы. Решения уравнения Шредингера, очевидно, будут непосредственно зависеть от вида выбранного оператора Гамильтона  $H$ .

Молекула, с физической точки зрения, это система, состоящая из атомных ядер и электронов. Следовательно, для того, чтобы точно описать уровни энергии молекулы, необходимо решить уравнение Шредингера с помощью гамильтониана, зависящего от координат и спинов всех частиц, которые образуют молекулу, и учитывающим все виды взаимодействия между этими частицами. Задача построения такого гамильтониана является столь же сложной, сколько поиск точного решения уравнения Шредингера с таким гамильтонианом. Поэтому для теоретического описания спектров молекул используют различного рода приближения в построении гамильтонианов молекул.

Как правило, в молекулярной спектроскопии используются нерелятивистские гамильтонианы, т.е. гамильтонианы следующего вида:

$$H = T_{яд} + T_{эл} + V, \quad (1)$$

где  $T_{яд}$  и  $T_{эл}$  – операторы кинетической энергии ядер и электронов соответственно;  $V$  – оператор потенциальной энергии молекулы, включающей энергию электрического притяжения электронов к ядрам и энергию межэлектронного и межъядерного отталкивания. Таким образом, операторы  $T_{яд}$ ,  $T_{эл}$  и  $V$  имеют вид:

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

где  $m_N$  и  $m_e$  – массы ядер и электронов соответственно;  $z_N$  и  $e$  – заряды ядер и электрона;  $r_{ab}$  – расстояние между  $a$ -й и  $b$ -й частицами. Следует заметить, что  $x_N$ ,  $x_i$  – это координаты электронов и ядер в декартовой пространственно-фиксированной системе (ПФС).

Если не брать во внимание целостность поступательного движения молекулы, то наиболее удобным и практически всегда используемым способом описания состояния молекулы является такой, при котором функции состояния молекулы зависят от ориентации молекулы в ПФС (вращательные переменные) и от относительного расположения ядер молекулы (колебательные переменные). Таким образом, для описания состояний молекулы используются координатные системы, каким-либо образом связанные с ней.

Вследствие этого на одном из первых этапов исследования молекулы как объекта микромира возникает задача, суть которой в том, чтобы, исходя из классического или квантового гамильтониана (1), записанного в ПФС, получить квантово-механический гамильтониан в связанной с молекулой системе координат. Коротко опишем процедуру перехода от оператора (1), (2) к

оператору, зависящему от трансляционных, вращательных и колебательных переменных.

Гамильтониан молекулы, как всякая функция от системы обобщения координат  $x_n$  и производных по ним  $\partial/\partial x_n$ , всегда может быть преобразована в систему новых обобщенных координат  $q_m$ , если известен закон преобразования для самих координат и их производных:

$$x_n = f_n(q_m), \partial/\partial x_n = \Phi_n(q_m, \partial/\partial q_l). \quad (3)$$

Как известно, если якобиан преобразования отличен от нуля, то соотношения типа (3) для производных могут быть найдены всегда, и притом единственным образом. Причем формулы перехода к новым координатам в общем случае можно задать бесконечным числом способов, поэтому можно получить и бесконечно много окончательных выражений для гамильтониана. При этом все полученные гамильтонианы должны иметь совпадающие наборы собственных значений и переходящие друг в друга при преобразования наборы собственных функций.

Одним из наиболее удачных преобразований координат является, позволяющим разделить различные виды движения в молекуле, являются преобразования:

$$\begin{aligned} x_{N\alpha} &= R_\alpha + \sum_{\beta} k_{\alpha\beta} \tilde{r}_{N\beta}, \\ x_{i\alpha} &= R_\alpha + \sum_{\beta} k_{\alpha\beta} \tilde{r}_{i\beta}, \end{aligned} \quad (4)$$

где  $x_{N\alpha}$  и  $x_{i\alpha}$  - компоненты векторов, описывающих положения  $N$ -го ядра и  $i$ -го электрона в пространственной системе координат;  $R_\alpha$  - вектор начала молекулярной системы координат относительно пространственной;  $k_{\alpha\beta}$  - матрицы направляющих косинусов углов между осями старой и новой систем ( $k_{\alpha\beta}$  - функции эйлеровых углов). Молекулярная система координат определяется таким образом, чтобы ее начало находилось в центре масс всей молекулы, что математически может быть записано как:

$$\sum_N m_N \tilde{r}_{N\beta} + \sum_i m_e \tilde{r}_{i\beta} = 0. \quad (5)$$

Здесь  $\tilde{r}_{i\beta}$  - компоненты координат  $i$ -го электрона в молекулярной системе; координаты  $N$ -го ядра  $\tilde{r}_{N\beta}$  выражаются в виде:

$$\tilde{r}_{N\beta} = \tilde{r}_{N\beta}^0 + \sum_{\lambda} m_N^{-\frac{1}{2}} l_{N\beta\lambda} Q_{\lambda}, \quad (6)$$

где константы  $r_{N\beta}^0$  и  $l_{N\beta\lambda}$  в общем случае произвольны;  $Q_{\lambda}$  - колебательные координаты (имеют размерность  $\text{см} \cdot \text{г}^{1/2}$ ). Константы  $\tilde{r}_{N\beta}^0$  и  $l_{N\beta\lambda}$  выбираются таким образом, чтобы выполнялись следующие условия:

1.  $\tilde{r}_{N\beta}$  совпадает с  $\tilde{r}_{N\beta}^0$ , когда ядра находятся в положениях равновесия;
2. оси молекулярной системы совпадают с главными осями инерции молекулы, когда ядра находятся в положении равновесия;
3. колебания являются нормальными;
4. выполняются условия Экарта.

Так как колебания координат  $Q$  независимы, эти требования могут быть выражены математически следующим образом:

$$\sum_{N\beta\gamma} \varepsilon_{\alpha\beta\gamma} m_N^{\frac{1}{2}} \tilde{r}_{N\beta}^0 l_{N\gamma\lambda} = 0, \quad (7)$$

$$\sum_{N\alpha} l_{N\alpha\lambda} l_{N\alpha\mu} = \delta_{\lambda\mu}, \quad (8)$$

$$\left( \frac{\partial^2 V}{\partial Q_{\lambda} \partial Q_{\mu}} \right)_{Q=0} = 0, \lambda \neq \mu, \quad (9)$$

$$\sum_N m_N \tilde{r}_{N\alpha}^0 \tilde{r}_{N\beta}^0 = 0, \alpha \neq \beta, \quad (10)$$

$$\left( \frac{\partial V}{\partial Q_{\lambda}} \right)_{Q=0} = 0, \quad (11)$$

где  $V$  - потенциальная функция молекулы;  $\varepsilon_{\alpha\beta\gamma}$  - полностью антисимметричный тензор, т.е.

$$\varepsilon_{\alpha\beta\gamma} = \begin{cases} 1, & \text{если } \alpha, \beta, \gamma - \text{циклическая перестановка индексов } x, y, z; \\ 0, & \text{если } \alpha = \beta, \beta = \gamma \text{ или } \alpha = \gamma; \\ -1 & \text{в остальных случаях.} \end{cases}$$

Добавим к соотношениям (7) – (11) условие (5), которое можно представить в виде

$$\begin{aligned} \sum_N m_N \tilde{r}_{N\beta} + \sum_i m_e \tilde{r}_{i\beta} &= 0, \\ \sum_N m_N^{\frac{1}{2}} l_{N\beta\gamma} &= 0. \end{aligned} \quad (12)$$

Формально приведенных  $3N$  условий (10) – (12) достаточно для определения  $3N$  параметров  $\tilde{r}_{N\beta}^0$ , а  $3N(3N - 6)$  соотношений (4) – (9) и (12) для определения  $3N(3N - 6)$  констант форм колебаний  $l_{N\beta\lambda}$ . Таким образом, преобразование координат (4) задается в явном виде.

Заметим, что описанная соотношениями (4) – (12) схема введения новых координат обладает существенным недостатком: для определения координат электронов и ядер, в каждый момент времени необходимо знать не только ядерную конфигурацию, но и расположение всех электронов относительно ядер (условие (12)), т.к. начало новой координатной системы помещено в центр масс всей молекулы. В связи с этим задача значительно усложняется.

Наиболее правильным является такое определение новых координат, когда  $r_{N\beta}$  и  $r_{i\beta}$  отсчитываются только от центра масс системы ядер, а не всей молекулы. В данном случае положение координатных осей зависит только от конфигурации ядер и, следовательно, они могут быть всегда определены. При этом формулы преобразования координат принимают вид

$$x_{N\alpha} = R_\alpha + \sum_\beta k_{\alpha\beta} (r_{N\beta}^0 + \sum_\lambda m_N^{\frac{1}{2}} l_{N\beta\lambda} Q_\lambda - \frac{m_0}{M} \sum_i r_{i\beta}), \quad (13)$$

и

$$x_{i\alpha} = R_\alpha + \sum_\beta k_{\alpha\beta} (r_{i\beta} - \frac{m_e}{M} \sum_j r_{j\beta}), \quad (14)$$



где теперь  $r_{N\beta}$  и  $r_{i\beta}$  - положения ядер и электронов в системе, начало которой фиксировано в центре масс ядер;

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

$M$  – полная масса молекулы. Уравнения для определения  $r_{N\alpha}^0$  и  $l_{N\alpha\lambda}$  в данном случае имеют такой же вид, как и (7) – (11), (12), а первое условие (12) преобразуется так:

$$\sum_N m_N r_{N\beta}^0 = 0. \quad (15)$$

Теперь, зная, как преобразуются координаты (13) – (14), можно определить закон преобразования операторов  $P_{N\alpha} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x_{N\alpha}}$  и  $P_{i\alpha} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x_{i\alpha}}$ .

Воспользуемся тем, что такие формулы были получены, исходя из полинома

$$L = \sum_{i\alpha} \frac{m_e}{2} \dot{x}_{i\alpha}^2 + \sum_{N\alpha} \frac{m_N}{2} \dot{x}_{N\alpha}^2 + V, \quad (16)$$

Опустим преобразования, приводящие к формулам, которые выражают классические величины  $P_{N\alpha}$  и  $P_{i\alpha}$  через соответствующие величины в молекулярной системе координат. Тогда выражения для операторов  $P_{N\alpha}$  и  $P_{i\alpha}$  примут вид

$$P_{i\alpha} = \frac{m_e}{M} P_\alpha + \sum_\beta k_{\alpha\beta} P_{i\beta}, \quad (17)$$

$$P_{N\alpha} = \frac{m_N}{M} P_\alpha + \sum_\beta k_{\alpha\beta} \left\{ \sum_\lambda m_N^{\frac{1}{2}} l_{N\beta\lambda} P_\lambda - \sum_{\gamma\delta\chi} m_N \varepsilon_{\beta\gamma\chi} r_{N\gamma}^0 I'_{\chi\delta}^{-1} N_\delta - \frac{m_{эл}}{M_N} \sum_j P_{j\beta} \right\}, \quad (18)$$

где  $M_N = \sum_N m_N$  - масса всех ядер;  $P_\alpha = -i\hbar \frac{\partial}{\partial R_\alpha}$ ,  $P_\lambda = -i\hbar \frac{\partial}{\partial Q_\lambda}$ ;  $P_\alpha$  - импульс,

сопряженный координате поступательного движения молекулы как целого;  $P_\lambda$

- импульс, сопряженный  $Q_\lambda$ ;  $I'_{\chi\delta}$  - элементы тензора момента инерции,

зависящие от координаты  $Q_\lambda$ . Операторы  $N_\alpha$  имеют вид

$$N_\alpha = J_\alpha - G_\alpha - L_\alpha$$

где  $J_\alpha$  - компоненты полного;

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

- колебательного и

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

- электронного угловых моментов.

В результате сложных преобразований, гамильтониан будет выглядеть следующим образом

$$H = \sum_\alpha \frac{P_\alpha^2}{2M} + \frac{1}{2m_{эл}} \sum_{i\alpha} P_{i\alpha}^2 + \frac{1}{2M_N} \sum_\alpha \left( \sum_i P_{i\alpha} \right)^2 + \frac{1}{2} \sum_\lambda P_\lambda^2 + \quad (18)$$

$$+ \frac{1}{2} \sum_{\alpha\beta} (J_\alpha - G_\alpha - L_\alpha) \tilde{\mu}_{\alpha\beta} (J_\beta - G_\beta - L_\beta) + V - \frac{h^2}{8} \sum_\alpha \tilde{\mu}_{\alpha\alpha},$$

где  $\tilde{\mu}_{\alpha\beta}$  - элементы матрицы обратных моментов инерции. Здесь первый член описывает поступательное движение молекулы как целого; второй член – кинетическая энергия электронов; третий член, вызванный различием центра масс ядер и всей молекулы, ответственен за массовый изотопический сдвиг энергии; четвертый и пятый описывают колебательное движение ядерного остова и его вращение в пространстве соответственно; оператор  $V$  – преобразованное выражение (2). Вклад  $\frac{h^2}{8} \sum_\alpha \tilde{\mu}_{\alpha\alpha}$  - так называемая уотсоновская добавка к колебательной потенциальной функции.

Выражение (18) определяет гамильтониан многоатомной нелинейной молекулы во «внутренних» координатах. Очевидно, что рассмотренный подход к задаче получения колебательно – вращательного гамильтониана может быть использован для преобразования не только оператора в виде (1), но и выражений более сложного вида, учитывающих, например, спиновые, магнитные эффекты.

Добавим, что выполненное выше преобразование гамильтониана справедливо только для нелинейных молекул.

В настоящее время решить полное электронно–колебательно-вращательное уравнение Шредингера для многоатомной молекулы не представляется возможным. Поэтому при решении подобных задач применяют приближенный метод построения так называемого эффективного гамильтониана. Рассмотрим уравнение Шредингера с произвольным гамильтонианом, который имеет вид:

$$H\psi = E\psi \quad (19)$$

Перейдем от исходного гамильтониана  $H$  к гамильтониану  $\tilde{H}$  с помощью произвольного унитарного оператора  $G$ , который является функцией от колебательных и вращательных координат:

$$\begin{aligned} H \rightarrow \tilde{H} &= G^+ H G; \\ G^+ G &= G G^+ \end{aligned} \quad (20)$$

Как известно, унитарное преобразование не меняет спектр собственных значений оператора.

Эрмитов оператор  $\tilde{H}$  должен обладать двумя важными свойствами:

1. Решение уравнения Шредингера с этим новым оператором  $\tilde{H}$  можно определить в явном виде;

2. Множество  $\tilde{V}$  всех решений оператора тождественно совпадает с некоторым подмножеством  $V$  множества  $A$  решений уравнения Шредингера с оператором  $H$ .

Оператор  $\tilde{H}$ , удовлетворяющий условиям 1-2, называется эффективным гамильтонианом [21].

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

$$H^{vib.-rot.} = \sum_{\nu, \tilde{\nu}}^2 |\nu\rangle \langle \tilde{\nu}| H^{\nu\tilde{\nu}} \quad (21)$$

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

$$H^{\nu\tilde{\nu}} = \begin{vmatrix} & 1 & 2 & 3 \\ 1 & W & F & C \\ 2 & - & W & - \\ 3 & - & - & W \end{vmatrix} \quad (22)$$

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

$F$  - оператор Ферми резонансного взаимодействия;

$C$  – соответствует типу Кориолиса взаимодействия.

Диагональные блоки гамильтониана в выражении (19), описывающие вращательную структуру невозмущенных колебательных состояний, взяты в виде оператора Уотсона [22]:

$$\begin{aligned} H^{\nu\nu} = & E^{\nu} + \left[ A^{\nu} - \frac{1}{2}(B^{\nu} + C^{\nu}) \right] J_z^2 + \frac{1}{2}(B^{\nu} + C^{\nu}) J^2 + \frac{1}{2}(B^{\nu} + C^{\nu}) J_{xy}^2 \\ & - \Delta_K^{\nu} J_z^4 - \Delta_{JK}^{\nu} J_z^2 J^2 - \Delta_K^{\nu} J^2 - \delta_K^{\nu} [J_z^2, J_{xy}^2]_{+} - 2\delta_J^{\nu} J^2 J_{xy}^2 \\ & + H_K^{\nu} J_z^6 + H_{KJ}^{\nu} J_z^4 J^2 + H_{JK}^{\nu} J_z^2 J^4 + H_J^{\nu} J^6 \\ & + \left[ h_K^{\nu} J_z^4 + h_{JK}^{\nu} J_z^2 J^2 + h_J^{\nu} J^4, J_{xy}^2 \right]_{+} + L_K^{\nu} J_z^8 + L_{KKJ}^{\nu} J_z^6 J^2 + L_{JK}^{\nu} J_z^4 J^4 \\ & + L_{JJK}^{\nu} J_z^2 J^6 + L_J^{\nu} J_z^8 + \left[ J_K^{\nu} J_z^6 + J_{KJ}^{\nu} J_z^4 J^2 + J_{JK}^{\nu} J_z^2 J^4 + J_J^{\nu} J^6, J_{xy}^2 \right]_{+} \\ & + P_K^{\nu} J_z^{10} + P_{KKJ}^{\nu} J_z^8 J^2 + P_{KJ}^{\nu} J_z^6 J^4 + P_{JK}^{\nu} J_z^4 J^6 + \\ & + S_K^{\nu} J_z^{12} + S_{KKJ}^{\nu} J_z^{10} J^2 + \dots, \end{aligned} \quad (23)$$

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

Когда вращательные постоянные удовлетворяют соотношению  $A=B=C$ , тогда имеем дело с молекулой типа сферического волчка.

В случае молекулы типа симметричного волчка вращательные постоянные удовлетворяют соотношению  $A>B=C$  для вытянутого симметричного волчка либо  $A=B>C$  для сплюснутого симметричного волчка.

Когда же все три вращательные постоянные не равны друг другу  $A \neq B \neq C$ , тогда имеем дело с молекулой ассиметричного волчка.

Что касается недиагональных блоков, то исходя из соображений симметрии, можно показать, что три оператора, описывающие Кориолисово взаимодействие (резонанс между состояниями разной симметрии), должны быть записаны в следующей форме [23]:

$$H_{v,\tilde{v}}(v \neq \tilde{v}) = {}^{v\tilde{v}}F_0 + {}^{v\tilde{v}}F_K J_z^2 + {}^{v\tilde{v}}F_J J^2 + \dots + {}^{v\tilde{v}}F_{xy} (J_x^2 - J_y^2) + {}^{v\tilde{v}}F_{Kxy} \{J_z^2, (J_x^2 - J_y^2)\}_+ + 2 {}^{v\tilde{v}}F_{Jxy} J^2 (J_x^2 - J_y^2) + \dots \quad (24)$$

1.  $A$  – тип Кориолиса между состояниями ( $v_{10} = 1, B_{2u}$ ) и ( $v_7 = 1, B_{1u}$ )

$$H_{v,\tilde{v}} = iJ_z H_{v\tilde{v}}^{(1)} + [J_x, J_y] H_{v\tilde{v}}^{(2)} + H_{v\tilde{v}}^{(2)} [J_x, J_y] + [iJ_z, (J_x^2 - J_y^2)] H_{v\tilde{v}}^{(3)} + H_{v\tilde{v}}^{(3)} [iJ_z, (J_x^2 - J_y^2)] + \dots, \quad (25)$$

2.  $B$  – тип Кориолиса между состояниями ( $v_{10} = 1, B_u$ ) и ( $v_4 = 1, A_u$ ):

$$H_{v,\tilde{v}} = iJ_x H_{v\tilde{v}}^{(1)} + H_{v\tilde{v}}^{(1)} iJ_y + [J_y, J_z] H_{v\tilde{v}}^{(2)} + H_{v\tilde{v}}^{(2)} [J_y, J_z] + [iJ_x, (J_x^2 - J_y^2)] H_{v\tilde{v}}^{(3)} + H_{v\tilde{v}}^{(3)} [iJ_x, (J_x^2 - J_y^2)] + \dots, \quad (26)$$

3.  $C$  – тип Кориолиса между состояниями ( $v_{10} = 1, B_{2u}$ ) и ( $v_{12} = 1, B_{3u}$ ):

$$H_{v,\tilde{v}} = iJ_y H_{v\tilde{v}}^{(1)} + H_{v\tilde{v}}^{(1)} iJ_x + [J_x, J_z] H_{v\tilde{v}}^{(2)} + H_{v\tilde{v}}^{(2)} [J_x, J_z] + [iJ_y, (J_x^2 - J_y^2)] H_{v\tilde{v}}^{(3)} + H_{v\tilde{v}}^{(3)} [iJ_y, (J_x^2 - J_y^2)] + \dots, \quad (27)$$

### 2.3. Метод комбинационных разностей

Методы, применяемые для анализа линий в спектрах, определяются как правило степенью сложности данного спектра. Спектры молекул типа асимметричного волчка не имеют явно различимых закономерностей, так как в основном состоят из перекрывающихся полос. В таких случаях невозможно идентифицировать спектр по его виду, как это реализуемо, например, с двухатомными молекулами. Для таких случаев наиболее часто используется метод комбинационных разностей, поскольку точное комбинационное правило Ридберга-Ритца является единственным способом идентификации линий, не содержащим каких либо математических модельных представлений (гамильтониана, констант потенциальной функции и т.д.).

Для упрощения определения энергетических уровней колебательных состояний была разработана компьютерная программа, в основе которой лежит данный метод.

Так как нижние колебательные состояния молекул, как правило, хорошо изучены, то мы можем точно предсказать расстояния в спектрах молекул между линиями, образованными переходами с различных нижних энергетических уровней на один и тот же верхний. Согласно комбинационному правилу, в спектре ищутся группы линий, образованные переходами с нескольких исходных состояний, имеющих разную энергию, на одно конечное. На рисунке 3 приведена схема, иллюстрирующая вращательные подуровни энергии нижнего и верхнего колебательных состояний. Получается, среди всего спектра нужно найти такие линии, центры которых удовлетворяют соотношению:

$$\left| \nu_{n_1} - \nu_{n_2} \right| - \left| E_{i_1} - E_{i_2} \right| \leq \Delta \nu_{n_1} + \Delta \nu_{n_2}, \quad (28)$$

где  $\nu_{n_1}$ ,  $\nu_{n_2}$  - измеренные и рассчитанные центры линий, соответствующие номерам  $n_1$  и  $n_2$ ;  $\Delta \nu_n$  - ошибки измерений частот;  $i_1$ ,  $i_2$  - квантовые числа начального уровня;  $E_{i_1}$ ,  $E_{i_2}$  - уровни энергии исходных состояний.

Предполагается, что энергии уровней основного колебательного состояния определены с более высокой точностью, нежели  $\Delta\nu_n$ . Обратим внимание на то, что, исходя из (28), разности не зависят от погрешности расчета верхних уровней и, следовательно, от используемых для расчета моделей [24].

Для расчета колебательных уровней молекулы в программе используется эффективный гамильтониан Уотсона (23).

Поскольку с высокой точностью известны расстояния между вращательными уровнями основного колебательного состояния  $i_1, i_2, i_3$  и  $i_4$  (рис. 3), мы можем сделать «расческу», расстояния между её зубчиками будет соответствовать расстояниям между вращательными уровнями основного колебательного состояния.

Такую расческу будем передвигать по спектру с целью поиска линий, совпадающих с зубчиками «расчески» (рис. 4)

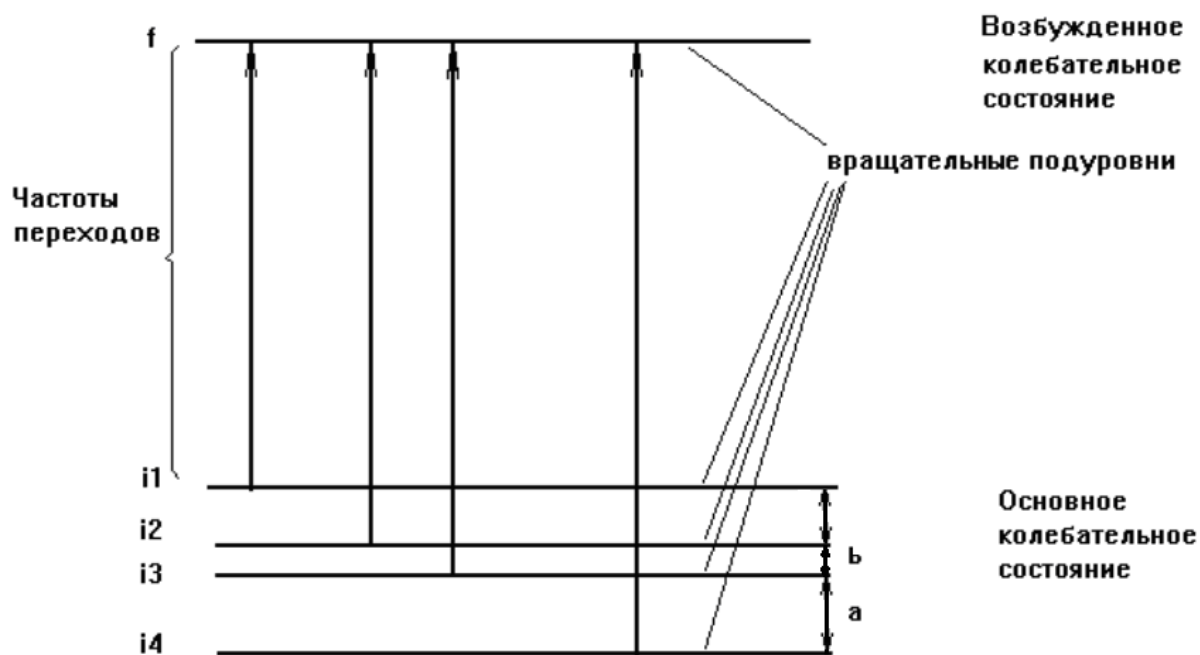


Рис. 3. Переходы с вращательных уровней основного колебательного состояния на вращательный уровень возбужденного колебательного состояния, а и b – известные расстояния между колебательными состояниями.

Зная положения нижних уровней, длины волн переходов, можно определить энергию верхнего уровня. Передвигая «расческу» по спектру, можно обнаружить ещё линии, которые совпадут с зубчиками. Выбирается наиболее вероятный вариант.

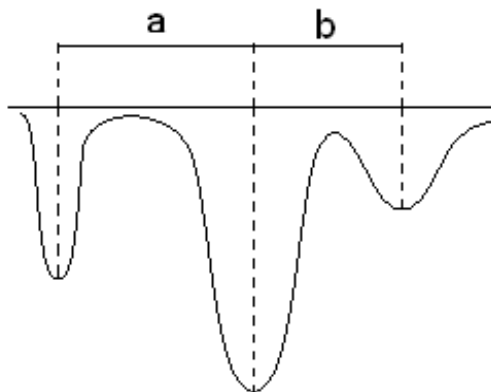


Рис. 4. Метод комбинационных разностей,  $a$  и  $b$  – известные расстояния между колебательными состояниями

Такой процесс называется идентификацией линий. Как уже оговаривалось ранее, это выполняет компьютерная программа.

В процессе идентификации полное совпадение линий спектра маловероятно, поэтому задается некоторая точность поиска « $d$ » (например  $d=0,001$ ). Это означает, что при отклонении центра линии спектра от зубчика «расчески» на величину меньшую или равную « $d$ », результат принимается как верный. Данное отклонение центра линии возникает из-за погрешности эксперимента.

## 2.4. Фурье – спектрометр

### 2.4.1. Гармонические и ангармонические колебания

Двухатомную молекулу АВ (или двухатомную группировку в составе органической молекулы) можно представить в виде двух шариков с массами  $m_A$  и  $m_B$ , связанных между собой пружиной (упругой связью) с равновесным



расстоянием  $r_e$  (рис. 5, а). При смещении шариков А и В из положения равновесия на расстояние  $\Delta r$  возникает возвращающая сила  $f$  (рис. 5, б), стремящаяся вернуть систему АВ в исходное равновесное положение. Сила  $f$  описывается с помощью закона Гука:

$$f = -k\Delta r,$$

где  $\Delta r = r - r_e$  – изменение длины пружины (связи);  $k$  – силовая постоянная пружины (связи).

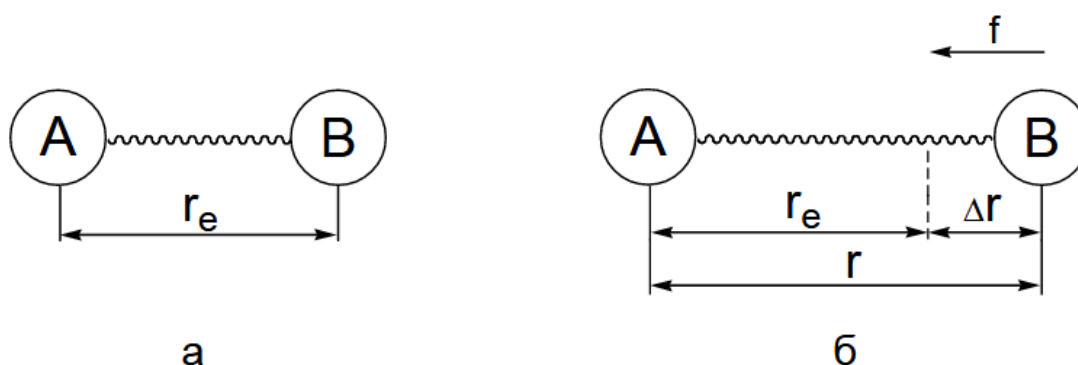


Рис. 5. Модель молекулы АВ, состоящей из двух атомов (шариков), соединенных упругой химической связью (пружиной), имеющей равновесное расстояние  $r_e$  (а). Система АВ в состоянии смещения на расстояние  $\Delta r$  (б); появление при этом возвращающей силы  $f$ .

Движение, происходящее после смещения шариков (атомов) А и В из положения равновесия называется простым гармоническим колебанием. Потенциальная энергия  $V_{\text{гарм}}$  системы гармонического осциллятора, состоящего из двух атомов, связанных упругой химической связью, определяется выражением:

$$V_{\text{гарм}} = \frac{1}{2}k\Delta r^2,$$

где  $k$  – силовая постоянная химической связи;  $\Delta r$  – смещение атомов из положения равновесия.

Функция  $V(r)$  представляет собой симметричную параболу, проходящую через точку минимума, соответствующую равновесному межъядерному расстоянию  $r_e$  (рис. 2а).

Колебательная энергия гармонического осциллятора  $E_{кол}^{гарм}$  квантуется по закону:

$$E_{кол}^{гарм} = h\nu_0 \left( \nu + \frac{1}{2} \right),$$

где  $h$  – постоянная Планка;  $\nu = 0, 1, 2, 3, \dots$  – колебательное квантовое число;  $\nu_0$  – частота колебаний гармонического осциллятора, описываемая уравнением:

$$\nu_0 = \frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{k}{M}},$$

где  $k$  – силовая постоянная связи;  $M = m_A m_B / (m_A + m_B)$  – приведенная масса двухатомной системы АВ.

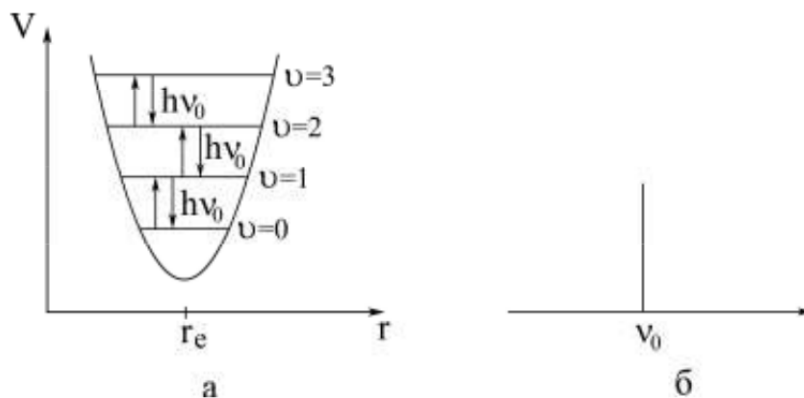


Рис. 6. Кривая потенциальной энергии и уровни колебательной энергии гармонического осциллятора (а). Схематический колебательный спектр гармонического осциллятора (б).

В результате квантования энергии  $E_{кол}^{гарм}$  гармонический осциллятор характеризуется набором равноотстоящих энергетических уровней, отличающихся друг от друга на одинаковую величину  $h\nu_0$  (рис. 6а). Правило

отбора для перехода между колебательными уровнями гармонического осциллятора имеет вид:

$$\Delta\nu = \pm 1.$$

Разрешенными являются только переходы между соседними уровнями. Например, переход между уровнями с  $\nu = 0$  и  $\nu = 1$  разрешен ( $\Delta\nu = 1$ ), а между уровнями с  $\nu = 0$  и  $\nu = 2$  запрещен ( $\Delta\nu = 2$ ) (рис. 6, а). В результате колебательный спектр гармонического осциллятора представляет собой только одну линию с частотой  $\nu_0$  (рис. 6, б).

В отличие от модели гармонического осциллятора колебания реальных молекул ангармоничны. Потенциальная энергия ангармонического осциллятора  $V_{ангарм}$  описывается функцией Морзе:

$$V_{ангарм} = D(1 - e^{-a\Delta r})^2,$$

где  $D$  – энергия диссоциации связи;  $\Delta r$  – смещение атомов из положения равновесия;  $a$  – постоянная, определяемая выражением:

$$a = 2\pi\nu_0 \sqrt{\frac{M}{2D}},$$

где  $\nu_0$  – частота осциллятора;  $M$  – приведенная масса;  $D$  – энергия диссоциации связи.

Колебательная энергия ангармонического осциллятора  $E_{кол}^{ангарм}$  квантуется согласно закону:

$$E_{кол}^{ангарм} = h\nu_0 \left( \nu + \frac{1}{2} \right) - \frac{h^2\nu_0^2}{4D} \left( \nu + \frac{1}{2} \right),$$

где  $h$  – постоянная Планка;  $\nu = 0, 1, 2, 3, \dots$  – колебательное квантовое число;  $\nu_0$  – частота осциллятора;  $D$  – энергия диссоциации связи. Из выражения для энергии  $E_{кол}^{ангарм}$  следует, что по мере увеличения квантового числа  $\nu$  колебательные уровни будут постепенно сближаться и в конечном итоге перейдут в континуум энергии при  $E_{кол}^{ангарм} = D$  (рис. 7а).

В случае ангармонического осциллятора (реальной молекулярной системы) могут реализовываться переходы не только между соседними колебательными уровнями с  $\Delta v = 1$ , но и переходы с  $\Delta v = 2, 3, \dots$ . Это приводит к появлению в колебательном спектре нескольких полос с частотами  $\nu, \nu_1, \nu_2$  и т.д. (рис. 7, б). Линия (полоса) спектра, отвечающая переходу между колебательными уровнями с  $v = 0$  и  $v = 1$  ( $\Delta v = 1$ ) называется основной частотой ( $h\nu$  на рис. 3а). Колебательный переход между уровнями с  $v = 0$  и  $v = 2$  ( $\Delta v = 2$ ) называется первым обертоном ( $h\nu_1$  на рис. 3а), а переход между уровнями с  $v = 0$  и  $v = 3$  ( $\Delta v = 3$ ) называется вторым обертоном ( $h\nu_2$  на рис. 7, а).



Рис.7. Кривая потенциальной энергии и уровни колебательной энергии ангармонического осциллятора (а). Схематический колебательный спектр ангармонического осциллятора (б).

Учитывая постепенное сближение колебательных уровней ангармонического осциллятора (рис. 7а) частота первого обертона  $\nu_1$  меньше, чем удвоенная частота основного перехода  $\nu$ ; а частота второго обертона  $\nu_2$  меньше, чем утроенная частота  $\nu$  [25].

## 2.4.2. Колебания многоатомных молекул

Молекула, состоящая из  $N$  атомов, имеет  $3N$  степеней свободы – это число независимых параметров для описания положения всех атомов молекулы в декартовых координатах ( $x$ ,  $y$ ,  $z$ ). В нелинейной молекуле из всех  $3N$  независимых параметров три степени свободы приходится на поступательное движение молекулы как целого и три на вращательное движение молекулы вокруг ее главных осей. Оставшиеся  $3N-6$  степеней свободы представляют собой так называемые нормальные колебания – независимые повторяющиеся сами по себе движения молекулы.

Для линейной молекулы характерно  $3N-5$  нормальных колебаний, т.к. линейные молекулы имеют три поступательных и две вращательных степени свободы молекулы как целого.

Полное колебательное движение молекулы можно представить в виде комбинации нормальных колебаний. В зависимости от строения органической молекулы в ИК-спектрах могут проявляться либо все нормальные колебания, либо часть из них.

Активными в ИК-спектрах являются только те колебания, которые сопровождаются изменением электрического дипольного момента  $\mu$  связи. Основное колебание активно в ИК-спектре, если первая производная дипольного момента по нормальной координате  $r$  отлична от 0, т. е.:

$$\frac{d\mu}{dr} \neq 0.$$

Поэтому, обычно в ИК-спектрах органических соединений проявляются с высокой интенсивностью колебания полярных связей C–O, C=O, C–N, N=O, S=O и т.п..

Число полос поглощения в ИК-спектрах может отличаться от числа нормальных колебаний молекулы вследствие появления дополнительных полос: обертонов; составных частот; линий, обусловленных резонансом Ферми.

В ИК-спектроскопии очень важным является понятие характеристичности нормальных колебаний, т.е. соответствия их определенным группам атомов. Характеристичным по частоте является нормальное колебание атомной группировки, частота которого сохраняется постоянной для ряда структурно родственных молекул, содержащих данную группировку. Характеристичность по частоте проявляют колебания многих групп в органических соединениях, например, C=O, C=C, O–H, C–H и др. Именно характеристичность колебаний позволяет использовать ИК-спектроскопию для идентификации органических соединений.

Нормальные колебания подразделяются на валентные  $\nu$  и деформационные  $\delta$ . В случае валентных колебаний происходит изменение длины связи вдоль ее оси, при этом различают валентные симметричные и асимметричные колебания (рис. 8, а, б). Деформационные колебания сопровождаются изменением угла между связями (рис. 8, в) [25].

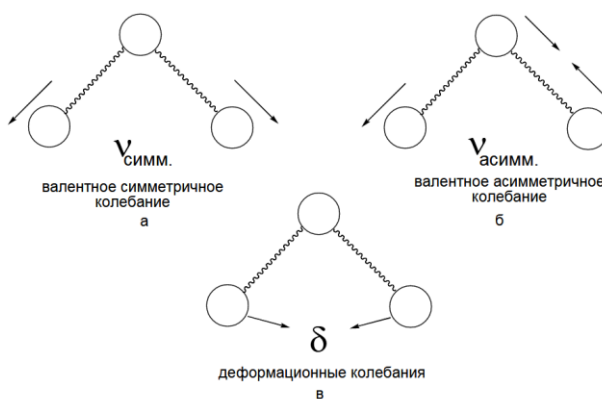


Рис. 8. Типы колебаний.

### 3. Расчеты и аналитика

#### 3.1. Теоретическая обработка спектров

В моей работе были зарегистрированы и проанализированы высокочастотные спектры фурье-преобразования молекулы  $C_2D_4$ .

Спектры молекулы  $C_2D_4$  были зарегистрированы в диапазоне длин волн от 450 до 750  $cm^{-1}$  с помощью Фурье-спектрометра Bruker IFS 120, в основе работы которого лежит принцип интерферометра Майкельсона. Исследуемый образец находился в газообразном состоянии при комнатной температуре и был помещен в ячейку Уайта, сделанной из нержавеющей стали. Используемый при регистрации спектров образец газа молекулы  $C_2D_4$  был получен в лаборатории EQ/ CDN изотопы. Химическая и изотопическая чистота составляет 99,8 ат. % D. Номинальное инструментальное разрешение, определенное как  $1/d_{MOPD}$  (максимальное разницей оптического пути), составляет 0,00206  $cm^{-1}$ , что приводит к доплеровским спектрам. Экспериментальные спектры были получены при следующих экспериментальных условиях: давление образца – 800 Па; оптическая длина пути – 16 м; количество сканирований – 80; общая ширина линии на 450 и 750  $cm^{-1}$  – 0,0020  $cm^{-1}$  и 0,0030  $cm^{-1}$  соответственно.

Спектры были откалиброваны спектральными линиями  $N_2O$ . Среднее отклонение позиций линии  $N_2O$  от позиций линий, опубликованных в текущей базе данных HITRAN, составляет порядка  $10^{-4}$   $cm^{-1}$ . Расходимость отдельных линий не превышает  $4 \cdot 10^{-4}$   $cm^{-1}$ .

Спектры данной молекулы были получены в диапазоне 450-750  $cm^{-1}$  на инфракрасном спектрометре (рис. 9).

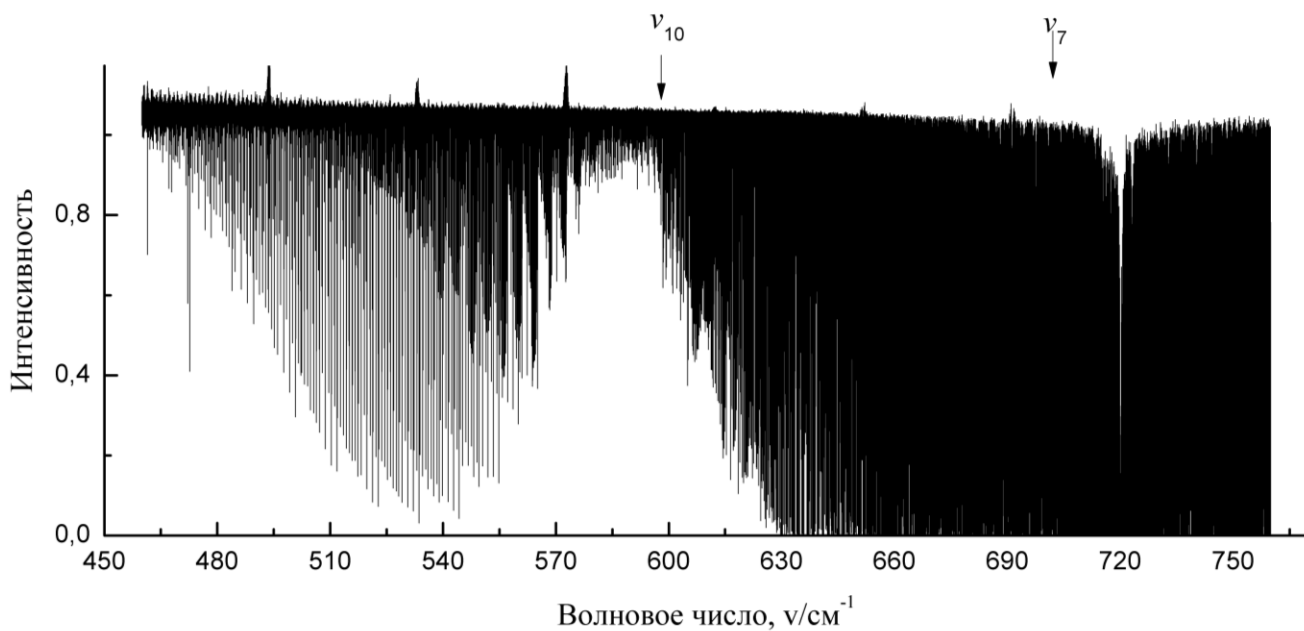


Рис. 9. Спектр молекулы  $C_2D_4$  в диапазоне 450-750  $cm^{-1}$ .

На рисунке 9 представлен спектр молекулы  $C_2D_4$  в диапазоне 450-750  $cm^{-1}$ , где показаны центры полос  $\nu_{10}$  и  $\nu_7$ . Явно выражена  $P$ -ветвь полосы  $\nu_{10}$ . Центр данной полосы расположен около 597,98  $cm^{-1}$ . Для наглядности высокого разрешения данного спектра на рисунке 10 представлен фрагмент  $P$ -ветви. Можно видеть ее четкую структуру.

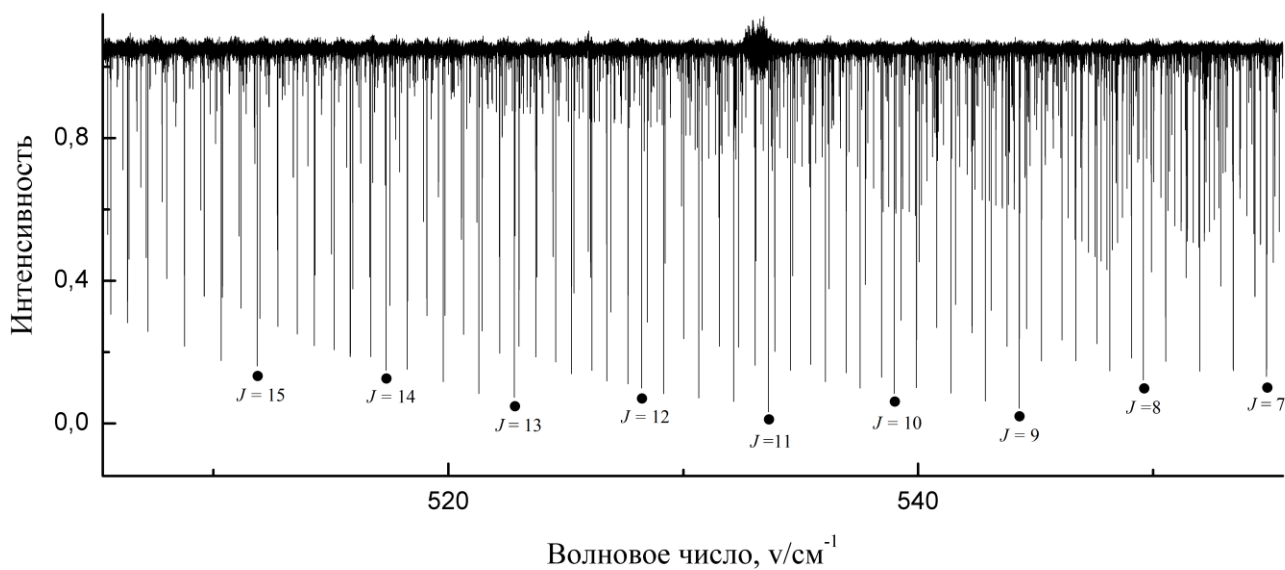


Рис. 10 Фрагмент хорошо разрешенной  $P$ -ветви полосы  $\nu_{10}$ .



В ходе анализа колебательно-вращательного спектра полосы  $\nu_{10}$  было проинтерпретировано более 2000 энергетических переходов с максимальным значением квантовых числах  $J_{\max} = 36$ ,  $K_a^{\max} = 22$ . Для интерпретации переходов использовался традиционный метод комбинационных разностей, описанный в одной из предыдущих глав. Вращательные энергии основного колебательного состояния были взяты из работы [26].

В качестве иллюстрации, в таблице 2 представлена небольшая часть найденных колебательно-вращательных переходов  $b$ -типа для полосы  $\nu_{10}$ . В последней колонке приведена разность между экспериментальным значением и теоретически рассчитанным.

### 3.2. Решение обратной спектроскопической задачи

В результате решения обратной спектроскопической задачи получено 9 параметров (см. Таблицу 3), описывающих вращательную структуру колебательного состояния ( $\nu_{10}=1$ ). Полученные параметры воспроизводят исходные данные с точностью, сравнимой с экспериментальной (среднеквадратичное отклонение не превышает  $\delta = 2,44 \cdot 10^{-4} \text{ см}^{-1}$ ).

Таблица 2. Фрагмент переходов, соответствующих полосе  $\nu_{10}$  молекулы  $\text{C}_2\text{D}_4$

J Ka Kc	J' Ka' Kc'	Положение линии	Пропускание	Номер спектра	$\delta \cdot 10^{-4}$
20 16 4	21 17 5	500.06025	48.0	IV	-7
27 13 14	28 14 15	500.52325	69.4	IV	-9
17 17 0	18 18 1	500.81382	29.6	IV	-7
22 15 7	23 16 8	500.85897	49.0	IV	-9
29 12 17	30 13 18	501.12608	83.4	IV	9
24 14 10	25 15 11	501.53261	62.6	IV	-6
31 11 20	32 12 21	501.65058	96.9	IV	9
19 16 3	20 17 4	501.65364	43.1	IV	7
26 13 13	27 14 14	502.19814	61.1	IV	-9
21 15 6	22 16 7	502.46037	40.6	IV	-9
28 12 16	29 13 17	502.81407	80.1	IV	9
23 14 9	24 15 10	503.17484	55.9	IV	-7

Таблица 2 (продолжение)

18 16 2	19 17 3	503.23380	37.7	IV	7
30 11 19	31 12 20	503.35989	89.9	IV	9
25 13 12	26 14 13	503.86116	56.5	IV	-8
20 15 5	21 16 6	504.05677	37.2	IV	-4
27 12 15	28 13 16	504.49365	74.8	IV	1
17 16 1	18 17 2	504.80051	31.3	IV	4

Таблица 3. Спектроскопические параметры полосы  $\nu_{10}$ 

Параметр	Значение, $\text{см}^{-1}$
$E$	593,341187(36)
$A$	2,44829196(51)
$B$	0,73504188(67)
$C$	0,5628809(75)
$\Delta_K \cdot 10^4$	0,204353(54)
$\Delta_{JK} \cdot 10^4$	0,02569(35)
$\Delta_J \cdot 10^4$	0,007950(88)
$\delta_K \cdot 10^4$	0,038845(15)
$\delta_J \cdot 10^4$	0,002337(59)

Значения в скобках обозначают доверительный интервал ( $1\sigma$  стандартная ошибка).

#### 4. Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение

##### 4.1. Определение возможных альтернатив проведения научных исследований

Альтернатив подобным исследованиям нет, за исключением исследований по схожей тематике, выполненных в научных лабораториях, являющихся нашими партнерами.

##### 4.2. Потенциальные потребители результатов исследования

В современном мире процедура оценки коммерческой ценности разработки относится к необходимому условию для поиска источников финансирования научного исследования и коммерциализации полученных результатов. Исследователь должен уделять этому значительное внимание с той целью, чтобы в полной мере проанализировать на каком этапе находится проект в данный момент и какие возможные перспективы следует ожидать в будущем.

Оценка позволит исследователю не только улучшать технические параметры, но и создавать конкурентоспособную разработку, отвечающую современным требованиям, а также значительно облегчает поиск потенциальных партнеров необходимых для успешного проведения научного исследования и как результат внедрение результатов научного исследования в промышленный оборот.

Основным результатом (продуктом) проведенного мной исследования являются: определение положения некоторых спектральных линий исследуемой молекулы, а также получение спектроскопических параметров. Полученные данные будут использоваться для пополнения как российских, так и международных баз данных (NIST). Последние, в свою очередь, широко

используются для решения многочисленных как теоретических, так и прикладных задач астрофизики, планетологии, атмосферной оптики, и т.д.

#### 4.2.1 SWOT-анализ

**SWOT** – Strengths, Weaknesses, Opportunities Threats (сильные, слабые стороны, возможности, угрозы) – представляет собой комплексный анализ научно-исследовательского проекта.

SWOT-анализ дает возможность определения и структурирования сильных и слабых стороны проводимого исследования, а также потенциальных возможностей и угроз. Достичь этого получается путем сравнения внутренних сил и слабостей проекта с возможностями, которые дает ему рынок. На основе SWOT-анализа можно сделать вывод о дальнейшем развитии научной работы, который в конечном итоге позволяет разумно распределить ресурсы по сегментам.

В целом, процедура проведения SWOT-анализа можно свести к заполнению матрицы, так называемой «матрицы SWOT-анализа». Для этого необходимо вносить сильные и слабые стороны проекта в соответствующие ячейки матрицы, это в свою очередь также помогает определить рыночные возможности и угрозы.

**Сильные стороны** проекта — то, в чем оно преуспело или какая-то особенность, предоставляющая дополнительные возможности. Сила может заключаться в имеющемся опыте, доступе к уникальным ресурсам, наличии передовой технологии и современного оборудования, высокой квалификации исследователей, достижении уникальных результатов, и т.п.

**Слабые стороны** проекта — это отсутствие чего-то важного для функционирования проекта или то, что пока не удастся по сравнению с другими проектами и поэтому ставит участников научной работы в неблагоприятное положение. В качестве примера слабых сторон можно привести недостаток финансирования, низкий уровень ресурсов или оборудования и т.п.

**Рыночные возможности** — это благоприятные обстоятельства, которые участники проекта могут использовать для получения преимущества. В качестве примера рыночных возможностей можно привести ухудшение позиций ваших конкурентов, резкий рост интереса в научном обществе к исследуемой проблеме, появление новых технологий производства вашей продукции и т.п. Следует отметить, что возможностями с точки зрения SWOT-анализа являются не все возможности, которые существуют на рынке, а только те, которые могут использовать участники проекта.

**Рыночные угрозы** — события, наступление которых может оказать неблагоприятное воздействие на исследования проекта. Примеры рыночных угроз: выход на рынок новых конкурентов, изменение курса валют и в следствии увеличение стоимости оборудования и т.п.

При использовании интерактивной матрицы (таблица 4) становится намного проще понять различные комбинации взаимосвязей областей SWOT. Полученную матрицу можно использовать в качестве одной из основ при оценивании возможностей стратегического выбора. Для анализа интерактивных таблиц удобно представить их в форме записи коррелирующих слабых сторон и возможностей, или сильных сторон и возможностей и т.д. в определенном виде: B1C1C2C3; B2C1C2C3. Каждая из записей представляет собой возможные пути реализации проекта. В таблице факторы помечают следующим образом: соответствие слабых сторон возможностям знаком минус «-»; соответствие сильных сторон возможностям знаком плюс «+»; при возникновении сомнений в выборе знака обозначается знаком «0».

Таблица 4. Интерактивная матрица работы

		Сильные стороны проекта					
		C1	C2	C3	C4	C5	C6
Возможности проекта	B1	+	+	+	-	+	0
	B2	0	+	+	+	+	+
	B3	0	+	+	+	+	+
	B4	+	+	+	+	+	+
	B5	+	+	+	+	+	+

Итоговая матрица по SWOT-анализу представлена в бакалаврской ВКР (таблица 5). Итоги SWOT-анализа учтены при проработке структуры работ, выполненных в рамках научно-исследовательского проекта.

Приведение анализа показало, что на этапе разработки технология имеет высокий шанс на коммерциализацию, в случае наличия интереса у партнеров и удачно выполненных исследованиях. Тем не менее, в случае затягивания по времени процедуры перехода разработки в стадию коммерциализации, не исключено снижение спроса на готовую технологию.

Таблица 5. SWOT-анализ

	<p><b>Сильные стороны научно-исследовательского проекта:</b>          С1. Наличие бюджетного финансирования          С2. Актуальность тематики          С3. Высокая точность полученных результатов          С4. Использование собственной разработки программного обеспечения          С5. Оригинальность решения поставленной задачи          С6. Наличие всех материалов для исследования</p>	<p><b>Слабые стороны научно-исследовательского проекта:</b>          Сл1. Сложность исследования          Сл2. Недостаток экспериментального оборудования          Сл3. Программное обеспечение с закрытым исходным кодом          Сл4. Узконаправленные исследования          Сл5. Долгое ожидание результатов спектроскопического анализа</p>
<p><b>Возможности:</b>          В1. Отсутствие конкурентных исследований по подобной тематике          В2. Интерес к подобным исследованиям со стороны иностранных партнеров          В3. Возможность появления новых методов анализа, расчета и моделирования          В4. Расширение лаборатории          В5. Высокая стоимость результатов исследования</p>	<ul style="list-style-type: none"> <li>– Возможность снижения стоимость производимого исследования и тем самым получение экологичности технологии</li> <li>– Продолжение расширения лаборатории</li> <li>– Сотрудничество с иностранными коллегами позволяет расширить область знаний, повысить квалификацию персонала, найти новых потенциальных потребителей результатов спектроскопии высокого разрешения.</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>– Нужно развивать новые методы исследования, для того чтобы уменьшить трудоёмкость работы.</li> <li>– Интерес зарубежных партнеров предоставляет доступ к коллективным исследованиям, доп. финансированию и доступ к большему количеству экспериментальных установок.</li> </ul>
<p><b>Угрозы:</b>          У1. Отсутствие спроса на результаты исследования          У2. Появление конкурирующих исследований          У3. Задержки финансирования          У4. Ограничение точности эксперимента          У5. Повышение издержек</p>	<p>Заявленная экономичность и энергоэффективность может быть не оправдана при отсутствии спроса на новые технологии и несвоевременном финансировании научного исследования. Хотя тематика исследований актуальна в настоящее время, и мы имеем оригинальные решения поставленной задачи молекулярной спектроскопии высокого разрешения.</p>	<p>Отсутствие необходимых экспериментальных данных и длительность периода исследований может привести к отсутствию спроса на новые данные. Поэтому мы должны развивать новые методы исследования. При необходимости можно стремиться к сотрудничеству с другими научными центрами.</p>

4.3. Планирование процесса управления НИТ: структура и график проведения, бюджет, риски и организация закупок

#### 4.3.1. Планирование научно-исследовательских работ

Для определения общего содержания работ, уточнения целей и разработки последовательных действий необходимо составить календарный график выполнения НИОКР.

Таблица 5. Календарный план ВКР

№ работ	Название	Длительность, дни	Дата начала работ	Дата окончания работ	Состав участников
1	Разработка задания на ВКР	2	18.01.2018	19.01.2018	Руководитель
2	Составление и утверждение задания	4	20.01.2018	23.01.2018	Руководитель
3	Выбор направления исследования и способов решения задач	6	25.01.2018	30.01.2018	Руководитель Студент
4	Подбор и изучение научно-технической литературы по теме	17	01.02.2018	17.02.2018	Студент
5	Проведение полуэмпирических исследований	63	19.02.2018	30.04.2018	Руководитель Студент
6	Анализ и обработка полученных результатов	9	04.05.2018	14.05.2018	Руководитель Студент
7	Оформление пояснительной записки	12	16.05.2018	28.05.2018	Студент
8	Подготовка к защите ВКР	17	30.05.2018	17.06.2018	Руководитель Студент

Календарный план представлен в виде диаграммы Ганта (таблица 6), которая представляет собой столбчатые диаграммы (гистограммы).



Представленные диаграммы показывают начало даты и окончания выполняемой работы, и представляют собой отрезки протяженные во времени с различной штриховкой (определяющей исполнителя работы).

Перевод длительности каждого этапа из рабочих в календарные дни, осуществляется при помощи следующей формулы:

$$T_{ki} = T_{pi} \cdot k_{кал}$$

где  $T_{ki}$  – продолжительность выполнения  $i$ -й работы в календарных днях;

$T_{pi}$  – продолжительность выполнения  $i$ -й работы в рабочих днях;

$k_{кал}$  – коэффициент календарности.

Коэффициент календарности определяется по следующей формуле:

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

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

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

$T_{пр}$  – количество праздничных дней в году.

В 2018 году 365 календарных дней, из них 52 выходных дня и 14 праздничных дней. Тогда коэффициент календарности равен:

$$k_{кал} = \frac{365}{365 - 52 - 14} = 1,22$$

Таблица 6. Временные показатели проведения научного исследования

№	Название работ	Трудоёмкость работ						Исполнители		T <sub>p</sub> , раб. дн.		T <sub>p</sub> , кал. дн.	
		t <sub>min</sub> , чел-дн.		t <sub>max</sub> , чел-дн.		T <sub>ож.</sub> , чел-дн.		P	С	P	С	P	С
		Р	С	Р	С	Р	С						
1	Разработка технического задания на ВКР	2	-	5	-	3,2	-	+	-	3,2	-	3,2	-
2	Составление и утверждение технического задания	3	-	5	-	3,8	-	+	-	3,8	-	4	-
3	Выбор направления исследования и способов решения задач	6	6	12	12	9,6	9,6	+	+	9,6	9,6	6	6
4	Подбор и изучение научно-технической литературы	-	12	-	16	-	14,8	-	+	-	14,8	-	17
5	Проведение полу-эмпирических исследований	-	50	-	63	-	55,2	-	+	-	55,2	-	71
6	Анализ и обработка полученных результатов	6	6	11	11	7,4	7,4	+	+	7,4	7,4	9	9
7	Оформление пояснительной записки	-	9	-	12	-	10	-	+	-	10	-	12
8	Подготовка к защите ВКР	5	18	10	17	7	23,4	+	+	3,8	13,2	5	17

Таблица 7. Календарный план-график проведения НИОКР

№	Вид работ	Исполните ль	Продолжительность выполнения работ																	
			январь			февраль			март			апрель			май			июнь		
			Декады (10 дней)																	
			1	2	3	1	2	3	1	2	3	1	2	3	1	2	3	1	2	
1	Разработка технического задания на ВКР	р		□																
2	Составление и утверждение технического задания	р		□																
3	Выбор направления исследования и способов решения задач	р,с		▬ ■																
4	Подбор и изучение научно-технической литературы по теме	с				■														
5	Проведение полу-эмпирических исследований	с							■	■	■	■	■	■						
6	Анализ и обработка полученных результатов	р,с																▬ ■		
7	Оформление пояснительной записки	с																	■	
8	Подготовка к защите ВКР	с																	■	□

р – руководитель - □

с – студент - ■

#### 4.3.2. Бюджет научного исследования

При планировании бюджета научного исследования следует помнить, что необходимо обеспечить полное и достоверное отражение всех видов запланированных расходов, требуемых при выполнении научного исследования. При процедуре формирования бюджета, запланированные расходы следует группировать по статьям (учет материальных затрат НТИ, затрат на специальное оборудование для научных (экспериментальных) работ,

основную заработную плату исполнителей темы и другие статьи по затратам), которые представлены в таблице (таблица 8).

Таблица 8. Группировка затрат по статьям

№ п/п	Сырье, материалы (за вычетом возвратных отходов), покупные изделия	Основная заработная плата	Отчисления на соц. нужды	Накладные расходы	Итого Плановая себестоимость НИР
1	550	109394	29645	586,96	140176

Сырьё, материалы, покупаемые изделия и полуфабрикаты (за вычетом отходов). В эту статью включают затраты на закупку всех видов материалов, комплектующих изделий и полуфабрикатов, нужных для выполнения всех задач по данной теме. Количество необходимых материальных ценностей определяют по нормам расхода.

В рамках бакалаврской работы были проделаны только теоретические исследования по этой причине материальные затраты, были реализованы исключительно на покупку канцелярских товаров (таблица 9).

Таблица 9. Сырье, материалы, комплектующие изделия и покупные полуфабрикаты

Материал	Единица материала	Цена, руб/ед.	Количество материала	Затраты, руб.
Бумага	упаковка	300	1	300
Пишущие предметы	Шт.	50	5	250
Всего за материалы				550
Итого				550

### 4.3.3. Расчет основной заработной платы

В данной статье содержится основная заработная плата работников, непосредственно вовлеченных в процесс выполнения проекта, (включая премии, доплаты) и дополнительная заработная плата.

$$C_{зп} = Z_{осн} + Z_{доп}, \quad (29)$$

здесь  $Z_{осн}$  – основная заработная плата;  $Z_{доп}$  – дополнительная заработная плата.

Основную заработную плату ( $Z_{осн}$ ) руководителя (лаборанта, инженера) от предприятия (при наличии руководителя от предприятия) можно рассчитать при помощи следующей формулы:

$$Z_{осн} = Z_{дн} \cdot T_{раб}, \quad (30)$$

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:

$$Z_{дн} = \frac{Z_m \cdot M}{F_d}, \quad (31)$$

где  $Z_m$  – месячный должностной оклад работника, руб. (окладом студента выступает стипендия, 9893 руб.);  $M$  – количество месяцев работы без отпуска в течение года:

при отпуске в 24 раб. дня  $M=11,2$  месяца, 5-дневная неделя;

при отпуске в 48 раб. дней  $M=10,4$  месяца, 6-дневная неделя;

$F_d$  – действительный годовой фонд рабочего времени научно-технического персонала, раб. дн. (таблица 10).

\

Таблица 10. Баланс рабочего времени

Показатели рабочего времени	Руководитель	Студент
Календарное число дней	365	365
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	251	251

Месячный должностной оклад:

$$Z_m = Z_b k_p = 43763 \text{ руб.} \quad (32)$$

где  $Z_b$  – базовый оклад, руб;  $k_p$  – районный коэффициент, равный 1,3.

Таблица 11. Расчет основной заработной платы

Исполнители	$Z_b$ , руб.	$k_p$	$Z_m$ , руб.	$Z_{дн}$ , руб.	$T_{раб}$ раб.дн.	$Z_{осн}$ , руб.
Руководитель	33664	1,3	43763	1813	28	50764
Студент	9893	1,3	12860	533	110	58630

#### 4.3.4. Отчисления на социальные нужды

В данной статье приведены отчисления во внебюджетные фонды:

$$C_{внеб} = k_{внеб} \cdot (Z_{осн} + Z_{доп}) = 0,271 \cdot (50764 + 58630) = 29645 \text{ руб.} \quad (33)$$

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

#### 4.3.5. Накладные расходы

В этой статье включены затраты на менеджмент и хозяйственное содержание, которые можно отнести напрямую к конкретной теме. Кроме того, сюда относят затраты на содержание, эксплуатацию и ремонт оборудования, производственных инструментов и инвентаря, зданий, сооружений и др. В определение этих затрат принимают как правило, что её размер составляет 70 -

90 % от основной суммы заработной платы научно-производственного персонала научно-технической организации.

Тогда как накладные расходы составляют 80-100% от суммы основной и дополнительной заработной платы, работников, непосредственно участвующих в выполнении темы.

Расчеты накладных расходов проводят по следующей формуле, рассмотрим в качестве примера затраты на электроэнергию при проведении полуэмпирических исследований:

$$C_{\text{накл}} = (W_{\text{Л}} + W_{\text{К}}) \cdot \text{Ц}_{\text{эл}} \cdot T_{\text{р,ч}} = (160 \text{ Вт} + 300 \text{ Вт}) \cdot 5,8 \text{ р/кВт} \cdot 220 \text{ ч} = 586,96 \text{ р.}, \quad (7)$$

где  $k_{\text{накл}}$  – коэффициент накладных расходов.

## 5. Социальная ответственность

### 5.1. Анализ выявленных вредных факторов производственной среды

#### 5.1.1. Микроклимат

Отклонение показателей микроклимата в помещении. Микроклиматические параметры – это сочетание температуры, относительной влажности и скорости движения воздуха. Эти параметры в значительной степени влияют на функциональную деятельность человека, его самочувствие, здоровье, а также и на надёжность работы вычислительной техники. С целью создания нормальных условий для персонала установлены нормы производственного микроклимата. Требования, предъявленные к воздуху, т.е. оптимально допустимые показатели микроклимата в производственном помещении для работ различной категории тяжести и в соответствии с периодом года, указаны в санитарных нормах проектирования промышленных предприятий СН 245-71 и ГОСТ 12.11.005-88 ССБТ «Общие санитарно-технические требования к воздуху рабочей зоны».

Таблица 12. Требования к показателям для рабочей зоны

Период года	Температура, °С		Относительная влажность, %		Скорость движения, м/с	
	Оптимальная	Допустимая	Оптимальная	Допуст., не более	Оптим., не более	Допуст.
Холод.	22-23	17-21	40-60	15-75	0,2	0,1-0,5
Тепл.	23-25	15-28	40-60	20-80	0,2	0,2-0,5

Оптимально допустимые показатели приведены в таблице 12 в нашем случае для рабочей зоны, относящейся к работам категории – 2а, т.е. работы, которые связаны с постоянной ходьбой, выполняемые стоя или в сидячем положении.



При высоких температурах воздуха в помещении, кровеносные сосуды кожи расширены, в результате повышается приток крови к поверхности тела, и соответственно повышается испускание тепла в окружающую среду. При низкой температуре воздуха в помещении реакция человеческого организма отличается: кровеносные сосуды кожи сужены, кровь приливает к поверхности тела, в результате замедляется и уменьшается теплоотдача. Таким образом, для нормального самочувствия человека необходимы некоторые определенные сочетания температуры, влажности и скорости потоков воздуха в рабочей зоне.

При высокой влажности ( $\varphi > 80\%$ ) затрудняется терморегуляция человеческого организма, из-за снижения испарения потоотделений, тогда как при низкой влажности ( $\varphi < 20\%$ ) вызывается пересыхание слизистых оболочек дыхательных путей.

Для оснащения оптимально допустимыми показателями микроклимата в холодный период года следует использовать средства защиты для остекленной поверхности оконных проемов в рабочей зоне, чтобы не допустить сильного понижения температуры, более того необходимо устанавливать систему отопления. В теплый период года необходимо обеспечивать защиту от прямого попадания солнечного излучения. Так же по возможности следует установить кондиционер, основная задача которого сводится к поддержке оптимальных параметров воздуха в заданных пределах, для обеспечения стабильности состояния работников и приемлемых для них условий.

### 5.1.2. Освещенность

Недостаточное освещение низкого качества способствует утомляемости зрения, что способствует его снижению, а порой и ведет к слепоте. Недостаточное освещение участков рабочих мест может стать причиной травматизма.

Естественное освещение источником, которого служит поток энергии солнца, является наиболее гигиеничным. Тем не менее, его, как правило,

недостаточно для нормальной работы в лаборатории, поэтому на рабочих местах оказываются, задействованы и источники искусственного освещения. Они могут быть обеспечены по средствам использования люминесцентных ламп ЛВ (белого цвета) мощностью 20, 40, 80 Вт. На рабочих местах с искусственным источником освещения установлена допустимая освещенность, в соответствии с действующей санитарной нормой и правил СНиП 23-05-95.

«Гигиенические требования к естественному, искусственному и совмещенному освещению жилых и общественных зданий. СанПиН 2.2.1/2.1.1.1278-03» устанавливают минимально допустимую освещенность рабочей поверхности в производственных помещениях в соответствии с видом деятельности. Согласно СНиП 23-05-95 зрительную работу делят на 8 разрядов в зависимости от размера объекта и условий зрительной работы. Примем четвертый разряд зрительной работы (средней точности). Для зрительной работы четвертого разряда приемлемые значения минимальной освещенности рабочей поверхности в производственном помещении в согласии со СНиП 23-05-95 отражены в таблице 13. На рабочей поверхности необходимо отсутствие резких теней, наличие которых создаёт неравномерно освещенные рабочие поверхности и способствует искажению размеров и форм объектов различия.

Таблица 13. Нормирование значения освещенности на рабочих местах производственных помещений при искусственном освещении

Характер зритель. 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
			Большой	Темный	400	200
		г	Средний	Светлый	300	150
			Большой	Светлый	300	150
			Большой	Средний	300	150

В соответствии со СНиП 23-05-95 газоразрядные лампы, принято использовать в качестве основного источника света. Главными преимуществами подобных ламп в сравнении с лампами накаливания это высокая светоотдача – 40–110 лм/Вт, более длительный срок эксплуатации (до 8000–12000 ч), получение светового потока с необходимым спектром излучения. Так же, люминесцентные лампы, рекомендованы для применения в производственных помещениях, обеспечивая необходимый уровень освещения, сохраняя зрение, снижая утомляемость, повышая работоспособность. С другой стороны, пульсацию светового потока, слепящее действие – все следует учесть при производственном процессе. С целью снижения коэффициента пульсации люминесцентных ламп их необходимо подключать в трехфазные электрические сети.

Метод коэффициента светового потока позволяет рассчитать общий равномерный световой поток искусственного освещения горизонтальной рабочей поверхности, учитывает световые потоки, отражённые от потолка и стен. Длина помещения  $A = 5,3$  м, ширина  $B = 4,7$  м, высота = 2,5 м. Высота

рабочей поверхности над полом  $h_p = 1$  м. В соответствии со СНиП 23-05-95 учитывая разряд зрительной работы, следует обеспечить освещенность не меньше чем  $E=300$  лк.

Площадь помещения:  $S = A \times B = 24,91 \text{ м}^2$ .

Недавно побеленные стены с окнами обладают коэффициентом отражения, без штор  $\rho_c=50\%$ , для потолка недавно побеленного  $\rho_{II}=70\%$ . При малом выделении пыли в помещении коэффициент запаса равен  $K_3 = 1,5$ . Для люминесцентных ламп характерен коэффициент неравномерности  $Z= 1,1$ .

Для того чтобы обеспечить освещение комнаты, с выше указанными параметрами, выберем лампу белого света ЛБ, со световым потоком  $\Phi_{ЛБ} = 2800$  Лм. Светильники длина которого 1227 мм, а ширина – 265 мм. имеет две люминесцентные лампы типа ОДОР-2-40, мощность каждой такой лампы 40 Вт.

Оптимальное расположение светильников определяется интегральным критерием, то есть величиной  $\lambda$ , значение которой для нашего случая лежит в диапазоне 1,1–1,3. При минимальном значении  $\lambda=1,1$  и расстоянии светильников от перекрытия  $h_c = 0,3$  м.

Определить высоту светильника над рабочей поверхностью можно по формуле:

$$h = H - h_{pn} - h_c = 1,55 \text{ м}.$$

Расстояние между соседними светильниками определяют по формуле:

$$L = \lambda \cdot h = 1,705 \text{ м}.$$

Число рядов светильников в помещении:

$$Nb = B / L = 1,58 \approx 2$$

Число светильников в ряду:

$$Na = A / L = 1,78 \approx 2.$$

Расстояние от крайних светильников до стены определяется по формуле:

$$l = L / 3 = 0,568 \text{ м}$$

На рисунке 11 изображен план помещения и размещения светильников с люминесцентными лампами.

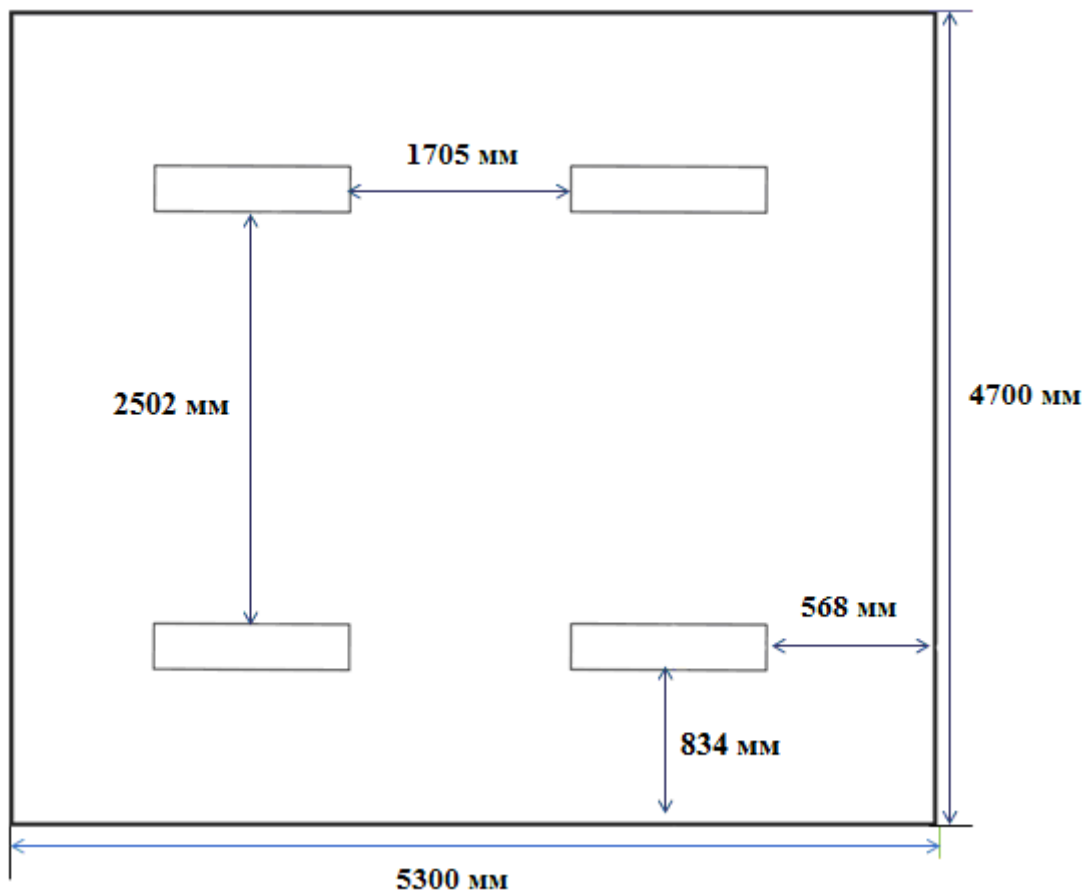


Рисунок 11. План помещения и размещения светильников с люминесцентными лампами

Индекс помещения определяется по формуле:

$$i = \frac{A \cdot B}{h(A + B)} = \frac{5,3 \cdot 4,7}{1,55 \cdot (5,3 + 4,7)} = 1,61.$$

Коэффициент использования светового потока показывает, какая часть светового потока ламп попадает на рабочую поверхность. Для светильников типа ОДОР с люминесцентными лампами при  $\rho_{\text{П}} = 70\%$ ,  $\rho_{\text{С}} = 50\%$  и индексе помещения  $i = 1,61$  равен  $\eta = 0,47$ .

Необходимый световой поток группы люминесцентных ламп светильника определяем по формуле:

$$\Phi_n = \frac{E \cdot A \cdot B \cdot K_3 \cdot Z}{N \cdot \eta} = \frac{300 \cdot 5,3 \cdot 4,7 \cdot 1,5 \cdot 1,1}{8 \cdot 0,47} = 3079 \text{ лм}.$$

Делаем проверку для необходимого условия:

$$-10\% \leq \frac{\Phi_{ЛД} - \Phi_{П}}{\Phi_{ЛД}} \cdot 100\% \leq 20\%,$$

$$\frac{\Phi_{ЛД} - \Phi_{П}}{\Phi_{ЛД}} \cdot 100\% = \frac{2800 - 3079}{2800} \cdot 100\% = -9\%.$$

Таким образом, полученный световой поток светильника соответствует пределам необходимого диапазона.

### 5.1.3. Шум

Наличие сильного шума вызывает проблемы с распознаванием цветовых сигналов, понижает скорость восприятия цвета, остроту зрения, может вызвать зрительную дезадаптацию, а также способствует нарушениям восприятия визуальной информации и понижает способность выполнения координированных движений. Производительность труда при этом уменьшается на 5 – 12%. Длительное шумовое воздействие с уровнем звукового давления 90 дБ понижает производительность труда на 30 – 60%. 75 Согласно ГОСТ 12.1.003-83 [29] с изм. 1999 г. эквивалентный уровень звука не должен превышать 50 дБА. В таблице 14 приведены допустимые уровни звукового давления на рабочем месте.

Таблица 14. Допустимы уровни звукового давления на рабочем месте

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

При значениях выше допустимого уровня необходимо предусмотреть СКЗ и СИЗ.

СКЗ:

- устранение причин шума или существенное его ослабление в источнике образования;
- изоляция источников шума от окружающей среды средствами звуко- и виброизоляции, звуко- и вибропоглощения;
- применение средств, снижающих шум и вибрацию на пути их распространения (в качестве материала можно использовать минеральную вату, гипсокартон, стекловату, базальтовую вату, древесное волокно, вспененный полиэтилен и др.);

СИЗ:

- применение спецодежды, спецобуви и защитных средств органов слуха: наушники, беруши, антифоны.

Наибольший уровень шума в нашей лаборатории у работающего кондиционера, составляющий 40 дБА. В рабочем помещении, по замерам, уровень звука составляет 25-40 дБА, в зависимости от того, работает кондиционер или нет. Соответственно уровень звука находится в номе. Для дальнейшего его снижения можно предложить следующие мероприятия: – применить звукопоглощающее покрытие стен; – экранировка рабочего места; – установка менее шумного кондиционера.

#### 5.1.4. Электромагнитные поля

Источниками электромагнитных излучений являются электрические сигналы цепей при работе персональных электронно-вычислительных машин. При воздействии электромагнитных полей незначительной напряженности получаемые нарушения в организме человека носят обратимый характер. При воздействии полей, имеющих напряжённость выше предельно допустимого

уровня, развиваются нарушения со стороны нервной и сердечнососудистой систем, органов пищеварения и некоторых биологических показателей крови. Наиболее мощным источником электромагнитных полей в помещении являются катушки отклоняющих систем, находящихся около цокольных частей электронно-лучевых трубок мониторов это электромагнитное поле имеет сложный спектральный состав в диапазоне частот от 0 Гц до 1000 МГц.

При наличии в помещении электронно-вычислительных машин, дополнительной аппаратуры и систем электропитания способствует созданию сложной картины электромагнитного поля. Очевидно, что электромагнитная картина помещения с электронно-вычислительными машинами сложная и характеризуется неравномерным распределением полей, а уровни энергии достаточно высокие, что приводит к опасности их действия для биологических систем. В таблице 15 приведены диапазоны возможных значений ЭМП.

Таблица 15. Диапазоны возможных значений ЭМП, измеренных на рабочих местах пользователей ПК

	5 Гц-2 кГц	2 – 400 кГц
Напряженность переменного электрического поля, В/м	1 – 35	0,1 – 1,1
Индукция переменного магнитного поля, Тл	6 - 770	1 - 32

При увеличении времени работы на персональных электронно-вычислительных машинах соотношение среди пользователей здоровых и больных резко возрастает. Влияние электромагнитного излучения на организм пользователя оказывает значительные изменения гормонального состояния, также происходят специфические изменения биотоков головного мозга при работе даже в течении 45 минут. У сотрудниц эти эффекты проявляются наиболее ярко и устойчиво. Однако, у некоторой группы лиц (порядка 20%)



отрицательной реакции функционального состояния организма не наблюдалось при длительности работы на электронно-вычислительных машинах менее 1 часа. На основе этой информации были сделаны выводы о возможности формирования специфических профессиональных критериев отбора персонала.

Безопасность здоровья пользователей регламентирована в Российской Федерации, действующими санитарным нормами и правилами " Гигиенические требования к видеодисплейным терминалам, персональным электронно-вычислительным машинам и организации работ" СанПиН 2.2.2.542-96. Целью санитарных норм является определение нормированных величин факторов воздействия, чтобы причиняемый вред был наименьшим и обеспечение комфортных условий труда. Предельно допустимые уровни, генерируемого монитором электромагнитного поля и поверхностного электростатического потенциала установлены СанПиН 2.2.2.542-96 и приведены в таблице 16.

Таблица 16. ПДУ электромагнитного поля монитора компьютера

Вид поля	Диапазон частот	Единица измерения	ПДУ
Магнитное	5 Гц-2 кГц	нТл	250
	2 – 400 кГц		25
Электрическое	5 Гц-2 кГц	В/м	25
	2 – 400 кГц		2,5

Основные предлагаемые средства защиты это фильтры для экранов мониторов, используя их для ограничения действия вредных факторов. А также способствует улучшению эргономических параметров экрана монитора и приводит к понижению излучения в направлении пользователя.

Защитные фильтры для экрана монитора разделяют на 2 главные группы:

1. защитные фильтры, улучшающие эргономические параметры дисплея и ослабляющие инфракрасное, ультрафиолетовое излучения, но не влияющие на электромагнитные параметры;

2. защитные фильтры, улучшающие эргономические параметры дисплея, ослабляющие инфракрасное, ультрафиолетовое излучения, ослабляющие электростатическое поле и переменное электрическое поле.

**СКЗ и СИЗ.** Одним из распространенных средств защиты от воздействия статического электричества является уменьшение генерации электростатических зарядов или их отвод с наэлектризованного материала, что достигается путем заземления металлических электропроводных элементов оборудования, увеличения поверхностей и объемной проводимости диэлектриков, установки нейтрализаторов статического электричества (индукционных, высоковольтных, жидких и др.).

Эффективным средством защиты является увеличение относительной влажности воздуха до 65-75 %, когда это возможно по условиям технологического процесса.

В качестве средств индивидуальной защиты применяют антистатическую обувь, антистатический халат, заземляющие браслеты.

## 5.2. Анализ выявленных опасных факторов производственной среды

### 5.2.1. Электробезопасность

Комната, в которой расположена лаборатория, является учебной аудиторией. Это связано с тем, что работа, которую выполняют сотрудники лаборатории, является теоретической. Для выполнения научных исследований сотрудникам требуется только стационарный компьютер или ноутбук. Лаборатория относится к помещению без повышенной опасности, так как в данном помещении отсутствует повышенная опасность поражения электрическим током (т.е. отсутствуют условия, создающие повышенную или особую опасность). Помещение сухое, хорошо отапливаемое, помещение с токонепроводящими полами, с температурой 18—20°, с влажностью 40—50%.

Выполнение организационных и технических мероприятий при работе с электроустановками является очень важным моментом, необходимым для избегания электротравматизма, также для этого разумно использовать средства защиты, к которым можно отнести: электрическую изоляцию токоведущих частей, защитные заземления и отключения, электрические разделения сетей. Эти средства защиты позволяют обеспечивать защиту работников от прикосновений к токоведущим частям, от опасности переходов напряжений к нетоковедущим частям и от шагового напряжения.

Защитным заземлением называют соединение с землей металлических нетоковедущих частей, которые могут оказаться под напряжением (ГОСТ 12.1.009 – 2009). Для защиты человека от поражений электрическим током, на защитное заземление накладывают ряд определенных требований, описанных в ПУЭ и ГОСТ 12.1.030 – 81 “ССВТ. Электробезопасность. Защитное заземление. Зануление”. Приведенные в этих источниках требования варьируются в зависимости от напряжений электроустановок и мощностей источника питания.

Средства защиты могут быть такие как:

1. электрическая изоляция токоведущих частей;
2. защитное заземление и отключение;
3. электрическое разделение сети.

К СИЗ относятся:

1. диэлектрические перчатки,
2. изолирующие и измеряющие электроэнергию клещи,
3. инструменты с изолирующими рукоятками,
4. эффективные штанги.

Используя эти средства можно обеспечивать защиту людей от прикосновения к токоведущим частям, от опасности перехода напряжения к металлическим нетоковедущим частям, от шагового напряжения. Известны следующие номиналы безопасности для электрического тока  $I_a < 100$  мА, напряжения  $U < 36$  В, сопротивления заземления  $R_{\text{заземления}} < 4$  Ом. Это

максимально допустимые значения величин, выше которых безопасность жизнедеятельности человека находится под значительной угрозой.

Также следует уделять особое внимание к защите от статического электричества. С целью его понижения можно применять специальные покрытия полов, которые могут быть выполнены, например, из антистатического поливинилхлоридного линолеума. Есть и другие методы защиты, такие как нейтрализация зарядов ионизированным воздухом.

Рабочая среда (сырость, высокая температура, токопроводящая пыль, едкие пары и газы, токопроводящие полы и т.д.) могут оказывать в той или иной степени менять степень опасности поражения током. Проектируя способы и средства защиты от поражений электрического тока, принимают во внимание безопасные значения тока при определенной длительности и пути его прохождения через тело в соответствии с ГОСТ 12.1.038-82. Допустимый безопасный ток в случае длительного воздействия принят в 1 мА, с продолжительностью воздействия до 30 с – 6 мА.

#### 5.2.2. Факторы пожарной и взрывной природы

Источником пожаровзрывоопасности в лаборатории может быть любой электроприбор. Во время работы с электроприбором не исключены оплавления изоляционных проводов, что может стать причиной короткого замыкания, перегрузки электронной схемы, которая, перегреваясь, сгорает с испусканием искр.

Пожарную опасность помещений подразделяют на А,Б,В,Г,Д категории. Нашу лабораторию в соответствии с НПБ 105-03 можно отнести к В категории, т.к. в помещении присутствуют деревянные столы, оконные рамы.

Что касается степени огнестойкости то лабораторию можно определить как огнестойкую 1-й степени по СНиП 21-01-97 (постройка сконструирована из кирпича, который 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 межполюсного пространства.

К первичным средствам пожаротушения при ликвидации пожара на ранней стадии относят: водопровод пожарный, огнетушители, сухой песок, асбестовые одеяла и др. В корпусе пожарные краны установлены в коридорах, на лестничных площадках, у входов. Ручные углекислотные огнетушители размещают в помещении.

Для устранения причин возникновения и локализации пожаров в помещении лаборатории должны проводиться следующие мероприятия:

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

Пожарная безопасность обеспечивается наличием огнетушителей:

1. Углекислотные огнетушители (ОУ-2). Углекислотные огнетушители предназначены для тушения загораний веществ, горение которых не может происходить без доступа воздуха, загораний электроустановок, находящихся под напряжением не более 1000В. Рекомендуется периодически проверять массу заряда - не реже одного раза в два года. Преимуществом Углекислотных огнетушителей, является то, что они не оставляют следов тушения, т.к. двуокись углерода полностью испаряется. Эта особенность огнетушителей углекислотных не портит при тушении электронное оборудование, приборы и

механизмы, а также и само охраняемое помещение и определяет их специфику использования

2. Огнетушитель водо-пенный ОВП-10 (А и В): Первичные средства пожаротушения. Огнетушитель водо-пенный предназначен для тушения возгораний твердых, тлеющих материалов органического происхождения (дерево, бумага, уголь и т.д.) - класс пожара А и жидкостей или твердых тел, превращающихся в жидкости (нефтепродукты, масла, краски и т.п.) - класс пожара В. Основным достоинством огнетушителей водо-пенных является продолжительное время работы, превышающее время работы других типов огнетушителей. По истечении 1 года хранения водные растворы зарядов выборочно должны проверяться на кратность пенообразования

3. Порошковые огнетушители (ОП-2): Огнетушители ОП обеспечивают подачу воздушно-механической пены. Огнетушащий состав - раствор пенообразователя. Порошковые огнетушители используются в качестве первичного средства тушения загорания пожаров класса А (твердых веществ), В (жидких веществ), С (газообразных веществ) и электроустановок, находящихся под напряжением до 1000 В. Огнетушители не предназначены для тушения загораний щелочных и щелочноземельных металлов и других материалов, горение которых может происходить без доступа воздуха. Перезарядка - один раз в год. Применение для тушения электроустановок, находящихся под напряжением не допускается.

Согласно требованиям, в офисе необходимо вести журнал регистрации противопожарного инструктажа, инструкцию о мерах пожарной безопасности и инструкцию о порядке действий персонала при пожаре. Сотрудник, ответственный за пожарную безопасность, должен иметь аттестацию учебного центра МЧС.

Здание должно соответствовать требованиям пожарной безопасности, а именно, наличие охранно-пожарной сигнализации, плана эвакуации, порошковых или углекислотных огнетушителей с поверенным клеймом,

табличек с указанием направления к запасному (эвакуационному) выходу (рисунок 12).

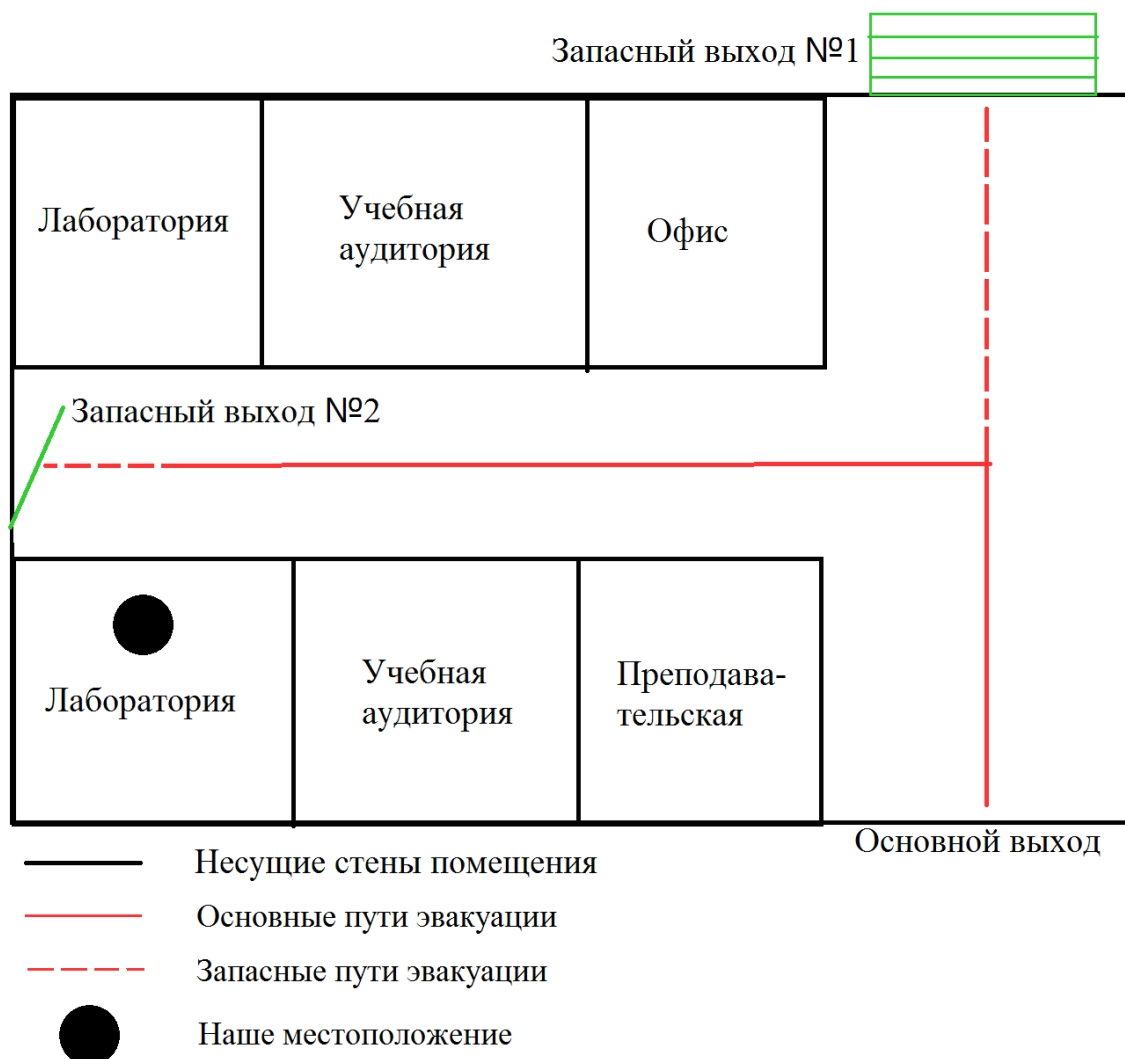


Рисунок 12. План эвакуации из лаборатории

### 5.3. Охрана окружающей среды

Лаборатория является не производственной, а это означает, что 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 на пластик, стекло, макулатура и алюминий.

Переработка твердых отходов, образующихся при утилизации бытового мусора, осуществляется с использованием физических, физико-химических и химических способов, в основе которых лежат видовая сепарация и последующая переработка по специальным технологиям разделенных по видам отходов с получением вторичных материальных ресурсов.

Часть отходов, не подлежащих утилизации по технологическим или экономическим причинам, может сжигаться с получением энергетических ресурсов. При сжигании отходов необходимо обеспечивать многостадийную очистку продуктов горения до требований государственных санитарных норм.

При захоронении не утилизируемых и негорючих отходов на полигонах твердых бытовых отходов (ТБО) также необходимо руководствоваться принятыми санитарными нормами, учитывая их токсичность, пожароопасность и допустимые нормы для совместного захоронения с ТБО.

Например, метод утилизации люминесцентных источников света начинается с их сбора и последующей транспортировки на предприятия, которые занимаются демеркуризацией. На практике использованные лампы всех типов должны сдаваться в пункты приема подобных отходов.

Производственные организации и коммерческие структуры обязаны заключать договоры с переработчиками дневных источников освещения.

#### 5.4. Защита в случае ЧС

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 диверсия.

Для Сибири в зимнее время года характерны морозы и метели. В результате порывов ветра могут быть обрывы линий электропитания, из-за чего возможны перебои в электроснабжении; перегрузки, которые могут стать



причиной пожара. Для предотвращения подобных ситуаций необходима организация системы аварийного электропитания, по возможности проведение линии электроснабжения под землей. Низкие температуры могут привести к авариям систем теплоснабжения. В случае заморозки труб должны быть предусмотрены запасные обогреватели. Их количества и мощности должно хватать для того, чтобы работа на производстве не прекратилась.

В последнее время, в связи с внешней политикой страны, возможны проявления диверсии. Угрозы могут быть как ложными, так и действительными, поэтому необходимы меры предосторожности по этому поводу. В качестве мер безопасности могут быть приняты следующие действия – установка системы видеонаблюдения и круглосуточной охраны, сохранение конфиденциальной информации о охранной системе. Необходимо так же проводить информирование должностных лиц и тренировки по отработке действий на случай экстренной эвакуации.

### 5.5. Промышленная санитария

Задачами промышленной санитарии является охрана здоровья трудящихся и оздоровление условий труда. Это достигается устройством вентиляции, комнат отдыха, поддержанием чистоты и порядка, нормальной температуры (16-18°) в помещениях, обеспечением хорошим естественным и искусственным освещением. Кроме того, в задачи промышленной санитарии входит обеспечение рабочих столовыми, бесплатным лечением, домами отдыха, санаториями и т. д.

Большое значение для сохранения здоровья и повышения производительности труда имеет также личная гигиена рабочего. Под личной гигиеной рабочего понимаются меры сохранения здоровья, предупреждения и устранения условий, вредно отражающихся на здоровье. Утомление в зависимости от условий труда может наступать быстрее или медленнее.

В результате продолжительной работы человек утомляется. Короткие перерывы и отдых во время работы предупреждают наступление утомляемости. Если рабочий работает стоя, необходимо отдыхать сидя; тот, кто работает сидя, должен отдыхать стоя. При работе необходимо также время от времени менять положение корпуса. Если это не делать, то у рабочего постепенно может развиваться боковое искривление позвоночника и сутулость, а иногда и сгорбленность. Для лучшего восстановления сил и для борьбы с утомляемостью и сутулостью рекомендуется заниматься физической культурой. Утренняя зарядка - необходимое условие борьбы с утомляемостью. Кроме этого, следует заниматься спортом.

#### 5.6. Правовые и организационные вопросы обеспечения безопасности

1. СН 245-71. Санитарные нормы проектирования промышленных предприятий.
2. ГОСТ 12.11.005-88. Общие санитарно-технические требования к воздуху рабочей зоны.
3. ГОСТ 12.1.003-83. Шум. Общие требования безопасности.
4. СН 2.2.4/2.1.8.562-96. Шум на рабочих местах, в помещениях жилых, общественных зданий и на территории жилой застройки»
5. СНиП 23-05-95. Естественное и искусственное освещение.
6. СанПиН 2.2.1/2.1.1.1278-03. Гигиенические требования к естественному, искусственному и совмещенному освещению жилых и общественных зданий.
7. СанПиН 2.2.2.542-96. Гигиенические требования к видеодисплейным терминалам, персональным электронно-вычислительным машинам и организации работ.
8. ГОСТ 12.1.009 – 2009. Система стандартов безопасности труда. Электробезопасность. Термины и определения

9. ГОСТ 12.1.030 – 81. Электробезопасность. Защитное заземление. Зануление.

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

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

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

## Заключение

В представленной работе описаны результаты проведенного анализа колебательно-вращательного спектра высокого разрешения молекулы  $C_2D_4$  в диапазоне  $450-750\text{ см}^{-1}$ . Исследуемый спектральный диапазон содержит фундаментальную полосу  $\nu_{10}$ . В результате анализа экспериментально зарегистрированного спектра было проинтерпретировано более 1000 колебательно-вращательных переходов. Данный диапазон спектра высокого разрешения молекулы  $C_2D_4$  был зарегистрирован впервые. А также фундаментальная полоса  $\nu_{10}$  была проинтерпретирована впервые в силу своей слабой интенсивности. Максимальные значения для квантовых переходов составляют  $J_{\max} = 36$  и  $K_a^{\max} = 22$ .

Полученные из эксперимента данные использовались в варьировании спектроскопических параметров. Данный набор параметров позволяет воспроизводить исходные экспериментальные колебательно-вращательные энергии с точностью  $\delta = 2,44 \cdot 10^{-4}\text{ см}^{-1}$ .

## Список используемой литературы

1. Flaud J-M, Lafferty WJ, Sams R, Malathy Devi V. High resolution analysis of the ethylene-1-<sup>13</sup>C spectrum in the 8.4-14.3  $\mu\text{m}$  region. *J Mol Spectrosc* 2010;259:39-45.
2. Tan Tl, Lebron GB. The  $\nu_{12}$  band of ethylene-1-<sup>13</sup>C ( $^{13}\text{C}^{12}\text{CH}_4$ ) by high-resolution FTIR spectroscopy. *J Mol Spectrosc* 2010;261:63-7.
3. Tan Tl, Lebron GB. High-resolution infrared analysis of the  $\nu_7$  band of cis-ethylene-d<sub>2</sub> (cis – C<sub>2</sub>H<sub>2</sub>D<sub>2</sub>). *J Mol Spectrosc* 2010;261:87-90.
4. Lebron GB, Tan TL. High-resolution FTIR. measurement and analysis of the  $\nu_3$  band of C<sub>2</sub>H<sub>3</sub>D. *J Mol Spectrosc* 2010;261:119-23.
5. Avila G, Carrington Jr. T. Using a pruned basis, a non-product quadrature grid, and the exact Watson normal-coordinate kinetic energy operator to solve the vibrational Schrödinger equation for C<sub>2</sub>H<sub>4</sub>. *J Chem Phys* 2011;135:064101.
6. Cartera S, Bowman JM, Handy NC. Multimode calculations of ro-vibrational energies of C<sub>2</sub>H<sub>4</sub> and C<sub>2</sub>D<sub>4</sub>. *Mol Phys* 2012;110:775-81.
7. Ben Hassen A, Kwabia Tchana F, Flaud J-M, Lafferty WJ, Landsheere X, Aroui H. Absolute line intensities for ethylene from 1800 to 2350  $\text{cm}^{-1}$ . *J Mol Spectrosc* 2012;282:30-3.
8. Ulenikov ON, Gromova OV, Aslapovskaya YuS, Horneman VM. High resolution spectroscopic study of C<sub>2</sub>H<sub>4</sub>: re-analysis of the ground state and  $\nu_4$ ,  $\nu_7$ ,  $\nu_{10}$  and  $\nu_{12}$  vibrational bands. *J Quant Spectrosc Radiat Transf* 2013;118:14-25.
9. Cui J, Yelle RV, Vuitton RV, Waite Jr JH, Kasprzak WT, Gell DA, et al. Analysis of titan's neutral upper atmosphere from Cassini ion neutral mass spectrometer measurements. *Icarus* 2009;200:581-615.
10. Tan TL, Gabona MG, Lebron GB. The  $\nu_{12}$  band of C<sub>2</sub>D<sub>4</sub>. *J Mol Spectrosc* 2011;266: 113-5.
11. Harper J, Morrison AR, Duncan JL. Fourier transform infrared spectroscopic analyses of the  $\nu_{12}$  fundamental of C<sub>2</sub>H<sub>4</sub> and C<sub>2</sub>D<sub>4</sub>. *Chem Phys Lett* 1981;83:32-6.

12. Duncan JL, Hamilton E, Fayt A, Van Lerberghe D, Hegelund F. High resolution infrared spectrum and rotational constants of ethylene-D<sub>4</sub>. *Mol Phys* 1981;43:737-52.
13. Harper J, Duncan JL. High resolution analysis of the infrared active  $\nu_7$  wagging fundamental of C<sub>2</sub>D<sub>4</sub>. *Mol Phys* 1982;46:139-49.
14. Mose A-K, Hegelund F, Nicolaisen FM. The high-resolution infrared spectrum of ethylene -d<sub>4</sub> below 1200 cm<sup>-1</sup>. *J Mol Spectrosc* 1989;137:286-95.
15. Duncan JL. The  $\nu_5+\nu_9$  carbon-deuterium stretching combination band of ethylene-D<sub>4</sub>: a case of almost exact accidental degeneracy of vibration levels. *Mol Phys* 1994;83:159-69.
16. Tan TL, Goh KL, Ong PP, Teo HH. High-resolution Fourier transform infrared spectroscopy and analysis of the  $\nu_{12}$  fundamental band of ethylene -d<sub>4</sub>. *Chem Phys Lett* 1999;315:82-6.
17. Tan TL, Goh KL, Ong PP, Teo HH. High-resolution FTIR spectrum of the  $\nu_9$  band of ethylene -D<sub>4</sub> (C<sub>2</sub>D<sub>4</sub>). *J Mol Spectrosc* 2000;202:249-52.
18. Goh KL, Tan TL, Ong PP, Teo HH. High-resolution FTIR spectroscopy of the  $\nu_{11}$  and  $\nu_2+\nu_7$  bands of ethylene-d<sub>2</sub>. *Mol Phys* 2000;98:583-7.
19. O.N.Ulenikov, O.V.Gromova, E.S.Bekhtereva, A.L.Fomchenko, Fangce Zhang, C. Sydow, C. Maul, S. Bauerecker. High resolution analysis of C<sub>2</sub>D<sub>4</sub> in the region of 600 – 1150 cm<sup>-1</sup>. *Journal of Quantitative Spectroscopy & Radiative Transfer* 182. – 2016. – p. 55 – 57.
20. Rothman L.S., Barbe A., Benner D.C., Brown L.R., Camy-Peyret C., Carleer M., et al. The HITRAN molecular spectroscopic database: edition of 2000 including updates through 2001 // *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transf.* – 2003. – V. 82. – pp. 5 – 44.
21. H.H.Nielsen. *The Vibration-Rotation Energies of Molecules / Reviews of modern physics.* V. 23. – N. 2. – 1951. – p. 90 – 96.
22. Watson. J.K.G. Determination of centrifugal coefficients of asymmetric – top molecules // *J. Chem. Phys.* – 1967. –V. 46 – pp.1935-1949.

23. Симметрия и ее применение к задачам колебательно- вращательной спектроскопии молекул, часть 2 // Ю. С. Макушкин, О. Н. Улеников, А. Е. Чеглоков. – Томск :Изд-во ТГУ, 1990. – 222 с.
24. Щербаков А.П., Быков А.Д., Науменко О.В., Сеница Л.Н. Спектральный логический обработчик для научных работников. Программный комплекс // Институт оптики атмосферы СО РАН. – Томск: - 2013. – 37 С.
25. Спектры и строение двухатомных молекул // Под ред. Кондратьева В.Н. – М.: Изд-во Иностранной литературы, 1949. – 397 С.
26. Н.Н.Nielsen. The Vibration-Rotation Energies of Molecules / Reviews of modern physics. V. 23. – N. 2. – 1951. – p. 90 – 96.

Приложение 1

Таблица 1.1 Переходы, соответствующие полосе  $\nu_{10}$  молекулы  $C_2D_4$

J Ka Kc	J' Ka' Kc'	Положение линии	Пропускание	Номер спектра	$\delta \cdot 10^{-4}$
20 16 4	21 17 5	500.06025	48.0	IV	-7
27 13 14	28 14 15	500.52325	69.4	IV	-9
17 17 0	18 18 1	500.81382	29.6	IV	-7
22 15 7	23 16 8	500.85897	49.0	IV	-9
29 12 17	30 13 18	501.12608	83.4	IV	9
24 14 10	25 15 11	501.53261	62.6	IV	-6
31 11 20	32 12 21	501.65058	96.9	IV	9
19 16 3	20 17 4	501.65364	43.1	IV	7
26 13 13	27 14 14	502.19814	61.1	IV	-9
21 15 6	22 16 7	502.46037	40.6	IV	-9
28 12 16	29 13 17	502.81407	80.1	IV	9
23 14 9	24 15 10	503.17484	55.9	IV	-7
18 16 2	19 17 3	503.23380	37.7	IV	7
30 11 19	31 12 20	503.35989	89.9	IV	9
25 13 12	26 14 13	503.86116	56.5	IV	-8
20 15 5	21 16 6	504.05677	37.2	IV	-4
27 12 15	28 13 16	504.49365	74.8	IV	1
17 16 1	18 17 2	504.80051	31.3	IV	4
22 14 8	23 15 9	504.80433	50.3	IV	-6
29 11 18	30 12 19	505.06000	90.3	IV	9
24 13 11	25 14 12	505.51202	52.9	IV	5
31 10 21	32 11 22	505.61854	96.8	IV	6
19 15 4	20 16 5	505.64373	30.5	IV	6
26 12 14	27 13 15	506.16337	71.1	IV	0
16 16 0	17 17 1	506.35340	28.0	IV	-8
21 14 7	22 15 8	506.42058	46.0	IV	-3
28 11 17	29 12 18	506.74978	81.9	IV	7
23 13 10	24 14 11	507.15063	46.3	IV	8
18 15 3	19 16 4	507.21918	25.7	IV	4
30 10 20	31 11 21	507.31816	94.6	IV	5
25 12 13	26 13 14	507.82215	62.1	IV	0
20 14 6	21 15 7	508.02367	40.6	IV	-1
27 11 16	28 12 17	508.40855	83.2	IV	5
22 13 9	23 14 10	508.77662	41.5	IV	2
17 15 2	18 16 3	508.78197	21.6	IV	2
29 10 20	30 11 19	508.99796	93.9	IV	5
29 10 19	30 11 20	509.00940	94.3	IV	1
24 12 12	25 13 13	509.46961	59.7	IV	0
19 14 5	20 15 6	509.61335	35.4	IV	-7
26 11 15	27 12 16	510.09660	78.4	IV	0
16 15 1	17 16 2	510.33164	17.6	IV	-2
21 13 8	22 14 9	510.38980	35.3	IV	5
28 10 18	29 11 19	510.69186	92.4	IV	0



Таблица 1.1 (продолжение)

23 12 11	24 13 12	511.10520	52.5	IV	9
18 14 4	19 15 5	511.18930	32.2	IV	9
25 11 14	26 12 15	511.75032	83.0	IV	9
15 15 0	16 16 1	511.86769	16.1	IV	1
20 13 7	21 14 8	511.98991	29.3	IV	3
27 10 17	28 11 18	512.36451	89.2	IV	2
22 12 10	23 13 11	512.72854	48.6	IV	5
17 14 3	18 15 4	512.75158	27.0	IV	-9
24 11 13	25 12 14	513.41081	68.9	IV	5
19 13 6	20 14 7	513.57683	24.9	IV	8
26 10 16	27 11 17	514.02713	72.1	IV	3
16 14 2	17 15 3	514.29994	21.8	IV	-1
21 12 9	22 13 10	514.33938	41.5	IV	7
28 9 19	29 10 20	514.61043	86.6	IV	0
23 11 12	24 12 13	515.03833	47.3	IV	7
18 13 5	19 14 6	515.15042	20.5	IV	3
25 10 16	26 11 15	515.67916	71.8	IV	2
15 14 1	16 15 2	515.83428	18.6	IV	3
20 12 8	21 13 9	515.93742	37.6	IV	9
27 9 18	28 10 19	516.28542	72.8	IV	3
22 11 11	23 12 12	516.65924	40.9	IV	7
17 13 4	18 14 5	516.71042	18.7	IV	8
29 8 22	30 9 21	516.86686	87.3	IV	7
29 8 21	30 9 22	517.02369	96.3	IV	3
24 10 14	25 11 15	517.32072	66.8	IV	6
14 14 0	15 15 1	517.35449	14.8	IV	2
19 12 7	20 13 8	517.52247	32.9	IV	7
26 9 17	27 10 18	517.94088	70.5	IV	0
16 13 3	17 14 4	518.25672	15.0	IV	-6
21 11 10	22 12 11	518.26822	34.4	IV	8
28 8 21	29 9 20	518.54904	94.4	IV	-3
23 10 13	24 11 14	518.95106	56.4	IV	9
18 12 6	19 13 7	519.09431	30.0	IV	2
25 9 16	26 10 17	519.58649	63.5	IV	-8
15 13 2	16 14 3	519.78922	11.6	IV	3
20 11 9	21 12 10	519.86467	30.2	IV	1
27 8 20	28 9 19	520.20793	92.9	IV	8
22 10 12	23 11 13	520.56991	51.6	IV	4
17 12 5	18 13 6	520.65277	24.9	IV	3
24 9 15	25 10 16	521.22228	56.3	IV	2
14 13 1	15 14 2	521.30772	8.3	IV	3
19 11 8	20 12 9	521.44832	25.9	IV	2
26 8 19	27 9 18	521.85466	90.9	IV	6
21 10 11	22 11 12	522.17676	46.6	IV	9
16 12 4	17 13 5	522.19766	19.7	IV	-2
13 13 0	14 14 1	522.81211	7.2	IV	2
23 9 14	24 10 15	522.84765	52.5	IV	1
18 11 7	19 12 8	523.01886	21.6	IV	9
28 7 21	29 8 22	523.11803	92.5	IV	4

Таблица 1.1 (продолжение)

25 8 18	26 9 17	523.49101	86.9	IV	3
15 12 3	16 13 4	523.72876	18.6	IV	7
20 10 10	21 11 11	523.77130	40.8	IV	3
22 9 13	23 10 14	524.46222	46.6	IV	-6
17 11 6	18 12 7	524.57614	17.1	IV	-5
24 8 17	25 9 16	525.11756	84.6	IV	5
14 12 2	15 13 3	525.24603	13.7	IV	4
19 10 9	20 11 10	525.35330	36.5	IV	2
26 7 20	27 8 19	525.69700	94.0	IV	6
26 7 19	27 8 20	526.02714	85.5	IV	5
21 9 12	22 10 13	526.06549	40.8	IV	0
16 11 5	17 12 6	526.11992	14.8	IV	-6
23 8 16	24 9 15	526.73448	82.9	IV	3
13 12 1	14 13 2	526.74933	11.7	IV	2
18 10 8	19 11 9	526.92245	31.2	IV	6
25 7 19	26 8 18	527.35874	84.2	IV	3
15 11 4	16 12 5	527.65009	11.1	IV	-6
20 9 11	21 10 12	527.65716	36.0	IV	7
12 12 0	13 13 1	528.23844	9.7	IV	0
22 8 15	23 9 14	528.34175	78.1	IV	9
17 10 7	18 11 8	528.47856	28.3	IV	0
26 6 21	27 7 20	528.72742	94.7	IV	-9
24 7 18	25 8 17	528.99460	88.1	IV	9
24 7 17	25 8 18	529.10729	83.7	IV	0
14 11 3	15 12 4	529.16648	8.2	IV	8
19 9 10	20 10 11	529.23634	44.9	IV	9
21 8 14	22 9 13	529.93901	60.9	IV	2
16 10 6	17 11 7	530.02137	23.7	IV	-9
23 7 17	24 8 16	530.61151	77.4	IV	7
13 11 2	14 12 3	530.66888	7.0	IV	0
18 9 9	19 10 10	530.80388	26.0	IV	9
26 6 20	27 7 21	531.40607	96.2	IV	-7
20 8 13	21 9 12	531.52490	57.8	IV	9
15 10 5	16 11 6	531.55070	21.6	IV	-2
12 11 1	13 12 2	532.15722	6.1	IV	8
22 7 16	23 8 15	532.21359	82.9	IV	-4
22 7 15	23 8 16	532.24770	74.1	IV	-7
17 9 8	18 10 9	532.35849	21.3	IV	1
25 6 19	26 7 20	532.48302	95.6	IV	-3
24 6 19	25 7 18	532.53874	92.1	IV	-5
14 10 4	15 11 5	533.06637	16.3	IV	1
19 8 12	20 9 11	533.10035	45.4	IV	1
11 11 0	12 12 1	533.63143	3.0	IV	0
24 6 18	25 7 19	533.69407	94.0	IV	-4
21 7 15	22 8 14	533.80329	70.9	IV	7
21 7 14	22 8 15	533.82115	79.8	IV	9
16 9 7	17 10 8	533.90008	20.2	IV	-1
24 5 20	25 6 19	533.91136	95.8	IV	-4
23 6 18	24 7 17	534.28787	88.7	IV	-2

Таблица 1.1 (продолжение)

13 10 3	14 11 4	534.56813	14.8	IV	5
18 8 10	19 9 11	534.66409	41.3	IV	7
23 6 17	24 7 18	535.01176	91.7	IV	-7
20 7 14	21 8 13	535.38194	78.7	IV	5
20 7 13	21 8 14	535.39096	66.2	IV	0
15 9 6	16 10 7	535.42847	16.5	IV	7
22 6 17	23 7 16	535.96956	89.2	IV	-1
12 10 2	13 11 3	536.05597	11.6	IV	7
17 8 9	18 9 10	536.21595	37.5	IV	6
22 6 16	23 7 17	536.32533	95.6	IV	0
23 5 19	24 6 18	536.39811	92.0	IV	-3
14 9 5	15 10 6	536.94340	14.1	IV	8
19 7 12	20 8 13	536.95437	74.6	IV	9
11 10 1	12 11 2	537.52963	9.8	IV	-9
16 8 8	17 9 9	537.75565	38.8	IV	-9
13 9 4	14 10 5	538.44462	12.9	IV	5
18 7 11	19 8 12	538.50954	59.2	IV	3
22 5 18	23 6 17	538.63819	91.7	IV	-7
10 10 0	11 11 1	538.98905	8.2	IV	3
15 8 7	16 9 8	539.28232	28.9	IV	-4
20 6 14	21 7 15	539.34911	66.2	IV	-2
12 9 3	13 10 4	539.93204	9.9	IV	6
17 7 10	18 8 11	540.05440	45.2	IV	6
21 5 17	22 6 16	540.67657	85.8	IV	-5
14 8 6	15 9 7	540.79607	26.7	IV	1
19 6 1	20 7 14	540.85825	81.9	IV	5
23 5 18	24 6 19	541.23624	96.5	IV	-3
11 9 2	12 10 3	541.40543	8.2	IV	-4
16 7 9	17 8 10	541.58966	33.2	IV	-5
22 5 17	23 6 18	542.02578	89.6	IV	-2
13 8 5	14 9 6	542.29657	25.2	IV	3
18 6 13	19 7 12	542.33485	77.9	IV	5
20 5 16	21 6 15	542.55648	89.0	IV	-7
22 12 10	22 13 9	542.72774	62.6	IV	8
10 9 1	11 10 2	542.86467	6.2	IV	0
21 5 16	22 6 17	542.96704	94.8	IV	-4
15 7 8	16 8 9	543.11306	31.6	IV	6
12 8 4	13 9 5	543.78345	21.6	IV	2
17 6 1	18 7 12	543.89838	76.0	IV	8
20 5 15	21 6 16	544.04987	84.9	IV	-9
9 9 0	10 10 1	544.30959	4.2	IV	0
19 5 15	20 6 14	544.31689	79.1	IV	8
14 7 7	15 8 8	544.62445	26.5	IV	6
11 8 3	12 9 4	545.25656	17.4	IV	-5
16 6 1	17 7 11	545.41701	72.4	IV	-2
18 5 14	19 6 13	545.98956	86.4	IV	0
13 7 6	14 8 7	546.12321	23.4	IV	7
18 5 13	19 6 14	546.55647	80.6	IV	3
10 8 2	11 9 3	546.71560	17.5	IV	3

Таблица 1.1 (продолжение)

15 6 9	16 7 10	546.92939	72.1	IV	-6
12 7 5	13 8 6	547.60895	22.3	IV	9
17 5 12	18 6 13	547.92870	85.0	IV	9
9 8 1	10 9 2	548.16048	14.5	IV	8
14 6 8	15 7 9	548.43324	68.0	IV	8
11 7 4	12 8 5	549.08133	18.3	IV	-1
16 5 11	17 6 12	549.34840	73.3	IV	-3
8 8 0	9 9 1	549.59105	12.0	IV	1
13 6 7	14 7 8	549.92634	42.4	IV	5
10 7 3	11 8 4	550.54005	17.3	IV	4
15 5 10	16 6 11	550.79698	80.9	IV	9
12 6 6	13 7 7	551.40918	40.8	IV	2
9 7 2	10 8 3	551.98482	14.4	IV	4
14 5 9	15 6 10	552.26050	67.6	IV	0
11 6 5	12 7 6	552.87949	38.3	IV	-3
8 7 1	9 8 2	553.41543	14.7	IV	4
13 5 8	14 6 9	553.72912	77.1	IV	8
15 4 12	16 5 11	554.07916	90.0	IV	5
10 6 4	11 7 4	554.33696	35.5	IV	6
7 7 0	8 8 1	554.83171	13.0	IV	6
12 5 7	13 6 8	555.19603	63.6	IV	8
15 4 11	16 5 12	555.24474	87.2	IV	7
14 4 11	15 5 10	555.75151	89.1	IV	1
9 6 3	10 7 4	555.78107	34.5	IV	9
14 4 10	15 5 11	556.45064	89.7	IV	4
11 5 6	12 6 7	556.65692	75.0	IV	-8
8 6 2	9 7 3	557.21147	33.2	IV	2
13 4 9	14 5 10	557.74149	89.1	IV	3
7 6 1	8 7 2	558.62784	31.5	IV	1
12 4 9	13 5 8	558.87805	85.8	IV	6
12 4 8	13 5 9	559.09238	85.6	IV	1
9 5 4	10 6 5	559.54943	44.1	IV	3
6 6 0	7 7 1	560.02991	27.6	IV	5
11 4 7	12 5 8	560.48128	85.3	IV	-7
8 5 3	9 6 4	560.97842	39.3	IV	3
10 4 6	11 5 7	561.89051	84.7	IV	6
24 7 18	24 8 17	561.98771	86.4	IV	2
7 5 2	8 6 3	562.39420	40.0	IV	6
9 4 5	10 5 6	563.30746	84.3	IV	7
6 5 1	7 6 2	563.79621	37.1	IV	0
8 4 4	9 5 5	564.72352	82.3	IV	7
5 5 0	6 6 1	565.18406	36.6	IV	8
5 4 1	6 5 2	568.91919	64.9	IV	8
4 4 0	5 5 1	570.29277	63.4	IV	0
28 9 20	29 8 21	576.38687	94.9	IV	9
33 13 21	34 12 22	581.46040	97.4	IV	9
15 5 11	16 4 12	584.01184	95.6	IV	0
31 13 19	32 12 20	585.22880	95.1	IV	6
19 7 13	20 6 14	585.70558	94.3	IV	0

Таблица 1.1 (продолжение)

16 6 11	17 5 12	587.08214	97.2	IV	-5
28 12 17	29 11 18	587.42649	93.1	IV	3
18 7 12	19 6 13	587.53386	89.0	IV	4
13 5 9	14 4 10	588.20251	94.7	IV	9
15 6 10	16 5 11	588.91648	97.1	IV	3
17 7 11	18 6 12	589.29956	93.3	IV	5
25 11 15	26 10 16	589.45247	93.9	IV	6
19 8 12	20 7 13	589.50376	97.9	IV	0
23 10 14	24 9 15	589.56528	97.5	IV	2
21 9 13	22 8 14	589.58627	96.4	IV	-3
12 5 8	13 4 9	590.07360	97.9	IV	0
14 6 9	15 5 10	590.66393	96.3	IV	7
16 7 10	17 6 11	591.01188	96.7	IV	-4
18 8 11	19 7 12	591.21719	97.6	IV	9
22 10 13	23 9 14	591.31156	96.6	IV	0
20 9 12	21 8 13	591.31494	94.4	IV	6
11 5 7	12 4 8	591.82581	94.7	IV	-1
13 6 8	14 5 9	592.34228	95.1	IV	2
15 7 9	16 6 10	592.67871	92.4	IV	2
17 8 10	18 7 11	592.89575	97.2	IV	6
23 11 13	24 10 14	592.95647	97.6	IV	4
19 9 11	20 8 12	593.01093	90.7	IV	3
21 10 12	22 9 13	593.03058	95.4	IV	4
12 6 7	13 5 8	593.96500	95.5	IV	6
14 7 8	15 6 9	594.30666	96.5	IV	7
16 8 9	17 7 10	594.54288	92.7	IV	0
22 11 12	23 10 13	594.67349	95.4	IV	8
18 9 10	19 8 11	594.67995	87.4	IV	5
20 10 11	21 9 12	594.72317	93.6	IV	6
9 5 5	10 4 6	595.06784	96.4	IV	0
11 6 6	12 5 7	595.54206	95.1	IV	7
13 7 7	14 6 8	595.89982	92.8	IV	9
15 8 8	16 7 9	596.15831	89.9	IV	-1
23 12 12	24 11 13	596.25145	98.0	IV	0
17 9 9	18 8 10	596.32120	85.6	IV	3
21 11 11	22 10 12	596.36722	93.9	IV	4
19 10 10	20 9 11	596.39075	93.2	IV	5
12 7 6	13 6 7	597.46217	89.0	IV	3
14 8 7	15 7 8	597.74635	90.6	IV	4
16 9 8	17 8 9	597.93683	77.5	IV	-1
18 10 9	19 9 10	598.03398	93.5	IV	2
20 11 10	21 10 11	598.03805	93.3	IV	8
9 6 4	10 5 5	598.58538	97.0	IV	7
4 4 1	5 3 2	598.73613	76.7	IV	-4
11 7 5	12 6 6	598.99453	88.4	IV	-7
32 18 15	33 17 16	599.16042	86.3	IV	-6
13 8 6	14 7 7	599.30811	91.2	IV	5
15 9 7	16 8 8	599.52770	85.8	IV	0
21 12 10	22 11 11	599.62747	97.5	IV	0

Таблица 1.1 (продолжение)

17 10 8	18 9 9	599.65393	93.1	IV	0
19 11 9	20 10 10	599.68690	93.3	IV	4
15 4 11	15 3 12	600.47397	56.8	III	7
7 3 4	7 2 5	600.87203	69.9	III	-8
30 7 23	30 6 24	600.98992	84.0	III	1
14 9 6	15 8 7	601.09370	3.3	II	-5
18 11 8	19 10 9	601.31339	4.5	II	0
5 3 3	5 2 4	602.02406	18.9	III	-4
9 3 7	9 2 8	602.40151	48.6	III	-5
13 9 5	14 8 6	602.63931	4.7	II	4
15 2 13	15 1 14	602.65044	18.4	III	9
10 3 8	10 2 9	602.65904	76.4	III	6
12 2 10	11 3 9	602.71635	104.7	III	2
3 2 1	2 1 2	602.76719	78.3	III	4
12 4 8	12 3 9	602.77841	43.9	III	-6
15 10 6	16 9 7	602.82568	3.7	II	-5
21 13 9	22 12 10	602.82568	3.7	II	-5
10 2 9	10 1 10	602.90565	74.1	III	2
25 15 11	26 14 12	602.94811	73.7	III	2
11 3 9	11 2 10	602.99714	38.4	III	5
4 2 3	3 1 2	603.18509	97.5	III	-4
20 3 17	20 2 18	603.38132	14.6	III	1
12 3 10	12 2 11	603.42056	39.0	III	5
11 4 7	11 3 8	603.44528	38.2	III	-5
40 9 31	39 10 30	603.45653	54.9	III	0
16 2 14	16 1 15	603.91737	70.8	III	2
13 3 11	13 2 12	603.92928	55.1	III	-2
16 3 13	15 4 12	604.35865	125.6	III	5
4 2 2	3 1 3	604.37068	83.2	III	4
13 4 10	13 3 11	604.62364	18.9	III	-3
11 4 8	11 3 9	604.68017	51.5	III	-5
14 4 11	14 3 12	604.68516	11.2	III	1
21 3 18	21 2 19	604.69703	13.8	III	-4
10 4 7	10 3 8	604.77114	43.9	III	-4
8 4 4	8 3 5	604.77817	46.7	III	0
15 4 12	15 3 13	604.82149	64.3	III	1
37 9 28	37 8 29	604.83626	80.5	III	3
6 2 5	5 1 4	604.87356	53.2	III	-5
8 4 5	8 3 6	605.00966	45.3	III	-3
16 5 11	16 4 12	605.02436	35.8	III	5
7 4 3	7 3 4	605.02436	35.8	III	-2
17 2 15	17 1 16	605.19123	20.2	III	-2
4 4 0	4 3 1	605.42561	71.5	III	-5
13 2 12	13 1 13	605.56655	48.1	III	1
18 4 15	18 3 16	605.75035	66.1	III	-1
3 3 1	2 2 0	605.94219	64.2	III	-3
3 3 0	2 2 1	605.95477	90.2	III	1
14 2 13	14 1 14	606.53104	30.5	III	-2
26 7 19	26 6 20	606.65508	26.1	III	9

Таблица 1.1 (продолжение)

16 5 12	16 4 13	606.69976	29.1	III	-3
9 2 8	8 1 7	606.86433	89.8	III	-4
33 7 26	32 8 25	607.04093	79.6	III	-4
37 8 30	37 7 31	607.14192	29.4	III	4
4 3 2	3 2 1	607.15651	41.4	III	-5
22 15 8	23 14 9	607.46737	55.8	III	-6
14 11 4	15 10 5	607.61870	17.2	II	-2
20 14 7	21 13 8	607.61870	17.2	II	1
11 5 6	11 4 7	607.73163	15.5	III	-3
25 7 18	25 6 19	607.83045	34.2	III	7
10 5 5	10 4 6	608.00385	0.5	III	1
10 5 6	10 4 7	608.06035	30.0	III	-6
6 2 4	5 1 5	608.11652	75.4	III	5
15 2 13	14 3 12	608.12691	113.1	III	1
9 5 5	9 4 6	608.24871	23.0	III	-7
5 3 3	4 2 2	608.30857	59.2	III	-5
35 7 29	35 6 30	608.37369	79.9	III	-1
18 3 15	17 4 14	608.37833	59.4	III	-5
8 5 3	8 4 4	608.40449	23.6	III	-2
8 5 4	8 4 5	608.41531	20.1	III	8
5 3 2	4 2 3	608.50120	57.4	III	-3
7 5 3	7 4 4	608.55649	12.3	II	4
33 8 26	33 7 27	608.56389	74.7	III	3
6 5 1	6 4 2	608.67412	16.3	III	0
27 7 21	27 6 22	608.68577	13.8	III	-8
5 5 1	5 4 2	608.77252	74.4	III	-3
5 5 0	5 4 1	608.77252	74.4	III	-2
24 7 17	24 6 18	608.85713	70.5	III	2
21 15 7	22 14 8	609.10717	67.9	III	-7
34 9 25	34 8 26	609.39731	34.4	III	2
23 7 16	23 6 17	609.74190	34.7	III	-5
6 3 3	5 2 4	609.81575	93.2	III	-2
24 7 18	24 6 19	610.01487	53.6	III	7
30 8 23	30 7 24	610.11367	75.7	III	-6
14 2 13	13 1 12	610.25113	110.5	III	8
7 3 5	6 2 4	610.31793	15.6	III	6
19 3 16	18 4 15	610.34998	39.5	III	-3
28 8 20	28 7 21	610.38681	58.7	III	6
23 7 17	23 6 18	610.49538	48.0	III	-2
4 4 0	3 3 1	610.64532	16.6	III	-9
4 4 1	3 3 0	610.64532	16.6	III	-4
29 8 22	29 7 23	610.70114	61.4	III	4
22 7 16	22 6 17	610.97575	58.7	III	8
12 6 7	12 5 8	611.07340	5.9	II	-1
8 3 6	7 2 5	611.13530	55.0	III	-2
21 7 14	21 6 15	611.15679	52.1	III	3
7 3 4	6 2 5	611.19021	96.6	III	2
11 6 5	11 5 6	611.29362	6.0	II	4
28 8 21	28 7 22	611.29836	38.9	III	2

Таблица 1.1 (продолжение)

11 6 6	11 5 7	611.29857	9.9	II	0
27 8 19	27 7 20	611.30799	86.6	III	9
21 7 15	21 6 16	611.44226	14.2	III	-1
10 6 4	10 5 5	611.49635	6.4	II	7
33 9 25	33 8 26	611.63656	63.3	III	-4
20 7 13	20 6 14	611.72305	8.5	II	-9
20 7 13	20 6 14	611.72411	25.5	III	2
9 3 7	8 2 6	611.82384	26.3	III	-4
20 7 14	20 6 15	611.89079	39.3	III	3
7 6 2	7 5 3	611.95460	6.7	II	-2
7 6 1	7 5 2	611.95460	6.7	II	-2
16 2 15	15 1 14	611.99572	81.5	III	2
23 2 21	23 1 22	612.11220	23.5	III	0
21 16 6	22 15 7	612.17144	1.9	II	7
19 7 12	19 6 13	612.22068	7.9	II	-1
19 7 13	19 6 14	612.31357	2.6	II	-7
32 9 24	32 8 25	612.34650	46.3	III	-5
17 14 4	18 13 5	612.44129	72.8	III	1
26 8 19	26 7 20	612.47849	45.3	III	-1
31 9 22	31 8 23	612.60731	59.7	III	1
18 7 11	18 6 12	612.65982	9.2	II	-3
18 7 12	18 6 13	612.70976	7.2	II	-6
25 8 17	25 7 18	612.82183	30.0	III	9
11 3 9	10 2 8	612.85945	52.5	III	-4
31 9 23	31 8 24	613.04512	20.9	III	-1
24 2 22	24 1 23	613.15626	105.9	III	-1
12 3 10	11 2 9	613.24492	76.7	III	-2
16 7 9	16 6 10	613.40266	4.0	II	5
16 7 10	16 6 11	613.41429	6.2	II	-6
24 8 16	24 7 17	613.45267	7.5	III	3
30 9 21	30 8 22	613.45267	7.5	III	0
13 3 11	12 2 10	613.57425	65.2	III	-6
24 8 17	24 7 18	613.58404	31.9	III	-5
15 7 8	15 6 9	613.71831	7.1	II	7
15 7 9	15 6 10	613.72314	7.8	II	-4
14 7 7	14 6 8	614.00154	7.3	II	-1
23 8 15	23 7 16	614.02176	42.9	III	5
23 8 16	23 7 17	614.09655	30.9	III	-3
19 2 17	18 3 16	614.17195	87.8	III	0
13 7 7	13 6 8	614.25817	10.4	II	-4
13 7 6	13 6 7	614.25817	10.4	II	6
7 4 3	6 3 4	614.29423	46.2	III	-2
29 9 21	29 8 22	614.37869	39.9	III	3
12 7 6	12 6 7	614.48774	11.9	II	-1
12 7 5	12 6 6	614.48774	11.9	II	3
11 7 5	11 6 6	614.69422	11.4	II	7
11 7 4	11 6 5	614.69422	11.4	II	8
10 7 3	10 6 4	614.87711	11.6	II	0
10 7 4	10 6 5	614.87711	11.6	II	0



Таблица 1.1 (продолжение)

28 9 19	28 8 20	614.88644	41.6	III	7
21 8 14	21 7 15	615.03014	10.9	III	3
9 7 3	9 6 4	615.03976	7.9	II	-1
9 7 3	9 6 4	615.03976	7.9	II	-1
9 7 2	9 6 3	615.03976	7.9	II	-1
8 7 1	8 6 2	615.18323	5.5	II	2
8 7 2	8 6 3	615.18323	5.5	II	2
5 5 0	4 4 1	615.29108	31.0	III	-4
5 5 1	4 4 0	615.29108	31.0	III	-4
7 7 0	7 6 1	615.30765	2.4	II	1
7 7 1	7 6 2	615.30765	2.4	II	1
8 4 5	7 3 4	615.37100	40.5	III	4
9 2 7	8 1 8	615.43262	47.0	III	6
20 8 13	20 7 14	615.44916	30.9	III	-3
8 4 4	7 3 5	615.48988	35.1	III	1
15 14 2	16 13 3	615.56859	83.5	III	-4
19 8 11	19 7 12	615.83439	24.8	III	-1
19 8 12	19 7 13	615.84003	37.4	III	-1
10 3 7	9 2 8	616.02175	45.9	III	0
26 9 17	26 8 18	616.12636	50.8	III	-1
26 9 18	26 8 19	616.16113	26.3	III	0
37 11 27	37 10 28	616.25634	76.9	III	1
37 7 30	36 8 29	616.44676	70.6	III	-2
6 5 2	5 4 1	616.50625	15.2	II	5
6 5 1	5 4 2	616.50625	15.2	II	3
17 8 10	17 7 11	616.53470	11.9	II	-2
21 2 19	20 3 18	616.60575	74.2	III	-4
25 9 16	25 8 17	616.67263	20.6	III	-1
25 9 17	25 8 18	616.69149	23.7	III	1
31 10 21	31 9 22	616.79024	66.6	III	-8
31 10 22	31 9 23	616.81916	38.5	III	-3
24 9 15	24 8 16	617.18073	17.6	III	0
23 3 20	22 4 19	617.30045	95.7	III	-4
30 10 20	30 9 21	617.44723	48.3	III	2
23 9 14	23 8 15	617.65343	4.2	II	-6
23 9 15	23 8 16	617.65915	4.8	II	0
7 5 3	6 4 2	617.70267	8.2	II	-1
10 4 6	9 3 7	617.90077	37.9	III	-2
11 3 8	10 2 9	617.99941	40.4	III	-7
22 9 14	22 8 15	618.09844	3.0	II	2
11 4 8	10 3 7	618.24268	57.7	III	-1
10 2 8	9 1 9	618.33132	75.4	III	-4
22 3 20	21 2 19	618.33132	75.4	III	2
9 8 2	9 7 3	618.36103	8.2	II	8
9 8 1	9 7 2	618.36103	8.2	II	8
8 8 0	8 7 1	618.49938	75.6	III	4
8 8 1	8 7 2	618.49938	75.6	III	4
21 9 13	21 8 14	618.50921	18.1	II	0
15 15 1	16 14 2	618.67121	83.9	III	-3

Таблица 1.1 (продолжение)

20 9 12	20 8 13	618.89276	5.0	II	-3
20 9 11	20 8 12	618.89276	5.0	II	1
11 4 7	10 3 8	619.15237	55.7	III	2
27 10 17	27 9 18	619.18852	23.0	III	-2
27 10 18	27 9 19	619.20658	52.7	III	-4
13 4 10	12 3 9	619.50952	52.5	III	-5
18 9 10	18 8 11	619.58474	14.1	II	-4
18 9 9	18 8 10	619.58474	14.1	II	-3
26 10 17	26 9 18	619.70519	39.6	III	-5
32 11 21	32 10 22	619.82319	46.9	III	-6
24 2 22	23 3 21	619.82991	79.8	III	5
14 4 11	13 3 10	619.91798	65.0	III	-7
9 5 4	8 4 5	620.04381	14.2	III	1
18 17 2	19 16 3	620.08239	2.5	II	1
16 9 7	16 8 8	620.18289	9.6	II	-5
16 9 8	16 8 9	620.18289	9.6	II	-5
16 4 13	15 3 12	620.35205	77.3	III	-4
15 9 7	15 8 8	620.44956	14.2	II	-3
15 9 6	15 8 7	620.44956	14.2	II	-3
12 4 8	11 3 9	620.46807	66.2	III	-1
24 10 14	24 9 15	620.64881	10.6	II	2
24 10 15	24 9 16	620.64881	10.6	II	-3
14 9 6	14 8 7	620.69515	11.9	II	-4
14 9 5	14 8 6	620.69515	11.9	II	-4
23 20 4	24 19 5	620.86380	74.7	III	-1
13 9 4	13 8 5	620.92211	9.4	II	6
13 9 5	13 8 6	620.92211	9.4	II	6
10 5 6	9 4 5	621.15876	17.2	III	-3
10 5 5	9 4 6	621.18609	17.1	III	1
11 2 9	10 1 10	621.43470	92.8	III	-2
29 11 19	29 10 20	621.57294	49.8	III	2
9 9 0	9 8 1	621.64093	3.6	II	3
9 9 1	9 8 2	621.64093	3.6	II	3
17 17 1	18 16 2	621.67318	1.9	II	7
21 10 12	21 9 13	621.87295	9.7	II	5
21 10 11	21 9 12	621.87295	9.7	II	6
34 12 22	34 11 23	621.99821	67.9	III	-4
28 11 17	28 10 18	622.11334	50.8	III	-3
20 10 10	20 9 11	622.23298	5.0	II	0
20 10 11	20 9 12	622.23298	5.0	II	0
11 5 7	10 4 6	622.24789	43.5	III	3
19 10 9	19 9 10	622.57212	6.8	II	6
19 10 10	19 9 11	622.57212	6.8	II	6
27 11 17	27 10 18	622.59785	36.5	III	2
27 11 16	27 10 17	622.61773	46.9	III	0
18 10 9	18 9 10	622.88848	7.1	II	-2
18 10 8	18 9 9	622.88848	7.1	II	-2
17 10 8	17 9 9	623.18453	5.9	II	-7
17 10 7	17 9 8	623.18453	5.9	II	-7

Таблица 1.1 (продолжение)

12 5 8	11 4 7	623.28761	46.6	III	-2
12 5 7	11 4 8	623.42033	46.1	III	3
32 12 20	32 11 21	623.51764	86.7	III	-2
25 11 14	25 10 15	623.54811	59.2	III	-2
25 11 15	25 10 16	623.56223	39.9	III	-5
15 10 5	15 9 6	623.71908	3.7	II	2
15 10 6	15 9 7	623.71908	3.7	II	2
14 10 5	14 9 6	623.95712	5.7	II	-2
14 10 4	14 9 5	623.95712	5.7	II	-2
24 11 14	24 10 15	623.99081	47.1	III	5
24 11 13	24 10 14	623.99585	10.6	III	5
13 10 3	13 9 4	624.17682	5.4	II	-6
13 10 4	13 9 5	624.17682	5.4	II	-6
36 13 23	36 12 24	624.26327	16.5	III	3
12 10 3	12 9 4	624.38024	3.1	II	4
12 10 2	12 9 3	624.38024	3.1	II	4
23 11 13	23 10 14	624.39929	9.9	II	3
23 11 12	23 10 13	624.39929	9.9	II	3
7 7 1	6 6 0	624.42895	18.9	II	4
7 7 0	6 6 1	624.42895	18.9	II	4
10 6 5	9 5 4	624.58215	9.2	II	-4
12 2 10	11 1 11	624.71359	81.9	III	-2
10 10 1	10 9 2	624.73313	6.8	II	-1
10 10 0	10 9 1	624.73313	6.8	II	-1
22 11 11	22 10 12	624.78600	12.8	II	0
22 11 12	22 10 13	624.78600	12.8	II	0
29 12 18	29 11 19	624.97078	0.3	III	0
29 12 17	29 11 18	624.97078	0.3	III	1
21 11 11	21 10 12	625.15238	12.7	II	-3
21 11 10	21 10 11	625.15238	12.7	II	-3
15 4 11	14 3 12	625.17525	70.8	III	1
28 12 16	28 11 17	625.46531	41.7	III	0
28 12 17	28 11 18	625.46531	41.7	III	0
20 11 10	20 10 11	625.49929	7.2	II	3
20 11 9	20 10 10	625.49929	7.2	II	3
8 7 2	7 6 1	625.61358	21.3	II	-1
8 7 1	7 6 2	625.61358	21.3	II	-1
11 6 6	10 5 5	625.70982	4.9	II	6
19 11 8	19 10 9	625.82492	17.2	II	-6
19 11 9	19 10 10	625.82492	17.2	II	-6
27 12 15	27 11 16	625.94049	28.9	III	-1
27 12 16	27 11 17	625.94049	28.9	III	-1
26 12 14	26 11 15	626.39521	28.9	III	-3
26 12 15	26 11 16	626.39521	28.9	III	-3
17 11 6	17 10 7	626.42041	6.6	II	-5
17 11 7	17 10 8	626.42041	6.6	II	-5
16 5 12	15 4 11	626.57132	50.6	III	-3
16 11 6	16 10 7	626.69077	8.0	II	1
16 11 5	16 10 6	626.69077	8.0	II	1

Таблица 1.1 (продолжение)

9 7 3	8 6 2	626.78260	12.4	II	-3
9 7 2	8 6 3	626.78260	12.4	II	-3
12 6 6	11 5 7	626.81881	7.3	II	5
25 12 13	25 11 14	626.83039	2.1	II	2
25 12 14	25 11 15	626.83039	2.1	II	2
37 14 24	37 13 25	626.91889	65.4	III	0
37 14 23	37 13 24	626.91889	65.4	III	0
15 11 5	15 10 6	626.94178	8.3	II	-8
15 11 4	15 10 5	626.94178	8.3	II	-8
16 4 12	15 3 13	627.13587	62.0	III	7
14 11 4	14 10 5	627.17618	11.6	II	-7
14 11 3	14 10 4	627.17618	11.6	II	-7
24 12 12	24 11 13	627.24522	4.6	II	5
24 12 13	24 11 14	627.24522	4.6	II	5
13 11 2	13 10 3	627.39395	7.9	II	1
13 11 3	13 10 4	627.39395	7.9	II	1
23 12 11	23 11 12	627.63949	10.5	II	0
23 12 12	23 11 13	627.63949	10.5	II	0
11 11 0	11 10 1	627.77735	5.9	II	-3
11 11 1	11 10 2	627.77735	5.9	II	-3
16 5 11	15 4 12	627.92306	39.7	III	0
10 7 4	9 6 3	627.93592	17.9	II	4
10 7 3	9 6 4	627.93592	17.9	II	4
22 12 10	22 11 11	628.01498	8.5	II	2
22 12 11	22 11 12	628.01498	8.5	II	2
29 13 17	29 12 18	628.21558	26.3	III	2
29 13 16	29 12 17	628.21558	26.3	III	2
21 12 9	21 11 10	628.37179	6.2	II	8
21 12 10	21 11 11	628.37179	6.2	II	8
15 3 12	14 2 13	628.38737	65.8	III	5
20 12 8	20 11 9	628.70850	7.9	II	-1
20 12 9	20 11 10	628.70850	7.9	II	-1
8 8 0	7 7 1	628.92068	18.3	III	-2
8 8 1	7 7 0	628.92068	18.3	III	-2
19 12 7	19 11 8	629.02772	9.1	II	0
19 12 8	19 11 9	629.02772	9.1	II	0
11 7 4	10 6 5	629.07107	10.5	II	4
11 7 5	10 6 4	629.07107	10.5	II	4
27 13 14	27 12 15	629.16098	21.2	III	7
27 13 15	27 12 16	629.16098	21.2	III	7
18 12 6	18 11 7	629.32908	12.4	II	2
18 12 7	18 11 8	629.32908	12.4	II	2
17 4 13	16 3 14	629.34958	48.3	III	-6
26 13 13	26 12 14	629.60316	18.4	III	-2
26 13 14	26 12 15	629.60316	18.4	III	-2
17 12 6	17 11 7	629.61207	7.3	II	-3
17 12 5	17 11 6	629.61207	7.3	II	-3
16 12 5	16 11 6	629.87846	9.7	II	0
16 12 4	16 11 5	629.87846	9.7	II	0

Таблица 1.1 (продолжение)

9 8 1	8 7 2	630.09134	19.2	II	4
9 8 2	8 7 1	630.09134	19.2	II	4
15 12 3	15 11 4	630.12751	6.7	II	1
15 12 4	15 11 5	630.12751	6.7	II	1
12 7 5	11 6 6	630.18696	14.9	II	-5
12 7 6	11 6 5	630.18696	14.9	II	-3
31 14 18	31 13 19	630.38253	60.4	III	-4
31 14 17	31 13 18	630.38253	60.4	III	-4
24 13 12	24 12 13	630.43241	7.1	II	-2
24 13 11	24 12 12	630.43241	7.1	II	-2
12 12 0	12 11 1	630.77489	39.2	III	3
12 12 1	12 11 2	630.77489	39.2	III	3
30 14 16	30 13 17	630.89293	53.0	III	2
30 14 17	30 13 18	630.89293	53.0	III	2
22 13 9	22 12 10	631.18787	6.8	II	2
22 13 10	22 12 11	631.18787	6.8	II	2
13 7 7	12 6 6	631.28452	19.2	II	3
13 7 6	12 6 7	631.28452	19.2	II	-1
21 13 9	21 12 10	631.53833	10.8	II	3
21 13 8	21 12 9	631.53833	10.8	II	3
20 13 7	20 12 8	631.87112	6.8	II	3
20 13 8	20 12 9	631.87112	6.8	II	3
19 13 7	19 12 8	632.18624	7.3	II	1
19 13 6	19 12 7	632.18624	7.3	II	1
14 7 8	13 6 7	632.36084	17.4	II	7
14 7 7	13 6 8	632.36084	17.4	II	-3
11 8 3	10 7 4	632.38407	21.9	II	4
11 8 4	10 7 3	632.38407	21.9	II	4
18 13 5	18 12 6	632.48370	5.6	II	-7
18 13 6	18 12 7	632.48370	5.6	II	-7
26 14 12	26 13 13	632.74578	23.6	III	-5
26 14 13	26 13 14	632.74578	23.6	III	-5
17 13 4	17 12 5	632.76616	21.1	II	6
17 13 5	17 12 6	632.76616	21.1	II	6
16 13 4	16 12 5	633.03086	9.5	II	8
16 13 3	16 12 4	633.03086	9.5	II	8
25 14 12	25 13 13	633.16484	32.8	III	5
25 14 11	25 13 12	633.16484	32.8	III	5
9 9 0	8 8 1	633.36254	28.6	II	-6
9 9 1	8 8 0	633.36254	28.6	II	-6
15 7 9	14 6 8	633.41404	12.3	II	7
30 15 16	30 14 17	633.93590	67.2	III	0
30 15 15	30 14 16	633.93590	67.2	III	0
22 14 8	22 13 9	634.31207	29.5	III	-7
22 14 9	22 13 10	634.31207	29.5	III	-7
29 15 15	29 14 16	634.41266	56.2	III	0
29 15 14	29 14 15	634.41266	56.2	III	0
16 7 10	15 6 9	634.44160	5.4	II	0
16 7 9	15 6 10	634.44738	5.4	II	1

Таблица 1.1 (продолжение)

21 14 7	21 13 8	634.66087	7.2	II	-1
21 14 8	21 13 9	634.66087	7.2	II	-1
17 3 14	16 2 15	634.95376	84.5	III	0
20 14 6	20 13 7	634.99188	25.3	III	-2
20 14 7	20 13 8	634.99188	25.3	III	-2
19 14 6	19 13 7	635.30685	3.5	II	5
19 14 5	19 13 6	635.30685	3.5	II	5
17 7 11	16 6 10	635.44176	9.7	II	2
17 7 10	16 6 11	635.45564	6.0	II	3
38 7 32	37 6 31	635.58331	85.6	III	-1
18 14 5	18 13 6	635.60369	23.4	III	-2
18 14 4	18 13 5	635.60369	23.4	III	-2
17 14 3	17 13 4	635.88464	34.0	III	-2
17 14 4	17 13 5	635.88464	34.0	III	-2
16 14 3	16 13 4	636.14966	22.0	III	2
16 14 2	16 13 3	636.14966	22.0	III	2
15 14 1	15 13 2	636.39769	56.9	III	-1
15 14 2	15 13 3	636.39769	56.9	III	-1
18 7 12	17 6 11	636.41023	11.3	II	1
18 7 11	17 6 12	636.43814	8.7	II	-5
36 7 30	35 6 29	636.45187	69.2	III	0
14 14 0	14 13 1	636.63021	35.0	III	1
14 14 1	14 13 2	636.63021	35.0	III	1
24 15 10	24 14 11	636.85730	10.0	II	-2
24 15 9	24 14 10	636.85730	10.0	II	-2
23 15 8	23 14 9	637.11828	31.1	III	-5
23 15 9	23 14 10	637.11828	31.1	III	-5
30 16 14	30 15 15	637.22090	28.2	III	6
30 16 15	30 15 16	637.22090	28.2	III	6
19 7 13	18 6 12	637.34075	7.7	II	-9
19 7 12	18 6 13	637.39787	7.4	II	4
29 16 14	29 15 15	637.66667	48.0	III	4
29 16 13	29 15 14	637.66667	48.0	III	4
10 10 1	9 9 0	637.75594	18.3	II	1
10 10 0	9 9 1	637.75594	18.3	II	1
21 15 7	21 14 8	637.77197	6.0	III	1
21 15 6	21 14 7	637.77197	6.0	III	1
13 9 5	12 8 4	637.88768	14.9	II	-1
13 9 4	12 8 5	637.88768	14.9	II	-1
20 15 6	20 14 7	638.09348	6.1	II	3
20 15 5	20 14 6	638.09348	6.1	II	3
28 16 12	28 15 13	638.10348	21.7	III	-9
28 16 13	28 15 14	638.10348	21.7	III	-9
20 7 14	19 6 13	638.22844	4.2	II	0
20 7 13	19 6 14	638.33352	4.9	II	1
39 18 21	39 17 22	638.33843	26.4	III	6
39 18 22	39 17 23	638.33843	26.4	III	6
17 8 10	16 7 9	638.83478	17.4	II	5
17 8 9	16 7 10	638.83478	17.4	II	0

Таблица 1.1 (продолжение)

11 10 1	10 9 2	638.89495	29.4	II	-1
11 10 2	10 9 1	638.89495	29.4	II	-1
26 16 10	26 15 11	638.94758	30.9	III	-2
26 16 11	26 15 12	638.94758	30.9	III	-2
14 9 5	13 8 6	638.97827	28.4	II	1
14 9 6	13 8 5	638.97827	28.4	II	1
21 7 15	20 6 14	639.05920	25.3	III	-8
16 15 1	16 14 2	639.24124	36.2	III	-3
16 15 2	16 14 3	639.24124	36.2	III	-3
21 7 14	20 6 15	639.24905	19.6	III	-6
25 16 10	25 15 11	639.34953	3.3	II	-6
25 16 9	25 15 10	639.34953	3.3	II	-6
15 15 0	15 14 1	639.49048	30.4	III	-2
15 15 1	15 14 2	639.49048	30.4	III	-2
24 16 8	24 15 9	639.73930	5.8	II	7
24 16 9	24 15 10	639.73930	5.8	II	7
22 7 16	21 6 15	639.82172	33.5	III	-1
18 8 10	17 7 11	639.83840	8.6	II	-2
12 10 3	11 9 2	640.01906	30.0	II	2
12 10 2	11 9 3	640.01906	30.0	II	2
15 9 7	14 8 6	640.05157	27.4	II	4
15 9 6	14 8 7	640.05157	27.4	II	4
23 16 7	23 15 8	640.11295	4.3	II	2
23 16 8	23 15 9	640.11295	4.3	II	2
22 7 15	21 6 16	640.15130	30.8	III	-7
23 7 17	22 6 16	640.49436	18.3	III	-6
29 17 12	29 16 13	640.64715	12.0	III	4
29 17 13	29 16 14	640.64715	12.0	III	4
21 16 6	21 15 7	640.81671	12.8	II	4
21 16 5	21 15 6	640.81671	12.8	II	4
19 8 12	18 7 11	640.81705	3.8	III	5
23 7 16	22 6 17	641.04856	38.8	III	-9
24 7 18	23 6 17	641.05565	38.2	III	0
28 17 12	28 16 13	641.09696	46.3	III	-3
28 17 11	28 16 12	641.09696	46.3	III	-3
16 9 7	15 8 8	641.10652	60.4	II	2
16 9 8	15 8 7	641.10652	60.4	II	2
13 10 3	12 9 4	641.12732	28.9	II	2
13 10 4	12 9 3	641.12732	28.9	II	2
20 16 4	20 15 5	641.14514	24.5	III	-3
20 16 5	20 15 6	641.14514	24.5	III	-3
19 16 3	19 15 4	641.45860	4.1	II	-6
19 16 4	19 15 5	641.45860	4.1	II	-6
25 7 19	24 6 18	641.47714	35.2	III	0
26 7 20	25 6 19	641.73200	47.5	III	-3
20 8 13	19 7 12	641.76842	5.4	III	-8
27 7 21	26 6 20	641.79876	58.8	III	-5
24 7 17	23 6 18	641.95553	1.3	III	1
26 17 10	26 16 11	641.95615	5.5	II	4

Таблица 1.1 (продолжение)

26 17 9	26 16 10	641.95615	5.5	II	4
11 11 0	10 10 1	642.10021	25.5	II	4
11 11 1	10 10 0	642.10021	25.5	II	4
19 3 16	18 2 17	642.11623	80.4	III	-5
32 18 14	32 17 15	642.16579	63.4	III	3
32 18 15	32 17 16	642.16579	63.4	III	3
14 10 4	13 9 5	642.21944	24.4	II	1
14 10 5	13 9 4	642.21944	24.4	II	1
16 16 0	16 15 1	642.30770	1.9	II	0
16 16 1	16 15 2	642.30770	1.9	II	0
21 8 14	20 7 13	642.69407	11.0	III	-5
21 8 13	20 7 14	642.70739	7.0	III	4
25 7 18	24 6 19	642.88870	41.8	III	-2
23 17 6	23 16 7	643.13408	4.9	II	0
23 17 7	23 16 8	643.13408	4.9	II	0
18 9 9	17 8 10	643.16041	24.2	II	2
18 9 10	17 8 9	643.16041	24.2	II	3
12 11 1	11 10 2	643.22261	27.4	II	-5
12 11 2	11 10 1	643.22261	27.4	II	-5
15 10 6	14 9 5	643.29445	11.5	II	-8
15 10 5	14 9 6	643.29445	11.5	II	-8
22 17 6	22 16 7	643.49775	9.0	II	7
22 17 5	22 16 6	643.49775	9.0	II	7
22 8 15	21 7 14	643.58782	34.1	III	0
21 17 4	21 16 5	643.84511	3.8	II	3
21 17 5	21 16 6	643.84511	3.8	II	3
26 7 19	25 6 20	643.87411	34.7	III	-2
20 17 4	20 16 5	644.17650	7.9	II	-8
20 17 3	20 16 4	644.17650	7.9	II	-8
13 11 2	12 10 3	644.33045	22.6	II	-7
13 11 3	12 10 2	644.33045	22.6	II	-7
16 10 7	15 9 6	644.35453	15.3	II	2
16 10 6	15 9 7	644.35453	15.3	II	2
19 17 2	19 16 3	644.49507	4.8	II	7
19 17 3	19 16 4	644.49507	4.8	II	7
27 18 9	27 17 10	644.51146	29.2	III	-2
27 18 10	27 17 11	644.51146	29.2	III	-2
37 8 30	36 7 29	644.62587	39.2	III	1
27 7 20	26 6 21	644.94709	47.5	III	8
17 17 1	17 16 2	645.08245	5.0	II	3
17 17 0	17 16 1	645.08245	5.0	II	3
20 9 11	19 8 12	645.13364	10.8	II	1
20 9 12	19 8 11	645.13364	10.8	II	2
24 8 17	23 7 16	645.25989	39.8	III	-5
24 8 16	23 7 17	645.34518	33.1	III	1
25 18 8	25 17 9	645.35125	38.2	III	6
25 18 7	25 17 8	645.35125	38.2	III	6
17 10 8	16 9 7	645.39649	21.3	II	1
17 10 7	16 9 8	645.39649	21.3	II	1



Таблица 1.1 (продолжение)

14 11 3	13 10 4	645.42409	25.7	II	4
14 11 4	13 10 3	645.42409	25.7	II	4
31 19 13	31 18 14	645.58431	63.7	III	5
31 19 12	31 18 13	645.58431	63.7	III	5
24 18 6	24 17 7	645.74837	41.0	III	3
24 18 7	24 17 8	645.74837	41.0	III	3
30 19 12	30 18 13	646.07375	60.8	III	1
30 19 11	30 18 12	646.07375	60.8	III	1
21 9 13	20 8 12	646.08729	13.2	II	-1
21 9 12	20 8 13	646.08729	13.2	II	-6
23 18 6	23 17 7	646.13037	50.0	III	-3
23 18 5	23 17 6	646.13037	50.0	III	-3
25 8 17	24 7 18	646.17587	40.3	III	-5
12 12 1	11 11 0	646.39562	35.2	II	-2
12 12 0	11 11 1	646.39562	35.2	II	-2
18 10 9	17 9 8	646.42076	18.1	II	-1
18 10 8	17 9 9	646.42076	18.1	II	-1
15 11 5	14 10 4	646.49996	24.6	II	-5
15 11 4	14 10 5	646.49996	24.6	II	-5
26 8 18	25 7 19	646.98607	45.8	III	-2
28 19 9	28 18 10	647.01170	55.9	III	1
28 19 10	28 18 11	647.01170	55.9	III	1
22 9 14	21 8 13	647.01897	14.7	II	7
22 9 13	21 8 14	647.01897	14.7	II	-4
20 18 3	20 17 4	647.18762	62.4	III	2
20 18 2	20 17 3	647.18762	62.4	III	2
38 21 17	38 20 18	647.31364	42.5	III	8
38 21 18	38 20 19	647.31364	42.5	III	8
27 8 20	26 7 19	647.35486	58.6	III	4
19 10 9	18 9 10	647.42728	16.2	II	2
19 10 10	18 9 9	647.42728	16.2	II	2
27 19 9	27 18 10	647.45910	25.6	III	-3
27 19 8	27 18 9	647.45910	25.6	III	-3
13 12 2	12 11 1	647.50322	22.1	II	3
13 12 1	12 11 2	647.50322	22.1	II	3
16 11 6	15 10 5	647.56135	27.9	II	1
16 11 5	15 10 6	647.56135	27.9	II	1
27 8 19	26 7 20	647.78352	49.0	III	2
26 19 7	26 18 8	647.89204	37.5	III	-7
26 19 8	26 18 9	647.89204	37.5	III	-7
20 10 11	19 9 10	648.41480	13.9	II	1
20 10 10	19 9 11	648.41480	13.9	II	1
31 20 11	31 19 12	648.45998	69.0	III	-3
31 20 12	31 19 13	648.45998	69.0	III	-3
36 21 15	36 20 16	648.50276	74.2	III	8
36 21 16	36 20 17	648.50276	74.2	III	8
28 8 20	27 7 21	648.57407	61.2	III	6
14 12 2	13 11 3	648.59523	33.3	II	5
14 12 3	13 11 2	648.59523	33.3	II	5

Таблица 1.1 (продолжение)

17 11 6	16 10 7	648.60615	23.3	II	4
17 11 7	16 10 6	648.60615	23.3	II	4
24 19 5	24 18 6	648.71560	45.5	III	1
24 19 6	24 18 7	648.71560	45.5	III	1
24 9 16	23 8 15	648.80490	12.2	III	7
21 10 12	20 9 11	649.38279	16.7	II	-1
21 10 11	20 9 12	649.38279	16.7	II	-1
29 20 9	29 19 10	649.44544	62.2	III	-5
29 20 10	29 19 11	649.44544	62.2	III	-5
21 3 18	20 2 19	649.52520	21.7	III	1
18 11 7	17 10 8	649.63324	27.7	II	-5
18 11 8	17 10 7	649.63324	27.7	II	-5
25 9 17	24 8 16	649.65580	30.3	III	0
15 12 3	14 11 4	649.67083	22.9	II	-3
15 12 4	14 11 3	649.67083	22.9	II	-3
28 20 9	28 19 10	649.91802	69.7	III	1
28 20 8	28 19 9	649.91802	69.7	III	1
20 19 2	20 18 3	650.18053	79.0	III	7
20 19 1	20 18 2	650.18053	79.0	III	7
22 10 12	21 9 13	650.33188	10.7	II	5
22 10 13	21 9 12	650.33188	10.7	II	5
26 9 18	25 8 17	650.47689	59.6	III	3
26 9 17	25 8 18	650.49540	34.1	III	1
19 11 9	18 10 8	650.64435	49.4	II	-4
19 11 8	18 10 9	650.64435	49.4	II	-4
13 13 0	12 12 1	650.64435	49.4	II	-5
13 13 1	12 12 0	650.64435	49.4	II	-5
16 12 5	15 11 4	650.73255	24.0	II	5
16 12 4	15 11 5	650.73255	24.0	II	5
25 20 5	25 19 6	651.24735	61.7	III	-2
25 20 6	25 19 7	651.24735	61.7	III	-2
23 10 13	22 9 14	651.25842	9.1	II	-3
23 10 14	22 9 13	651.25842	9.1	II	-2
35 22 13	35 21 14	651.60849	81.3	III	-2
35 22 14	35 21 15	651.60849	81.3	III	-2
20 11 10	19 10 9	651.63863	17.3	II	2
20 11 9	19 10 10	651.63863	17.3	II	2
14 13 2	13 12 1	651.73521	30.1	II	1
14 13 1	13 12 2	651.73521	30.1	II	1
17 12 5	16 11 6	651.77761	24.2	II	4
17 12 6	16 11 5	651.77761	24.2	II	4
30 21 9	30 20 10	651.78493	52.6	III	-3
30 21 10	30 20 11	651.78493	52.6	III	-3
23 20 3	23 19 4	652.05841	25.4	III	-7
28 9 19	27 8 20	652.05841	25.4	III	1
23 20 4	23 19 5	652.05841	25.4	III	-7
32 8 24	31 7 25	652.09568	67.6	III	0
24 10 15	23 9 14	652.16468	9.3	II	1
24 10 14	23 9 15	652.16468	9.3	II	-1

Таблица 1.1 (продолжение)

21 11 11	20 10 10	652.61473	18.3	II	3
21 11 10	20 10 11	652.61473	18.3	II	3
29 9 21	28 8 20	652.71001	8.1	III	6
28 21 8	28 20 9	652.77641	57.5	III	2
28 21 7	28 20 8	652.77641	57.5	III	2
15 13 3	14 12 2	652.81076	19.2	II	5
15 13 2	14 12 3	652.81076	19.2	II	5
27 21 7	27 20 8	653.25112	49.7	III	6
27 21 6	27 20 7	653.25112	49.7	III	6
30 9 22	29 8 21	653.35473	12.5	III	-2
30 9 21	29 8 22	653.55872	37.3	III	5
22 11 12	21 10 11	653.57185	16.3	II	-6
22 11 11	21 10 12	653.57185	16.3	II	-6
26 21 5	26 20 6	653.71073	66.6	III	5
26 21 6	26 20 7	653.71073	66.6	III	5
19 12 7	18 11 8	653.81976	18.8	II	3
19 12 8	18 11 7	653.81976	18.8	II	3
16 13 3	15 12 4	653.87048	25.0	II	4
16 13 4	15 12 3	653.87048	25.0	II	4
26 10 17	25 9 16	653.90894	11.0	III	-2
31 9 23	30 8 22	653.93330	19.7	III	1
25 21 5	25 20 6	654.15545	52.2	III	7
25 21 4	25 20 5	654.15545	52.2	III	7
31 9 22	30 8 23	654.26438	33.8	III	-1
30 22 9	30 21 10	654.40357	54.5	III	4
30 22 8	30 21 9	654.40357	54.5	III	4
34 8 26	33 7 27	654.48523	73.7	III	5
23 11 12	22 10 13	654.51309	15.8	II	5
23 11 13	22 10 12	654.51309	15.8	II	5
27 10 17	26 9 18	654.74682	38.8	III	-7
20 12 9	19 11 8	654.81634	17.9	II	2
20 12 8	19 11 9	654.81634	17.9	II	2
33 9 25	32 8 24	654.81663	0.7	III	-6
14 14 1	13 13 0	654.84733	19.0	II	-2
14 14 0	13 13 1	654.84733	19.0	II	-2
17 13 4	16 12 5	654.91425	20.2	II	-2
17 13 5	16 12 4	654.91425	20.2	II	-2
32 9 23	31 8 24	654.95973	57.2	III	1
24 11 14	23 10 13	655.43308	31.8	III	-4
28 22 7	28 21 8	655.43855	3.7	III	0
24 11 13	23 10 14	655.43855	3.7	III	-1
28 22 6	28 21 7	655.43855	3.7	III	0
28 10 19	27 9 18	655.54266	45.0	III	-5
28 10 18	27 9 19	655.55899	51.2	III	-3
21 12 10	20 11 9	655.79709	14.0	II	9
21 12 9	20 11 10	655.79709	14.0	II	9
15 14 1	14 13 2	655.92006	19.4	II	-5
15 14 2	14 13 1	655.92006	19.4	II	-5
27 22 5	27 21 6	655.93729	50.0	III	3

Таблица 1.1 (продолжение)

27 22 6	27 21 7	655.93729	50.0	III	3
18 13 5	17 12 6	655.94290	22.3	II	-4
18 13 6	17 12 5	655.94290	22.3	II	-4
25 11 14	24 10 15	656.32460	22.5	III	6
25 11 15	24 10 14	656.33870	29.4	III	4
29 10 19	28 9 20	656.34465	57.8	III	-3
22 12 11	21 11 10	656.75868	10.6	II	-6
22 12 10	21 11 11	656.75868	10.6	II	-6
25 22 4	25 21 5	656.89234	42.9	III	4
25 22 3	25 21 4	656.89234	42.9	III	4
19 13 6	18 12 7	656.95601	18.1	II	-3
19 13 7	18 12 6	656.95601	18.1	II	-3
16 14 3	15 13 2	656.97771	45.1	II	-6
16 14 2	15 13 3	656.97771	45.1	II	-6
23 12 12	22 11 11	657.70433	7.8	II	-9
23 12 11	22 11 12	657.70433	7.8	II	-9
31 10 21	30 9 22	657.83459	58.3	III	-2
20 13 8	19 12 7	657.95365	13.5	II	1
20 13 7	19 12 8	657.95365	13.5	II	1
17 14 3	16 13 4	658.01976	12.3	II	-9
17 14 4	16 13 3	658.01976	12.3	II	-9
27 11 17	26 10 16	658.04599	19.5	III	-8
24 12 13	23 11 12	658.63394	11.1	II	2
24 12 12	23 11 13	658.63394	11.1	II	2
28 11 18	27 10 17	658.89143	47.0	III	-6
28 11 17	27 10 18	658.90491	16.3	III	1
21 13 8	20 12 9	658.93503	19.2	II	4
21 13 9	20 12 8	658.93503	19.2	II	4
15 15 0	14 14 1	659.00507	32.4	II	-1
15 15 1	14 14 0	659.00507	32.4	II	-1
18 14 4	17 13 5	659.04734	10.0	II	-2
18 14 5	17 13 4	659.04734	10.0	II	-2
25 12 13	24 11 14	659.54401	13.5	II	-5
25 12 14	24 11 13	659.54401	13.5	II	-5
29 11 19	28 10 18	659.70760	41.5	III	-4
34 10 24	33 9 25	659.86438	24.7	III	7
22 13 9	21 12 10	659.89931	22.3	II	-2
22 13 10	21 12 9	659.89931	22.3	II	-2
19 14 6	18 13 5	660.05926	28.2	II	4
19 14 5	18 13 6	660.05926	28.2	II	4
26 12 15	25 11 14	660.43782	8.3	II	3
26 12 14	25 11 15	660.43782	8.3	II	3
30 11 20	29 10 19	660.49908	19.7	III	1
23 13 11	22 12 10	660.84756	11.9	II	-4
23 13 10	22 12 11	660.84756	11.9	II	-4
20 14 7	19 13 6	661.05388	11.4	II	-7
20 14 6	19 13 7	661.05388	11.4	II	-7
17 15 3	16 14 2	661.10162	12.5	II	1
17 15 2	16 14 3	661.10162	12.5	II	1

Таблица 1.1 (продолжение)

31 11 21	30 10 20	661.26441	51.0	III	-2
31 11 20	30 10 21	661.27965	33.2	III	-1
27 12 16	26 11 15	661.31266	27.4	III	2
27 12 15	26 11 16	661.31266	27.4	III	2
24 13 12	23 12 11	661.77991	7.2	II	1
24 13 11	23 12 12	661.77991	7.2	II	1
21 14 8	20 13 7	662.03402	14.5	II	-5
21 14 7	20 13 8	662.03402	14.5	II	-5
18 15 3	17 14 4	662.12722	19.9	II	-5
18 15 4	17 14 3	662.12722	19.9	II	-5
28 12 16	27 11 17	662.16917	32.5	III	-3
28 12 17	27 11 16	662.16917	32.5	III	-3
25 13 12	24 12 13	662.69481	8.5	III	1
25 13 13	24 12 12	662.69481	8.5	III	1
39 10 29	38 9 30	662.90510	61.3	III	5
22 14 8	21 13 9	662.99803	21.4	II	-5
22 14 9	21 13 8	662.99803	21.4	II	-5
29 12 17	28 11 18	663.00951	21.1	III	0
29 12 18	28 11 17	663.00951	21.1	III	0
16 16 0	15 15 1	663.11893	20.6	II	5
16 16 1	15 15 0	663.11893	20.6	II	5
19 15 5	18 14 4	663.13974	19.6	II	-1
19 15 4	18 14 5	663.13974	19.6	II	-1
26 13 13	25 12 14	663.59268	2.1	III	2
26 13 14	25 12 13	663.59268	2.1	III	2
30 12 19	29 11 18	663.83568	2.4	III	1
30 12 18	29 11 19	663.83568	2.4	III	0
23 14 9	22 13 10	663.94677	8.6	II	2
23 14 10	22 13 9	663.94677	8.6	II	2
35 11 24	34 10 25	664.09326	31.9	III	0
20 15 6	19 14 5	664.13899	18.2	II	2
20 15 5	19 14 6	664.13899	18.2	II	2
17 16 2	16 15 1	664.15450	26.3	II	-8
17 16 1	16 15 2	664.15450	26.3	II	-8
27 13 15	26 12 14	664.47289	11.0	III	-2
27 13 14	26 12 15	664.47289	11.0	III	-2
24 14 10	23 13 11	664.87805	8.0	II	-5
24 14 11	23 13 10	664.87805	8.0	II	-5
21 15 7	20 14 6	665.12629	11.1	II	0
21 15 6	20 14 7	665.12629	11.1	II	0
18 16 2	17 15 3	665.17742	18.5	II	2
18 16 3	17 15 2	665.17742	18.5	II	2
37 11 27	36 10 26	665.23388	83.0	III	9
37 11 26	36 10 27	665.33498	1.4	III	-2
25 14 11	24 13 12	665.79410	17.6	III	-1
25 14 12	24 13 11	665.79410	17.6	III	-1
22 15 8	21 14 7	666.10635	14.1	II	-3
22 15 7	21 14 8	666.10635	14.1	II	-3
29 13 17	28 12 16	666.18220	3.7	III	9

Таблица 1.1 (продолжение)

29 13 16	28 12 17	666.18220	3.7	III	9
26 14 12	25 13 13	666.69351	9.8	III	0
26 14 13	25 13 12	666.69351	9.8	III	0
30 13 18	29 12 17	667.00810	23.8	III	-4
30 13 17	29 12 18	667.00810	23.8	III	-4
23 15 8	22 14 9	667.09302	9.4	II	-4
23 15 9	22 14 8	667.09302	9.4	II	-4
17 17 0	16 16 1	667.18797	18.4	II	-3
17 17 1	16 16 0	667.18797	18.4	II	-3
21 16 5	20 15 6	668.15416	9.5	II	-2
21 16 6	20 15 5	668.15416	9.5	II	-2
18 17 2	17 16 1	668.20539	16.3	II	-3
18 17 1	17 16 2	668.20539	16.3	II	-3
22 16 7	21 15 6	669.11791	10.6	II	3
22 16 6	21 15 7	669.11791	10.6	II	3
19 17 3	18 16 2	669.20809	15.1	II	0
19 17 2	18 16 3	669.20809	15.1	II	0
20 17 4	19 16 3	670.19526	17.3	II	-4
20 17 3	19 16 4	670.19526	17.3	II	-4
27 15 12	26 14 13	670.52619	13.4	III	5
27 15 13	26 14 12	670.52619	13.4	III	5
24 16 8	23 15 9	671.00195	20.1	II	1
24 16 9	23 15 8	671.00195	20.1	II	1
21 17 5	20 16 4	671.16900	20.7	II	6
21 17 4	20 16 5	671.16900	20.7	II	6
32 14 18	31 13 19	671.73848	3.2	III	-4
32 14 19	31 13 18	671.73848	3.2	III	-4
25 16 9	24 15 10	671.92344	12.5	II	-1
25 16 10	24 15 9	671.92344	12.5	II	-1
22 17 6	21 16 5	672.12660	13.5	II	1
22 17 5	21 16 6	672.12660	13.5	II	1
19 18 2	18 17 1	672.21234	21.4	II	-2
19 18 1	18 17 2	672.21234	21.4	II	-2
29 15 15	28 14 14	672.27508	26.6	III	4
29 15 14	28 14 15	672.27508	26.6	III	4
23 17 7	22 16 6	673.07004	104.9	II	-1
23 17 6	22 16 7	673.07004	104.9	II	-1
27 16 12	26 15 11	673.72880	16.3	III	2
27 16 11	26 15 12	673.72880	16.3	III	2
24 17 7	23 16 8	673.99928	4.6	III	-1
24 17 8	23 16 7	673.99928	4.6	III	-1
21 18 3	20 17 4	674.16166	9.9	II	5
21 18 4	20 17 3	674.16166	9.9	II	5
28 16 13	27 15 12	674.61315	6.1	III	-7
28 16 12	27 15 13	674.61315	6.1	III	-7
25 17 8	24 16 9	674.91452	9.1	II	0
25 17 9	24 16 8	674.91452	9.1	II	0
22 18 4	21 17 5	675.11344	7.9	II	2
22 18 5	21 17 4	675.11344	7.9	II	2

Таблица 1.1 (продолжение)

19 19 0	18 18 1	675.20181	17.5	II	5
19 19 1	18 18 0	675.20181	17.5	II	5
29 16 13	28 15 14	675.48944	3.2	III	-2
29 16 14	28 15 13	675.48944	3.2	III	-2
26 17 10	25 16 9	675.81649	12.2	II	9
26 17 9	25 16 10	675.81649	12.2	II	9
30 16 15	29 15 14	676.35888	0.3	III	0
30 16 14	29 15 15	676.35888	0.3	III	0
24 18 6	23 17 7	676.97337	13.9	III	-3
24 18 7	23 17 6	676.97337	13.9	III	-3
21 19 2	20 18 3	677.13592	15.1	II	0
21 19 3	20 18 2	677.13592	15.1	II	0
28 17 11	27 16 12	677.57746	20.5	III	6
28 17 12	27 16 11	677.57746	20.5	III	6
25 18 8	24 17 7	677.88208	21.1	III	-3
25 18 7	24 17 8	677.88208	21.1	III	-3
22 19 4	21 18 3	678.08085	14.0	II	4
22 19 3	21 18 4	678.08085	14.0	II	4
32 16 16	31 15 17	678.10084	53.6	III	2
32 16 17	31 15 16	678.10084	53.6	III	2
29 17 13	28 16 12	678.43742	27.5	III	-1
29 17 12	28 16 13	678.43742	27.5	III	-1
26 18 8	25 17 9	678.77685	23.7	III	0
26 18 9	25 17 8	678.77685	23.7	III	0
20 20 1	19 19 0	679.14542	18.6	III	-6
20 20 0	19 19 1	679.14542	18.6	III	-6
21 20 2	20 19 1	680.09690	2.2	III	1
21 20 1	20 19 2	680.09690	2.2	III	1
28 18 10	27 17 11	680.52406	31.0	III	-1
28 18 11	27 17 10	680.52406	31.0	III	-1
22 20 3	21 19 2	681.03126	17.5	III	-7
22 20 2	21 19 3	681.03126	17.5	III	-7
24 20 5	23 19 4	682.85605	20.1	III	-1
24 20 4	23 19 5	682.85605	20.1	III	-1
25 20 6	24 19 5	683.74542	27.5	III	-4
25 20 5	24 19 6	683.74542	27.5	III	-4
32 18 15	31 17 14	683.85748	2.3	III	-6
32 18 14	31 17 15	683.85748	2.3	III	-6
34 18 16	33 17 17	685.44890	11.4	III	0
34 18 17	33 17 16	685.44890	11.4	III	0
27 20 7	26 19 8	685.48097	2.3	III	-4
27 20 8	26 19 7	685.48097	2.3	III	-4
31 19 12	30 18 13	685.93651	9.9	III	6
31 19 13	30 18 12	685.93651	9.9	III	6
28 20 9	27 19 8	686.32711	38.1	III	-8
28 20 8	27 19 9	686.32711	38.1	III	-8
29 20 10	28 19 9	687.16054	26.8	III	-1
29 20 9	28 19 10	687.16054	26.8	III	-1
26 21 6	25 20 5	687.49673	8.3	III	8

Таблица 1.1 (продолжение)

26 21 5	25 20 6	687.49673	8.3	III	8
37 18 19	36 17 20	687.74804	1.6	III	-1
37 18 20	36 17 19	687.74804	1.6	III	-1
27 21 7	26 20 6	688.33903	1.4	III	3
27 21 6	26 20 7	688.33903	1.4	III	3
28 21 8	27 20 7	689.16742	1.0	III	2
28 21 7	27 20 8	689.16742	1.0	III	2
39 18 21	38 17 22	689.22979	33.5	III	2
39 18 22	38 17 21	689.22979	33.5	III	2
30 21 10	29 20 9	690.78276	6.3	III	-2
30 21 9	29 20 10	690.78276	6.3	III	-2
32 21 12	31 20 11	692.34651	20.9	III	0
32 21 11	31 20 12	692.34651	20.9	III	0
25 23 3	24 22 2	692.52528	33.0	III	-3
25 23 2	24 22 3	692.52528	33.0	III	-3
33 21 13	32 20 12	693.10901	64.9	III	-7
33 21 12	32 20 13	693.10901	64.9	III	-7
37 20 18	36 19 17	693.36004	24.0	III	1
30 22 9	29 21 8	693.38127	34.1	III	9
30 22 8	29 21 9	693.38127	34.1	III	9
36 21 16	35 20 15	695.32975	71.6	III	8
36 21 15	35 20 16	695.32975	71.6	III	8
33 22 11	32 21 12	695.64561	29.0	III	5
33 22 12	32 21 11	695.64561	29.0	III	5
39 21 19	38 20 18	697.44902	23.8	III	0
39 21 18	38 20 19	697.44902	23.8	III	0
32 23 9	31 22 10	698.99419	54.0	III	1