

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

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

МАГИСТЕРСКАЯ ДИССЕРТАЦИЯ

Тема работы
Исследование спектра поглощения молекулы D₂S в районе 3.50 мк: положения линий, интенсивности, полуширины

УДК 539.194:535.34

Студент

Группа	ФИО	Подпись	Дата
ОБМ71	Ерсин Толганай Ерсинкызы		

Руководитель

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Профессор ИШФВП	Бехтерова Е.С.	д.ф.-м.н.		

КОНСУЛЬТАНТЫ ПО РАЗДЕЛАМ:

По разделу «Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение»

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

По разделу «Социальная ответственность»

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

ДОПУСТИТЬ К ЗАЩИТЕ:

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

Томск – 2019 г.

РЕЗУЛЬТАТЫ ОБУЧЕНИЯ

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

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

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

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

УТВЕРЖДАЮ:
 Руководитель ООП
 _____ Лидер А.М. _____
 (Подпись) (Дата) (Ф.И.О.)

ЗАДАНИЕ на выполнение выпускной квалификационной работы

В форме:

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

Студенту:

Группа	ФИО
ОБМ71	Ерсин Толганай Ерсинкызы

Тема работы:

Исследование спектра поглощения молекулы D₂S в районе 3.50 мк: положения линий, интенсивности, полуширины
Утверждена приказом директора (дата, номер) _____

Срок сдачи студентом выполненной работы: _____

ТЕХНИЧЕСКОЕ ЗАДАНИЕ:

<p>Исходные данные к работе <i>(наименование объекта исследования или проектирования; производительность или нагрузка; режим работы (непрерывный, периодический, циклический и т. д.); вид сырья или материал изделия; требования к продукту, изделию или процессу; особые требования к особенностям функционирования (эксплуатации) объекта или изделия в плане безопасности эксплуатации, влияния на окружающую среду, энергозатратам; экономический анализ и т. д.).</i></p>	<p>Объект исследования: Изотополог молекулы сероводород</p>
<p>Перечень подлежащих исследованию, проектированию и разработке вопросов <i>(аналитический обзор по литературным источникам с целью выяснения достижений мировой науки техники в рассматриваемой области; постановка задачи исследования, проектирования, конструирования; содержание процедуры исследования, проектирования, конструирования; обсуждение результатов выполненной работы; наименование дополнительных разделов, подлежащих разработке; заключение по работе).</i></p>	<p>Обзор литературы. Интерпретация спектральных линии полос $\nu_1+\nu_2$, $3\nu_2$, $\nu_2+\nu_3$ в диапазоне 2500 – 3300 см⁻¹. Решение обратной спектроскопической задачи (получение спектроскопических постоянных). Раздел «Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение» Раздел «Социальная ответственность»</p>

Перечень графического материала (с точным указанием обязательных чертежей)	
--	--

Консультанты по разделам выпускной квалификационной работы
(с указанием разделов)

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

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

ГЛАВА 2. Объект и методы исследования
2.1. Общая характеристика молекулы D ₂ S
2.2. Метод комбинационных разностей
2.3. Описание и принцип работы Фурье - спектрометра

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

Задание выдал руководитель:

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Профессор ИШФВП	Бехтерева Е.С.	д.ф.-м.н., профессор		

Задание принял к исполнению студент:

Группа	ФИО	Подпись	Дата
ОБМ71	Ерсин Т.Е.		

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

Школа Инженерная школа ядерных технологий
 Направление подготовки (специальность) Физика
 Уровень образования Экспериментальная физика
 Отделение школы (НОЦ) Магистр
 Период выполнения (осенний / весенний семестр 2018 /2019 учебного года)

Форма представления работы:

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

КАЛЕНДАРНЫЙ РЕЙТИНГ-ПЛАН выполнения выпускной квалификационной работы

Срок сдачи студентом выполненной работы:	
--	--

Дата контроля	Название раздела (модуля) / вид работы (исследования)	Максимальный балл раздела (модуля)
01.08.2018	<i>Обзор литературы</i>	10
10.12.2018	<i>Объект и методы исследования; Расчеты и аналитика</i>	40
01.02.2019	<i>Результаты проведенного исследования</i>	30
01.05.2019	<i>Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение</i>	10
01.05.2019	<i>Социальная ответственность</i>	10

СОСТАВИЛ:

Руководитель ВКР

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Профессор ИШФВП	Бехтерева Е.С.	д.ф. -м.н., профессор		

СОГЛАСОВАНО:

Руководитель ООП

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

РЕФЕРАТ

Выпускная квалификационная работа 113 с., 14 рис., 28 табл., 42 источников, 4 приложение.

Ключевые слова: молекулярная спектроскопия, молекула сероводорода, колебательно-вращательный гамильтониан, симметрия молекул.

Объектом исследования является молекула сероводорода D_2S .

Цель работы – исследование количественных характеристик спектра поглощения молекулы D_2S в районе $3,50 \mu m$.

Анализ, основанный на высокоточных экспериментальных данных сильно резонирующих полос $\nu_1+\nu_2$, $3\nu_2$, $\nu_2+\nu_3$ в диапазоне $2500 - 3300 \text{ см}^{-1}$, включает в себя определение положений и интенсивностей линий, а также спектроскопических параметров модели гамильтониана.

Предметом исследования был выбран спектр, локализованный в диапазоне, который относится к средней области инфракрасного излучения. Метода комбинационных разностей стал основным методом исследования спектра в этой работе. С использованием полученной квантовой информации об энергетических переходах, была решена обратная задача и получены спектроскопические параметры эффективного гамильтониана.

Другой важной задачей являлся анализ интенсивностей колебательно-вращательных линий полос $\nu_1+\nu_2$, $\nu_2+\nu_3$. Как следствие решения обратной задачи, определены параметры в разложении эффективного дипольного момента исследуемых колебательных состояний.

Информация о спектрах молекул, а именно, положения линий и их интенсивность, является необходимой для решения задач в различных областях наук (астрофизика, атмосферная оптика, спектроскопия лазеров и т.п.). Полученные результаты войдут в базы спектроскопических данных, что в свою очередь, говорит об актуальности проведенного исследования.

Оглавление

Введение.....	10
1. Некоторая информация об исследованиях молекулы D ₂ S.....	12
2. Объект и методы исследования.....	14
2.1. Общая характеристика молекулы D ₂ S.....	14
2.2. Методы комбинационных разностей.....	17
2.3. Описание и принцип работы Фурье – спектрометра.....	18
3. Методы теоретического анализа спектров молекул.....	22
3.1. Колебательно – вращательный гамильтониан молекулы.....	22
3.2. Модель колебательно – вращательного эффективного гамильтониана.....	29
4. Результаты проведённого исследования.....	32
4.1. Экспериментальные детали.....	32
4.2. Описание и интерпретация спектров.....	33
4.3. Колебательно – вращательный анализ взаимодействующих полос $\nu_1+\nu_2$, $3\nu_2$, $\nu_2+\nu_3$	34
4.4. Интенсивности линий в спектре поглощения молекулы D ₂ S.....	45
5. Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение.....	51
5.1. Оценка коммерческого потенциала и перспективности проведения научных исследований с позиции ресурсоэффективности и ресурсосбережения.....	51
5.1.1. Потенциальные потребители результатов исследования.....	51
5.1.2. SWOT – анализ.....	52
5.1.3. Диаграмма Исикавы.....	53
5.1.4. Инициация проекта.....	56
5.1.5. Организационная структура и план проекта.....	57
5.1.6. Бюджет научного исследования.....	58
5.1.7. Реестер рисков проекта.....	63
6. Социальная ответственность.....	68
6.1. Правовые и организационные вопросы обеспечения безопасности.....	68
6.1.1. Специальные (характерные для рабочей зоны исследователя) правовые нормы трудового законодательства.....	69

6.1.2. Организационные мероприятия компоновке рабочей зоны исследователя.....	69
6.2. Вредные факторы проектируемой производственной среды.....	71
6.2.1. Отклонение показателей микроклимата.....	73
6.2.2. Превышение уровня шума.....	74
6.2.3. Недостаток естественного света, освещенности рабочей зоны.....	76
6.2.4. Повышенное значение напряжения в электрической цепи, замыкание которой может произойти через тело человека....	80
6.2.5. Пожаровзрывоопасность.....	82
6.3. Организационные мероприятия обеспечения безопасности.....	83
6.4. Экологическая безопасность.....	84
6.5. Защита в чрезвычайных ситуациях.....	85
Заключение.....	87
Список литературы.....	88
Приложение А.....	92
Приложение Б.....	97
Приложение В.....	102
Приложения С.....	105

Введение

Достижения современной колебательно-вращательной спектроскопии молекул позволяют с необходимой достоверностью описывать явления, возникающие в спектрах высокого разрешения. Исследования ИК спектров позволяют извлекать высокоточную информацию об структурных постоянных, параметрах внутримолекулярного поля, а также, об электронном дипольном моменте и т.п. В дополнение к этому, исследование именно ИК спектров важно в первую очередь, по причине того, что они являются так называемыми «отпечатками пальцев» молекул. Это свойство позволяет однозначно по спектру определить наличие или отсутствие определенной молекулы в спектре. Знание интенсивности линий в спектре дает информацию об концентрации (давлении) и об температуре окружающей среды. Такой подход в исследовании молекул обширно применяется при зондировании атмосферы как Земли, так и планет Солнечной системы.

В данной работе рассматривается молекула-изотополог сероводорода (D_2S). Рассмотрим основные критерии, послужившие причиной выбора исследования этой молекулы:

Во-первых, исследование дейтерированных изотопологов является необходимым и важным для уточнения параметров внутримолекулярного потенциального поля. Это связано с тем фактом, что параметры потенциальной функции, записанной через естественные координаты, не зависят от масс ядер.

Во-вторых, D_2S это легкая молекула и по этой причине все эффекты присущие такому классу молекул ярко проявляются в спектре. Как следствие, исследования данных эффектов в молекуле D_2S позволит более подробно описать внутреннюю динамику такого рода молекул.

В–третьих, молекула сероводорода играет важную роль в таких отраслях наук, как астрофизика, экология и т.д. «Следы» данной молекулы были зарегистрированы в спектрах атмосферы Венеры, а также в межзвездной среде.

В данной работе исследуется спектр поглощения колебательно-вращательных полос $\nu_2+\nu_3$, $\nu_1+\nu_2$ и $3\nu_2$ молекулы D_2S и определяются параметры эффективного гамильтониана и эффективного дипольного момента рассматриваемых состояний.

Основываясь на перечисленных выше фактах, можно заключить, что исследование данной молекулы является актуальным и своевременным.

В связи с этим можно сформулировать **цель работы** – исследование количественных характеристик спектра поглощения молекулы D_2S в районе $3,50 \mu m$.

Для реализации цели исследования необходимо решить следующие **задачи**:

1. Выполнить анализ колебательно-вращательных переходов в полосах $\nu_1+\nu_2$, $3\nu_2$ и $\nu_2+\nu_3$.
2. Определить спектроскопические параметры эффективного гамильтониана системы взаимодействующих состояний (110), (030) и (011).
3. Провести измерения экспериментальных интенсивностей линий в спектре.
4. Определить параметры эффективного дипольного момента комбинационных полос $\nu_1+\nu_2$, и $\nu_2+\nu_3$.

1. Некоторая информация об исследованиях молекулы D₂S

Сероводород является важным химическим элементом во многих областях, таких как химия, астрофизика, атмосферная оптика, планетология и др. Он играет важную роль в качестве загрязнителя земной атмосферы. Сероводород образуется в результате извержений вулканов и сжигания топлива в процессе жизнедеятельности человека, [1] - [4]. Участвуя в серном цикле, различные изотопологи сероводорода создают основу как для изучения процессов, имевших место в ранней истории Земли, так и для определения изотопного состава серы в атмосфере Земли в наши дни [5].

Известно, что сероводород наиболее распространен в атмосферах газовых гигантов Солнечной системы, планет вне солнечной системы, красных карликов, межзвездных облаков и т. д. [6] - [11]. В космосе обнаружены не только основная молекула, но и различные изотопологи сероводорода [6] - [16]. По этой причине активно проводятся обширные лабораторные спектроскопические исследования молекулы сероводорода и ее изотопологов.

Сероводород также является одним из немногих примеров, где глобальная аналитическая потенциальная энергия и дипольные поверхности могут быть определены с очень высокой точностью. В этом контексте принципиально важно охарактеризовать спектроскопические свойства всех изотопологов сероводорода, которые имеют одинаковый электронный потенциал гиперповерхности в приближение Борна–Оппенгеймера, как можно более полно и точно, чтобы наложить ограничения на гиперповерхность и для дальнейшего уточнения формулировок многомерных поверхностей потенциала и дипольного момента путем настройки на эксперимент. С этой точки зрения особенно интересно точное исследование спектров высокого разрешения дейтерированного сероводорода.

Несмотря на большие требования многочисленных как фундаментальных, так и прикладных проблем химической физики, проблем

атмосферы, астрофизики и планетологии и др., в количественной информации о характеристиках спектральных линий, до настоящего времени число лабораторных исследований характеристики спектральных линий сероводорода значительно меньше числа соответствующих исследований положений линий (колебательные энергетические структуры), см., [17] - [21]. О характеристиках спектральных линии D_2S в инфракрасных спектрах высокого разрешения насколько нам известно, только одно исследование было опубликовано ранее. [22], в котором обсуждались линейные силы первой триады D_2S .

Поэтому в настоящей работе мы сосредоточимся на изучении колебательно-вращательного спектра высокого разрешения вида D_2S (колебательные спектры D_2S исследовались в работах [23] - [32]) в области $2500 - 3300\text{см}^{-1}$

2. Объект и методы исследования

2.1. Общая характеристика молекулы D_2S

Диоксид серы (двуокись серы) является химическим соединением с формулой D_2S . (см. рисунок 1)

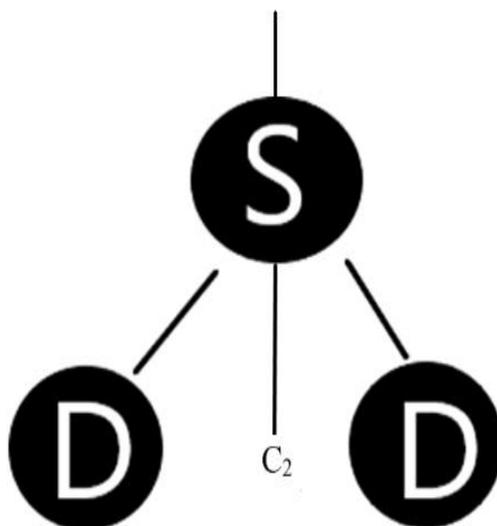


Рисунок 1. Молекула D_2S .

Молекула D_2S представляет собой изогнутую молекулу с точечной группой симметрии C_{2v} . Теория валентной связи, рассматривающая только s- и p- орбитали, описывает связь в терминах резонанса между двумя резонансными структурами

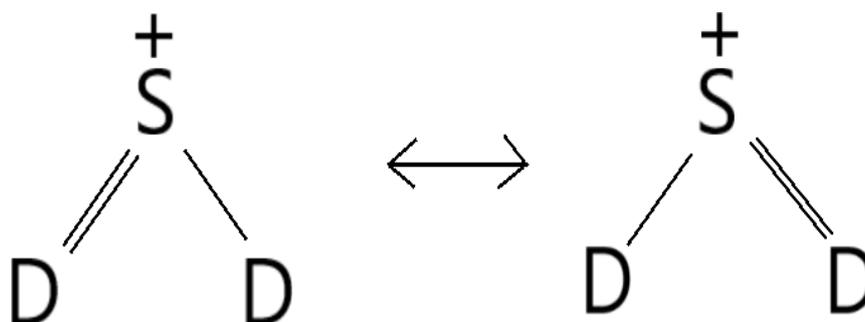


Рисунок 2. Две резонансные структуры диоксида серы.

Молекула D_2S является молекулой типа асимметричного волчка. Асимметричным волчком называется такая молекула, где все три главных

момента инерции различны, соответственно, различны и равновесные вращательные постоянные A , B и C , выражающиеся следующими соотношениями:

$$A = \hbar / 4\pi c I_A, \quad (2.1)$$

$$B = \hbar / 4\pi c I_B, \quad (2.2)$$

$$C = \hbar / 4\pi c I_C. \quad (2.3)$$

Здесь I_A , I_B , I_C – главные моменты инерции в порядке возрастания. Для нелинейной молекулы, содержащей N атомов, существуют $3N-6$ колебательных степеней свободы. Таким образом, D_2S имеет три колебания, называемых «нормальными колебаниями», и они показаны на рис. 3.

Все колебания молекулы могут быть выражены как линейные комбинации нормальных колебаний. Переходы с основного колебательного состояния на однократно возбужденные образуют фундаментальную полосу. Для D_2S все три фундаментальные полосы лежат в инфракрасной области. Они будут соответствовать трем наиболее интенсивным полосам в спектре. Частота деформационного колебания ν_2 наименьшая из трех, а частота антисимметричного валентного колебания ν_3 – максимальному значению.

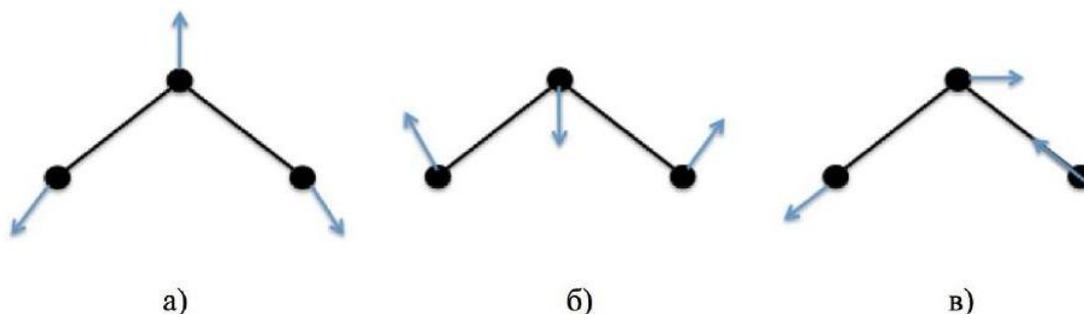


Рисунок 3. Нормальные колебания молекулы D_2S [33]. а) Симметричное растяжение – ν_1 б) Изгиб – ν_2 в) Асимметричное растяжение – ν_3 .

В ИК спектре данной молекулы реализуются полосы, соответствующие переходам между колебательными состояниями симметрии A_1 , B_1 и B_2 . Учитывая изменения квантовых чисел J , K_a и K_c возможны 2 совокупности типов переходов.

1) $A_1 \leftarrow A_1$ (основное колебательное состояние). Такому типу перехода между колебательными состояниями соответствует полоса *a*-типа. Следующие правила отбора справедливы: $\Delta J = 0, \pm 1$, ΔK_a – чётные, ΔK_c – нечётные;

2) $B_1 \leftarrow A_1$ (основное колебательное состояние). В этом случае возможны переходы между вращательными уровнями колебательных состояний симметрии B_1 и A_1 , подчиняющиеся следующим правилам отбора: $\Delta J = 0, \pm 1$, ΔK_a – нечётные, ΔK_c – нечётные (*b*-тип полосы);

С точки зрения теории групп молекулярная группа симметрии исследуемой молекулы изоморфна точечной группе первого рода C_{2v} [34]. Как можно видеть из таблицы 1, группа симметрии C_{2v} содержит в себе 4 неприводимых представления: A_1 , A_2 , B_1 и B_2 ; 4 элемента группы, приводящие молекулу в исходное состояние: E , $C_2(z)$, $\sigma_v(xz)$, $\sigma_v'(yz)$. В последнем столбце таблицы 1 определяется симметрия операторов вращения: T_z , T_x , T_y .

Таблица 1. Типы симметрии и характеры неприводимых представлений молекулы D_2S

C_{2v}	E	$C_2(z)$	$\sigma_v(xz)$	$\sigma_v'(yz)$	Вращательные операторы
A_1	1	1	1	1	J_z
A_2	1	1	-1	-1	
B_1	1	-1	1	-1	J_x
B_2	1	-1	-1	1	J_y

Исходя из симметрии нормальных колебаний, а также используя таблицу характеров (см. таблицу 1) можно определить симметрию рассматриваемых колебательных полос. В результате анализа выяснилось, что $3\nu_2$ (A_1), $\nu_1+\nu_2$ (A_1) относятся к полосам *b*-типа, $\nu_2+\nu_3$ (B_1) является полосой *a*-типа.

2.2. Метод комбинационных разностей

Для того, чтобы определить колебательные уровни энергии возбужденных состояний, необходимо использовать метод комбинационных разностей. Обсудим основную идею данного метода.

На один вращательный уровень возбужденного колебательного состояния возможны переходы сразу с нескольких уровней основного состояния (см. рисунок 4). Предположим, что структура основного колебательного состояния предварительно изучена и известна с достаточно высокой точностью, т. е. известно с хорошей точностью ΔE между вращательными уровнями основного колебательного состояния.

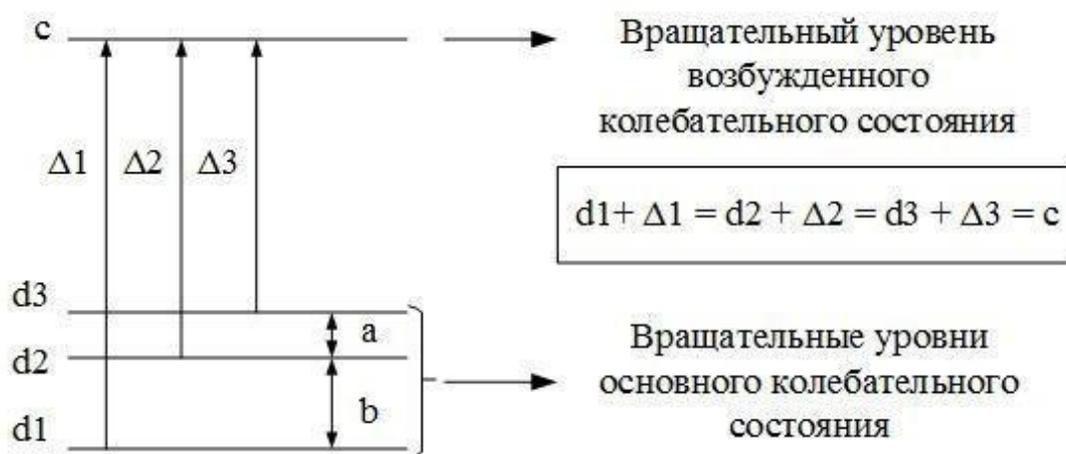


Рисунок 4. Переходы с вращательных уровней основного колебательного состояния на вращательный уровень возбужденного колебательного состояния.

Как видно из рисунка 4, можно знать с довольно высокой точностью значения Δ_1 , Δ_2 и Δ_3 . Эти значения определяют расстояния между «зубчиками», так называемой «расчески», т.е. эквивалентно энергетической структуре основного состояния, то есть расстоянию между его вращательными уровнями. Перемещая полученную «линейку» по спектру, можно зарегистрировать линии, совпадающие сразу с несколькими её делениями. (рис. 5).

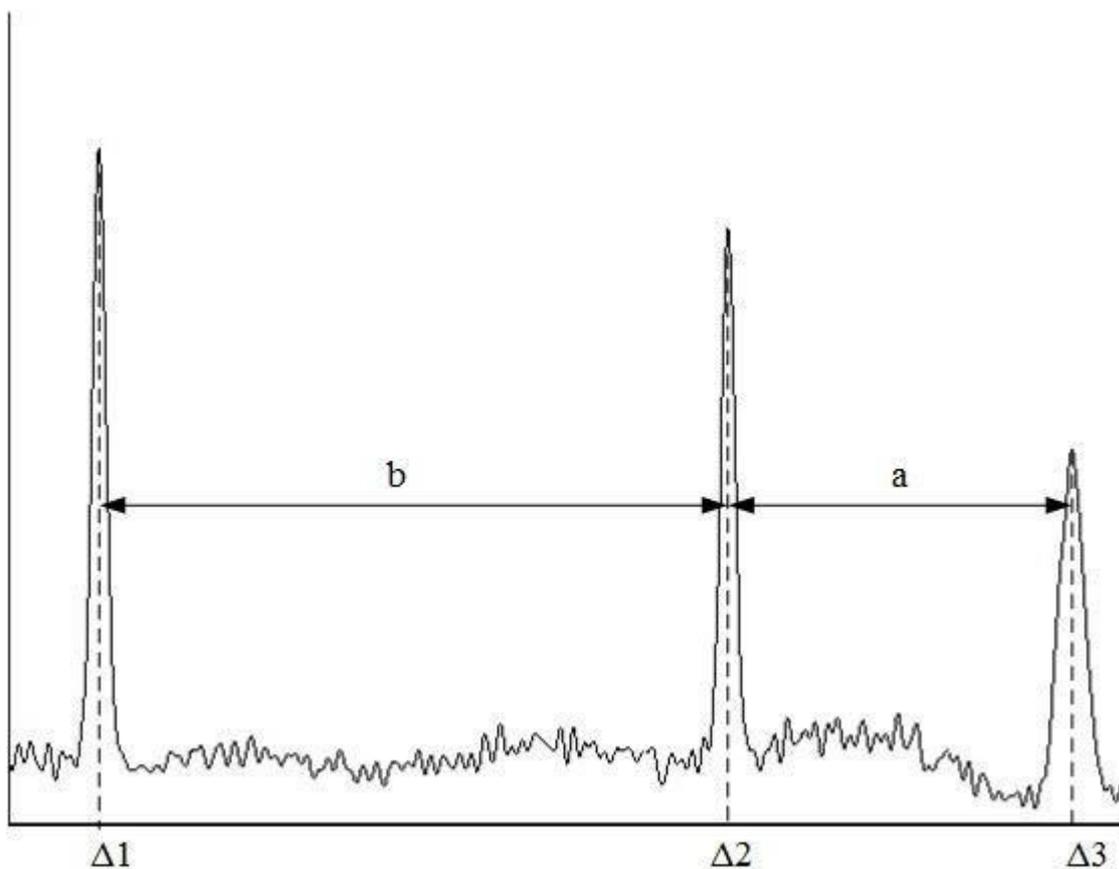


Рисунок 5. Линии, совпадающие с «линейкой».

Таким образом, результатом анализа будут являться данные об энергетических переходах между основным и возбужденным колебательными состояниями. Суммируя ранее известные данные об энергетических положениях нижнего колебательного уровня и экспериментальные энергетические переходы, можно получить энергии возбужденных состояний. Корректным будет набор линий, у которого энергия верхнего состояния будет одинакова для всех возможных переходов. Абсолютной точности совпадения энергий достичь невозможно из-за наличия в спектре перекрывающихся линий. Как следствие, необходимо задавать определенную точность поиска.

2.3. Описание и принцип работы Фурье – спектрометра

Идея метода спектроскопии, основанного на применении двухлучевого интерферометра с последующим преобразованием Фурье, известно давно. В 1891 г. Майкельсон показал, что интенсивность света, измеряемая на выходе

двухлучевого интерферометра с переменной разностью хода, представляет собой косинусное преобразование Фурье падающего излучения. Так как, преобразование Фурье является операцией обратимой, для восстановления исследуемого спектра можно выполнить косинусное Фурье-преобразование интерферограммы, которая описывает изменение интенсивности прошедшего через интерферометр излучения как функцию разности хода между интерферирующими пучками. Но процесс развития Фурье-спектроскопии стал возможен только благодаря современным компьютерам, позволяющим проводить Фурье-преобразование интерферограммы, имеющей миллион и более точек [35, 36].

Для количественного и качественного анализа содержания веществ в газовой пробе, используется один из оптических спектральных установок называемый Фурье-спектрометром. В этой главе мы рассмотрим принцип работы и преимущества использования данного спектрометра.

Главным компонентом Фурье-спектрометра является интерферометр. Наиболее широко известная и применимая конфигурация – интерферометр Майкельсона. Схема интерферометра представлена на рисунке 6.

Расщепитель луча (светоделительная пластина) используется для деления света, подлежащего спектральному анализу, на два пучка. После того, как они отразились на двух разных зеркалах, два луча комбинируются одним и тем же разделителем лучей и отправляются на детектор. Одно из зеркал фиксировано, а другое - подвижное зеркало. Когда фиксированное и подвижное зеркала равноудалены от разделителя луча ($d = 0$), оба луча движутся на одном и том же расстоянии до достижения детектора. Однако, если подвижное зеркало отодвинуть, то один из световых лучей должен будет пройти дополнительное расстояние $\delta = 2d$ (назад и вперед), называемое оптической разностью хода.

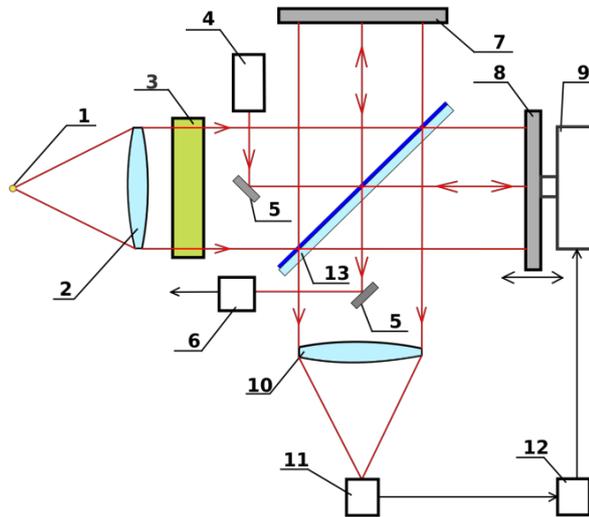


Рисунок 6 – Интерферометр Майкельсона:

1 - Исследуемый источник; 2 - Линза коллиматора; 3 - Кювета с исследуемым веществом; 4 - Опорный лазер; 5 - Вспомогательные зеркала опорного пучка от лазера; 6 - Фотоприемник; 7 - Неподвижное зеркало; 8 - Подвижное зеркало; 9 - Механический привод подвижного зеркала; 10 - Объектив фотоприемника; 11 - Фотоприемник; 12 - Управляющий и обрабатывающий интерферограмму компьютер; 13 - Расщепитель луча.

Рассмотрим монохроматический источник света. На детекторе рекомбинированные лучи будут интерферировать и в результате могут быть либо конструктивными, либо деструктивными. Если $\delta = 0$ (т.е. если два зеркала равноудалены от светоделителя), или если δ является целым числом, кратным длине волны λ ($\delta = n\lambda$, n с целым числом), то два пучка, как говорят, находятся в фазе и образуют конструктивную интерференцию: интенсивность на детекторе равна интенсивности источника.

Напротив, если $\delta = \frac{\lambda}{2}$ или $\delta = (n + 1)\frac{\lambda}{2}$, то это значит, что два луча находятся в одной фазе и создают деструктивную интерференцию: интенсивность на регистраторе равна нулю.

Интенсивность $I(\delta)$, записанная на детекторе, является синусоидальной функцией

$$I(\delta) = \frac{I_0}{2} \left[1 + \cos\left(\frac{2\pi}{\lambda} \delta\right) \right], \quad (2.3)$$

где I_0 – интенсивность источника. Графически это выглядит следующим образом

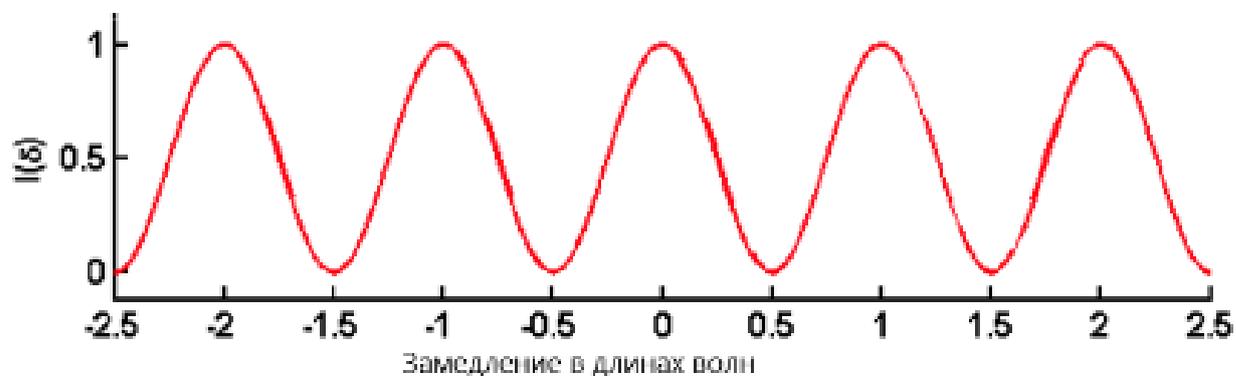


Рисунок 7 – Монохроматическая световая интерферограмма.

Интенсивность $I(\delta)$, измеряемая как функция от оптической разности хода δ , называется интерферограммой. Важно понимать, что период записанной интерферограммы зависит от длины волны света: чем длиннее длина волны, тем больше интервал интерферограммы.

3. Методы теоретического анализа спектров молекул

3.1. Колебательно-вращательный гамильтониан молекулы

Для того чтобы теоретически описать физическое явление, необходимо построить его математическую модель. В связи с этим возникает проблема выбора физически обоснованной математической модели изучаемого объекта. Применительно к теоретическому исследованию спектров высокого разрешения, эта задача сводится к выбору корректного гамильтониана молекулы.

Для наиболее полного и точного описания молекулярной системы необходимо построить гамильтониан, зависящий от координат и спинов всех частиц, образующих эту систему, учесть при этом все возможные взаимодействия между составными частями, и, наконец, решить с этим гамильтонианом уравнение Шрёдингера. Построение такого гамильтониана – достаточно непростая задача, а решение уравнения Шрёдингера с ним – задача ещё сложнее. Поэтому при теоретическом описании спектров молекул используются разнообразные приближения.

В молекулярной спектроскопии обычно используются нерелятивистские гамильтонианы следующего вида:

$$H = T_{яд} + T_{эл} + V \quad (3.1)$$

Здесь $T_{эл}$ и $T_{яд}$ – операторы, описывающие кинетическую энергии ядер и электронов в молекуле, V – оператор, характеризующий потенциальную энергию межъядерного отталкивания и притяжения, а также учитывает в себе энергию межэлектронных связей. В явном виде операторы потенциальной энергии примут форму:

$$T_{яд} = -\frac{\hbar^2}{2} \sum_N \frac{1}{m_N} \left(\frac{\partial^2}{\partial x_N^2} + \frac{\partial^2}{\partial y_N^2} + \frac{\partial^2}{\partial z_N^2} \right) \quad (3.2)$$

$$T_{эя} = -\frac{\hbar^2}{2} \sum_i \frac{1}{m_i} \left(\frac{\partial^2}{\partial x_i^2} + \frac{\partial^2}{\partial y_i^2} + \frac{\partial^2}{\partial z_i^2} \right) \quad (3.3)$$

$$V = \sum_{i,j>i} \frac{e^2}{r_{ij}} + \sum_{N,N'>N} \frac{Z_N Z_{N'}}{r_{NN'}} - \sum_{i,N} \frac{e Z_N}{r_{iN}} \quad (3.4)$$

где m_i и m_N – массы электронов и ядер, e и Z_N – значения зарядов электрона и ядер, соответственно, $r_{\alpha\beta}$ – расстояние между двумя частицами α и β . Здесь необходимо отметить, что x_i и x_N – это координаты в пространственно-фиксированной системе координат (ПФС).

Однако данная система координат только усложняет решения нашей задачи. На практике практически всегда выбираются системы координат, так или иначе связанные с самой молекулой, а именно, такие, центр которых расположен в центре масс молекулы и выбор осей определяет ориентацию молекулы. Поэтому возникает важная задача – получить гамильтониан (3.1) в системе координат, связанной с молекулой.

Кратко опишем преобразование оператора (3.1) к оператору, зависящему от трансляционных, колебательных и вращательных переменных. Гамильтониан молекулы, как всякая функция от системы обобщённых координат x_n и их производных $\partial/\partial x_n$, всегда может быть преобразован к системе новых обобщённых координат q_m , если известны законы преобразования для самих координат и их производных:

$$x_n = f_n(q_m), \quad \partial/\partial x_n = f'_n(q_m, \partial/\partial q_l), \quad (3.5)$$

Если якобиан преобразования (3.5) отличен от нуля, то эти соотношения могут быть найдены всегда, притом единственным образом. Поскольку количество задаваемых преобразований бесконечно много, целесообразно выбрать тот вариант, который будет упрощать решение задачи.

Известно достаточно выгодное для нас преобразование координат [37], позволяющее разделить различные виды движения в молекуле:

$$x_{N\alpha} = R_\alpha + \sum_{\beta} K_{\alpha\beta} r'_{N\beta} \quad (3.6)$$

$$x_{i\alpha} = R_\alpha + \sum_{\beta} K_{\alpha\beta} r'_{i\beta} \quad (3.7)$$

где $x_{N\alpha}$ и $x_{i\alpha}$ – проекции векторов на декартовы оси, характеризующие положение N -го ядра и i -го электрона в ПФС; R_α – проекции вектора начала системы координат в молекуле относительно пространственной; K – матрица поворота (направляющих косинусов).

Молекулярная система координат определяется так, чтобы её начало оказалось в центре масс системы. Математически это условие записывается таким образом:

$$\sum_N m_N r'_{N\beta} + \sum_i m_e r'_{i\beta} = 0 \quad (3.8)$$

Здесь $r'_{i\beta}$ – компоненты координат i -го электрона в молекулярной системе. Координаты N -го ядра $r'_{N\beta}$ выбираются в виде

$$r'_{N\beta} = r_{N\beta}^e + \sum_{\lambda} m_N^{-1/2} l_{N\beta\lambda} Q_{\lambda} \quad (3.9)$$

Константы $r_{N\beta}^e$ и $l_{N\beta\lambda}$ – нефиксированные и выбираются произвольным образом; Q_{λ} – колебательные моды. Произвольные константы выберем, исходя из следующих условий:

- когда ядра находятся в положениях равновесия, оси молекулярной системы совпадают с главными осями инерции молекулы;
- $r'_{N\beta}$ совпадает с $r_{N\beta}^e$, когда ядра находятся в положениях равновесия;
- колебания являются нормальными;
- условия Экарта выполняются.

Учитывая независимость колебательных координат Q , математически перечисленные условия можно записать так:

$$\sum_{N\beta\gamma} \varepsilon_{\alpha\beta\gamma} m_N^{1/2} r_{N\beta}^e l_{N\gamma\lambda} = 0 \quad (3.10)$$

$$\sum_{N\alpha} l_{N\alpha\lambda} l_{N\alpha\mu} = \delta_{\lambda\mu} \quad (3.11)$$

$$W_{\lambda\mu} = \left(\frac{\partial^2 V}{\partial Q_\lambda \partial Q_\mu} \right)_{Q=0} = 0, \quad \lambda \neq \mu \quad (3.12)$$

$$\sum_N m_N r'_{N\alpha} r'_{N\beta} = 0, \quad \alpha \neq \beta \quad (3.13)$$

$$\left(\frac{\partial V}{\partial Q_\lambda} \right)_{Q=0} = 0 \quad (3.14)$$

Перепишем условие (3.8) и добавим его к этим соотношениям.

$$\sum_N m_N r'_{N\beta} + \sum_i m_{el} r'_{i\beta} = 0 \quad (3.15)$$

$$\sum_N m_N^{1/2} l_{N\beta\lambda} = 0 \quad (3.16)$$

Количество условий достаточно для определения параметров $r'_{N\beta}$ (из (3.13) – (3.15)), и параметров $l_{N\beta\lambda}$ ((3.10) – (3.12) и (3.16)). Таким образом, можно однозначно задать преобразование координат (3.6) – (3.7).

Однако описанная схема имеет существенный недостаток: чтобы определить координаты ядер и электронов, нужно знать не только конфигурацию ядер, но и относительно ядер положение всех электронов в каждый момент времени (см. условие (3.15)). Это связано с тем, что начало новой координатной системы помещено в центр масс *всей молекулы*.

Более простым и удобным является такое определение новых координат, в которых $r'_{N\beta}$ и $r'_{i\beta}$ берут начало в начале системы координат, расположенной в центре масс *ядер молекулы*. Как следствие, выражения, определяющие координатное преобразование, примут следующий вид [38]:

$$x_{N\alpha} = R_\alpha + \sum_\beta K_{\alpha\beta} \left(r_{N\beta}^e + \sum_\lambda m^{-1/2} l_{N\beta\lambda} Q_\lambda - \frac{m_{el}}{M} \sum_i r_{i\beta} \right) \quad (3.17)$$

$$x_{i\alpha} = R_\alpha + \sum_\beta K_{\alpha\beta} \left(r_{i\beta} - \frac{m_{el}}{M} \sum_j r_{j\beta} \right) \quad (3.18)$$

где $r_{i\beta}$ и $r_{N\beta}$ – положения электронов и ядер в системе, начало которой фиксировано в центре масс ядер; M – масса всей молекулы. Уравнения для

определения параметров преобразования $r_{N\beta}^e$ и $l_{N\beta\lambda}$ имеют точно такой же вид, как и (3.10) – (3.14), (3.16), изменится лишь условие (3.15):

$$\sum_N m_N r_{N\beta}^e = 0 \quad (3.19)$$

Имея в распоряжении преобразование координат (3.17) – (3.18), мы можем получить закон преобразования операторов импульса. Как показано в работе [27], операторы импульса $P_{N\alpha}$ и $P_{i\alpha}$ определяются через соотношения

$$P_{N\alpha} = \frac{m_N}{M} P_\alpha + \sum_\beta K_{\alpha\beta} \left(\sum_\lambda m_N^{-1/2} l_{N\beta\lambda} P_\lambda - \sum_{\gamma\delta\eta} m_N \varepsilon_{\beta\gamma\eta} r_{N\gamma}^e I_{\eta\delta}''^{-1} N_\delta - \frac{m_{el}}{M_N} \sum_j P_{j\beta} \right) \quad (3.20)$$

$$P_{i\alpha} = \frac{m_{el}}{M} P_\alpha + \sum_\beta K_{\alpha\beta} P_{i\beta} \quad (3.21)$$

где M_N – суммарная масса ядер; P_α – сопряжённый координате импульс поступательного движения молекулы, как целого; P_λ – импульс, сопряжённый координате Q_λ ; $I_{\eta\delta}''$ – элементы тензора момента инерции, зависящие от координат Q_λ . Операторы N_α имеют вид

$$N_\alpha = J_\alpha - G_\alpha - L_\alpha \quad (3.22)$$

где J_α – компоненты полного, G_α – колебательного и L_α – электронного угловых моментов.

$$G_\alpha = \sum_{\lambda\mu} \zeta_{\lambda\mu}^\alpha Q_\lambda P_\mu \quad (3.23)$$

$$L_\alpha = \sum_{\beta\gamma} \varepsilon_{\alpha\beta\gamma} \sum_i r_{i\beta} P_{i\gamma} \quad (3.24)$$

Как следствие достаточно сложных преобразований, гамильтониан молекулы принимает следующий вид:

$$H = \sum_\alpha \frac{P_\alpha^2}{2M} + \frac{1}{2m_{el}} \sum_{i\alpha} P_{i\alpha}^2 + \frac{1}{2M_N} \sum_\alpha \left(\sum_i P_{i\alpha} \right)^2 + \frac{1}{2} \sum_\lambda P_\lambda^2 + \frac{1}{2} \sum_{\alpha\beta} (J_\alpha - G_\alpha - L_\alpha) \tilde{\mu}_{\alpha\beta} (J_\beta - G_\beta - L_\beta) + V - \frac{\hbar^2}{8} \sum_\alpha \tilde{\mu}_{\alpha\alpha} \quad (3.25)$$

Первое слагаемое несет в себе информацию о движение молекулы как целого; второе слагаемое определяет скоростную зависимость электронов; третье слагаемое описывает сдвиг обусловленный различием центра масс

ядер и центра полных масс молекулы; четвертое и пятое – определяет колебание и вращение ядерного остова соответственно; оператор V – преобразованное выражение для потенциальной энергии (3.4). Последний член – уотсоновская добавка к колебательной потенциальной функции.

Гамильтониан нелинейной многоатомной молекулы во «внутренних» координатах представлен формулой (3.25). Следует отметить, что выполненное преобразование гамильтониана справедливо только для нелинейных молекул.

С учетом порядков малости слагаемых, входящих в уравнение (3.25), гамильтониан представим в виде трех частей:

$$H = H_{эл} + \Delta H_1 + \Delta H_2 \quad (3.26)$$

где

$$H_{эл} = \frac{1}{2m_{el}} \sum_{i\alpha} P_{i\alpha}^2 + V \quad (3.27)$$

$$\Delta H_1 = \sum_{\alpha} \frac{P_{\alpha}^2}{2M} + \frac{1}{2} \sum_{\lambda} P_{\lambda}^2 + \frac{1}{2} \sum_{\alpha\beta} \tilde{\mu}_{\alpha\beta} (J_{\alpha} - G_{\alpha})(J_{\beta} - G_{\beta}) \quad (3.28)$$

$$\Delta H_2 = \frac{1}{2M_N} \sum_{\alpha} \left(\sum_i P_{i\alpha} \right)^2 + \frac{1}{2} \sum_{\alpha\beta} \tilde{\mu}_{\alpha\beta} (L_{\alpha} L_{\beta} - (J_{\alpha} - G_{\alpha}) L_{\beta} - L_{\alpha} (J_{\beta} - G_{\beta})) \quad (3.29)$$

Применим для упрощения решения уравнения Шредингера приближение Борна-Оппенгеймера. Основная задача которого, разделить уравнение Шредингера на два. Отдельно рассмотрим задачу о движении электронов в поле медленно движущихся ядер и о движении ядер в некоем усреднённом (т.н. *эффективном*) поле, создаваемом электронами.

Решение электронной задачи рассматривается при условии постоянства времени, в этом случае достаточно решить стационарное уравнение Шредингера:

$$H_{эл} \psi_n^{эл}(\Delta r_{NK}) = E_n(\Delta r_{NK}) \psi_n^{эл}(\Delta r_{NK}) \equiv V_n(\Delta r_{NK}) \psi_n^{эл}(\Delta r_{NK}) \quad (3.30)$$

Здесь важно отметить тот факт, что решения данного уравнения (собственные функции и значения) являются функциями расстояния между ядрами. Определяя значения Δr_{NK} , мы находим *внутримолекулярную*

потенциальную функцию (ВМПФ). На настоящий момент, основным методом решения электронной задачи является методы, основанные на первых принципах (*ab initio*). При этом, разница между экспериментальными и рассчитанными значениями с помощью *ab initio* методов составляет 4-5 порядков. Такой точности недостаточно для решения задач колебательно-вращательной спектроскопии молекул.

С другой стороны, существует метод позволяющий совместить в себе высокоточную экспериментальную информацию и методы операторной теории возмущений.

Рассмотрим уравнение Шрёдингера изолированного состояния. В этом случае, используя основные принципы операторной теории возмущений, можно показать, что после унитарного преобразования эффективным гамильтонианом примет вид:

$$H_n^{\text{эфф}} = V_n(\Delta r_{NK}) + \langle \psi_n^{\text{эл}} | \Delta H_1 | \psi_n^{\text{эл}} \rangle + \quad (3.31)$$

$$+ \langle \psi_n^{\text{эл}} | \Delta H_2 | \psi_n^{\text{эл}} \rangle + \quad (3.32)$$

$$+ \sum_{m \neq n} \frac{\langle \psi_n^{\text{эл}} | \Delta H_1 + \Delta H_2 | \psi_m^{\text{эл}} \rangle \langle \psi_m^{\text{эл}} | \Delta H_1 + \Delta H_2 | \psi_n^{\text{эл}} \rangle}{E_n - E_m} + \dots \quad (3.33)$$

Приближение Борна-Оппенгеймера в явном виде выражается первыми 2 слагаемыми. Адиабатическое приближению, а также принимая во внимание не адиабатические поправки, в совокупности будут определяться формулами (3.32) - (3.33). Таким образом, в приближении Борна-Оппенгеймера гамильтониан имеет вид:

$$H = \frac{1}{2} \sum_{\lambda} P_{\lambda}^2 + \frac{1}{2} \sum_{\alpha\beta} \tilde{\mu}_{\alpha\beta} (J_{\alpha} - G_{\alpha})(J_{\beta} - G_{\beta}) + V \quad (3.34)$$

Рассмотренная схема позволяет в явном виде получить ВМПФ. Как ясно из рассуждений потенциальная функция в этом случае будет точно такой же, что и для изотопически замещенных молекул.

3.2. Модель колебательно-вращательного эффективного гамильтониана

Для решения уравнения Шредингера (УШ) для сложных молекул, необходимо использовать теорию возмущения. В качестве оператора H_0 , с которым решение УШ известно, в колебательно-вращательной задаче удобно выделить чисто колебательный оператор. Тогда оператор h (малая добавка к H_0) должен зависеть от колебательных (a) и вращательных (b) координат. Таким образом, Гамильтониан выбирается обычно в следующем виде:

$$H(a) = H_0(a) + h(a, b) \quad (3.35)$$

При диагонализации данного оператора на собственных функциях гамильтониана на диагонали получится сумма матричных элементов, которые должны вырождаться в числа. Но, на самом деле матричные элементы представляют собой операторы, зависящие от вращательных переменных. При этом, возникает набор не коммутирующих операторов, что значительно усложняет решение задачи.

В этом случае, применяются приближенные методы, позволяющие определить собственные функции и значения оператора Гамильтона. Для решения задач в рамках настоящей магистерской диссертации применялся метод, так называемых эффективных операторов, [39]. Рассмотрим, оператор H_I , который должен быть обязательно эрмитовым, уравнение Шредингера с ним решается и собственную функцию и собственные энергии этого оператора позволяют определить соответствующие величины исходного колебательно-вращательного гамильтониана.

При теоретическом описании спектра, с использованием проинтерпретированных переходов из экспериментальных спектров, применялся метод эффективного гамильтониана. Матричный элемент эффективного гамильтониана на собственных функциях позволяет рассматривать также резонансные взаимодействия между исследуемыми состояниями. Данная модель гамильтониана имеет следующий вид:

$$H^{vib.-rot.} = \sum_{v, \tilde{v}} |v\rangle \langle \tilde{v}| H^{v\tilde{v}} \quad (3.36)$$

где v, \tilde{v} – колебательные состояния и $H^{v\tilde{v}}$ имеет следующий вид:

$$H^{v\tilde{v}} = \begin{bmatrix} 1 & 2 & 3 & \dots \\ 1 & W & F & C \\ 2 & - & W & - \\ 3 & - & - & W \\ \vdots & & & \ddots \end{bmatrix} \quad (3.37)$$

где W представляет собой диагональный блок; F – это недиагональный блок, характеризующий резонансные взаимодействия типа Ферми; C – это недиагональный блок, характеризующий резонансные взаимодействия типа Кориолиса.

В 1968 году James K. G. Watson показал [40], что диагональные блоки эффективного гамильтониана молекул типа асимметричного волчка (т.е. все три вращательные постоянные различны $A \neq B \neq C$) для изолированного колебательного состояния может быть записан как оператор (в A -редукции, Γ представлении), который широко используется в колебательно-вращательной спектроскопии и имеет следующий вид:

$$\begin{aligned} H^{vv} = & E^v + [A^v - \frac{1}{2}(B^v + C^v)]J_z^2 + \frac{1}{2}(B^v + C^v)J^2 + \frac{1}{2}(B^v - C^v)J_{xy}^2 \\ & - \Delta_K^v J_z^4 - \Delta_{JK}^v J_z^2 J^2 - \Delta_K^v J^4 - \delta_K^v [J_z^2, J_{xy}^2]_+ - 2\delta_J^v J^2 J_{xy}^2 \\ & + H_K^v J_z^6 + H_{KJ}^v J_z^4 J^2 + H_{JK}^v J_z^2 J^4 + H_J^v J^6 + [J_{xy}^2, h_K^v J_z^4 + h_{JK}^v J_z^2 J^2 + h_J^v J^4]_+ \\ & + L_K^v J_z^8 + L_{KKJ}^v J_z^6 J^2 + L_{JK}^v J_z^4 J^4 + L_{KJJ}^v J_z^2 J^6 + L_J^v J_z^8 + \dots \end{aligned} \quad (3.38)$$

где J_α ($\alpha=x, y, z$) являются компонентами оператора углового момента, определённого в молекулярно-фиксированной системе координат; $J_{xy}^2 = J_x^2 - J_y^2$; $[..., ...]_+$ обозначает антикоммутатор; E являются центром полосы; A^v, B^v и C^v являются вращательными постоянными, связанными с колебательными состояниями (v); $\Delta_K, \Delta_{JK}, \Delta_J$ и остальные параметры являются параметрами центробежного искажения различного порядка.

Резонансные взаимодействия между колебательными состояниями в терминах оператора эффективного гамильтониана имеют вид

$$H^{v\tilde{v}} (v \neq \tilde{v}) = H_F^{v\tilde{v}} + H_{C_y}^{v\tilde{v}} + H_{C_x}^{v\tilde{v}} + H_{C_z}^{v\tilde{v}} \quad (3.39)$$

Как написано в уравнении (3.39), существуют $H^{v\tilde{v}} (v \neq \tilde{v})$ операторы четырёх типов, которые соответствуют резонансным взаимодействиям четырёх типов: Ферми, Кориолиса c -типа, Кориолиса b -типа и Кориолиса a -типа.

Если результат произведения симметрий колебательных состояний ν и $\tilde{\nu}, \Gamma = \Gamma^\nu \otimes \Gamma^{\tilde{\nu}}$, равен A_1 , то резонансное взаимодействие между колебательными состояниями ν и $\tilde{\nu}$ относится к типу Ферми и/или Дарлингга-Деннисона. Когда колебательные состояния ν и $\tilde{\nu}$ обладают одной симметрией. Оператор имеет вид:

$$H_F^{v\tilde{v}} = {}^{v\tilde{v}}F_0 + {}^{v\tilde{v}}F_K J_z^2 + {}^{v\tilde{v}}F_J J^2 + \dots + {}^{v\tilde{v}}F_{xy} (J_x^2 - J_y^2) + {}^{v\tilde{v}}F_{Kxy} [J_z^2, (J_x^2 - J_y^2)]_+ + 2 {}^{v\tilde{v}}F_{Jxy} J^2 (J_x^2 - J_y^2) + \dots \quad (3.40)$$

Первый параметр в уравнении (3.40), ${}^{v\tilde{v}}F_0$ – параметр чисто колебательного взаимодействия. Все остальные параметры описывают колебательно-вращательную часть Ферми-взаимодействия. В соответствии с вышеописанным, три оператора $H_{C_y}^{v\tilde{v}}$, $H_{C_x}^{v\tilde{v}}$ и $H_{C_z}^{v\tilde{v}}$ в уравнении (3.39) описывают взаимодействия типа Кориолиса. Если результат $\Gamma = \Gamma^\nu \otimes \Gamma^{\tilde{\nu}}$ равен B_1 , то резонансное взаимодействие относится к типу Кориолиса a -типа.

$$H_{C_y}^{v\tilde{v}} = iJ_y H_{v\tilde{v}}^{(1)} + H_{v\tilde{v}}^{(1)} iJ_y + [J_x, J_z]_+ H_{v\tilde{v}}^{(2)} + H_{v\tilde{v}}^{(2)} [J_x, J_z]_+ + [iJ_y, (J_x^2 - J_y^2)]_+ H_{v\tilde{v}}^{(3)} + H_{v\tilde{v}}^{(3)} [iJ_y, (J_x^2 - J_y^2)]_+ + \dots, \quad (3.41)$$

Если результат $\Gamma = \Gamma^\nu \otimes \Gamma^{\tilde{\nu}}$ равен A_1 , то резонансное взаимодействие относится к типу Кориолиса b -типа

$$H_{C_z}^{v\tilde{v}} = iJ_z H_{v\tilde{v}}^{(1)} + [J_x, J_y]_+ H_{v\tilde{v}}^{(2)} + H_{v\tilde{v}}^{(2)} [J_x, J_y]_+ + [iJ_z, (J_x^2 - J_y^2)]_+ H_{v\tilde{v}}^{(3)} + H_{v\tilde{v}}^{(3)} [iJ_z, (J_x^2 - J_y^2)]_+ + \dots, \quad (3.42)$$

Значения $H_{v\tilde{v}}^{(i)}, (i=1,2,3)$ в уравнении (3.41) также являются операторами, и они могут быть записаны в общем виде, как

$$H_{v\tilde{v}}^{(i)} = \frac{1}{2} {}^{v\tilde{v}}C^i + {}^{v\tilde{v}}C_K^i J_z^2 + \frac{1}{2} {}^{v\tilde{v}}C_J^i J^2 + {}^{v\tilde{v}}C_{KK}^i J_z^4 + {}^{v\tilde{v}}C_{KJ}^i J_z^2 J^2 + \frac{1}{2} {}^{v\tilde{v}}C_{JJ}^i J^4 + \dots \quad (3.44)$$

4. Результаты проведённого исследования

4.1. Экспериментальные детали

Спектр высокого разрешения молекулы D_2S в диапазоне 2500 – 3500 cm^{-1} был зарегистрирован на Фурье – спектрометре Bruker IFS 120 HR в Техническом университете Брауншвейга, Германия. Газ поместили в ячейку Уайта, выполненную из нержавеющей стали. В качестве источника инфракрасного излучения использовался Глобар. Светоделитель изготовлен из бромида калия, который, как правило, используется для оптических элементов в инфракрасной области оптического диапазона. В качестве детектора был выбран для выполнения эксперимента высокочувствительный полупроводниковый Hg-Cd-Te детектор (МСТ).

Длина оптического пути - 12 метров. При этом, температура регистрации спектра равна 300 К, а давлении - 600 Па. Для данных экспериментальных условий экспериментальное разрешение не превышает 0,003 cm^{-1}

Таблица 2 – Список экспериментальных условий, использованных при регистрации спектров D_2S

Спектр	Сильный
Диапазон, cm^{-1}	2500 – 3300
Разрешение, cm^{-1}	0,003
Давление, мбар	6
Температура, К	300
Источник	Globar
Оптическая длина пути, м	12
Светоделитель	KBr
Детектор	МСТ

4.2. Описание и интерпретация спектров

На рисунке 8 проведены обзорные спектры в диапазоне 2500 – 3300 см^{-1} , в пределах которого расположены оберточная полоса $3\nu_2$ и две комбинационные полосы $\nu_1+\nu_2$, $\nu_2+\nu_3$, а также указаны центры всех исследуемых полос. В данном диапазоне самыми «сильными» являются полосы $\nu_1+\nu_2$, $\nu_2+\nu_3$. Запрещённая по симметрии полоса $3\nu_2$ значительно слабее, так как она проявилась только за счет резонансных взаимодействий с другими полосами.

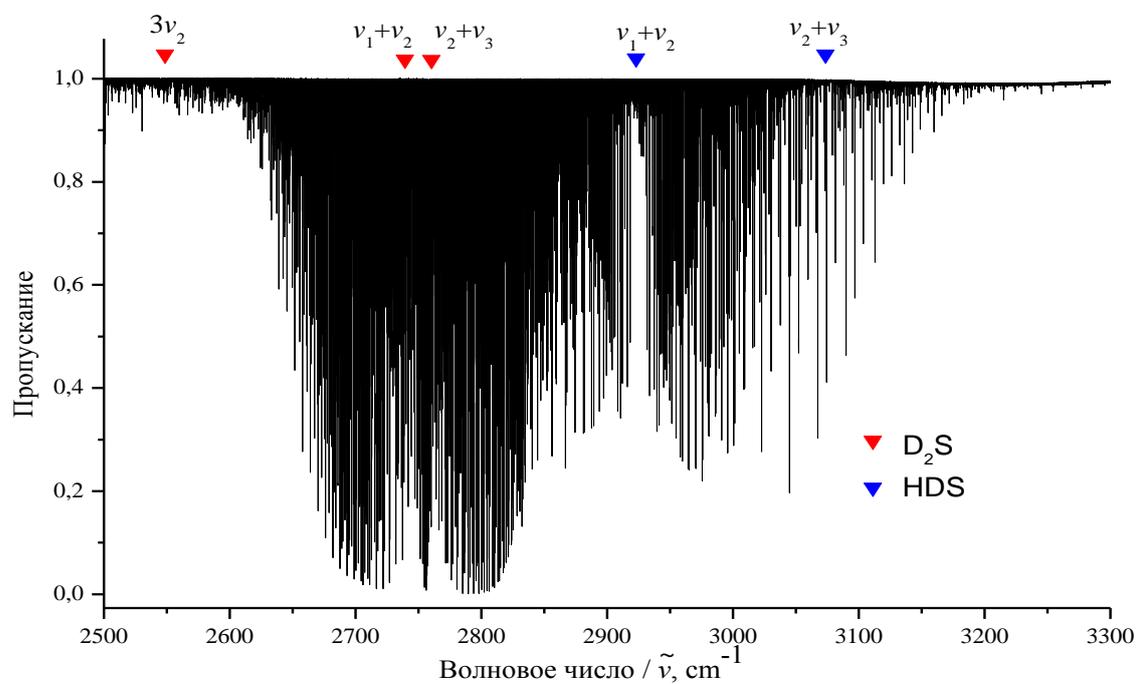


Рисунок 8 – Экспериментально зарегистрированный спектр D_2S в диапазоне 2500 – 3300 см^{-1} .

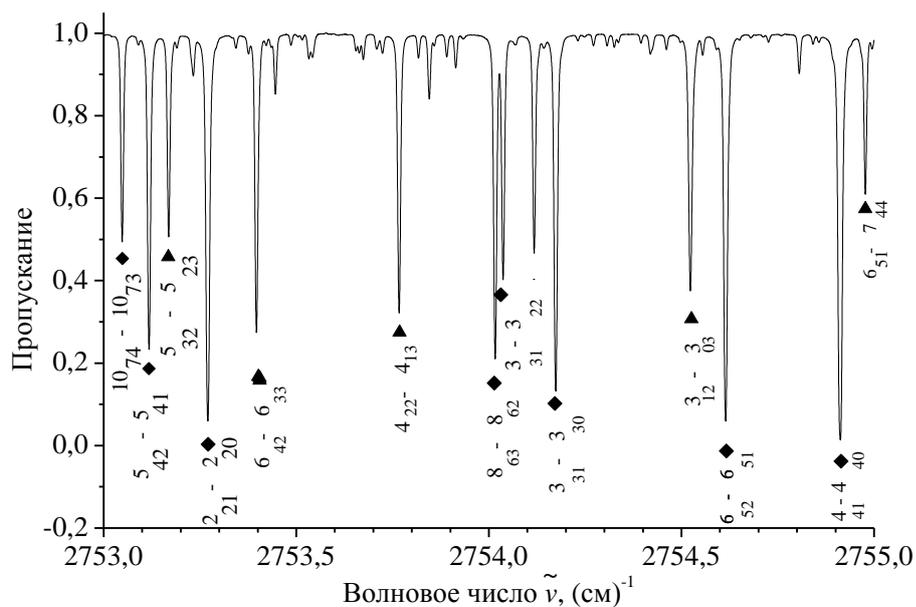


Рисунок 9 – Небольшая часть спектра молекулы D_2S в районе полосы $\nu_1+\nu_2$, $\nu_2+\nu_3$. Линии, принадлежащие полосам $(\nu_1+\nu_2)$ (треугольник) и $(\nu_2+\nu_3)$ (ромбик).

4.3. Колебательно-вращательный анализ взаимодействующих полос $\nu_1+\nu_2$, $3\nu_2$, $\nu_2+\nu_3$.

Анализ спектра полос $\nu_1+\nu_2$, $3\nu_2$ и $\nu_2+\nu_3$ был проведен на основе метода комбинационных разностей с использованием параметров основного состояния, взятых из работы [41].

В ходе анализа был исследован спектр полосы $\nu_2 + \nu_3$ до максимальных значений квантовых чисел $J^{max} = 28$, $K_a^{max} = 15$. Проинтерпретировано более 800 переходов, принадлежащих исследуемой полосе. Полученные данные послужили для определения более 650 колебательно-вращательных энергий возбужденного состояния ($\nu_2=\nu_3=1$). В таблице 3 приведены некоторые значения переходов и соответствующие им энергии для исследуемой полосы молекулы D_2S . Все найденные энергии возбужденного состояния ($\nu_2=\nu_3=1$) приведены в Таблице А1 в приложении А.

Таблица 3. Экспериментально определенные переходы для полосы $\nu_2 + \nu_3$ молекулы D_2S .

Квантовые числа верхнего состояния	Квантовые числа нижнего состояния			Частота перехода см ⁻¹	Пропускание %	Энергия см ⁻¹	Среднее значение энергии см ⁻¹
	J'	K'_a	K'_c				
2 1 1	2	1	2	2760.85665	66.1	2780.63675	2780.6368
	3	1	2	2732.12038	31.8	2780.63700	
	3	3	0	2719.40187	84.7	2780.63676	
3 1 2	3	1	3	2766.38020	49.5	2803.22541	2803.2253
	3	3	1	2742.70938	66.1	2803.22522	
	4	1	3	2727.16855	10.6	2803.22529	
	4	3	1	2709.79437	66.9	2803.22521	
4 1 3	3	3	0	2769.45613	98.3	2830.69102	2830.6910
	4	1	4	2771.80810	75.3	2830.69093	
	4	3	2	2740.71413	65.5	2830.69099	
	5	1	4	2722.51805	28.6	2830.69102	
	5	3	2	2696.45689	89.6	2830.69094	
5 1 4	4	3	1	2769.21978	98.2	2862.65062	2865.6586
	5	1	5	2776.83094	61.3	2862.65058	
	5	3	3	2736.83617	29.3	2862.65143	
	6	1	5	2717.61096	8.4	2862.65071	
	6	3	3	2680.64691	87.9	2862.65093	
6 1 5	5	3	2	2765.05673	99.6	2899.29078	2899.2930
	6	1	6	2781.65439	79.0	2899.29379	
	6	3	4	2732.00738	65.9	2899.29334	
	7	3	4	2664.44255	96.4	2899.29353	

7	1	6	7	1	7	2786.36523	61.1	2940.70273	2940.7030
			7	3	5	2726.80383	49.8	2940.70229	
			8	1	7	2707.38715	4.3	2940.70280	
			8	3	5	2648.74588	92.5	2940.70145	
8	1	7	8	1	8	2790.98387	66.8	2986.89476	2986.8946
			8	3	6	2721.45455	73.8	2886.89486	
			9	1	8	2702.14750	6.1	2986.89490	
			9	3	6	2633.36616	97.2	2986.89458	
9	1	8	9	1	9	2795.51534	73.2	3037.87171	3037.8720
			9	3	7	2716.02579	55.0	3037.87263	
			10	1	9	2696.83182	9.3	3037.87178	
			10	3	7	2618.06977	98.0	3037.87154	
10	1	9	11	1	10	2691.44135	14.4	3093.63098	3093.6313
11	1	10	11	1	11	2804.32002	84.1	3154.16897	3154.1690
			11	3	9	2704.96888	67.8	3154.16903	
			12	1	11	2685.97688	21.1	3154.16889	
			12	3	9	2587.44214	98.9	3154.16855	
12	1	11	12	1	12	2808.59371	87.8	3219.48144	3219.4815
			12	3	10	2699.34371	75.3	3219.48137	
			13	1	12	2680.43905	30.9	3219.48127	
13	1	12	13	1	13	2812.78131	89.9	3289.56330	3289.5634
			13	3	11	2693.65356	80.9	3289.56352	
			14	1	13	2764.82855	42.0	3289.56347	
			14	3	11	2556.67131	95.5	3289.56255	
14	1	13	14	1	14	2816.88394	94.1	3364.41051	3364.4105
			14	3	12	2687.89868	86.6	3364.41055	
			15	1	14	2669.14594	53.4	3364.41033	
15	1	14	15	1	15	2820.90049	95.9	3444.01647	3444.0165
			15	3	13	2682.07890	90.6	3444.01656	

	16	1	15	2663.39192	64.2	3444.01638	
16 1 15	16	1	16	2824.83213	96.6	3528.37646	3528.3760
	16	3	14	2676.19478	93.8	3528.37584	
	17	1	16	2657.56704	74.3	3528.37565	
17 1 16	16	3	13	2697.26889	86.3	3615.54355	3615.5438
	17	1	17	2826.73925	80.3	3615.54462	
18 1 17	18	3	16	2663.31431	93.8	3710.40751	3710.4096
	19	1	18	2644.78843	80.5	3710.40944	
19 1 18	18	3	15	2687.22000	97.4	3810.04769	3810.0472

Спектр полосы $\nu_1 + \nu_2$ был исследован до максимальных значений квантовых чисел $J^{max} = 25$, $K_a^{max} = 13$. На основе проведенного спектрального анализа удалось определить квантовые числа для более чем 750 переходов. С учетом P-, Q- и R- ветвей, количество определенных энергий около 160. В таблице 4 представлены некоторые значения переходов и соответствующих им энергий для исследуемой полосы молекулы D_2S . Все найденные энергии возбужденного состояния ($\nu_1 = \nu_2 = 1$) приведены в Таблице Б1 в приложении Б.

Таблица 4. Экспериментально определенные переходы для полосы $\nu_1 + \nu_2$ молекулы D_2S .

Квантовые числа верхнего состояния	Квантовые числа нижнего состояния			Частота перехода см ⁻¹	Пропускание %	Энергия см ⁻¹	Среднее значение энергии см ⁻¹
	J'	K'_a	K'_c				
2 2 1	2	1	2	2752.07449	74.0	2771.85459	2771.8545
	3	1	2	2723.33767	71.0	2771.85429	
	3	3	0	2710.61971	65.0	2771.85460	

3	2	2	4	1	3	2716.58693	29.1	2792.64367	2792.6435
			4	3	1	2699.21251	67.1	2792.64335	
4	2	3	3	3	0	2757.89866	10.2	2819.13355	2819.1335
			4	1	4	2760.25047	70.9	2819.13331	
			4	3	2	2729.15642	68.0	2819.13328	
			5	1	4	2710.96035	48.4	2819.13331	
			5	3	2	2684.89832	92.5	2819.13237	
			5	5	0	2663.09664	73.6	2819.13519	
5	2	4	5	1	5	2764.94186	28.3	2850.76150	2850.7596
			5	3	3	2724.94386	50.8	2850.75913	
			6	1	5	2705.71936	19.9	2850.75912	
			6	3	3	2668.75508	94.0	2850.75910	
6	2	5	6	1	6	2769.61605	74.1	2887.25545	2887.2558
			6	3	4	2719.96952	75.7	2887.25547	
			7	1	6	2700.50843	40.6	2887.25553	
			7	3	4	2652.40469	98.2	2887.25566	
			7	5	2	2628.56751	98.8	2887.25712	
7	2	6	7	1	7	2774.20386	49.6	2928.54136	2928.5419
			7	3	5	2714.64355	65.4	2928.54201	
			7	5	3	2673.94530	91.4	2928.54130	
			8	1	7	2695.22570	10.5	2928.54134	
			8	3	5	2636.58749	97.5	2928.54305	
8	2	7	8	1	8	2778.68887	52.4	2974.59975	2974.7497
			8	3	6	2709.15970	85.0	2974.60001	
			9	1	8	2689.85242	10.2	2974.59981	
			9	3	6	2621.07264	99.3	2974.60106	
9	2	8	9	1	9	2783.06802	58.4	3025.42439	3025.4246
			9	3	7	2703.57840	73.5	3025.42523	
			10	1	9	2684.38442	12.9	3025.42439	

10 2 9	10	1	10	2787.34171	64.4	3081.01209	3081.0127
	10	3	8	2697.91093	74.6	3081.01281	
	11	1	10	2678.82249	15.9	3081.01213	
	11	3	8	2590.15389	99.3	3081.01410	
11 2 10	11	1	11	2791.51088	69.6	3141.35983	3141.3598
	11	3	9	2692.15981	84.4	3141.35996	
	12	1	11	2673.16790	22.6	3141.35991	
	12	3	9	2574.63300	99.5	3141.35941	
12 2 11	12	1	12	2795.57670	73.0	3206.46444	3206.4642
	12	3	10	2686.32646	89.2	3206.46413	
	13	1	12	2667.42173	30.3	3206.46394	
	13	3	10	2559.06126	99.1	3206.46540	
13 2 12	13	1	13	2799.53831	81.9	3276.32030	3276.3201
	13	3	11	2680.40899	67.5	3276.31895	
	14	1	13	2661.58524	39.4	3276.32016	
	14	5	9	2446.94594	97.9	3276.32071	
14 2 13	14	1	14	2803.39737	86.1	3350.92394	3350.9241
	14	3	12	2674.41211	95.3	3350.92398	
	15	1	14	2655.65945	49.0	3350.92384	
15 2 14	15	1	15	2807.15402	90.1	3430.27001	3430.2701
	15	3	13	2668.33252	96.5	3430.27018	
	16	1	15	2649.64546	59.6	3430.26992	
16 2 15	16	1	16	2810.80835	24.8	3514.35269	3514.3532
	16	3	14	2662.17376	97.4	3514.35481	
	16	5	12	2535.41586	99.3	3514.35187	
	17	1	16	2643.54453	69.3	3514.35314	
17 2 16	17	1	17	2814.36240	89.9	3603.16776	3603.1678
	17	3	15	2655.93291	89.4	3603.16821	
	18	1	17	2637.35743	73.9	3603.16733	

Спектр полосы $3\nu_2$ был исследован до максимальных значений квантовых чисел $J^{max} = 15$, $K_a^{max} = 7$. Квантовые числа верхнего и нижнего состояний, частоты переходов, пропускание, значения колебательно-вращательных энергий приведены в таблице 5 в колонках 1, 2, 3, 4 и 5, соответственно.

Таблица 5. Экспериментально определенные переходы для полосы $3\nu_2$ молекулы D_2S .

Квантовые числа верхнего состояния	Квантовые числа нижнего состояния			Частота перехода	Пропускание	Энергия	Среднее значение энергии
	J'	K'_a	K'_c				
2 2 1	2	1	2	2560.06792	97.9	2579.84802	2579.8481
	3	3	0	2518.61323	92.9	2579.84812	
3 2 2	3	1	3	2564.36594	93.4	2601.21114	2601.2114
	3	3	1	2540.69559	91.3	2601.21144	
	4	1	3	2525.15469	86.6	2601.21143	
	4	3	1	2507.78059	92.8	2601.21143	
4 2 3	4	1	4	2569.46348	98.3	2628.34631	2628.3466
	4	3	2	2538.36916	94.4	2628.34602	
	5	1	4	2520.17348	90.3	2628.34645	
	5	3	2	2494.11256	99.0	2628.34661	
5 2 4	4	3	1	2567.20560	97.9	2660.63644	2660.6345
	5	1	5	2574.81432	95.9	2660.63396	
	5	3	3	2534.81853	88.7	2660.63380	
	6	1	5	2515.59463	67.7	2660.63438	
	6	1	6	2580.13620	88.8	2697.77561	
	6	3	4	2530.49149	95.5	2697.77744	

6	2	5	7	1	6	2511.03017	90.0	2697.77727	2697.7770
			7	3	4	2462.92706	99.8	2697.77804	
			7	5	2	2439.08663	60.4	2697.77625	
7	2	6	7	1	7	2585.34580	96.8	2739.68330	2739.6834
			7	3	5	2525.78523	91.8	2739.68370	
			8	1	7	2506.36735	75.9	2739.68299	
			8	3	5	2447.72747	99.3	2739.68303	
8	2	7	8	1	8	2590.41956	97.3	2786.33045	2786.3310
			8	3	6	2520.89069	96.3	2786.33100	
			9	1	8	2501.58282	75.2	2786.33022	
			9	5	4	2389.51234	99.4	2786.33067	
9	2	8	9	3	7	2515.86727	92.8	2837.71410	2837.7133
			10	1	9	2496.67326	77.8	2837.71322	
			10	3	7	2417.91079	99.8	2837.71257	
10	2	9	10	1	10	2600.15913	99.4	2893.82951	2893.8293
			10	3	8	2510.72763	93.5	2893.82951	
			11	1	10	2491.63932	80.1	2893.82895	
			11	5	6	2336.70777	99.1	2893.82963	
11	2	10	11	3	9	2505.47531	94.9	2954.67546	2954.6743
			11	5	7	2427.55616	95.1	2954.67105	
			12	1	12	2486.48328	83.8	2954.67529	
12	2	11	12	3	10	2500.11175	96.5	3020.24942	3020.2472
			13	1	12	2481.20722	87.9	3020.24944	
			13	3	10	2372.84650	99.9	3020.25064	
13	2	12	13	1	13	2613.76136	53.6	3090.54334	3090.5470
			13	3	11	2494.63842	97.2	3090.54838	
			14	1	13	2475.81306	91.0	3090.54799	
14	2	13	14	1	14	2618.04211	95.5	3165.56868	3165.5677
			14	3	12	2489.05535	98.5	3165.56722	

	15	1	14	2470.30293	93.5	3165.56732	
15 2 14	14	3	11	2512.41582	98.9	3245.30707	3245.3045
	15	1	15	2622.19064	94.0	3245.30662	
	16	1	15	2464.67870	95.5	3245.30316	
	16	3	13	2327.02776	99.9	3245.30222	
16 2 15	16	5	12	2350.85238	99.7	3329.78839	3329.7880
17 2 16	17	1	17	2630.19108	96.2	3418.99645	3418.9965
	17	5	13	2335.38038	96.2	3419.00386	
18 2 17	18	3	16	2465.78504	99.7	3512.87823	3512.8782
	19	3	16	2280.60316	92.0	3512.87793	
19 2 18	20	1	19	2441.32423	97.1	3611.55848	3611.5564
20 2 19	20	1	20	2641.42416	95.2	3714.94035	3714.9355
	21	1	20	2435.29141	81.5	3714.93293	
	21	3	18	2249.46455	99.7	3714.93300	

Исследуемые состояния ($v_1=v_2=1$) и ($v_2=v_3=1$), ($v_2=3$) расположены близко, поэтому между ними возникает сильное резонансное взаимодействие типа Кориолиса, что было учтено при анализе спектра и варьировании параметров эффективного гамильтониана. Путем варьирования переходы, характеризующиеся низкими значениями квантового числа J , были использованы для предсказания значений энергий переходов при высоких J .

В результате решения обратной спектроскопической задачи были получены параметры, описывающих вращательную структуру колебательных состояний ($v_1=v_2=1$) и ($v_2=v_3=1$) и параметры их взаимодействия, представленные в Таблицах 6 и 7.

Таблица 6. Спектроскопические параметры ($v_1=v_2=1$) и ($v_2=v_3=1$) состояний молекулы D_2S (в cm^{-1}).

Параметр	($v_1= v_2=1$)	($v_2= v_3=1$)
E	2754.45295(38)	2754.45295(38)
A	5.531911(25)	5.531911(25)
B	4.456155(41)	4.456155(41)
C	2.240459(12)	2.240459(12)
$\Delta_J \times 10^3$	0.181974(28)	0.181974(28)
$\Delta_{JK} \times 10^3$	-0.656040(57)	-0.656040(57)
$\Delta_K \times 10^2$	0.111368(14)	0.111368(14)
$\delta_J \times 10^4$	0.82336(31)	0.82336(31)
$\delta_K \times 10^6$	0.49550(18)	0.49550(18)
$H_J \times 10^7$	0.42743(92)	0.42743(92)
$H_{JK} \times 10^6$	-0.20625(15)	-0.20625(15)
$H_{KJ} \times 10^6$	0.13026(79)	0.13026(79)
$H_K \times 10^6$	0.25044(33)	0.25044(33)
$h_J \times 10^7$	0.2144(25)	0.2144(25)
$h_{JK} \times 10^7$	0.6254(27)	0.6254(27)
$h_K \times 10^6$	0.26488(44)	0.26488(44)
$L_J \times 10^{11}$	-0.953(39)	-0.953(39)
$L_{JK} \times 10^{10}$	0.465(76)	0.465(76)

$L_{JK} \times 10^9$	-0.266(56)	-0.266(56)
$L_{KJJ} \times 10^9$	0.614(33)	0.614(33)
$L_K \times 10^9$	-0.508(19)	-0.508(19)
$l_J \times 10^{11}$	-0.478(34)	-0.478(34)
$l_{JK} \times 10^{10}$	0.114(47)	0.114(47)
$l_{KJ} \times 10^{10}$	-0.343(41)	-0.343(41)
$l_K \times 10^9$	-0.232(21)	-0.232(21)

Таблица 7 – Параметры резонансных взаимодействий типа Кориолиса для взаимодействующих состояний ($v_1=v_2=1, A_1$), ($v_2=v_3=1, B_1$), молекулы D_2S

Параметр	Значение
$C^{(1)}$	0.07911(18)
$C_K^{(1)}$	0.01054(41)
$C_J^{(1)} \times 10^3$	0.3187(53)
$C^{(2)}$	0.06772(24)
$C_K^{(2)} \times 10^4$	0.1027(76)

Полученные в результате решения обратной задачи параметры приведены вместе с 66%-ми доверительными интервалами (в скобках). Следует отметить, что полученные параметры позволяют воспроизвести исходные экспериментальные колебательно-вращательные энергии колебательных состояний ($v_1= v_2=1$) и ($v_2= v_3=1$) ($3v_2$) с точностью $2.8 \times 10^{-4} \text{ см}^{-1}$.

4.4. Интенсивности линий в спектре поглощения молекулы D₂S

Контур спектральной линии молекул в газовой фазе характеризуются тремя основными явлениями уширения: естественное уширение, уширение давлением (при высоких давлениях) и эффект Доплера, вызывающий доплеровское уширение. Уширение давлением приводит необходимости использовать Лоренцевую функцию для описания контура линии. Контур линии подчиняется данному распределению при высоких давлениях. В эффекте Доплера скорость молекул подчиняется распределению Максвелла и имеет гауссову форму. Преимущественно рассматривается при условиях низкого давления. Интенсивность колебательно-вращательной линии определяется из соотношения

$$k_{\sigma}^N = \int \alpha(\sigma') d\sigma' = \frac{8\pi^3\sigma}{4\pi\epsilon_0 3hc} \left[1 - \exp\left(-\frac{hc\sigma}{kT}\right) \right] \frac{g_A}{Q(T)} \exp\left(-\frac{E_A}{kT}\right) R_A^B, \quad (4.4)$$

где величина k_{σ}^N – это интенсивность колебательно-вращательной линии (не зависящая от давления и длины пути поглощения), $\sigma = (E_B - E_A)/hc$ – волновое число перехода, E_B и E_A – энергии верхнего и нижнего состояний, соответственно, g_A – статистический вес, $Q(T)$ – статистическая сумма, $R_A^B = |\langle A|P_z|B\rangle|^2$ – квадрат матричного элемента дипольного момента.

Для определения интенсивности линии обычно применяют различные контуры: Лоренца, Доплера, Фойгта, Армана-Тран, Раутиана и т.д. На настоящий момент точность описания экспериментального контура линии является достаточно хорошей. Однако, вплоть до 2014 спектроскописты пользовались для описания контуров моделью предложенной Фойгтом. Контур Фойгта это свертка доплеровского и лоренцовского контуров. Как показал анализ, контур Фойгта дает недооценку в значениях интенсивностях (вплоть до 10%). Это возникает по причине не учета такого эффекта как изменение скоростей молекул при столкновениях.

По этой причине, группой ученых из «Лаборатории физической и биофизической химии», занимающихся проблемой «Интенсивности и формы линий в спектрах высокого разрешения изотопологов воды из эксперимента и теории» [42] была рекомендована модель контура (контур Армана-Тран), учитывающего эффект описанный выше. Контур Армана-Тран содержит параметр ν_{vs} , который позволяет более корректно описать контур линии, так как из-за эффекта усреднении скоростей молекул при столкновениях, линия становится выше и соответственно уже. Этот контур позволяет гораздо с большей точностью описывать форму линии. Точность описания экспериментальной линии контуром Армана-Тран не превышает 1%.

В качестве иллюстрации анализа на рисунке 10 показаны примеры соответствия экспериментальных форм линии переходов полосы $\nu_1 + \nu_2$.

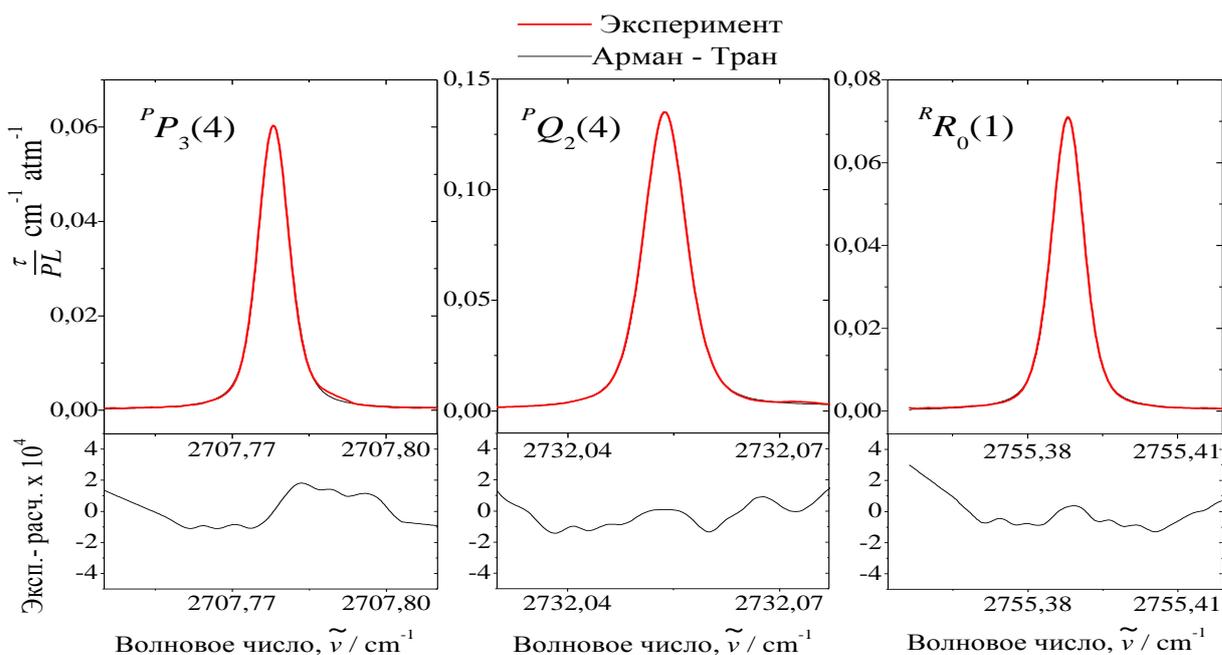


Рисунок 10 – Соответствие экспериментальных и рассчитанных форм спектральных линий полосы $\nu_1 + \nu_2$.

В рамках первого шага анализа интенсивностей была решена обратная спектроскопическая задача, то есть, определены спектроскопические параметры гамильтониана (52 диагональных и 5 резонансных блоков гамильтониана) для полос $\nu_1 + \nu_2$, $\nu_2 + \nu_3$ и $3\nu_2$. Полученные из решения обратной спектроскопической задачи параметры воспроизводят положения

3572 линий с точностью $0,0042 \text{ см}^{-1}$. Статистическая информация для рассматриваемых полос представлена в таблице 8. Величины в скобках в колонке 3 обозначают количество линий выбранных для исследования интенсивности. Отметим, при анализе интенсивностей из спектра выбирались отдельно стоящие, не накрытые, не слишком слабые и не перенасыщенные линии.

Таблица 8. Статистическая информация.

Полоса	Центр, см^{-1}	Количество переходов	Количество уровней
$3\nu_2$	2549.07401	675 (0)	271
$\nu_1+\nu_2$	2742.66648	1345 (187)	560
$\nu_2+\nu_3$	2754.45295	1552 (234)	822

В рамках исследования интенсивностей линий молекулы D_2S проведен анализ 421 колебательно-вращательной линии, которые относятся к колебательным полосам $\nu_1+\nu_2$ и $\nu_2+\nu_3$. Описание контура линии проводился путем его подгонки профилем Армана-Тран. Как видно из рисунка 10 точность описания линии данным профилем не превышает 1%. Часть проанализированных переходов располагаются в таблице 9, где приводятся значения интенсивностей линий k^P ($\text{см}^{-2} \cdot \text{атм}^{-1}$), полученные путем подгонки формы линии контуром Армана-Тран (колонка 4) и воспроизведенные с параметрами эффективного дипольного момента из таблицы 10.

Таблица 9. Часть проанализированных интенсивностей линий для полос $\nu_1+\nu_2$ и $\nu_2+\nu_3$ молекулы D_2S .

$J \quad K_a \quad K_c$	$J' \quad K'_a \quad K'_c$	Частота перехода	$k^P_{\text{экс.}} \cdot 10^{-2}, \text{ см}^{-2} \cdot \text{атм}^{-1}$	$k^P_{\text{расч.}} \cdot 10^{-2}, \text{ см}^{-2} \cdot \text{атм}^{-1}$	$\delta, \%$	Полоса
-------------------------	----------------------------	------------------	--	---	--------------	--------

		см ⁻¹				
1	2	3	4	5	6	7
3 1 3	4 1 4	2732.186210	0.183741	0.194335	-5.77	$\nu_2+\nu_3$
4 3 1	4 4 0	2733.719980	0.839420	0.081359	3.08	$\nu_1+\nu_2$
2 2 1	3 2 2	2733.765340	0.118464	0.116470	1.68	$\nu_2+\nu_3$
3 1 2	3 2 1	2736.608130	0.092228	0.085788	6.98	$\nu_1+\nu_2$
2 0 2	3 0 3	2737.106260	0.124478	0.120195	3.44	$\nu_2+\nu_3$
2 1 2	3 1 3	2737.371640	0.219002	0.216970	.93	$\nu_2+\nu_3$
2 2 0	2 1 1	2747.231820	0.170648	0.168273	1.39	$\nu_1+\nu_2$
3 2 1	3 1 2	2749.238280	0.098198	0.102534	-4.42	$\nu_1+\nu_2$
4 2 2	4 1 3	2753.767000	0.175566	0.178307	-1.56	$\nu_1+\nu_2$
5 4 2	5 3 3	2758.397960	0.152296	0.152079	.14	$\nu_1+\nu_2$
3 0 3	2 1 2	2759.364240	0.095688	0.089243	6.73	$\nu_1+\nu_2$
3 1 3	2 0 2	2759.696080	0.185749	0.180238	2.97	$\nu_1+\nu_2$
4 0 4	3 1 3	2764.076730	0.208604	0.207887	.34	$\nu_1+\nu_2$
4 1 4	3 0 3	2764.139430	0.109297	0.104167	4.69	$\nu_1+\nu_2$
5 2 4	5 1 5	2764.941860	0.198991	0.191833	3.60	$\nu_1+\nu_2$
3 1 3	2 1 2	2771.288950	0.065568	0.067735	-3.31	$\nu_2+\nu_3$
3 0 3	2 0 2	2771.526470	0.142040	0.141135	.64	$\nu_2+\nu_3$
3 3 1	2 2 0	2773.541970	0.144420	0.148398	-2.75	$\nu_1+\nu_2$

Заключительный этап анализа включал в себя определение параметров эффективного дипольного момента, которые входят в R_A^B (см. формулу (4.4)) в качестве варьируемых величин. Для этого решалась обратная задача с использованием определенных на предыдущем этапе значения 52 интенсивностей колебательно-вращательных линий. Полученный набор параметров эффективного дипольного момента полос $\nu_1+\nu_2$ и $\nu_2+\nu_3$ можно видеть в таблице 10. Среднеквадратичное отклонение экспериментальных (полученные с помощью контура Армана-Тран) и рассчитанных значений интенсивностей спектральных линий составляет 6,7%.

Таблица 10. Параметры эффективного дипольного момента полосы $\nu_1+\nu_2$ и $\nu_2+\nu_3$ молекулы D_2S (в Дебаях)

Оператор	Параметр	Значение
k_{zx}	$^{110}\mu_1 \cdot 10^{-2}$	0.4303(75)
$\{k_{zz}, iJ_y\}$	$^{110}\mu_5 \cdot 10^{-4}$	-0.287(65)
$\{k_{zz}, \{J_x, J_z\}\}$	$^{110}\mu_6 \cdot 10^{-3}$	0.104(37)
k_{zz}	$^{011}\mu_1 \cdot 10^{-2}$	0.1241(05)
$\{k_{zz}, J^2\}$	$^{011}\mu_2 \cdot 10^{-4}$	-0.393(66)
$\frac{1}{2} [\{k_{zx}, iJ_y\} - \{ik_{zy}, J_x\}]$	$^{011}\mu_4 \cdot 10^{-2}$	-0.1193(40)
$\frac{1}{2} [\{k_{zx}, iJ_y\} + \{ik_{zy}, J_x\}]$	$^{011}\mu_6 \cdot 10^{-3}$	-0.176(69)

a) $\{A, B\} = AB + BA, J_{xy}^2 = J_z^2 - J_y^2$

b) 1σ

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

Студенту:

Группа ОБМ71	ФИО Ерсин Толганай Ерсинкызы
------------------------	--

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

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

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

Перечень вопросов, подлежащих исследованию, проектированию и разработке:

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

Перечень графического материала (с точным указанием обязательных чертежей):

1. *Оценка конкурентоспособности технических решений*
2. *Матрица SWOT*
3. *Альтернативы проведения НИ*
4. *График проведения и бюджет НИ*
5. *Оценка ресурсной, финансовой и экономической эффективности НИ*

Дата выдачи задания для раздела по линейному графику

Задание выдал консультант:

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Доцент ОСГН ШБИП	Меньшикова Екатерина Валентиновна	Кандидат философских наук		

Задание принял к исполнению студент:

Группа ОБМ71	ФИО Ерсин Толганай Ерсинкызы	Подпись	Дата
------------------------	--	----------------	-------------

5. Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение

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

5.1.1. Потенциальные потребители результатов исследования

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

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

5.1.2. SWOT-анализ

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

Таблица 11 – SWOT анализ

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

В5. Возможность улучшения программного обеспечения		
<p style="text-align: center;">Угрозы:</p> <p>У1. Отсутствие спроса на результаты исследования</p> <p>У2. Развитая конкуренция других научных центров</p> <p>У3. Задержки финансирования</p> <p>У4. Ограничение точности эксперимента</p> <p>У5. Повышение издержек</p>	<p>По результатам анализа интерактивной матрицы проекта полей «Сильные стороны и угрозы» можно сделать вывод о том, что возможные угрозы при производстве, такие как отсутствие спроса и развитая конкуренция, могут сильно ослабить позиции данного научного исследования. тематика очень актуальна, и мы имеем оригинальные решения поставленной задачи молекулярной спектроскопии высокого разрешения, поэтому мы имеем конкурентоспособность</p>	<p>По результатам анализа интерактивной матрицы проекта полей «Слабые стороны и угрозы» можно сделать вывод о том, что мы должны развивать новые методы исследования. При необходимости можно стремиться к сотрудничеству с другими научными центрами.</p>

5.1.3. Диаграмма Исикавы

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

Область применения диаграммы:

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

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

анализа:

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

Существует ряд причин, которые оказывают на это влияние.

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

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

2. Материалы исследования. Теоретическое исследование молекул построено на интерпретации колебательно-вращательных молекулярных спектров. Для корректного описания молекулярного спектра необходимо получать спектры с наиболее четкой структурой. Большой вклад делает чистота образца. Образцы сомнительной чистоты приводят к неточному и некорректному описанию полученных экспериментальных данных. Это

влечет за собой к понижению качества исследований. Для решения данной проблемы необходимо закупать образцы чистотой не меньше 99%.

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

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

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

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

На рисунке 11 представлена причинно-следственная диаграмма (диаграмма Исикавы).



Рисунок 11 – Причинно-следственная диаграмма

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

5.1.4. Инициация проекта

Инициация нашего проекта заключается в следующем:

Цель: Анализ спектра поглощения высокого разрешения молекулы D_2S в области $2500 - 3300 \text{ см}^{-1}$.

Задачи:

1. Выполнить анализ колебательно-вращательных переходов в полосах $\nu_1 + \nu_2$, $3\nu_2$, $\nu_2 + \nu_3$.
2. Определить спектроскопические параметры эффективного гамильтониана для системы взаимодействующих состояний $(110)/(030)/(011)$.
3. Провести измерения экспериментальных интенсивностей линий в

спектре.

4. Определить параметры эффективного дипольного момента.

5.1.5. Организационная структура и план проекта

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

Для определения общего содержания работ, уточнения целей и разработки последовательных действий необходимо составить календарный график выполнения НИОКР (таблицы 12 и 13)

Таблица 12 – Календарный план контрольных событий проект

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

Таблица 13 – Календарный план контрольных событий проект



Таблица 14 – Рабочая группа проекта

ФИО, должность Место работы	Роль в проекте	Функции
Бехтерева Е.С. Профессор, ТПУ	Руководитель	<ol style="list-style-type: none"> 1. Разработка ТЗ* 2. Программное обеспечение 3. Оценка полученных результатов
Ерсин Т.Е. Магистр, ТПУ	Инженер	<ol style="list-style-type: none"> 1. Изучение литературы по текущему исследованию 2. Теоретического исследование 3. Анализ и обработка полученных результатов 4. Написание выпускной работы (статей)

*ТЗ – Техническое задание

5.1.6. Бюджет научного исследования

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

Расчет стоимости материальных затрат производится по действующим прейскурантам или договорным ценам. Результаты по данной

статье занесены в таблицу 15.

Таблица 15 – Материальные затраты

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

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

Электроэнергетические затраты за время работы над проектом можно рассчитать, как

$$Q_3 = W \cdot P \cdot t = 0,44 \cdot 176 \cdot 6 \cdot 5,8 = 2695 \text{ руб.}$$

где W – тариф на электроэнергию (5,8 рублей за 1 кВт/ч), P – электроэнергетические затраты компьютера за весь период работы (2 компьютера – 0.44 кВт), t – время работы над проектом в часах.

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

Основная заработная плата рассчитывается на основании отраслевой оплаты труда. Отраслевая система оплаты труда в ТПУ предполагает следующий состав заработной платы: оклад – определяется предприятием. В ТПУ оклады распределены в соответствии с занимаемыми должностями; стимулирующие выплаты – устанавливаются руководителем подразделений за эффективный труд и выполнение дополнительных обязанностей. В раздел включается основная заработная плата научных и инженерно-технических работников непосредственно участвующих в выполнении работ. Величина

расходов по заработной плате определяется исходя из трудоемкости выполняемых работ и действующей системы окладов и тарифных ставок. В состав основной заработной платы включается премия, выплачиваемая 61 ежемесячно из фонда заработной платы в размере 20 –30 % от тарифа или оклада. Расчет основной заработной платы $Z_{осн}$ представлен в таблице. Полная заработная плата включает в себя основную и дополнительную (12-20 % от $Z_{осн}$):

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

Основная заработная плата рассчитывается по следующей формуле:

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

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

Среднедневная заработная плата рассчитывается по формуле:

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

где $Z_{ок}$ – месячный должностной оклад, руб.; M – количество месяцев работы без отпуска в течение года (при отпуске в 48 раб. дней $M = 10.4$ месяца, 6дневная неделя); F_d – действительный годовой фонд рабочего времени (таблица 16).

Таблица 16 – Фонд рабочего времени

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

Руководитель – профессор

Месячный должностной оклад работника:

$$Z_m = Z_{ок} \cdot k_p \quad (5.4)$$

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

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

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

где $k_{доп}$ – коэффициент дополнительной заработной плат. Расчет основной и дополнительной заработной платы приведён в таблице 17.

Таблица 17 – Расчет основной и дополнительной заработной платы

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

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

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

где $k_{внб}$ – коэффициент отчислений на уплату во внебюджетные фонды (пенсионный фонд, фонд обязательного медицинского страхования и пр.). На 2014 г. в соответствии с Федеральным законом от 24.07.2009 №212-ФЗ установлен размер страховых взносов равный 30%. На основании пункта 1 ст.58 закона №212-ФЗ для учреждений, осуществляющих образовательную и научную деятельность в 2014 году водится коэффициент – 0,271. Контрольные цифры отчислений во внебюджетные фонды представлены в таблице 18. Полный сформирование бюджет затрат научно-исследовательского проекта (таблица 18).

Таблица 18 – Отчисления во внебюджетные фонды

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

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

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

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

Накладные расходы представлены в таблице 19.

Таблица 19– Накладные расходы

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

Таблица 20 – Расчет бюджета затрат

Наименование	Сумма, руб
Материальные затраты	7 500
Отчисления во внебюджетные фонды	50 312.88
Затраты по основной заработной плате	169 403,6
Затраты по дополнительной заработной плате	16 940,4
Затраты на электроэнергию	2 695
Накладные расходы	55 903,2
Бюджет затрат	302 755.08

5.1.7. Реестр рисков проекта

Идентифицированные риски проекта включают в себя возможные неопределенные события, которые могут возникнуть в проекте и вызвать последствия, которые повлекут за собой нежелательные эффекты. В таблице 21 сведены возможные риски проекта

Таблица 21 – Реестр рисков проектов

Риск	Потенциальное воздействие	Вероятность наступления (1-5)	Влияние риска (1-5)	Уровень риска	Способы смягчения риска	Условия наступления
Интерпретация не достаточно количественных линий	Невозможность проведения необходимых исследований для научной работы	3	4	высокий	Привлечение дополнительных рабочих сил	Неправильное предсказание

Недостоверность полученных результатов	Низкая точность выводов обратной задачи	3	4	высокий	Тщательное проведение расчетных работ	Неправильное использование используемого программного обеспечения
--	---	---	---	---------	---------------------------------------	---

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

**ЗАДАНИЕ ДЛЯ РАЗДЕЛА
«СОЦИАЛЬНАЯ ОТВЕТСТВЕННОСТЬ»**

Студенту:

Группа	ФИО
0БМ71	Ерсин Толганай Ерсинкызы

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

Тема ВКР:

Исследование спектра поглощения молекулы D₂S в районе 3.50 мкм: положения линий, интенсивности, полуширины.	
Исходные данные к разделу «Социальная ответственность»:	
1. Характеристика объекта исследования (вещество, материал, алгоритм, методика, рабочая зона) и области его применения	Рабочая зона: аудитория 123, корпус №3 НИ ТПУ; Материал: спектр молекулы D ₂ S сероводород.
Перечень вопросов, подлежащих исследованию, проектированию и разработке:	
1. Правовые и организационные вопросы обеспечения безопасности: <ul style="list-style-type: none"> – специальные (характерные при эксплуатации объекта исследования, проектируемой рабочей зоны) правовые нормы трудового законодательства; – организационные мероприятия при компоновке рабочей зоны. 	<ul style="list-style-type: none"> – ГОСТ 12.0.003-2015 Система стандартов безопасности труда (ССБТ). Опасные и вредные производственные факторы. Классификация – ГОСТ 12.2.032-78 Система стандартов безопасности труда (ССБТ). Рабочее место при выполнении работ сидя. Общие эргономические требования – СанПиН 2.2.2/2.4.1340-03 "Гигиенические требования к персональным электронно-вычислительным машинам и организации работы" (с изменениями на 21 июня 2016 года) – ПНД Ф 12.13.1-03 Методические рекомендации. Техника безопасности при работе в аналитических лабораториях (общие положения) – ГОСТ Р ИСО 6385-2016 Эргономика. Применение эргономических принципов при проектировании производственных систем – ГОСТ Р 50923-96. Дисплеи. Рабочее место оператора. Общие эргономические требования и

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

Дата выдачи задания для раздела по линейному графику

Задание выдал консультант:

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

Задание принял к исполнению студент:

Группа	ФИО	Подпись	Дата
ОБМ71	Ерсин Толганай Ерсинкызы		

6. Социальная ответственность

В данной работе проводится моделирование ИК-спектра поглощения молекулы D_2S в районе 3.50μ : положения линий, интенсивности, полуширины.

Результатом исследования является идентификация линий экспериментального спектра, а также набор спектроскопических параметров модели спектра поглощения молекулы D_2S сероводород. Полученные данные будут использоваться для пополнения как российских, так и международных баз данных (HITRAN). Последние, в свою очередь, широко используются для решения многочисленных как теоретических, так и прикладных задач астрофизики, планетологии, атмосферной оптики.

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

6.1 Правовые и организационные вопросы обеспечения безопасности

По данной теме рассматриваются законодательный и нормативные документы:

- 1.ГОСТ 12.0.003-2015. Опасные и вредные производственные факторы. Классификация.
- 2.СН 245-71. Санитарные нормы проектирования промышленных предприятий.
- 3.ГОСТ 12.11.005-88. Общие санитарно-технические требования к воздуху рабочей зоны.
4. ГОСТ 12.1.003-83. Шум. Общие требования безопасности.
- 5.СН 2.2.4/2.1.8.562-96. Шум на рабочих местах, в помещениях жилых, общественных зданий и на территории жилой застройки»
- 6.СНиП 23-05-95. Естественное и искусственное освещение.
- 7.СанПиН 2.2.1/2.1.1.1278-03. Гигиенические требования к естественному, искусственному и совмещенному освещению жилых и общественных зданий.

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

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

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

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

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

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

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

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

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

6.1.2. Организационные мероприятия при компоновке рабочей зоны исследователя.

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

химические, биологические и социальные условия, влияющие на здоровье и безопасность людей, а также на их способность и готовность выполнять стоящие перед ними задачи.

Согласно ГОСТ Р 50923-96 рабочее место с дисплеем должно обеспечивать оператору возможность удобного выполнения работ в положении сидя и не создавать перегрузки костно-мышечной системы. Основными элементами рабочего места оператора являются: рабочий стол, рабочий стул (кресло), дисплей, клавиатура; вспомогательными – пюпитр, подставка для ног. Рабочий стул должен быть подъемно-поворотным и регулируемым по высоте и углам наклона сиденья и спинки, а также расстоянию спинки от переднего края сиденья. Требования каждому из этих элементов рабочего места рассмотрено в ГОСТ Р 50923-96 подробно. Дисплей на рабочем месте оператора должен располагаться так, чтобы изображение в любой его части было различимо без необходимости поднять или опустить голову. Дисплей на рабочем месте должен быть установлен ниже уровня глаз оператора. Угол наблюдения экрана оператором относительно горизонтальной линии взгляда не должен превышать 60° , как показано на рисунке 12.

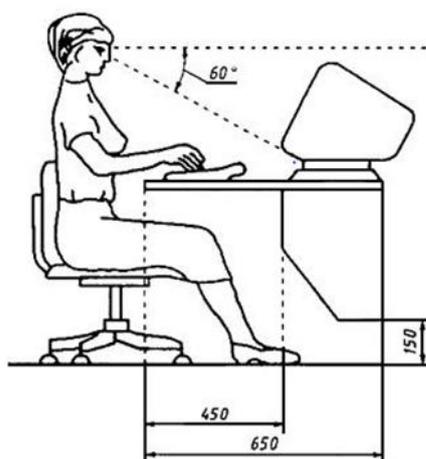


Рисунок 12 – Расположение дисплея на столе

6.2. Вредные факторы проектируемой производственной среды

Для идентификации потенциальных факторов необходимо использовать ГОСТ 12.0.003-2015 «Опасные и вредные производственные факторы. Классификация». Перечень опасных и вредных факторов, характерных для проектируемой производственной среды представлены в виде таблицы 22.

Таблица 22 – Возможные опасные и вредные факторы

Факторы (ГОСТ 12.0.003-2015)	Этапы работ			Нормативные документы
	Разработка	Изготовлене	Эксплуатаця	
1. Вредные производственные факторы, связанные с аномальными микроклиматическими параметрами воздушной среды на местонахождении работающего	+	+	+	ГОСТ 12.1.005-88. СН-245-71
2. Вредные производственные факторы, связанные с	+	+	+	СанПиН 2.2.2/2.4.1340-03

электромагнитными полями переменного характера				
3 Вредные производственные факторы, связанные с акустическими колебаниями в производственной среде	-	-	+	ГОСТ 12.1.003-83 ГОСТ 12.4.026.
4 Вредные производственные факторы, связанные со световой средой	+	+	+	ГОСТ 12.4.026-2015 Система стандартов безопасности труда (ССБТ). Цвета сигнальные, знаки безопасности и разметка сигнальная. Назначение и правила применения. Общие технические требования и характеристики. Методы испытаний.
5. Повышенное значение напряжения в	-	+	+	ГОСТ 12.1.038-82 ГОСТ 12.1.030-81

элек-трической цепи, замыка-ние которой может произойти через тело человека				
6.Пожаровзрывоопас- ность.	-	-	+	НПБ 105-03

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

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

6.2.1. Отклонение показателей микроклимата

Требования, предъявленные к воздуху, т.е. оптимальные и допустимые значения показателей микроклимата в производственных помещениях для работ разной категории тяжести и в зависимости от периода года, представлены в санитарных нормах проектирования промышленных предприятий СН 245-71 и ГОСТ 12.11.005-88 ССБТ «Общие санитарно-технические требования к воздуху рабочей зоны». В таблице 23 представлены оптимальные и допустимые параметры рабочей зоны для

конкретной категории работ - 2а, т.е. работы, связанные с постоянной ходьбой, выполняемые стоя или сидя, но не требующие перемещения тяжестей.

Таблица 23 – Оптимальные и допустимые параметры для рабочей зоны

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

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

Для обеспечения оптимальных и допустимых показателей микроклимата в холодный период года следует применять средства защиты рабочих мест от остекленных поверхностей оконных проемов, чтобы не было охлаждения, а также необходимо установить отопительную систему. В теплый период года необходимо предусмотреть защиту от попадания прямых солнечных лучей. К средствам коллективной защиты можно отнести установки кондиционирования воздуха, основная задача которых поддерживать параметры воздуха в установленных пределах, для обеспечения надежной работы и комфортных условий для работников.

6.2.2. Превышение уровня шума

Для определения допустимого уровня шума на рабочих местах используется ГОСТ 12.1.003-83. ССБТ «Шум. Общие требования безопасности», СН 2.2.4/2.1.8.562-96 «Шум на рабочих местах, в помещениях жилых, общественных зданий и на территории жилой застройки». Согласно ГОСТ 12.1.003 - 83, нормируемой шумовой характеристикой рабочих мест при шуме являются уровни звуковых давлений в децибелах в октановых полосах. В таблице 24 приведены допустимые уровни звукового давления на рабочем месте.

Таблица 24 - 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

В нашей научно-исследовательской лаборатории не находится никаких приборов и устройств, создающих шум, который может оказать влияние на здоровье. Так же в помещении отсутствует вентиляционная система, которая могла бы создавать дополнительные шумы. Лаборатория расположена среди учебных комнат, что означает, что в соседних комнатах так же отсутствует производственное оборудование.

Для защита лаборатории от воздействия шума целесообразно применить в качестве средства коллективной защиты (СКЗ) рациональную планировку предприятий и производственных помещений. При проектировании ограждающих конструкций, предназначенных для защиты от шума следует принимать наиболее эффективные по изоляции воздушного шума конструкции – однослойные с пустотами или из бетонов на пористых заполнителях и ячеистых бетонов, или однослойные конструкции с тонкой

облицовкой толщиной не более 1,5 см (сухая штукатурка и другие подобные материалы) с воздушным промежутком не менее 4 см.

6.2.3. Недостаток естественного света, освещенности рабочей зоны

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

Источник естественного освещения - поток энергии солнца. Естественное освещение является наиболее гигиеничным. Однако по условиям зрительной работы в лаборатории естественного освещения, как правило, недостаточно, поэтому на рабочих местах оказывается задействованным и искусственное освещение. Оно может быть обеспечено с помощью люминесцентных ламп ЛВ (белого цвета) мощностью 20, 40, 80 Вт. Для рабочих мест с искусственным освещением регламентирована допустимая освещенность, согласно действующим санитарным нормам и правилам СНиП 23-05-95.

«Гигиенические требования к естественному, искусственному и совмещенному освещению жилых и общественных зданий. СанПиН 2.2.1/2.1.1.1278-03» определяет наименьшую освещенность рабочих поверхностей в производственных помещениях в зависимости от вида производимой деятельности. В соответствии со СНиП 23-05-95 все зрительные работы делятся на 8 разрядов и в зависимости от размера объекта различения и условий зрительной работы. Принимаем четвертый разряд зрительной работы (средней точности). Допустимые значения наименьшей освещенности рабочих поверхностей в производственных помещениях в соответствии со СНиП 23-05-95 для четвертого разряда зрительной работы приведены в таблице 25. На рабочей поверхности должны отсутствовать резкие тени, которые создают неравномерное распределение поверхностей с различной яркостью в поле зрения, искажает размеры и формы объектов

различия, в результате повышается утомляемость и снижается производительность труда.

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

Таблица 25 – Нормирование значения освещенности на рабочих местах производственных помещений при искусственном освещении

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

Расчёт общего равномерного искусственного освещения горизонтальной рабочей поверхности выполняется методом коэффициента светового потока, учитывающим световой поток, отражённый от потолка и стен. Длина помещения $A = 5,3$ м, ширина $B = 4,7$ м, высота = $3,5$ м. Высота рабочей поверхности над полом $h_p=0.8$ м. Согласно СНиП 23-05-95 необходимо создать освещенность не ниже 150 лк, в соответствии с разрядом зрительной работы.

Площадь помещения: $S = A * B = 24,91$ м². Коэффициент отражения свеж побеленных стен с окнами, без штор $\rho_c = 50\%$, свежепобеленного потолка $\rho_{\Pi} = 70\%$. Коэффициент запаса, соответствующий помещению с малым выделением пыли равен $K_3 = 1,5$. Коэффициент неравномерности для люминесцентных ламп $Z = 1,1$.

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

Интегральным критерием оптимальности расположения светильников является величина λ , которая для люминесцентных светильников с защитной решёткой ОДОР лежит в диапазоне 1,1-1,3. Возьмем минимальное значение $\lambda = 1,1$ и расстояние светильников от перекрытия (свес) $h_c=0.3$ м.

Высота светильника над рабочей поверхностью определяется по формуле: $h = H - h_{pn} - h_c = 2.4$ м.

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

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

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

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

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

На рисунке 13 изображен план помещения и размещения светильников с люминесцентными лампами.

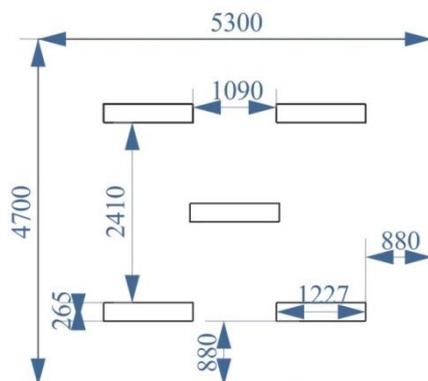


Рисунок 13 – План помещения и размещения светильников с люминесцентными лампами

Индекс помещения определяется по формуле:

$$i = \frac{A*B}{h(A+B)} = 1,04.$$

Коэффициент использования светового потока, показывающий какая часть светового потока ламп попадает на рабочую поверхность, для светильников типа ОДОР с люминесцентными лампами при $\rho_{\text{п}} = 70\%$, $\rho_{\text{с}} = 50\%$ и индексе помещения $i = 1,6$ равен $\eta = 0,42$.

Потребный световой поток группы люминесцентных ламп светильника определяется по формуле:

$$\Phi_{\text{п}} = \frac{EABK_{\text{з}}Z}{N\eta} = 2836 \text{ лм.}$$

Делаем проверку выполнения условия:

$$-10\% \leq \frac{\Phi_{\text{лд}} - \Phi_{\text{п}}}{\Phi_{\text{лд}}} * 100\% \leq 20\%,$$

$$\frac{\Phi_{\text{лд}} - \Phi_{\text{п}}}{\Phi_{\text{лд}}} * 100\% = -9,07\%.$$

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

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

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

Основными причинами воздействия тока на человека являются:

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

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

Электроустановки классифицируют по напряжению: с номинальным напряжением до 1000 В (помещение без повышенной опасности), до 1000 В с

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

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

Лаборатория относится к помещению без повышенной опасности поражения электрическим током (в которой отсутствуют условия, создающие повышенную или особую опасность), поскольку – это помещение сухое, хорошо отапливаемое, с токонепроводящими полами, с температурой 18—20°, с влажностью 40—50%. Заземление металлических нетоковедущих частей обеспечивается присоединением вилки прибора к специальной розетке с заземляющим контактом. Имеется устройство защитного отключения. Защита от прямого прикосновения не требуется, поскольку отсутствуют электроустановки, а электрооборудование находится в зоне системы уравнивания потенциалов, и наибольшее рабочее напряжение не превышает 25 В переменного или 60 В постоянного тока.

Безопасные номиналы характеристик тока:

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

6.2.5. Пожаровзрывоопасность

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

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

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

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

В общественных зданиях и сооружениях на каждом этаже должно размещаться не менее двух переносных огнетушителей. Огнетушители следует располагать на видных местах вблизи от выходов из помещений на высоте не более 1,35 м. Размещение первичных средств пожаротушения в коридорах, переходах не должно препятствовать безопасной эвакуации людей.

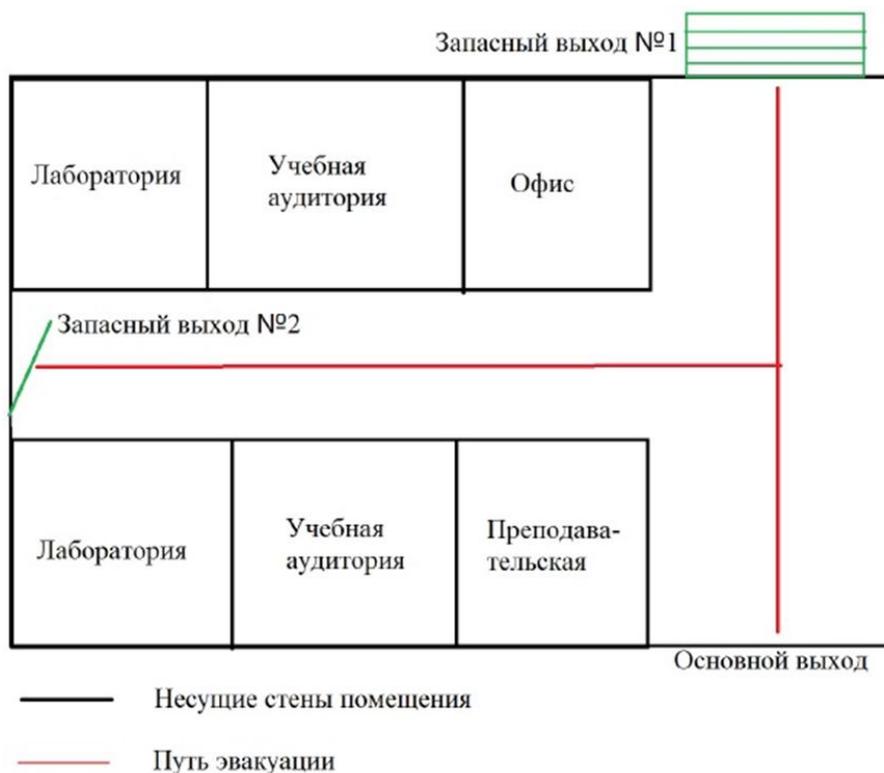


Рисунок 14 – Пути эвакуации

Здание должно соответствовать требованиям пожарной безопасности, а именно, наличие охранно-пожарной сигнализации, плана эвакуации, порошковых или углекислотных огнетушителей с поверенным клеймом, табличек с указанием направления к запасному (эвакуационному) выходу (рисунок 14).

6.3. Организационные мероприятия обеспечения безопасности

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

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

запрещается. Запрещается также приступать к работе, если человек не прошел проверку на знания правила безопасности труда.

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

После окончания работы с установкой необходимо:

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

6.4. Экологическая безопасность

Лаборатория является не производственной, а значит отсутствует производственный мусор (в том числе и пожароопасный, и вредный для окружающей среды). Тем не менее могут быть приняты следующие меры по сохранению окружающей среды: сортировка мусора и последующая утилизация. Отходы, содержащие гальванические элементы (например, батарейки) собирает на переработку компания «Батарейки, сдавайтесь!», у которой расположены точки сбора по всему городу. Макулатура (черновики, отработанная бумага и т.п.) будет собираться в размерах более одного килограмма и утилизироваться по адресу 634024, г. Томск, ул. Трудовая, 11 компанией ООО «Пирс». Предварительно макулатура должна быть отчищена от посторонних предметов, таких как, например, скрепки. Компания ООО «Экоорг» осуществляет утилизацию отработанных картриджей от принтеров практически всех компаний. Предварительная обработка картриджей бывших в употреблении не требуется. ООО Научно-производственное предприятие «ЭКТОМ» осуществляет бесплатные сбор, обезвреживание и транспортировку опасных отходов отработанных люминесцентных ламп.

6.5 Защита в чрезвычайных ситуациях

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

- техногенная;
- природная.

К техногенным ЧС относятся можно отнести пожары, взрывы, диверсии, выбросы ядовитых веществ, пожары, взрывы. К природным ЧС можно отнести природные катаклизмы. К наиболее вероятным техногенной ЧС является пожары. Для предотвращения пожаров, взрывов необходимо соблюдать правила техники безопасности и организовывать мероприятия, упомянутые в разделе 5.2.2.

При возникновении пожаров необходимо:

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

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

Выводы

В данной работе рассмотрены безопасность и гигиена труда при исследовании спектра поглощения молекулы D_2S в районе 3.50μ : положения линий, интенсивности, полуширины. Были выявлены вредные и опасные факторы рабочей зоны, причины и средства защиты, рассмотрены чрезвычайные ситуации и поведение в них.

Социальная ответственность представляет диалектическую взаимосвязь между лицом (работодателем) и обществом (работником), характеризующаяся взаимными правами и обязанностями по выполнению социальных норм и наложением воздействия в случае её нарушения. На основе рассмотрения безопасности в процессе выполнения работы, было ясно, что студенты – будущий руководитель должен нести социальную ответственность за принимаемые решения.

Заключение

В работе выполнен анализ спектра высокого разрешения полос $\nu_1+\nu_2$, $3\nu_2$ и $\nu_2+\nu_3$ молекулы D_2S . В результате найдено более 3500 переходов и более 1600 значений верхних уровней энергий для исследуемых состояний ($\nu_1=\nu_2=1$), ($\nu_2=3$) и ($\nu_2=\nu_3=1$) с максимальными значениями квантовых чисел J^{max} / K_a^{max} равными 25/13, 15/7 и 28/15, соответственно. Полученные экспериментальные данные использовались в процедуре определения параметров эффективного гамильтониана, которые воспроизводят исходные данные с точностью, близкой к экспериментальной. Определены экспериментальные интенсивности для более чем 400 линий.

Список литературы

1. Brimblecombe P , Hammer C , Rodhe H , Ryaboshapko A , Boutron CF . Evolution of the global biogeochemical sulphur cycle. // Chichester, NY: John Wiley & Sons, Ltd; 1989. P. 77–121 .
2. A.Paytan, M. Kastner, D. Campbell, M.H. Thiemens Sulfur isotopic composition of cenozoic seawater sulfate. // Science, 282 (1998), P. 1459-1462.
3. G. Hoshyaripour, M. Hort, B. Langmann. How does the hot core of a volcanic plume control the sulfur speciation in volcanic emission. // Geochem Geophys Geosyst, 13 (2012), P. Q07004.
4. C.F. Llavador, M.H. Espinos, I.E. Mantilla. Estimation of hydrogen sulfide emission rates at several wastewater treatment plants through experimental concentration measurements and dispersion modeling. // J Air Waste Manage Assoc, 62 (2012), P. 758-766.
5. J. Farquhar, J. Savarino, T.L. Jackson, M.H. Thiemens. Evidence of atmospheric sulphur in the martian regolith from sulphur isotopes in meteorites. // Nature, 404 (2000), P. 50.
6. P. Thaddeus, R.W. Wilson, M.L. Kutner, K.B. Jefferts, A.A. Penzias Interstellar hydrogen sulfide. // Astrophys J, 176 (1972), P. L73-L76.
7. V. Wakelam, A. Castets, C. Ceccarelli, B. Lefloch, E. Caux, L. Paganì Sulphur-bearing species in the star forming region 11689n. // Astron Astrophys, 413 (2004), P. 609.
8. C. Visscher, K. Lodders, J.B. Fegley Atmospheric chemistry in giant planets, brown dwarfs, and low-mass dwarf stars. II. sulfur and phosphorus. // Astron Astrophys, 648 (2006), P. 1181.
9. K. Zahnle, M.S. Marley, R.S. Freedman, K. Lodders, J.J. Fortney. Atmospheric sulfur photochemistry on hot jupiters. // Astrophys J, 701 (2009), P. L20 - L24.

10. R. Aladro, S. Martin, J. Martin Pintado, R. Mauersberger, C. Henkel, B. Ocaña Flaquer *et al.* A $\lambda=1.3$ mm and 2 mm molecular line survey towards m82. // *Astron Astrophys*, 535 (2011), P. A84.
11. K. Justtanont, T. Khouri, M. Maercker, J. Alcolea, L. Decin, H. Olofsson *et al.* Herschel/hifi observations of o-rich agb stars: molecular inventory. // *Astron Astrophys*, 537 (2012), P. A144.
12. K. Justtanont, T. Khouri, M. Maercker, J. Alcolea, L. Decin, H. Olofsson *et al.* Herschel/hifi observations of o-rich agb stars: molecular inventory. // *Astron Astrophys*, 537 (2012), P. A144.
13. N. Ukita, M. Hydrogen sulfide in a circumstellar envelope. // *Astron Astrophys*, 121 (1983), P. 15.
14. Y.C. Minh, W.M. Irvine, L.M. Ziurys. Detection of interstellar hydrogen sulfide in cold, dark clouds. // *Astrophys J*, 345 (1989), P. L63 - L66.
15. Y.C. Minh, L.M. Ziurys, W.M. Irvine, D. Observations of the H₂S toward OMC-1. // *Astrophys J*, 360 (1990), P. 136.
16. Macdonald, A.G. Gibb, R.J. Habing, T.J. Millar. A330-360 GHz spectral survey of G 34.3+0.15. i. data and physical analysis. // *Astron Astrophys Suppl*, 119 (1996), P. 333.
17. C. Vastel, T.G. Phillips, C. Ceccarelli, J.C. Pearson. First detection of doubly deuterated hydrogen sulfide. // *Astrophys J*, 5930 (2003), P L97 - L100.
18. L.L. Strow. Line strength measurements using diode lasers: the ν_2 band of H₂S. // *J Quant Spectrosc Radiat Transf*, 290 (1983), P. 395.
19. Y. Line strengths in the ν_2 band of HS. // *J Quant Spectrosc Radiat Transf*, 31 (1984), P. 185.
20. L. Lechuga - Fossat, F. J-M, C. Camy-Peiret, J.W.C. Johns. The spectrum of natural hydrogen sulfide between 2150 and 2950 cm⁻¹. // *Can J Phys*, 62 (1984), P.1889.
21. L.R. Brown, J.A. Crisp, D. Crisp, O.V. Naumenko, M.A. Smirnov, L.N. Sinita, A. Perrin. The absorption spectrum of H₂S between 2150 and

- 4260 cm^{-1} : analysis of the positions and intensities in the first ($2\nu_2$, ν_1 , and ν_3) and second ($3\nu_2$, $\nu_1+\nu_2$, and $\nu_2+\nu_3$) triad regions. // *J Mol Spectrosc*, 188 (1998), P. 148.
22. C.Y.R. Wu, F.Z. Temperature dependent photoabsorption cross sections of HS in the 1600–2600 cm^{-1} region. // *J Quant Spectrosc Radiat Transf*, 60 (1998), P.17.
 23. J. Lamouroux, L. Regalia-Jarlot, T. VIG, X. Thomas, P. Von der Heyden, S.A. Tashkun, B. Yu. Measurements of line intensities and determination of transition moment parameters from experimental data for the ν_1 and ν_3 bands of D₂S₂. // *J Mol Spectrosc*, 250 (2008), P. 117.
 24. C.R. Bailey, J.W. Thompson, J. Hale. The infrared absorption spectra of H₂S, HDS and D₂S. // *J Chem Phys*, 4 (1936), P. 625.
 25. Nielsen A. H , Nielsen H. H . The infrared absorption spectrum of the deuterium sulfides.// *J Chem Phys* 1937;5:277–83 .
 26. Allen H. C , Naylor R. E , Plyler E. K . The deuterium–sulfide band at 4590 cm^{-1} . *J Res Natl Bur Stand* 1954;53:321–3
 27. Allen H. C , Plyler E. K , Blaine R. L . Some infrared bands of deuterium sulfide. // *J Res Natl Bur Stand* 1957;59:211–14 .
 28. Miller R. E , Leroi G. E , Eggers D. F . Analysis of the ν_1 and ν_2 fundamentals in deuterium sulfide. // *J Chem Phys* 1966;45:3028–37 .
 29. Miller R. E , Leroi G. E , Eggers D. F . Infrared spectrum of deuterium sulfide. // *J Chem Phys* 1967;46:2292–7 .
 30. Cook R. L , De Lucia F. C , Helminger P . Millimeter and submillimeter wave rotational spectrum and centrifugal distortion effects of D₂S. // *J Mol Spectrosc* 1974;41:123–36 .
 31. Gillis J. L , Blatherwick R. D , Bonomo F. S . Analysis of ν_2 of D₂S. // *J Mol Spectrosc* 1985;114:228–33 .
 32. Camy - Peyret C , J-M F , Lechuga - Fossat L , Johns J. W. C . The far-infrared spectrum of deuterated hydrogen sulfide: the ground state rotational

- constants of $D_2^{32}S$, $D_2^{34}S$, $HD^{32}S$, and $HD^{34}S$. // *J Mol Spectrosc* 1985;109:300–33 .
33. Camy-Peyret C , J-M F , N. Gom A , Johns J.W.C . The three fundamental bands ν_2 , ν_1 and ν_3 of $D_2^{32}S$ and the ν_2 band of $D_2^{34}S$. // *Mol Phys* 1988;65:649–57 .
34. Макушкин Ю.С., Улеников О.Н., Чеглоков. А.Е. Симметрия и её применения к задачам колебательно-вращательной спектроскопии молекул. Томск: Издательство Томского государственного университета, 1990, часть 1, 190 с.
35. Бабушкин А.А. Методы спектрального анализа. – Москва: Из-во МГУ, 1992. – 508 с.
36. Конн Ж. Спектроскопические исследования с применением Фурье-преобразования. – Москва: Мир. – 1972. 201-305 С.
37. Конн Ж. Инфракрасная спектроскопия высокого разрешения. – Москва: Мир. – 1972. 352 С.
38. Rusinek E., Fichoux H., Khelkhal M., Herlemont F., Legrand J., Fayt A. Subdoppler Study of the ν_7 Band of C_2H_4 with a CO_2 Laser Sideband Spectrometer // *J. Mol. Spectrosc.* – 1998. – V. 189. – P. 64 – 73
39. Makushkin Yu.S., Ulenikov O.N. On the transformation of the complete electron-nuclear Hamiltonian of a polyatomic molecule to the intramolecular coordinates // *J. Mol. Spectrosc.* – 1977. – V. 68. –P. 1 – 20.
40. Watson. J.K.G. Determination of centrifugal coefficients of asymmetric-top molecules // *J. Chem. Phys.* – 1967. –V. 46 – P.1935-1949.
41. C. Camy-Peyret, J.-M. Flaud, L. Lechuga-Fossat, J.W.C. Johns. // *J. Mol. Spectrosc.* 109 (1955) 300–333.
42. Recommended isolated-line profile representing high-resolution spectroscopic transitions / Tennyson, J. [other] // *Pure Appl. Chem.* – 2014. – Vol. 86. – P. 1931–1943.

Приложение А

Таблица-26 Экспериментальные колебательно – вращательные уровни энергий, определённых в результате исследования спектра поглощения полосы $\nu_2 + \nu_3$ молекулы D_2S (в cm^{-1})

J	K_a	K_c	E	N	$\Delta * 10^4$
0	0	0	2754.4517	2	0
1	0	1	2761.4179	4	2
2	0	2	2773.8989	5	2
3	0	3	2790.0291	6	3
4	0	4	2812.8775	8	5
5	0	5	2839.5071	7	0
6	0	6	2870.9359	5	1
7	0	7	2907.1626	0	4
8	0	8	2948.1834	3	2
9	0	9	2993.9971	6	6
10	0	10	3044.5994	0	2
11	0	11	3099.9859	0	1
12	0	12	3160.1517	3	0
13	0	13	3225.0936	6	3
14	0	14	3294.8046	5	0
15	0	15	3369.2802	4	1
16	0	16	3448.5143	5	0
17	0	17	3532.5090	5	4
18	0	18	3621.2331	5	5
19	0	19	3714.7050	2	0
20	0	20	3813.2468	2	5
1	1	1	2762.3898	3	0
2	1	2	2774.2174	5	1
3	1	3	2791.0691	6	5
4	1	4	2812.8815	2	0
5	1	5	2839.5963	7	1
6	1	6	2870.9362	8	2
7	1	7	2907.1620	8	3
8	1	8	2948.1841	8	3
9	1	9	2993.9976	7	0
10	1	10	3044.5994	7	5
11	1	11	3099.9852	5	

12	1	12	3160.1517	5	2
13	1	13	3225.0936	6	2
14	1	14	3294.8046	4	5
15	1	15	3369.2802	3	0
16	1	16	3448.5143	2	4
17	1	17	3532.5090	0	0
18	1	18	3621.2331	1	6
19	1	19	3714.7050	5	0
20	1	20	3813.2468	4	6
1	1	0	2764.5469	0	0
2	1	1	2780.6368	3	4
3	1	2	2803.2253	3	0
4	1	3	2830.6910	2	5
5	1	4	2862.6586	5	0
6	1	5	2899.2930	6	1
7	1	6	2940.7030	0	0
8	1	7	2986.8946	1	3
9	1	8	3037.8720	5	0
10	1	9	3099.6313	4	4
11	1	10	3154.1690	6	0
12	1	11	3219.4815	5	2
13	1	12	3289.5634	7	0
14	1	13	3364.4105	8	5
15	1	14	3444.0165	7	0
16	1	15	3528.3760	5	4
17	1	16	3615.5438	6	0
18	1	17	3710.4096	4	1
19	1	18	3810.0472	2	0
2	2	0	2784.9927	1	2
3	2	1	2809.6621	0	0
4	2	2	2841.8474	5	3
5	2	3	2879.7194	6	0
6	2	4	2922.0032	4	5
7	2	5	2968.7264	9	0
8	2	6	3020.1153	5	5
9	2	7	3076.2473	5	0
10	2	8	3137.1402	5	1
11	2	9	3202.7978	2	0
12	2	10	3273.2158	1	3

13	2	11	3348.3918	0	0
14	2	12	3428.3208	3	2
15	2	13	3512.9982	4	0
16	2	14	3602.4169	4	2
17	2	15	3696.5712	5	0
2	2	1	2783.5476	3	1
3	2	2	2804.0206	2	0
4	2	3	2830.9582	5	0
5	2	4	2862.7020	0	1
6	2	5	2899.3017	0	4
7	2	6	2940.7035	0	0
8	2	7	2986.8960	1	5
9	2	8	3037.8714	4	0
10	2	9	3099.6312	5	6
11	2	10	3154.1691	3	0
12	2	11	3219.4815	6	2
13	2	12	3289.5634	0	0
14	2	13	3364.4990	5	3
15	2	14	3444.0165	2	0
16	2	15	3528.3760	4	1
17	2	16	3615.5437	5	0
3	3	0	2816.1918	2	1
4	3	1	2848.9888	5	2
5	3	2	2889.9232	2	2
6	3	3	2937.8259	5	0
7	3	4	2990.6338	2	1
8	3	5	3047.6167	2	0
9	3	6	3109.0327	5	1
10	3	7	3175.0939	5	4
11	3	8	3245.8699	5	5
12	3	9	3321.3771	5	6
13	3	10	3401.6201	5	2
14	3	11	3486.5957	4	3
3	3	1	2815.4086	4	1
4	3	2	2844.7228	2	2
5	3	3	2880.7160	3	2
6	3	4	2922.2487	2	2
7	3	5	2968.7761	5	3

8	3	6	3020.1237	2	2
9	3	7	3076.2477	0	0
10	3	8	3137.1405	4	1
11	3	9	3202.7970	5	0
12	3	10	3273.2163	6	4
13	3	11	3348.3918	1	0
14	3	12	3428.3172	2	5
15	3	13	3512.9930	1	0
16	3	14	3602.4169	4	6
17	3	15	3696.5712	7	6
18	3	16	3795.4710	5	5
19	3	17	3899.0603	8	0
4	4	0	2858.4192	4	2
5	4	1	2897.8438	6	5
6	4	2	2948.1457	8	5
7	4	3	3005.0415	5	2
8	4	4	3068.1966	8	3
9	4	5	3135.6842	4	2
10	4	6	3207.2677	2	1
11	4	7	3283.2853	4	0
4	4	1	2858.0611	0	5
5	4	2	2895.7037	3	0
6	4	3	2940.4585	1	6
7	4	4	2991.4664	4	0
8	4	5	3047.8195	5	0
9	4	6	3109.0751	2	2
10	4	7	3175.1016	6	0
11	4	8	3245.8711	1	2
12	4	9	3321.3783	4	5
13	4	10	3401.6196	8	0
14	4	11	3486.5950	2	6
15	4	12	3576.3028	0	4
5	5	0	2911.7014	4	5
6	5	1	2958.3937	0	4
7	5	2	3014.6042	6	4
8	5	3	3078.5023	2	2
9	5	4	3154.5721	5	1
10	5	5	3232.5690	0	1
11	5	6	3314.5566	4	2

5	5	1	2911.5547	0	0
6	5	2	2957.2038	0	3
7	5	3	3010.3772	3	5
8	5	4	3070.3995	1	2
9	5	5	3136.3438	5	5
10	5	6	3207.4308	2	5
11	5	7	3283.3215	6	2
12	5	8	3363.9310	0	0
6	6	0	2975.9458	4	2
7	6	1	3029.9052	1	5
8	6	2	3093.2223	4	5
9	6	3	3166.1120	0	6
10	6	4	3245.8266	1	2
11	6	5	3369.8686	1	3
6	6	1	2975.8890	2	0
7	6	2	3029.3417	4	1
8	6	3	3090.6243	5	3
9	6	4	3159.2160	8	2
10	6	5	3234.3397	3	5
7	7	0	3051.0862	4	5
8	7	1	3112.4150	7	4
9	7	2	3182.6848	6	6
10	7	3	3262.7028	5	4
11	7	4	3351.9312	4	7
7	7	1	3051.0195	2	1
8	7	2	3112.1702	1	2
9	7	3	3181.3158	7	0
10	7	4	3258.1116	5	0
11	7	5	3341.9346	2	3
8	8	0	3136.8883	4	0
9	8	1	3205.7852	8	1
8	8	1	3136.8730	2	0
9	8	2	3205.6850	5	0

Приложение Б

Таблица-27 Экспериментальные колебательно – вращательные уровни энергий, определённых в результате исследования спектра поглощения полосы $\nu_1 + \nu_2$ молекулы D_2S (в cm^{-1})

J	K_a	K_c	E	N	$\Delta * 10^4$
1	0	1	2746.8405	0	0
2	0	2	2762.05324	0	7
3	0	3	2779.1446	1	4
4	0	4	2800.9217	2	5
5	0	5	2827.4606	5	1
6	0	6	2858.7754	7	2
7	0	7	2894.8674	6	4
8	0	8	2935.7359	5	1
9	0	9	2981.3770	3	1
10	0	10	3031.7880	0	2
11	0	11	3086.9662	5	4
12	0	12	3146.9050	1	3
13	0	13	3211.6031	5	1
14	0	14	3281.0541	4	2
15	0	15	3355.2524	4	5
16	0	16	3434.1960	8	1
17	0	17	3517.8752	5	2
18	0	18	3606.2710	6	3
1	1	1	2750.6262	7	5
2	1	2	2762.3444	4	4
3	1	3	2779.1991	5	2
4	1	4	2800.9303	2	1
5	1	5	2827.4616	0	0
6	1	6	2858.7751	4	3
7	1	7	2894.8677	3	2
8	1	8	2935.7352	0	0
9	1	9	2981.3767	5	1
10	1	10	3031.7874	5	0
11	1	11	3086.9662	1	4
12	1	12	3146.9050	8	2
13	1	13	3211.6031	7	0
14	1	14	3281.0541	0	3

15	1	15	3355.2524	1	1
16	1	16	3434.1950	7	2
17	1	17	3517.8751	5	0
1	1	0	2752.7724	6	1
2	1	1	2768.7781	0	1
3	1	2	2791.3156	2	2
4	1	3	2818.7699	1	4
5	1	4	2850.6839	5	1
6	1	5	2887.2421	4	5
7	1	6	2928.5403	5	2
8	1	7	2974.5999	2	5
9	1	8	3025.4240	3	2
10	1	9	3081.0135	5	5
11	1	10	3141.3599	4	5
12	1	11	3206.4642	6	2
13	1	12	3276.3110	1	4
14	1	13	3350.9241	2	6
15	1	14	3430.2701	0	4
16	1	15	3514.3532	3	5
17	1	16	3606.1678	0	2
2	2	0	2773.2123	1	5
3	2	1	2791.7549	0	2
4	2	2	2829.8251	4	4
5	2	3	2867.6903	0	1
6	2	4	2909.9824	4	1
7	2	5	2956.6527	0	3
8	2	6	3007.9459	1	3
9	2	7	3063.9458	2	3
10	2	8	3124.6885	0	3
11	2	9	3190.1754	3	3
12	2	10	3260.4068	0	3
13	2	11	3335.3763	2	0
14	2	12	3415.0813	0	2
15	2	13	3499.5167	5	1
16	2	14	3588.6767	0	0
17	2	15	3681.7205	5	5
2	2	1	2771.8545	0	1
3	2	2	2792.6435	4	0
4	2	3	2819.1335	0	2

5	2	4	2850.7596	5	3
6	2	5	2887.2558	0	2
7	2	6	2928.5419	5	1
8	2	7	2974.7497	0	0
9	2	8	3025.4246	3	1
10	2	9	3081.0127	3	0
11	2	10	3141.3598	2	1
12	2	11	3206.4642	0	0
13	2	12	3276.3201	0	4
14	2	13	3350.9241	4	3
15	2	14	3430.2701	0	2
16	2	15	3514.3532	5	5
17	2	16	3603.1678	0	5
3	3	0	2805.0015	1	5
4	3	1	2836.8689	0	4
5	3	2	2877.7277	5	2
6	3	3	2925.5944	0	1
7	3	4	2978.4716	0	2
8	3	5	3035.4745	2	1
9	3	6	3096.8241	2	0
10	3	7	3162.7718	5	2
11	3	8	3231.8312	5	5
12	3	9	3308.7483	2	4
13	3	10	3388.8014	2	6
14	3	11	3473.5793	1	3
15	3	12	3563.0629	4	5
16	3	13	3657.2524	5	4
3	3	1	2803.8194	2	2
4	3	2	2833.2313	0	4
5	3	3	2868.9995	3	1
6	3	4	2910.3359	2	5
7	3	5	2956.7301	5	4
8	3	6	3007.9562	4	2
9	3	7	3063.9466	7	1
10	3	8	3124.6879	0	4
11	3	9	3190.1760	2	1
12	3	10	3260.4061	0	2
13	3	11	3335.3766	0	0

14	3	12	3415.0814	2	4
15	3	13	3499.5167	4	2
16	3	14	3588.6767	4	4
4	4	0	2847.2763	5	2
5	4	1	2886.6042	1	4
6	4	2	2935.4001	5	2
7	4	3	2992.4865	2	4
8	4	4	3055.7568	4	1
9	4	5	3123.3796	2	0
10	4	6	3194.9818	1	4
11	4	7	3270.9235	0	1
4	4	1	2846.4779	7	2
5	4	2	2884.2131	2	4
6	4	3	2928.8687	5	6
7	4	4	2979.6370	0	5
8	4	5	3035.7910	5	5
9	4	6	3096.8991	0	2
10	4	7	3162.7874	1	5
11	4	8	3233.4824	2	2
12	4	9	3308.7473	1	1
13	4	10	3388.8011	5	3
14	4	11	3473.5789	1	1
15	4	12	3563.0629	0	2
16	4	13	3657.2527	2	0
5	5	0	2900.8047	3	5
6	5	1	2947.3628	5	4
7	5	2	3003.3645	6	0
8	5	3	3068.7142	7	1
9	5	4	3141.6620	0	5
10	5	5	3219.9345	5	6
5	5	1	2897.8438	0	5
6	5	2	2945.3472	5	0
7	5	3	2998.8178	4	1
8	5	4	3058.6920	2	3
9	5	5	3124.3767	1	2
10	5	6	3195.2569	3	2
11	5	7	3270.9921	4	1
12	5	8	3351.4517	5	0
13	5	9	3436.5986	7	1

6	6	0	2965.3825	5	0
7	6	1	3019.2527	2	3
8	6	2	3082.1641	1	2
9	6	3	3154.8330	0	5
11	6	5	3324.8026	4	4
6	6	1	2965.3650	6	1
7	6	2	3019.0941	0	8
8	6	3	3082.1374	5	4
9	6	4	3147.5333	1	5
10	6	5	3222.4707	0	1
11	6	6	3302.9454	2	0
7	7	0	3040.8795	1	2
8	7	1	3102.1865	0	4
9	7	2	3171.6264	2	6
10	7	3	3251.4862	6	5
7	7	1	3040.8711	3	4
8	7	2	3102.0795	2	6
9	7	3	3171.5264	1	5
10	7	4	3250.3949	5	4
8	8	0	3127.1859	4	2
8	8	1	3127.1842	4	1

Приложение В

Таблица-28 Экспериментальные колебательно – вращательные уровни энергий, определённых в результате исследования спектра поглощения полосы $3\nu_2$ молекулы D_2S (в cm^{-1})

J	K_a	K_c	E	N	$\Delta * 10^4$
0	0	0	2549.0733	1	2
1	0	1	2556.1951	3	2
2	0	2	2568.8977	5	5
3	0	3	2586.1920	4	2
4	0	4	2608.1231	7	3
5	0	5	2634.7780	3	5
6	0	6	2666.1728	6	4
7	0	7	2702.3934	8	6
8	0	8	2743.1912	1	8
9	0	9	2788.8090	2	7
10	0	10	2839.1608	5	1
11	0	11	2894.2461	5	0
12	0	12	2954.5963	4	1
13	0	13	3018.6070	7	2
14	0	14	3087.8535	5	5
15	0	15	3161.8342	8	5
1	1	1	2557.3657	2	4
2	1	2	2569.2402	0	6
3	1	3	2586.2588	1	7
4	1	4	2608.1346	3	2
5	1	5	2634.7780	2	0
6	1	6	2666.1726	5	0
7	1	7	2702.3107	1	2
8	1	8	2743.1906	0	1
9	1	9	2788.8088	1	2
10	1	10	2839.1629	3	5
11	1	11	2894.2461	5	4
12	1	12	2954.5963	6	2
13	1	13	3018.6070	4	3
14	1	14	3087.8535	7	3
15	1	15	3161.8342	2	0
1	1	0	2559.7351	0	1

2	1	1	2576.3426	1	5
3	1	2	2599.6560	2	5
4	1	3	2627.9000	3	4
5	1	4	2660.5358	5	7
6	1	5	2697.7580	4	8
7	1	6	2739.6819	6	6
8	1	7	2786.3303	0	4
9	1	8	2837.7117	4	5
10	1	9	2893.8291	5	2
11	1	10	2954.6756	2	4
12	1	11	3020.2634	3	6
13	1	12	3090.6671	3	1
14	1	13	3166.0753	5	2
15	1	14	3245.3045	7	0
2	2	0	2581.3834	8	3
3	2	1	2606.7961	5	5
4	2	2	2640.0891	2	6
5	2	3	2679.3041	2	8
6	2	4	2722.9166	5	7
7	2	5	2770.8166	2	7
8	2	6	2823.2712	2	8
9	2	7	2880.4010	5	5
10	2	8	2942.2333	6	5
2	2	1	2579.8481	4	5
3	2	2	2601.2114	5	2
4	2	3	2628.3466	4	5
5	2	4	2660.6345	7	2
6	2	5	2697.7770	8	0
7	2	6	2739.6834	5	0
8	2	7	2786.3310	2	1
9	2	8	2837.7133	2	4
10	2	9	2893.8293	0	4
11	2	10	2954.6743	0	5
12	2	11	3020.2472	1	5
13	2	12	3090.5470	1	6
14	2	13	3165.5677	2	7
15	2	14	3245.3045	3	2
16	2	15	3329.7880	5	2
17	2	16	3418.9965	4	1

18	2	17	3512.8782	6	5
19	2	18	3611.5564	5	8
20	2	19	3714.9355	2	7
3	3	0	2614.5139	2	4
4	3	1	2647.9175	0	5
5	3	2	2690.3737	1	2
6	3	3	2740.0645	4	1
7	3	4	2794.8464	0	0
8	3	5	2853.6782	0	1
9	3	6	2917.1294	2	2
3	3	1	2613.7228	2	5
4	3	2	2644.0660	3	1
5	3	3	2680.8991	5	4
6	3	4	2723.3733	5	5
7	3	5	2770.9252	2	5
8	3	6	2823.2950	2	5
9	3	7	2880.4041	2	6
10	3	8	2942.4113	1	4
4	4	0	2659.4335	2	5
5	4	1	2700.2317	5	2
6	4	2	2750.9211	3	0
7	4	3	2810.3402	6	1
8	4	4	2875.8842	4	0
4	4	1	2659.0903	6	1
5	4	2	2697.9724	8	3
6	4	3	2744.0833	2	5
7	4	4	2796.3358	0	6
8	4	5	2854.1140	0	5
5	5	0	2717.1266	0	2
6	5	1	2764.2219	1	0
7	5	2	2822.3018	2	1
8	5	3	2890.1383	5	5
5	5	1	2716.4846	4	5
6	5	2	2763.0876	3	0
7	5	3	2817.8868	6	1
8	5	4	2879.5921	8	2

Приложение С

Раздел 2 Объект и методы исследования

Студент:

Группа	ФИО	Подпись	Дата
ОБМ71	Ерсин Толганай Ерсинкызы		

Консультант школы отделения (НОЦ) – Экспериментальной физики:

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

Консультант – лингвист ОИЯ ШБИП:

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

2.1 General characteristics of the molecule D₂S

2.2. Object and methods of research

Sulfur dioxide (also sulfur dioxide) is a chemical compound with formula D₂S.

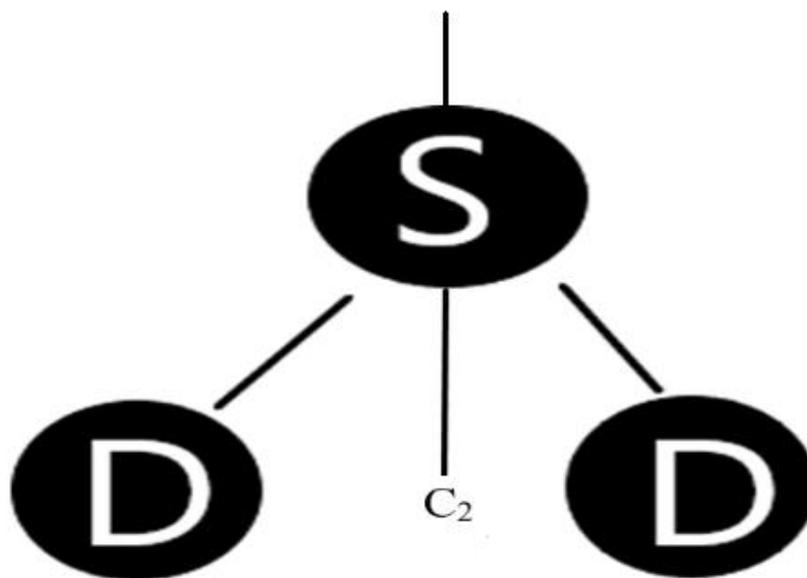


Figure 1. D₂S molecule

Molecule D₂S is a curved molecule with a dot group of symmetry with_{2v}. Theory of Valence connection, considering only S- and p-orbitals, describes the relationship in terms of resonance between the two resonance structures

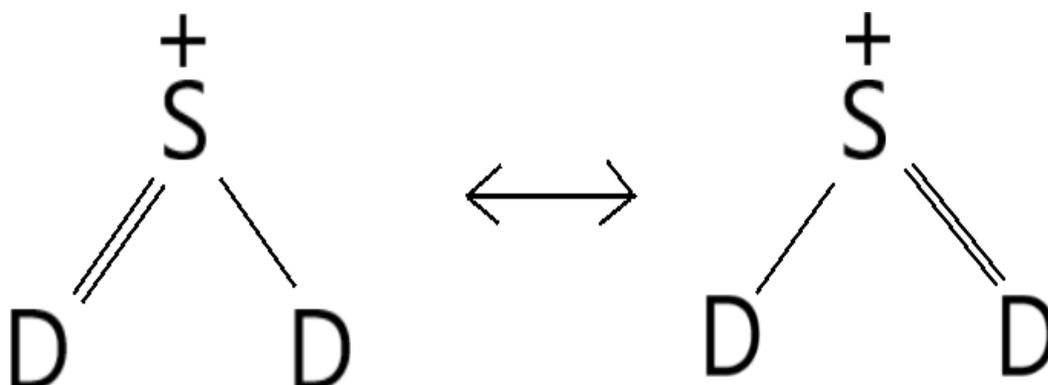


Figure 2: Two resonance structures of sulfur dioxide

Molecule D_2S is a molecule of the type of asymmetric spinning. Asymmetric Wolf is a molecule, where all three main moments of inertia are different, respectively, different and equilibrium rotational constant A , B and C , expressed in the following relationships:

$$A = \hbar / 4\pi c I_A \quad (2.1)$$

$$B = \hbar / 4\pi c I_B \quad (2.2)$$

$$C = \hbar / 4\pi c I_C \quad (2.3)$$

Here I_A , I_B , I_C are the main moments of inertia in ascending order. For a nonlinear molecule containing n atoms, there are $3n - 6$ oscillatory degrees of freedom. Thus, D_2S has three oscillations, called "normal oscillations", and they are shown in Figure 1. 3. All oscillations of a molecule can be expressed as linear combinations of these normal oscillations. Transitions from the main oscillatory state to the momentary excited form a fundamental lane. For D_2S All three fundamental stripes lie in the infrared area. They will match the three most intense bands in the spectrum. The frequency of deformation oscillation ν_2 is the smallest of the three, and the frequency of the antisymmetric Valence Oscillation ν_3 is the maximum value.

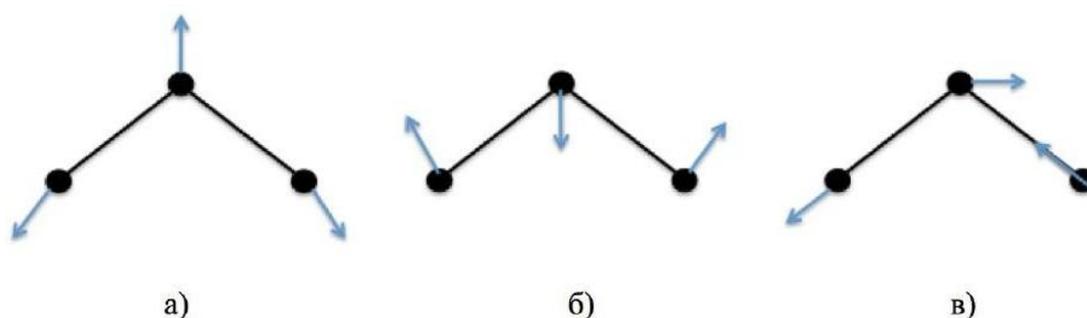


Figure 3. Normal oscillations of the Molecule D_2s [21].

A) symmetrical stretching – ν_1 Б) Bending – ν_2) B) asymmetric stretching – ν_3

In this molecule, there may be transitions in the absorption spectrum of only three types: from the basic state, which has a symmetry of a_1 , on excited oscillatory states that have symmetry A_1 , B_1 or B_2 . There are strips A-, B-and C-type:

- $A_1 \leftarrow A_1$ is a-type stripe with the rules of selection $\Delta J = 0, \pm 1$, ΔK_a – even, ΔK_c – odd;
- $B_1 \leftarrow A_1$ is a B-type band with rules of selection $\Delta J = 0, \pm 1$, ΔK_a – odd, ΔK_c – odd;
- $B_2 \leftarrow A_1$ is a C-type strip with $\Delta J = 0, \pm 1$, ΔK_a -odd, ΔK_c -even.

It should be noted that the symmetry is prohibited transitions in the absorption spectrum from the main vibrational state, which has a symmetry of A_1 , the excited vibrational states, which has a symmetry of A_2 , and they can be manifested only in the presence of resonance interactions type Fermi or Coriolis.

The symmetry group of this molecule is isomorphic to the point group of symmetry C_{2v} [22]. This group has four irreducible representations.

Table 1. Symmetry types and irreducible characters of the molecule representations D_{2S}

C_{2v}	E	$C_2(z)$	$\sigma_v(xz)$	$\sigma_v'(yz)$	Базисы
A_1	1	1	1	1	T_z
A_2	1	1	-1	-1	R_z
B_1	1	-1	1	-1	T_x, R_y
B_2	1	-1	-1	1	T_y, R_x

From the above it follows that the investigated strips are stripes of different type. $3\nu_2$ (A_1), $\nu_1+\nu_2$ (A_1) and refer to *b*-type strips and $\nu_2+\nu_{3rd}$ (B_1) is a stripe *a*-type. However, if there are strong resonances (such as Fermi and Coriolis) between the nearby states.

Two oscillatory-rotational states belonging ($v_1=v_2= 1, A_1$), ($v_2=v_3= 1, B_1$) are located in the spectrum range $2500 - 3300 \text{ cm}^{-1}$ and you can expect a strong resonance between these states.

2.2. Method of combinational differences

In order to make it easier to determine the energetic levels of vibrational states, a computer program was developed, which allows revealing the energetic states of any number of vibrational states of the molecule, such as asymmetric spinning. The basis of this computer program is the method of combinational differences.

The essence of the method: the rotational levels of the main and excited oscillatory states are considered. A prerequisite is: the presence of several transitions from the rotational levels of the main vibrational state to the same level of the excited vibrational state (Figure 4). The structure of the main vibrational state is known with high accuracy.

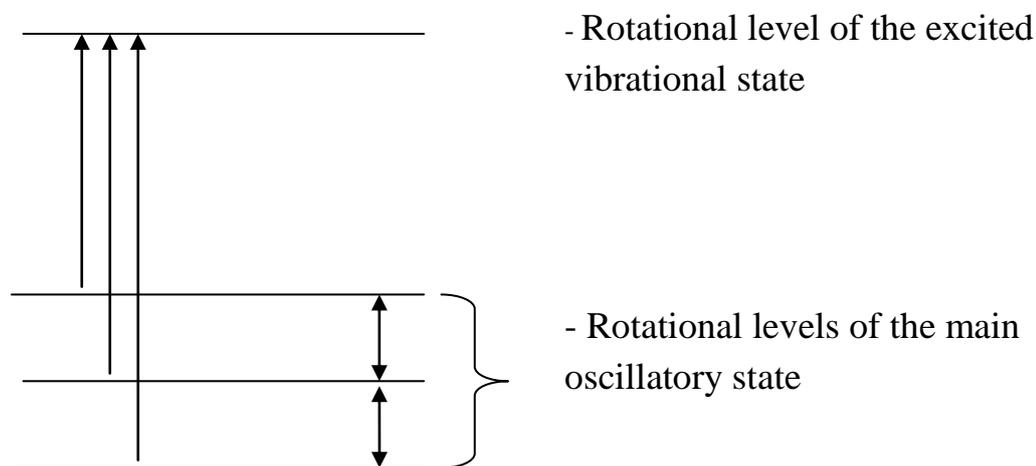


Figure 4 – Transitions from the rotational levels of the main vibrational state to the rotational level of the excited vibrational State

Since the distance between the rotational levels of the main vibrational state a and b is known with high accuracy (Figure 3), we can make a "comb", the distance between its teeth will correspond Distances between the rotational levels of the main vibrational state. This comb will be moved along the spectrum in order to find lines that coincide with the teeth "comb" (see Figure 5)

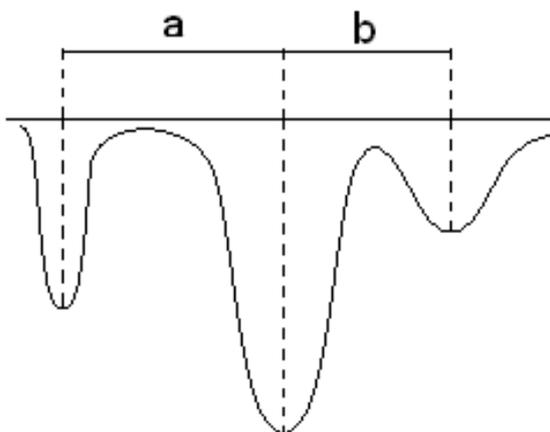


Figure 5- Illustration of combinational differences method

Knowing the positions of the lower levels, the wavelengths of the transitions, you can determine the energy of the top level. Moving the "comb" on the spectrum, you can find more lines that coincide with the teeth. The most probable variant is chosen.

This process is called line identification. As already stipulated earlier, it is performed by a computer program.

In the process of identification, the complete convergence of spectrum lines is unlikely, so some "C" search accuracy is set (e.g. with = 0,001). This means that when the center of the spectrum line is rejected from the tooth "comb" to the value of less than or equal to "C", the result is accepted as true. This deviation of the center of the line arises from the error of the experiment.

2.3. Description and operating principle of Fourier-spectrometer

The idea of the spectroscopy method based on the use of two-beam interferometer with the subsequent transformation of Fourier is known for a long

time. As early as 1891, Maykelson showed that the intensity of light measured at the output of a two-beam interferometer with variable stroke rate is a cosine transformation of the Fourier incident radiation. Since the Fourier transform is a reversible operation, it is sufficient to perform the cosine Fourier transform Interferogram, which describes the change in the intensity of the past through the interferometer Radiation as a function of the difference of stroke between the interferenced beams. However, the real progress of Fourier spectroscopy has become possible only thanks to modern computers, which allow performing Fourier-transformation of a interferogram with a million or more points [23, 24].

One of the optical spectral systems is the Fourier spectrometer, which is used for quantitative and qualitative analysis of the substance content in the gas sample. The principle of operation and advantages of using this spectrometer will be discussed in more detail in this chapter.

The main component of the Fourier spectrometer is interferometer. The most widely known and applicable configuration is the interferometer of Maykelson. The interferometer scheme is presented in Figure 6.

The beam splitting (the light separation plate) is used to divide the light subject to spectral analysis into two beams. After they are reflected on two different mirrors, the two beams are recombined with the same ray separator and sent to the detector. One of the mirrors is fixed and the other is a movable mirror. When the fixed and movable mirrors are equidistant from the beam separator ($d = 0$), both beams move at the same distance until the detector is reached. However, if the movable mirror is pushed back, one of the light beams will have to pass Additional distance $\delta = 2d$ (back and forth), called optical differences of stroke.

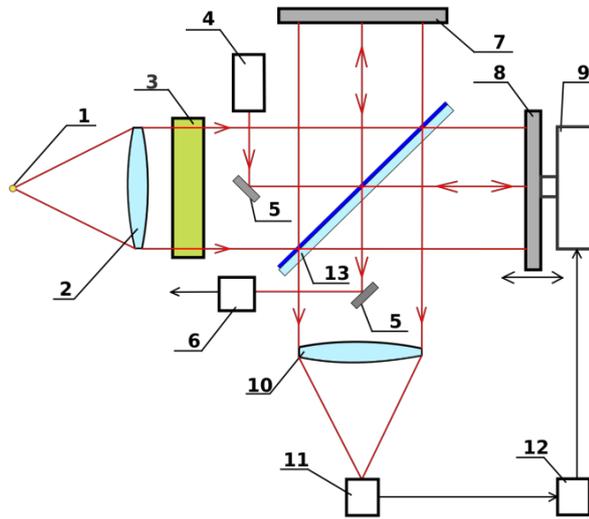


Figure 6 – Interferometer Maykelson:

1-researched source; 2-Collimatura lens; 3-Cuvette with the investigated substance; 4-Reference laser; 5-Auxiliary mirrors of the reference beam from the laser; 6-Photo receiver; 7-a stationary mirror; 8-movable mirror; 9-Mechanical drive of the movable mirror; 10-lens photo receiver; 11-Photo receiver; 12-Managing and processing interferogram computer; 13-Beam Splitting

Consider a monochromatic light source. On the detector the combined beams will be interferable and as a result can be either constructive or destructive. If $\delta = 0$ (i.e. if two mirrors are equidistant from the splitter), or if δ is an integer, a multiple of the wavelength λ ($\delta = n\lambda$, n with an integer), then two beams, as Are said to be in phase and form a constructive interference: the intensity of the detector is equal to the intensity of the source.

On the contrary, if or, it means that two beams are in one phase and create a destructive interference: the intensity on the Registrar is equal to zero.

$$\delta = (n + 1)\frac{\lambda}{2}$$

The intensity of the $I(\delta)$ recorded on the detector is a sine wave function

$$I(\delta) = \frac{I_0}{2} [1 + \cos(\frac{2\pi}{\lambda}\delta)], \quad (2.3)$$

where I_0 is the intensity of the source. Graphically it looks as follows

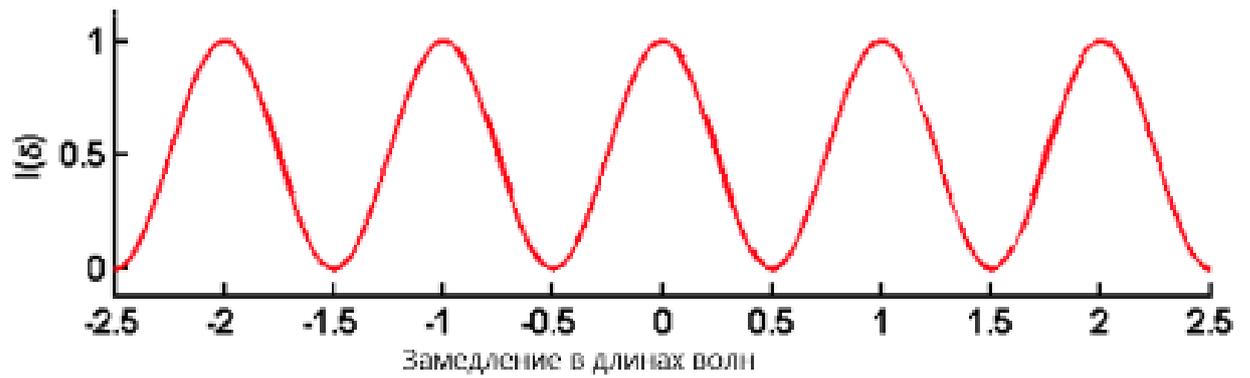


Figure 7 -Monochromatic light interferogram

The intensity of $I(\delta)$, measured as a function of the optical difference of the δ stroke, is called interferogram. It is important to understand that the period of recorded interferogram depends on the wavelength of light: the longer the wavelength, the greater the interval Interferogram.

Modern Fourier spectrometers are equipped with computers that automatically control the recording of Interferograms, calibration, processing interferogram method of reverse Fourier transform.