

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

### БАКАЛАВРСКАЯ РАБОТА

Тема работы
<b>Определение параметров потенциальной функции молекулы C<sub>2</sub>H<sub>4</sub></b>

УДК 539.194:543.42

Студент

Группа	ФИО	Подпись	Дата
0Б61	Глушков Петр Алексеевич		

Руководитель ВКР

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Профессор	Бехтерева Елена Сергеевна	д.ф.-м.н.		

### КОНСУЛЬТАНТЫ ПО РАЗДЕЛАМ:

По разделу «Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение»

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

По разделу «Социальная ответственность»

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

### ДОПУСТИТЬ К ЗАЩИТЕ:

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

## Запланированные результаты обучения по программе

Код результата	Результат обучения (выпускник способен)	Требования ФГОС, критериев и/или заинтересован ных сторон
<i>Общекультурные компетенции</i>		
<b>Р1</b>	Использовать основные этапы и закономерности исторического развития общества, основы философских, экономических, правовых знаний для формирования мировоззренческой, гражданской позиций и использования в различных сферах жизнедеятельности	Требования ФГОСЗ+ (ОК-1, ОК-2, ОК-3, ОК-4)
<b>Р2</b>	К самоорганизации и самообразованию, работать в коллективе, к коммуникации в устной и письменной формах, в том числе на иностранном языке, толерантно воспринимать социальные, этические и культурные различия, использовать методы и средства физической культуры, приёмы первой помощи и методы защиты в условиях ЧС.	Требования ФГОСЗ+ (ОК-5, ОК-6, ОК-7, ОК-8, ОК-9)
<i>Общепрофессиональные компетенции</i>		
<b>Р3</b>	Использовать в профессиональной деятельности базовые естественнонаучные знания, современные концепции и ограничения естественных наук, использовать фундаментальные знания разделов общей и теоретической физики, математики для создания моделей и решения типовых профессиональных задач, в том числе с использованием знаний профессионального иностранного языка.	Требования ФГОСЗ+ (ОПК-1, ОПК-2, ОПК-3, ОПК-7)
<b>Р4</b>	Понимать сущность и значение информации, соблюдать основные требования информационной безопасности, использовать методы, способы, средства получения и хранения информации, решать стандартные задачи на основе информационной и библиографической культуры.	Требования ФГОСЗ+ (ОПК-4, ОПК-5, ОПК-6)
<b>Р5</b>	Получить организационно-управленческие навыки при работе в научных группах, критически переосмысливать накопленный опыт, изменять при необходимости профиль своей профессиональной деятельности, нести ответственность за последствия своей инженерной деятельности.	Требования ФГОСЗ+ (ОПК-8, ОПК-9)
<i>Профессиональные компетенции</i>		
<b>Р6</b>	<u>Научно-исследовательская деятельность</u> Проводить научные теоретические и экспериментальные исследования в областях: материаловедения, атомной и ядерной физики, водородной энергетики, физики плазмы с помощью современной приборной базы с использованием специализированных знаний физики и освоенных профильных дисциплин.	Требования ФГОСЗ+ (ПК-1, ПК-2)

<b>P7</b>	<u>Научно-инновационная деятельность</u> Применять на практике профессиональные знания теории и методов физических исследований, а также профессиональные знания и умения в результате освоения профильных дисциплин для проведения физических исследований в инновационных областях науки, используя современные методы обработки, анализа и синтеза информации.	Требования ФГОСЗ+ (ПК-3, ПК-4, ПК-5)
<b>P8</b>	<u>Организационно-управленческая</u> Использовать на практике теоретические основы организации и планирования физических исследований, участвовать в подготовке и составлении научной документации по установленной форме, понимать и применять на практике методы управления в сфере природопользования	Требования ФГОСЗ+ (ПК-6, ПК-7, ПК-8)
<b>P9</b>	<u>Педагогически-просветительская</u> Проектировать, организовывать, анализировать педагогическую деятельность, владеть последовательностью изложения материала с использованием междисциплинарных связей физики с другими дисциплинами, участвовать в информационно-образовательных мероприятиях по пропаганде и распространению научных знаний	Требования ФГОСЗ+ (ПК-9)

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

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

УТВЕРЖДАЮ:  
 Руководитель ООП  
 \_\_\_\_\_ Склярова Е.А.  
 (Подпись)      \_\_\_\_\_ (Дата)      (Ф.И.О.)

**ЗАДАНИЕ  
на выполнение выпускной квалификационной работы**

В форме:

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

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

Студенту:

Группа	ФИО
ОБ61	Глушкову Петру Алексеевичу

Тема работы:

<b>Определение параметров потенциальной функции молекулы C<sub>2</sub>H<sub>4</sub></b>	
Утверждена приказом директора (дата, номер)	04.02.2020 г., №35-14/с

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

**ТЕХНИЧЕСКОЕ ЗАДАНИЕ:**

<p><b>Исходные данные к работе</b></p> <p><i>(наименование объекта исследования или проектирования; производительность или нагрузка; режим работы (непрерывный, периодический, циклический и т. д.); вид сырья или материал изделия; требования к продукту, изделию или процессу; особые требования к особенностям функционирования (эксплуатации) объекта или изделия в плане безопасности эксплуатации, влияния на окружающую среду, энергозатратам; экономический анализ и т. д.).</i></p>	<ul style="list-style-type: none"> <li>– Объект исследования: молекула этилена C<sub>2</sub>H<sub>4</sub>;</li> <li>– Данные о центрах колебательных полос молекулы из различных литературных источников</li> </ul>
---	---

<p><b>Перечень подлежащих исследованию, проектированию и разработке вопросов</b></p> <p><i>(аналитический обзор по литературным источникам с целью выяснения достижений мировой науки техники в рассматриваемой области; постановка задачи исследования, проектирования, конструирования; содержание процедуры исследования, проектирования, конструирования; обсуждение результатов выполненной работы; наименование дополнительных разделов, подлежащих разработке; заключение по работе).</i></p>	<ul style="list-style-type: none"> <li>– Обзор литературных источников;</li> <li>– Определение координатного представления молекулы этилена;</li> <li>– Определение констант форм колебаний молекулы этилена;</li> <li>– Разработка алгоритма симметризации базисных состояний;</li> <li>– Создание ПО для численного расчета аналитической модели;</li> <li>– Восстановление параметров потенциальной функции молекулы этилена;</li> <li>– Социальная ответственность;</li> <li>– Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение;</li> <li>– Заключение</li> </ul>
--	--

**Консультанты по разделам выпускной квалификационной работы**  
(с указанием разделов)

Раздел	Консультант
Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение	Киселева Елена Станиславовна, Доцент ОСГН ШБИП
Социальная ответственность	Мезенцева Ирина Леонидовна, Ассистент ООД

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

--

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

**Задание выдал руководитель:**

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Профессор	Бехтерева Елена Сергеевна	д.ф.-м.н.		

**Задание принял к исполнению студент:**

Группа	ФИО	Подпись	Дата
0Б61	Глушков Петр Алексеевич		

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

Студенту:

<b>Группа</b>	<b>ФИО</b>
ОБ61	Глушкову Петру Алексеевичу

<b>Школа</b>	<b>ИЯТШ</b>	<b>Отделение школы (НОЦ)</b>	<b>ОЭФ</b>
Уровень образования	Бакалавриат	Направление/специальность	03.03.02 «Физика»

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

1. Стоимость ресурсов научного исследования (НИ): материально-технических, энергетических, финансовых, информационных и человеческих	Материальные затраты, размер окладов, затраты на электроэнергию, амортизационные расходы
2. Нормы и нормативы расходования ресурсов	-Тариф на промышленную электроэнергию 5,8 за 1 кВт -районный коэффициент города Томск – 1,3
3. Используемая система налогообложения, ставки налогов, отчислений, дисконтирования и кредитования	Публикация статей облагается дополнительными внебюджетными отчислениями в фонды с коэффициентом 30,2%.

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

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

**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:**

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

**Задание принял к исполнению студент:**

<b>Группа</b>	<b>ФИО</b>	<b>Подпись</b>	<b>Дата</b>
ОБ61	Глушков Петр Алексеевич		10.03.2020

## ЗАДАНИЕ ДЛЯ РАЗДЕЛА «СОЦИАЛЬНАЯ ОТВЕТСТВЕННОСТЬ»

Студенту:

<b>Группа</b>	<b>ФИО</b>
0Б61	Глушков Петр Алексеевич

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

Тема ВКР:

<b>Определение параметров потенциальной функции молекулы C<sub>2</sub>H<sub>4</sub></b>	
<b>Исходные данные к разделу «Социальная ответственность»:</b>	
1. Характеристика объекта исследования (вещество, материал, прибор, алгоритм, методика, рабочая зона) и области его применения	<i>Объект исследования: методика расчета параметров потенциальной функции молекулы C<sub>2</sub>H<sub>4</sub>. Рабочая зона: рабочая поверхность с ПЭВМ. Область применения: теоретические расчеты в лаборатории</i>
Перечень вопросов, подлежащих исследованию, проектированию и разработке:	
<b>1. Правовые и организационные вопросы обеспечения безопасности:</b> <ul style="list-style-type: none"> <li>– специальные (характерные при эксплуатации объекта исследования, проектируемой рабочей зоны) правовые нормы трудового законодательства;</li> <li>– организационные мероприятия при компоновке рабочей зоны.</li> </ul>	- Трудовой кодекс Российской Федерации от 30.12.2001 N 197-ФЗ (ред. от 27.12.2018)  - ГОСТ 12.2.032-78 «ССБТ. Рабочее место при выполнении работ сидя. Общие эргономические требования.»
<b>2. Производственная безопасность:</b> 2.1. Анализ выявленных вредных и опасных факторов 2.2. Обоснование мероприятий по снижению воздействия	– Отклонение показателей микроклимата – Превышение уровня шума – Отсутствие или недостаток необходимого естественного и искусственного освещения
<b>3. Экологическая безопасность:</b>	– Безотходное производство.
<b>4. Безопасность в чрезвычайных ситуациях:</b>	– Сильные морозы – Пожары – Несанкционированное проникновение – Наиболее типичная ЧС: Пожар

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

**Задание выдал консультант:**

<b>Должность</b>	<b>ФИО</b>	<b>Ученая степень, звание</b>	<b>Подпись</b>	<b>Дата</b>
Ассистент ООД	Мезенцева И.Л.			10.03.2020

**Задание принял к исполнению студент:**

<b>Группа</b>	<b>ФИО</b>	<b>Подпись</b>	<b>Дата</b>
0Б61	Глушков Петр Алексеевич		11.04.2020

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

Школа Инженерная школа ядерных технологий

Направление подготовки (специальность) 03.03.02 «Физика»

Уровень образования Бакалавр

Отделение школы (НОЦ) Экспериментальной физики

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

Форма представления работы:

Бакалаврская работа

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

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

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

Дата контроля	Название раздела (модуля) / вид работы (исследования)	Максимальный балл раздела (модуля)
01.03.2020	Аналитический обзор литературы	15
20.03.2020	Определение констант форм колебаний	15
05.04.2020	Интегрирование метода получения констант форм колебаний и расчета гармонических частот колебаний в ПО	5
10.04.2020	Создание векторов состояний и расчет энергий нулевого приближения	5
15.04.2020	Связь параметров F и k, k и параметров ангармоничности	10
25.04.2020	Определение Параметров ФПП. Решение обратной задачи	10
30.04.2020	Анализ результатов	15
14.05.2020	Социальная ответственность	10
20.05.2020	Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение	10
24.05.2020	Заключение	5

**СОСТАВИЛ:**

**Руководитель ВКР**

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Профессор	Бехтерева Елена Сергеевна	д.ф.-м.н.		

**СОГЛАСОВАНО:****Руководитель ООП**

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

## РЕФЕРАТ

Выпускная квалификационная работа 75 с., 1 рис., 29 табл., 35 источников, 0 прил.

Ключевые слова: Молекула C<sub>2</sub>H<sub>4</sub>, потенциальная функция, молекулярная спектроскопия, спектры высокого разрешения, спектроскопические параметры.

Объектом исследования является (ются) Молекула C<sub>2</sub>H<sub>4</sub>.

Цель работы – уточнение квадратичных и определение кубических и кватричных параметров потенциальной функции молекулы этилена.

В процессе исследования проводились расчет констант форм колебаний, получение аналитических связей между параметрами потенциальной функции в различных записях и параметрами ангармоничности, решение обратной задачи для получения параметров потенциальной функции

В результате исследования Разработана аналитическая модель для определения координатного представления потенциальной функции этилена, разработан алгоритм симметризации базисных состояний, создана программа численного расчета энергетических состояний этилена, определены, обусловленные экспериментальными данными, параметры, а именно, 18 квадратичных, 6 кубических и 7 кватричных параметров ФПП.

Область применения: астрофизика, планетология и атмосферная оптика.

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

В будущем планируется привлечение дополнительной экспериментальной информации об изотопологах этилена, а также включение в алгоритмическую схему метода колебательно-вращательной части проблемы.

## Оглавление

Введение.....	12
1. Состояние исследований потенциальной функции этилена .....	15
2. Необходимая информация о молекуле этилена.....	17
3. Первые связи на $l$ параметры из геометрических соображений.....	20
4. Дальнейшее получение формул на $l$ параметры.....	21
4.1. Условия Экарта и ортогональности.....	21
4.2. Расчет гармонических частот вне плоскостных колебаний .....	22
4.3. Условие на вторую производную ФПП .....	23
4.4. Расчет гармонических частот всех колебаний .....	25
5. Интегрирование метода получения $l$ -параметров и расчета гармонических частот колебаний в ПО .....	27
6. Векторы состояний и расчет энергий нулевого приближения .....	29
7. Связь параметров $F$ и $k$ , $k$ и параметров ангармоничности.....	33
8. Определение Параметров ФПП. Решение обратной задачи .....	39
9. Социальная ответственность .....	41
9.1. Правовые и организационные вопросы обеспечения безопасности....	41
9.2. Производственная безопасность.....	42
9.3. Экологическая безопасность.....	51
9.4. Безопасность в чрезвычайных ситуациях.....	51
10. Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение....	54
10.1. Потенциальные потребители результатов исследования.....	54
10.2. Анализ конкурентных технических решений .....	55
10.3. SWOT-анализ .....	56
10.4. Планирование научно-исследовательских работ.....	60
10.5. Бюджет научно-технического исследования (НТИ).....	65
10.6. Определение ресурсной (ресурсосберегающей), финансовой, бюджетной, социальной и экономической эффективности исследования .....	69
11. Заключение .....	71
Список литературы .....	72

## Введение

Путем изучения спектров колебательно-вращательная спектроскопия дает возможность получить информацию о некоторых физических характеристиках молекул, таких как, например, магнитный момент, электрический момент, внутримолекулярное силовое поле, структурные постоянные молекулы и межмолекулярный потенциал. Эти знания, в свою очередь, необходимы для решения задач молекулярной физики, химии, биологии и астрофизики. Так, например, в работе [1], посвященной исследованию присутствия газа молекулы  $C_2H_4$  вокруг звездного объекта IRC+10216, прямо демонстрируется необходимость спектроскопических данных, путем акцентирования внимания на моменте использования этих данных при составлении необходимой авторам статистической суммы.

Анализ спектров высокого разрешения дает возможность определить систему энергетических уровней изучаемой молекулы. Модели, развитые в колебательно-вращательной спектроскопии, на настоящий момент, позволяют описывать довольно сложные энергетические структуры, учитывающие множественные резонансные взаимодействия с точностями сопоставимыми с экспериментальной погрешностью в исследуемом диапазоне. Значимость спектроскопических параметров эффективных гамильтонианов, определяемых из прямого фитинга экспериментальных данных, можно определить, как фундаментальную, поскольку, дальнейшее использование методов теории возмущений открывает возможность определения потенциальной функции исследуемой молекулы. Потенциальная функция молекулы или внутримолекулярное силовое поле, или функция потенциальной поверхности (далее ФПП), в свою очередь, определяет внутреннюю колебательную динамику молекулы, определяющую ее физико-химические свойства. Описанная цепь рассуждений составляет основу, так называемого полуэмпирического подхода в определении ФПП.

Альтернативными методами определения ФПП являются расчеты, основывающиеся на первых принципах квантовой механики [2]. Это, так

называемые, *ab initio* методы. Неразрывно связанные с развитием компьютерных мощностей, *ab initio* методы позволяют определять параметры ФПП и энергетические структуры молекул, однако для молекул, содержащих более четырех атомов точность таких расчетов на 4-5 порядков хуже экспериментальных погрешностей.

Основываясь на необходимости в сведениях предсказательного характера высокой точности для исследования современных колебательно-вращательных спектров (особенно переходов в высоковозбужденные состояния) наиболее практичным и востребованным является целенаправленное развитие полуэмпирического подхода определения ФПП и реализация его для исследуемых объектов с использованием всей имеющейся высокоточной информации. Это, в свою очередь, обуславливает необходимость решения нескольких задач:

1. Обоснование с точки квантовой физики и разработка метода нахождения внутримолекулярных потенциальных функций.
2. Разработка алгоритмов и программ для реализации разработанных методов.
3. Обеспечение первых пунктов высокоточной информацией, получаемой из анализа спектров высокого разрешения.
4. Проведение экспериментальных исследований, а именно регистрации колебательно-вращательных спектров в широком диапазоне электромагнитной шкалы при вариативных макропараметрах (давление, температура, оптическая длина пути) для различных изотопологов молекул.

В настоящий момент в литературе опубликованы параметры функции потенциальной поверхности (ФПП) этилена только до квадратичных вкладов [3, 4]. Однако, как показывает анализ спектров  $C_2H_4$  и ее изотопологов, необходимость в количественном определении кубических и квартичных силовых коэффициентов возникает уже в области  $1500\text{ см}^{-1}$  и выше. Таким образом, получение параметров ФПП высоких порядков для молекулы этилена является актуальной задачей.

Следует отметить, что полуэмпирические методы, зачастую сталкиваются с тем, что при увеличении числа атомов в молекуле многократно возрастает объем вычислений, хотя, на самом деле, такой недостаток преследует и *ab initio* методы. В случае полуэмпирического подхода, эту проблему помогает решить использование свойств симметрии. Классификация состояний по симметрии позволяет разбить множество колебательных, а также колебательно-вращательных состояний на подмножества меньших размерностей, при этом, исходная матрица редуцируется еще на этапе построения. Этот метод делает возможным расчет ФПП молекул, содержащих более 4-х, 5-, 6-ти атомов.

Определение ФПП этилена является своевременной задачей, поскольку за последнее время было накоплено много экспериментальной информации, как об исследовании основной модификации, так и изотопологов, например, [5-8], необходимой для восстановления ФПП.

Как логичное развитие наших знаний, необходимо разработать метод, программный код и провести расчеты параметров ФПП высших порядков и уточнить знания о квадратичных.

Исходя из вышесказанного, **цель** данной работы: уточнение квадратичных и определение кубичных и квартичных параметров потенциальной функции молекулы этилена.

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

1. Разработка аналитической модели для определения координатного представления потенциальной функции этилена.
2. Разработка алгоритмов симметризации базисных состояний.
3. Интеграция аналитической модели в ПО численного расчета.
4. Решение обратной задачи: восстановление параметров потенциальной функции.

## 1. Состояние исследований потенциальной функции этилена

Исследования, посвященные определению параметров потенциальной функции этилена, ведутся уже давно. Так, в работе [9], авторы представили список из 18 квадратичных параметров потенциальной функции. Однако, как отмечено в работе, в восстановлении таких характеристик молекулы как частоты гармонических колебаний и некоторых экспериментальных констант с использованием полученного набора параметров, наблюдались достаточно большие отклонения от экспериментальных данных. Например, рассчитанное значение частоты колебания  $\omega_1$  отличалось от эксперимента на  $10 \text{ см}^{-1}$ . Помимо прочего, авторы работы [9] сравнивают результаты определения параметров потенциальной функции с *ab initio* расчетами из работы [4] и со своими прошлыми результатами [10]. Сравнение результатов приведено в первых трех столбцах таблицы 1.

Как было сказано ранее, определение параметров потенциальной функции молекулы этилена возможно и с помощью *ab initio* методов, как, например, в работах [3, 4]. Так, например, в работе [3] достигается наилучшее для *ab initio* совпадение с полуэмпирическим методом определения параметров потенциальной функции в работе [9]. Данное сравнение так же представлено в таблице 1.

Таблица 1 – Сравнение результатов определения параметров потенциальной функции молекулы этилена. Единицы измерения энергетических параметров - аДж, дистанционных –ангстремы, угловых – радианы.

Параметр	Работа [9]	Работа [10]	Работа [4]	Работа [3]
$F_{1,1}$	9,418(38)	9,395	9,939	9,410(26)
$F_{2,1}$	0,160(38)	0,365	0,192	0,123(75)
$F_{2,2}$	-0,305(10)	-0,289	-0,315	
$F_{3,1}$	5,630(24)	5,638	5,950	5,640(80)

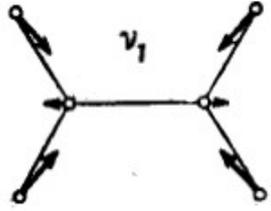
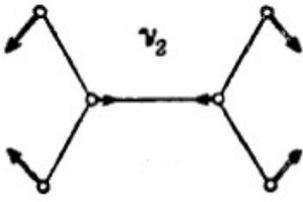
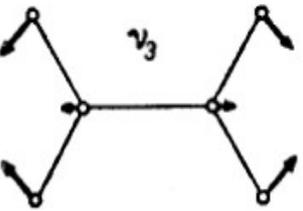
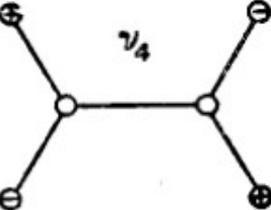
Продолжение таблицы 1

Параметр	Работа [9]	Работа [10]	Работа [4]	Работа [3]
F <sub>3,2</sub>	-0,072(18)	-0,052	-0,067	
F <sub>3,3</sub>	0,4145(17)	0,414	0,493	
F <sub>4,4</sub>	0,6479(40)	0,646	0,775	
F <sub>5,5</sub>	5,514(27)	5,657	5,854	5,597(41)
F <sub>6,5</sub>	0,220(18)	0,365	0,208	0,211(56)
F <sub>6,6</sub>	0,5502(37)	0,560	0,622	0,640(42)
F <sub>7,7</sub>	0,9533(73)	0,950	1,194	
F <sub>8,8</sub>	0,6974(55)	0,702	0,875	
F <sub>9,9</sub>	5,525(28)	5,493	5,904	5,627(32)
F <sub>10,9</sub>	-0,116(40)	-0,161	-0,088	0,07
F <sub>10,10</sub>	0,4108(37)	0,413	0,445	0,462(83)
F <sub>11,11</sub>	5,580(24)	5,603	5,936	5,630(84)
F <sub>12,11</sub>	0,0818(76)	0,085	0,102	
F <sub>12,12</sub>	0,3838(20)	0,384	0,452	

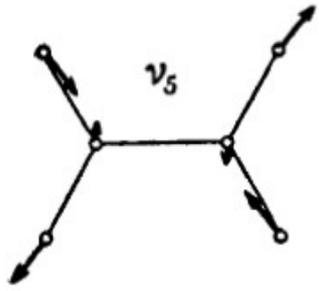
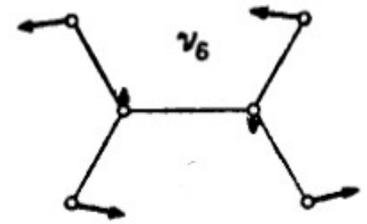
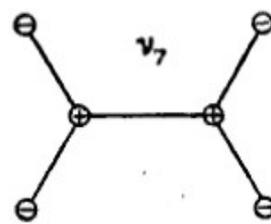
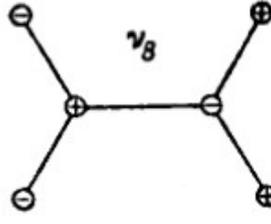
## 2. Необходимая информация о молекуле этилена

Группа симметрии молекулы этилена изоморфна группе симметрии  $D_{2h}$ . Эта группа включает в себя 6 типов симметрии, к которым принадлежат 12 возможных колебаний молекулы этилена. В таблице 2 представлены колебания, соответствующие разным типам симметрии.

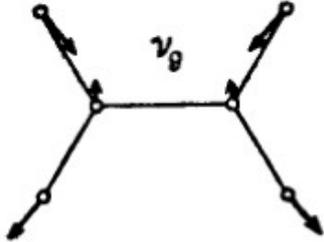
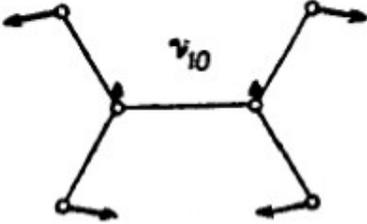
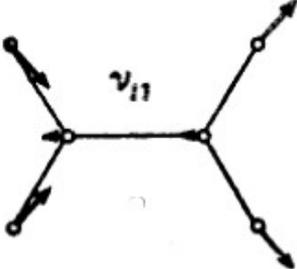
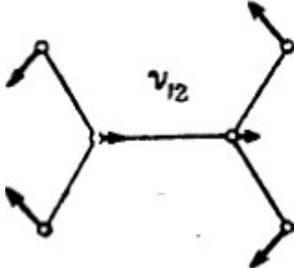
Таблица 2 – Нормальные колебания молекулы этилен

Симметрия	Колебание	Изображение колебания
$A_g$	Q1	
	Q2	
	Q3	
$A_u$	Q4	

Продолжение таблицы 2

Симметрия	Колебание	Изображение колебания
$B_{1g}$	$Q_5$	
	$Q_6$	
$B_{1u}$	$Q_7$	
$B_{2g}$	$Q_8$	

Продолжение таблицы 2

Симметрия	Колебание	Изображение колебания
B <sub>2u</sub>	Q9	
	Q10	
B <sub>3u</sub>	Q11	
	Q12	

### 3. Первые связи на $l$ параметры из геометрических соотношений

Для определения констант форм колебаний, как и в работе [2], начнем с элементарных связей на  $l$ , получаемых исходя из нормальных колебаний молекулы. В таблице 1 представлены изображения всех 12-и колебаний этилена, стоит заметить, что здесь и далее оси координат будем ориентировать следующим образом: молекула лежит в плоскости ХУ, так что ось Х проходит вдоль связи С=С. Полученные взаимосвязи представлены ниже.

$l_{1z1} \neq 0$	$l_{2x3} = -l_{1x3}$	$l_{3x6} = -l_{1x6}$	$l_{2z10} = -l_{1z10}$
$l_{2z1} = l_{1z1}$	$l_{3x3} = -l_{1x3}$	$l_{4x6} = -l_{1x6}$	$l_{3z10} = l_{1z10}$
$l_{3z1} = -l_{1z1}$	$l_{4x3} = l_{1x3}$	$l_{5y7} \neq 0$	$l_{4z10} = -l_{1z10}$
$l_{4z1} = -l_{1z1}$	$l_{5x3} = 0$	$l_{6y7} = l_{5y7}$	$l_{1x10} \neq 0$
$l_{5z1} \neq 0$	$l_{6x3} = 0$	$l_{1y7} \neq 0$	$l_{2x10} = l_{1x10}$
$l_{6z1} = -l_{5z1}$	$l_{1y4} \neq 0$	$l_{2y7} = l_{1y7}$	$l_{3x10} = l_{1x10}$
$l_{1x1} \neq 0$	$l_{2y4} = -l_{1y4}$	$l_{3y7} = l_{1y7}$	$l_{4x10} = l_{1x10}$
$l_{2x1} = -l_{1x1}$	$l_{3y4} = l_{1y4}$	$l_{4y7} = l_{1y7}$	$l_{5x11} = 0$
$l_{3x1} = -l_{1x1}$	$l_{4y4} = -l_{1y4}$	$l_{5y8} \neq 0$	$l_{6x11} = 0$
$l_{4x1} = l_{1x1}$	$l_{5z5} = 0$	$l_{6y8} = -l_{5y8}$	$l_{5z11} \neq 0$
$l_{5x1} = 0$	$l_{6z5} = 0$	$l_{1y8} \neq 0$	$l_{6z11} = l_{5z11}$
$l_{6x1} = 0$	$l_{5x5} \neq 0$	$l_{2y8} = l_{1y8}$	$l_{1z11} \neq 0$
$l_{1z2} \neq 0$	$l_{6x5} = -l_{5x5}$	$l_{3y8} = -l_{1y8}$	$l_{2z11} = l_{1z11}$
$l_{2z2} = l_{1z2}$	$l_{1z5} \neq 0$	$l_{4y8} = -l_{1y8}$	$l_{3z11} = l_{1z11}$
$l_{3z2} = -l_{1z2}$	$l_{2z5} = -l_{1z5}$	$l_{5z9} = 0$	$l_{4z11} = l_{1z11}$
$l_{4z2} = -l_{1z2}$	$l_{3z5} = -l_{1z5}$	$l_{6z9} = 0$	$l_{1x11} \neq 0$
$l_{5z2} \neq 0$	$l_{4z5} = l_{1z5}$	$l_{5x9} \neq 0$	$l_{2x11} = -l_{1x11}$
$l_{6z2} = -l_{5z2}$	$l_{1x5} \neq 0$	$l_{6x9} = l_{5x9}$	$l_{3x11} = l_{1x11}$
$l_{1x2} \neq 0$	$l_{2x5} = l_{1x5}$	$l_{1z9} \neq 0$	$l_{4x11} = -l_{1x11}$
$l_{2x2} = -l_{1x2}$	$l_{3x5} = -l_{1x5}$	$l_{2z9} = -l_{1z9}$	$l_{5x12} = 0$
$l_{3x2} = -l_{1x2}$	$l_{4x5} = -l_{1x5}$	$l_{3z9} = l_{1z9}$	$l_{6x12} = 0$
$l_{4x2} = l_{1x2}$	$l_{5z6} = 0$	$l_{4z9} = -l_{1z9}$	$l_{5z12} \neq 0$
$l_{5x2} = 0$	$l_{6z6} = 0$	$l_{1x9} \neq 0$	$l_{6z12} = l_{5z12}$
$l_{6x2} = 0$	$l_{5x6} \neq 0$	$l_{2x9} = l_{1x9}$	$l_{1z12} \neq 0$
$l_{1z3} \neq 0$	$l_{6x6} = -l_{5x6}$	$l_{3x9} = l_{1x9}$	$l_{2z12} = l_{1z12}$
$l_{2z3} = l_{1z3}$	$l_{1z6} \neq 0$	$l_{4x9} = l_{1x9}$	$l_{3z12} = l_{1z12}$
$l_{3z3} = -l_{1z3}$	$l_{2z6} = -l_{1z6}$	$l_{5z10} = 0$	$l_{4z12} = l_{1z12}$
$l_{4z3} = -l_{1z3}$	$l_{3z6} = -l_{1z6}$	$l_{6z10} = 0$	$l_{1x12} \neq 0$
$l_{5z3} \neq 0$	$l_{4z6} = l_{1z6}$	$l_{5x10} \neq 0$	$l_{2x12} = -l_{1x12}$
$l_{6z3} = -l_{5z3}$	$l_{1x6} \neq 0$	$l_{6x10} = l_{5x10}$	$l_{3x12} = l_{1x12}$
$l_{1x3} \neq 0$	$l_{2x6} = l_{1x6}$	$l_{1z10} \neq 0$	$l_{4x12} = -l_{1x12}$

## 4. Дальнейшее получение формул на $l$ параметры

### 4.1. Условия Экарта и ортогональности

Далее нахождение параметров  $l$  будет происходить по уже известным в литературе [12] формулам:

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

$$\sum_{N\alpha} l_{N\beta\lambda} \cdot l_{N\alpha\mu} = \delta_{\lambda\mu}, \quad (2)$$

$$\left( \frac{\partial^2 V}{\partial Q_\lambda \partial Q_\mu} \right)_{Q=0} = 0, \quad \lambda \neq \mu, \quad (3)$$

$$\sum_N m_N r_{N\beta} + \sum_i m_e r_{i\beta} = 0, \quad (4)$$

$$\sum_N m_N^{1/2} l_{N\beta\lambda} = 0. \quad (5)$$

Ниже представлены полученные уравнения на искомые параметры.

$$6,29502056419006 \cdot l_{1x5} \cdot l_{1x6} - 1,72022030238173 \cdot l_{1x5} \cdot l_{1z6} - 1,72022030238173 \cdot l_{1z5} \cdot l_{1x6} +$$

$$+ 5,28938186214929 \cdot l_{1z5} \cdot l_{1z6} = 0$$

$$4,67126800432936 \cdot l_{1x9} \cdot l_{1x10} + 4l_{1z9} \cdot l_{1z10} = 0$$

$$4,67126800432936 \cdot l_{1z11} \cdot l_{1z12} + 4l_{1x11} \cdot l_{1x12} = 0$$

$$l_{1y4} = \frac{1}{2}$$

$$l_{1y7} = 0,462682003643462$$

$$l_{1y8} = 0,398567078627108$$

$$5,17460328228128 \cdot 10^{-12} \cdot l_{1y7} + 8,93190476573273278 \cdot 10^{-12} \cdot l_{5y7} = 0$$

$$5,17460328228128 \cdot 10^{-12} \cdot l_{1x9} + 8,93190476573273278 \cdot 10^{-12} \cdot l_{5x9} = 0$$

$$5,17460328228128 \cdot 10^{-12} \cdot l_{1x10} + 8,93190476573273278 \cdot 10^{-12} \cdot l_{5x10} = 0$$

$$5,17460328228128 \cdot 10^{-12} \cdot l_{1z11} + 8,93190476573273278 \cdot 10^{-12} \cdot l_{5z11} = 0$$

$$5,17460328228128 \cdot 10^{-12} \cdot l_{1z12} + 8,93190476573273278 \cdot 10^{-12} \cdot l_{5z12} = 0$$

$$6,46616809627784 \cdot 10^{-20} \cdot l_{1x5} - 4,84668146830120 \cdot 10^{-20} \cdot l_{1z5} + 6,03627055972988 \cdot 10^{-20} \cdot l_{5x5} = 0$$

$$6,46616809627784 \cdot 10^{-20} \cdot l_{1x6} - 4,84668146830120 \cdot 10^{-20} \cdot l_{1z6} + 6,03627055972988 \cdot 10^{-20} \cdot l_{5x6} = 0$$

$$6,46616809627784 \cdot 10^{-20} \cdot l_{1y8} + 6,03627055972988 \cdot 10^{-20} \cdot l_{5y8} = 0$$

$$4l_{1x1}^2 + 4l_{1z1}^2 + 2l_{5z1}^2 = 1$$

$$4l_{1x2}^2 + 4l_{1z2}^2 + 2l_{5z2}^2 = 1$$

$$4l_{1x3}^2 + 4l_{1z3}^2 + 2l_{5z3}^2 = 1$$

$$4l_{1y4}^2 = 1$$

$$6,29502056419006 \cdot l_{1x5}^2 - 3,44044060476346 \cdot l_{1x5} \cdot l_{1z5} + 5,28938186214929 \cdot l_{1z5}^2 = 1$$

$$6,29502056419006 \cdot l_{1x5}^2 - 3,44044060476346 \cdot l_{1x5} \cdot l_{1z5} + 5,28938186214929 \cdot l_{1z5}^2 = 1$$

$$4,67126800432936 \cdot l_{1y7}^2 = 1$$

$$6,29502056419006 \cdot l_{1y8}^2 = 1$$

$$4,67126800432936 \cdot l_{1x9}^2 + 4l_{1z9}^2 = 1$$

$$4,67126800432936 \cdot l_{1x10}^2 + 4l_{1z10}^2 = 1$$

$$4,67126800432936 \cdot l_{1z11}^2 + 4l_{1x11}^2 = 1$$

$$4,67126800432936 \cdot l_{1z12}^2 + 4l_{1x12}^2 = 1$$

$$4l_{1x1} \cdot l_{1x2} + 4l_{1z1} \cdot l_{1z2} + 2l_{5z1} \cdot l_{5z2} = 0$$

$$4l_{1x1} \cdot l_{1x3} + 4l_{1z1} \cdot l_{1z3} + 2l_{5z1} \cdot l_{5z3} = 0$$

$$4l_{1x2} \cdot l_{1x3} + 4l_{1z2} \cdot l_{1z3} + 2l_{5z2} \cdot l_{5z3} = 0$$

## 4.2. Расчет гармонических частот вне плоскостных колебаний

Как видно, на данном этапе получилось определить параметры для вне плоскостных колебаний. Можно рассчитать гармонические частоты для этих колебаний и сравнить с известными значениями в литературе.

Приведем сравнение полученных результатов с результатами из работы [3]

Таблица 3 – Результат расчета и сравнение гармонических частот вне плоскостных колебаний

Частота	Наши результаты, см <sup>-1</sup>	Из работы [3], см <sup>-1</sup>
$\omega_4$	1030	1030
$\omega_7$	949	949
$\omega_8$	908	909

Как можно увидеть, отличие полученных параметров от параметров из работы [3] не превосходит 1 см<sup>-1</sup>. Так как это только пробный расчет, нацеленный на проверку модели, то такие отклонения можно принять за норму, значения еще будут уточняться.

#### 4.3. Условие на вторую производную ФПП

Из условия гармоничности самой потенциальной функции вытекает условие (3).

Из этого условия так же можно получить уравнения на оставшиеся неизвестные параметры.

$$0,555593107964013 \cdot l_{1z1} \cdot l_{1z2} - 0,129498157573588 \cdot l_{1z1} \cdot l_{5z2} - 0,129498157573588 \cdot l_{5z1} \cdot l_{1z2} + \\ + 0,217131124732715 \cdot l_{5z1} \cdot l_{5z2} + 1,08799862717122 \cdot l_{1x1} \cdot l_{1x2} - 0,141068439241659 \cdot l_{1x1} \cdot l_{5z2} - \\ - 0,141068439241659 \cdot l_{1x2} \cdot l_{5z1} + 0,455193165015864 \cdot l_{1z1} \cdot l_{1x2} + 0,455193165015864 \cdot l_{1z2} \cdot l_{1x1} = 0$$

$$0,555593107964013 \cdot l_{1z1} \cdot l_{1z3} - 0,129498157573588 \cdot l_{1z1} \cdot l_{5z3} - 0,129498157573588 \cdot l_{5z1} \cdot l_{1z3} + \\ + 0,217131124732715 \cdot l_{5z1} \cdot l_{5z3} + 1,08799862717122 \cdot l_{1x1} \cdot l_{1x3} - 0,141068439241659 \cdot l_{1x1} \cdot l_{5z3} - \\ - 0,141068439241659 \cdot l_{1x3} \cdot l_{5z1} + 0,455193165015864 \cdot l_{1z1} \cdot l_{1x3} + 0,455193165015864 \cdot l_{1z3} \cdot l_{1x1} = 0$$

$$0,555593107964013 \cdot l_{1z3} \cdot l_{1z2} - 0,129498157573588 \cdot l_{1z2} \cdot l_{5z3} - 0,129498157573588 \cdot l_{5z2} \cdot l_{1z3} + \\ + 0,217131124732715 \cdot l_{5z3} \cdot l_{5z2} + 1,08799862717122 \cdot l_{1x3} \cdot l_{1x2} - 0,141068439241659 \cdot l_{1x2} \cdot l_{5z3} - \\ - 0,141068439241659 \cdot l_{1x3} \cdot l_{5z2} + 0,455193165015864 \cdot l_{1z2} \cdot l_{1x3} + 0,455193165015864 \cdot l_{1z3} \cdot l_{1x2} = 0$$

$$1,72717498577427 \cdot l_{1x5} \cdot l_{1x6} + 0,332265452064908 \cdot l_{1z6} \cdot l_{1x5} + 0,332265452064908 \cdot l_{1z5} \cdot l_{1x6} + \\ + 0,412822465430345 \cdot l_{1z5} \cdot l_{1z6} = 0$$

$$0,660051013993616 \cdot l_{1z9} \cdot l_{1x10} + 0,660051013993616 \cdot l_{1z10} \cdot l_{1x9} + 0,447267461509382 \cdot l_{1z9} \cdot l_{1z10} + \\ + 1,34939190320720 \cdot l_{1x9} \cdot l_{1x10} = 0$$

$$0,535857203669425 \cdot l_{1z11} \cdot l_{1x12} + 0,535857203669425 \cdot l_{1z12} \cdot l_{1x11} + 0,717680807933767 \cdot l_{1z11} \cdot l_{1z12} + \\ + 1,09125648868796 \cdot l_{1x11} \cdot l_{1x12} = 0$$

Из-за наличия квадратных уравнений на искомые параметры, расчеты дают несколько наборов решений. Физически они относятся к различным фазам колебаний. Ниже представлен один из таких наборов.

$$l_{1z3} = 0,246198377859120$$

$$l_{1x1} = 0,166105155152043$$

$$l_{1x2} = 0,223312435486095$$

$$l_{1x3} = 0,415380107358530$$

$$l_{5z1} = -0,338391854148467$$

$$l_{5z2} = 0,593126885872876$$

$$l_{5z3} = -0,183552309439863$$

$$l_{1z5} = -0,379964647990696$$

$$l_{1z6} = 0,251248410335909$$

$$l_{1x5} = 0,116003271731731$$

$$l_{1x6} = 0,401115802905582$$

$$l_{1z9} = 0,249609731961733$$

$$l_{1x9} = 0,400902656422236$$

$$l_{1z10} = 0,433237788875799$$

$$l_{1x10} = -0,230979861825924$$

$$l_{1z11} = -0,391675077616939$$

$$l_{1x11} = 0,266168994742386$$

$$l_{1z12} = 0,246303207590347$$

$$l_{1x12} = 0,423265952136275$$

$$l_{1z1} = -0,406392118470446$$

$$l_{1z2} = -0,155665682745558$$

#### 4.4. Расчет гармонических частот всех колебаний

Теперь, зная набор значений параметров  $l$ , можем, как и в пункте 4.2, провести расчет гармонических частот колебаний. Только сейчас проведем расчет для всех колебаний. Так же приведем сравнение с известными значениями (таблица 4).

Таблица 4 – Результат расчета и сравнение всех гармонических частот колебаний.

Частота	Наши результаты, $\text{см}^{-1}$	Из работы [3], $\text{см}^{-1}$
$\omega_1$	1358	1358
$\omega_2$	1670	1671
$\omega_3$	3163	3163
$\omega_4$	1030	1030
$\omega_5$	1229	1229
$\omega_6$	3233	3233
$\omega_7$	949	949
$\omega_8$	908	909
$\omega_9$	3259	3259
$\omega_{10}$	820	820
$\omega_{11}$	1460	1461
$\omega_{12}$	3144	3144

Как видно по данным таблицы 3 отклонение от значений работы [1] так же не превышает  $1 \text{ см}^{-1}$ . Из всех расчетов, следует заключить, что модель

определения  $l$ -параметров верна и полученные данные можно использовать в дальнейшей работе.

## 5. Интегрирование метода получения $l$ -параметров и расчета гармонических частот колебаний в ПО

В предыдущих пунктах метод для определения констант форм колебаний и гармонических частот колебаний был реализован в среде аналитического программирования MAPLE. Однако, учитывая то обстоятельство, что процесс решения самосогласованной задачи – итерационная процедура, возникает необходимость в дальнейшей интеграции метода определения  $l$ -параметров и расчета частот в программный код на языке, более подходящем для этих целей. С точки зрения эффективности, современные компьютерные мощности позволяют использовать современные компиляторы и программные среды, однако, в случае научного программирования наиболее значимым является разработка оптимальных алгоритмических схем. Использование, языка программирования как средства, в данной ситуации, является исключительно практичным, что подразумевает простоту синтаксиса и «примитивную» ясность операндов. В данном случае простота написания кода играет в пользу эффективности и прозрачности алгоритма. Придерживаясь описанных соображений и, учитывая имеющиеся наработки, языком программирования численной схемы был выбран FORTRAN. Следует отметить, что подобная программа для молекул, содержащих 3-5 атомов уже разработана в научной группе О.Н. Уленикова. Однако, специфика молекулы этилен состоит в наличии, так называемых, вне плоскостных колебаний, что требует существенной модификации имеющихся алгоритмов, исходя из принципов определения координат такого рода. Мы не исключаем переход на более современные средства типа C+ (в случае необходимости), что, по сути, не является самоцелью.

Уравнения (1-5) образуют систему  $3N(3N-6)$  нелинейных уравнений. В случае реализации численного метода определения констант форм колебаний для молекулы, не имеющей вырожденных колебаний основную сложность составляет определение вне плоскостных колебательных координат и, как следствие, условий на вторую производную потенциальной функции (3).

Выражения для упомянутых торсионных координат были определены в аналитической среде MAPLE в виде рядов, параметрически зависящих от искомым  $l$ .

Поскольку система уравнений содержит вторые степени искомым параметров, то имеется возможность найти решение только численно методом вариации. Именно такой подход используется в нашем случае.

Составленная на основе метода наименьших квадратов процедура подбирает численное решение итерационно минимизируя сумму квадратов разностей правых частей уравнений (1-5).

Критерием правильности найденного  $l$ -набора является восстановление гармонических частот.

## 6. Векторы состояний и расчет энергий нулевого приближения

После подготовки корневой механики расчета в программном обеспечении, необходимо было начать подготовку к заполнению матрицы состояний и ее диагонализации. Первым этапом стала генерация колебательных состояний, расчет их энергий и сортировка их по симметриям.

### а) Симметрии состояний.

Как было указано в параграфе 1, молекула этилена имеет 12 нормальных колебаний, обладающих фундаментальными частотами и преобразующихся по неприводимым представлениям группы  $D_{2h}$  [12], как показано в таблице 5.

Таблица 5 – Таблица характеров точечной группы  $D_{2h}$

	E	$C_2(z)$	$C_2(y)$	$C_2(x)$	I	$\sigma(xy)$	$\sigma(zx)$	$\sigma(yz)$	Базисы	
$A_g$	1	1	1	1	1	1	1	1		$x^2, y^2, z^2$
$B_{1g}$	1	1	-1	-1	1	1	-1	-1	$R_z$	$xy$
$B_{2g}$	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	$R_y$	$xz$
$B_{3g}$	1	-1	-1	1	1	-1	-1	1	$R_x$	$yz$
$A_u$	1	1	1	1	-1	-1	-1	-1		
$B_{1u}$	1	1	-1	-1	-1	-1	1	1	$z$	
$B_{2u}$	1	-1	1	-1	-1	1	-1	1	$y$	
$B_{3u}$	1	-1	-1	1	-1	1	1	-1	$x$	

Ниже в таблице 6 представлены симметрии состояний.

Таблица 6 – Симметрии состояний молекулы этилен.

Состояние	Симметрия
$q1$	$A_g$
$q2$	$A_g$
$q3$	$A_g$
$q4$	$A_u$
$q5$	$B_{1g}$

Продолжение таблицы 6

Состояние	Симметрия
$q6$	$B_{1g}$
$q7$	$B_{1u}$
$q8$	$B_{2g}$
$q9$	$B_{2u}$
$q10$	$B_{2u}$
$q11$	$B_{3u}$
$q12$	$B_{3u}$

Смешанные состояния так же обладают симметрией. Однако их симметрия должна определяться исходя из симметрий исходных состояний таблицы 6 по правилам теории групп. Для удобства в таблице 7 представлены правила умножения для группы  $D_{2h}$ .

Таблица 7 – Таблица умножения для точечной группы  $D_{2h}$

	$A_g$	$B_{1g}$	$B_{2g}$	$B_{3g}$	$A_u$	$B_{1u}$	$B_{2u}$	$B_{3u}$
$A_g$	$A_g$	$B_{1g}$	$B_{2g}$	$B_{3g}$	$A_u$	$B_{1u}$	$B_{2u}$	$B_{3u}$
$B_{1g}$	$B_{1g}$	$A_g$	$B_{3g}$	$B_{2g}$	$B_{1u}$	$A_u$	$B_{3u}$	$B_{2u}$
$B_{2g}$	$B_{2g}$	$B_{3g}$	$A_g$	$B_{1g}$	$B_{2u}$	$B_{3u}$	$A_u$	$B_{1u}$
$B_{3g}$	$B_{3g}$	$B_{2g}$	$B_{1g}$	$A_g$	$B_{3u}$	$B_{2u}$	$B_{1u}$	$A_u$
$A_u$	$A_u$	$B_{1u}$	$B_{2u}$	$B_{1g}$	$A_g$	$B_{1u}$	$B_{2g}$	$B_{3g}$
$B_{1u}$	$B_{1u}$	$A_u$	$B_{3u}$	$B_{2u}$	$B_{1u}$	$A_g$	$B_{3g}$	$B_{2g}$
$B_{2u}$	$B_{2u}$	$B_{3u}$	$A_u$	$B_{1u}$	$B_{2g}$	$B_{3g}$	$A_g$	$B_{1g}$
$B_{3u}$	$B_{3u}$	$B_{2u}$	$B_{1u}$	$A_u$	$B_{3g}$	$B_{2g}$	$B_{1g}$	$A_g$

Ниже приведены некоторые примеры смешанных состояний и их симметрий.

Таблица 8 – Примеры симметрии различных состояний

Состояние	Симметрия
$v4+v8$	$B_{2u}$

Продолжение таблицы 8

Состояние	Симметрия
$\nu_4+\nu_9$	$B_{2g}$
$\nu_4+\nu_{11}$	$B_{3g}$
$\nu_5+\nu_6$	$A_g$
$\nu_5+7$	$A_u$
$\nu_5+\nu_8$	$B_{3g}$

### б) Нулевое приближение

В качестве нулевого приближения использовалась модель несвязанных гармонических осцилляторов. Поскольку нормальных колебаний, интерпретируемых здесь как одномерные осцилляторы, 12, то энергия системы выражается как сумма энергий осцилляторов, которая вычисляется по формуле, см. [2]:

$$E = \sum_i \hbar \omega_i \left( \nu_i + \frac{1}{2} \right) \quad (6)$$

Волновые функции нулевого приближения представимы в виде произведений двенадцати функций, соответствующих осцилляторов:

$$\Psi^{\nu_1 \nu_2 \nu_3 \dots \nu_{12}} = \Psi^{\nu_1} \Psi^{\nu_2} \Psi^{\nu_3} \dots \Psi^{\nu_{12}}$$

Базисной функцией всякого осциллятора является полином Эрмита, максимальная степень которого соответствует степени возбуждения колебания:

$$\Psi_n = C_n e^{-\frac{1}{2}\xi^2} H_n(\xi) \quad (7)$$

где  $H_n(\xi)$  полиномы Эрмита:

$$H_n(\xi) = (-1)^n e^{\xi^2} \frac{d^n e^{-\xi^2}}{d\xi^n} \quad (8)$$

Для определения поправок ангармоничности с помощью теории возмущений необходима информация о матричных элементах операторов

координаты и импульса на функциях нулевого приближения. Здесь мы использовали матричные элементы в следующем виде, например, см. [2]:

$$x_{n-1,n} = x_0 \sqrt{\frac{n}{2}}, \quad x_{n+1,n} = x_0 \sqrt{\frac{n+1}{2}} \quad (9)$$

$$p_{n-1,n} = -im_0 \omega x_{n-1,n}, \quad p_{n+1,n} = im_0 \omega x_{n+1,n}. \quad (10)$$

## 7. Связь параметров F и k, k и параметров ангармоничности

Выражение потенциальной функции возможно, к примеру, в естественных координатах,  $\Delta r$ ,  $\Delta \alpha$ , или координатах симметрии  $S$ :

$$V = \frac{1}{2} \sum_{ij} F_{ij} S_i S_j + \frac{1}{6} \sum_{ijk} F_{ijk} S_i S_j S_k + \frac{1}{24} \sum_{ijkl} F_{ijkl} S_i S_j S_k S_l + \dots \quad (11)$$

где координаты симметрии имеют следующий вид:

$$\begin{array}{ll} A_g & S_1 = (r_1 + r_2 + r_3 + r_4)/2 \\ & S_2 = R \\ & S_3 = (\beta_1 + \beta_2 + \beta_3 + \beta_4)/2 \\ A_u & S_4 = (\tau_{5126} + \tau_{3124})/\sqrt{2} \\ B_{1g} & S_5 = (r_1 - r_2 - r_3 + r_4)/2 \\ & S_6 = (\beta_1 - \beta_2 - \beta_3 + \beta_4)/2 \\ B_{1u} & S_7 = (\tau_{3126} - \tau_{5124})/\sqrt{2} \\ B_{2g} & S_8 = (\tau_{5126} - \tau_{3124})/\sqrt{2} \\ B_{2u} & S_9 = (r_1 - r_2 + r_3 - r_4)/2 \\ & S_{10} = (\beta_1 - \beta_2 + \beta_3 - \beta_4)/2 \\ B_{3u} & S_{11} = (r_1 + r_2 - r_3 - r_4)/2 \\ & S_{12} = (\beta_1 + \beta_2 - \beta_3 - \beta_4)/2 \end{array} \quad (12)$$

где  $r_i$  - расстояния между атомами углерода и водорода;

$R$  - расстояние между атомами углерода;

$\beta_1$  - углы между связями между атомами;

$\tau_{5126}$  - торсионные углы.

В данной работе используется вариант потенциала, записанный через параметры F, как и в работах [3,4,9,10].

Однако, переход от декартовых координат внутримолекулярной системы к нормальным

$$r_{N\alpha} = R_\alpha + \sum_{\beta \in XYZ} k_{\alpha\beta}(\vartheta, \varphi, \chi) \left( r_{N\beta}^e + \sum_{\lambda} (\hbar / 2\pi c \omega_{\lambda} m_N)^{\frac{1}{2}} l_{N\beta\lambda} q_{\lambda} \right) \quad (13)$$

где  $k_{\alpha\beta}(\vartheta, \varphi, \chi)$  - матрицы направляющих косинусов углов между осями старой и новой систем, есть ни что иное как переход к потенциалу вида

$$V(q_{\lambda}) = \frac{1}{2} \sum_{\lambda} \omega_{\lambda} q_{\lambda}^2 + \sum_{\lambda\mu\nu} k_{\lambda\mu\nu} q_{\lambda} q_{\mu} q_{\nu} + \sum_{\lambda\mu\nu\xi} k_{\lambda\mu\nu\xi} q_{\lambda} q_{\mu} q_{\nu} q_{\xi} + \dots \quad (14)$$

В свою очередь, параметры  $k$  входят в ангармонические поправки,  $X_{ik}$ , необходимые для расчета энергий. При расчете энергии дополнительные

возмущения, обусловленные потенциалом, учитываются с помощью поправок к формуле (6):

$$E = \sum_i \hbar \omega_i \left( v_i + \frac{1}{2} \right) + \sum_{i,k} X_{ik} \left( v_i + \frac{1}{2} \right) \left( v_j + \frac{1}{2} \right) \quad (15)$$

Здесь  $X_{ik}$  - параметры ангармоничности, отвечающие за поправки второго порядка малости по отношению к главному вкладу. Эти параметры на два порядка меньше основного вклада в энергию, т.е. имеют значения в целых или десятках  $\text{см}^{-1}$ . Стоит сказать что существуют подобные поправки и меньших порядков и так же могут учитываться при расчете энергии, однако на данный момент ограничимся параметрами  $X_{ik}$ :

$$X_{\lambda\lambda} = \frac{3}{2} k_{\lambda\lambda\lambda} + \sum_{\mu \neq \lambda} \frac{k_{\lambda\lambda\mu}^2 \omega_\mu}{4(4\omega_\lambda^2 - \omega_\mu^2)} - \frac{3k_{\lambda\lambda\lambda}^2}{8\omega_\lambda} \quad (16)$$

$$X_{\lambda\mu} = k_{\lambda\lambda\mu} + \frac{\mu_{\alpha\alpha}^0 \zeta_{\lambda\mu}^\alpha \hbar^2 (\omega_\lambda^2 + \omega_\mu^2)}{\omega_\lambda \omega_\mu} + \frac{2k_{\lambda\mu\mu}^2 \omega_\mu}{(\omega_\lambda^2 - 4\omega_\mu^2)} + \frac{2k_{\lambda\lambda\mu}^2 \omega_\lambda}{(\omega_\mu^2 - 4\omega_\lambda^2)} + \sum_{v \neq \lambda, v \neq \mu} \frac{k_{\lambda\mu v}^2}{8} \left( \frac{1}{\omega_\lambda - \omega_\mu - \omega_v} + \frac{1}{\omega_\lambda + \omega_\mu - \omega_v} + \frac{1}{\omega_\lambda + \omega_\mu + \omega_v} + \frac{1}{\omega_\lambda - \omega_\mu + \omega_v} \right) \quad (17)$$

Вид этих параметров получен для трехатомных молекул, группа симметрии которых изоморфна точечной группе  $C_{2v}$ , однако справедлив для всякой молекулы типа асимметричного волчка и в данной работе применяется для молекулы этилен.

Недиагональные элементы матрицы, построенной в базисе симметризованных колебательных функций, для взаимодействий Ферми типа имеют следующий вид:

$$E_{\lambda\gamma\nu} = 3/8 k_{\lambda\lambda\nu} - \frac{3k_{\lambda\lambda\nu} k_{\nu\nu\nu}}{\omega_\nu} - \frac{9}{2} k_{\lambda\lambda\nu} k_{\lambda\nu\nu} \frac{\omega_\lambda}{(\omega_\lambda^2 - \omega_\nu^2)} + \sum_{\eta \neq \lambda\nu} \frac{3}{2} k_{\lambda\lambda\nu\eta} k_{\nu\nu\eta} \frac{\omega_\eta}{(\omega_\nu^2 - \omega_\eta^2)} - \frac{1}{2} k_{\lambda\lambda\nu\nu}^2 \left( \frac{1}{\omega_\lambda} + \frac{\omega_\lambda}{2(\omega_\lambda^2 - \omega_\nu^2)} \right) + \frac{27}{8} k_{\lambda\lambda\nu\nu}^2 \omega_\nu \left( \frac{1}{(\omega_\lambda^2 - \omega_\nu^2)} + \frac{1}{(\omega_\lambda^2 - 9\omega_\nu^2)} \right) + \sum_{\eta \neq \lambda\nu} \frac{1}{2} k_{\lambda\lambda\nu\eta}^2 \frac{\omega_\eta}{(\omega_\lambda^2 - \omega_\eta^2)} - \frac{3k_{\nu\nu\nu} \zeta_{\lambda\nu}^\alpha \zeta_{\lambda\nu}^\beta \mu_{\alpha\beta}^\nu \hbar^2 (5\omega_\lambda^2 - \omega_\nu^2)}{2 \omega_\lambda \omega_\nu^2} - \frac{k_{\lambda\nu\nu} \zeta_{\lambda\nu}^\alpha \zeta_{\lambda\nu}^\beta \mu_{\alpha\beta}^\lambda \hbar^2}{2\omega_\lambda \omega_\nu} \left( \frac{\omega_\lambda (\omega_\lambda^2 + 7\omega_\nu^2)}{(\omega_\lambda^2 - 2\omega_\nu^2)} + \frac{4(\omega_\lambda^2 + 3\omega_\nu^2)}{\omega_\lambda} \right) + \sum_{\eta \neq \lambda\nu} \frac{1}{16} k_{\lambda\lambda\nu\eta}^2 \left( \frac{1}{\omega_\lambda - 2\omega_\nu - \omega_\eta} - \frac{1}{\omega_\lambda - 2\omega_\nu + \omega_\eta} + \frac{1}{\omega_\lambda + 2\omega_\nu - \omega_\eta} - \frac{1}{\omega_\lambda + 2\omega_\nu + \omega_\eta} \right) \quad (18)$$

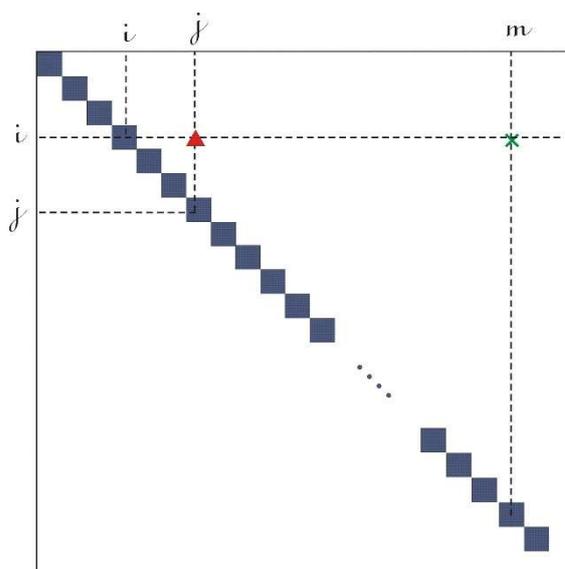


Рисунок 1 – Схематичное изображение матрицы состояний

Следует отметить, что для примера это выражение приводится, однако в ходе решения задачи нам не удалось воспользоваться данным выражением в виду дефицита информации о резонирующих состояниях.

Исследование аналитических зависимостей параметров  $F$  и  $k$  внутримолекулярного потенциала возможно с учетом различных приближений и представляется самостоятельной задачей, не выполнявшейся в рамках данной работы.

В данном подходе, для обоснования целесообразности фитинга того или иного параметра потенциала (ФПП взята в симметризованных координатах  $S$ , следовательно, искомыми в процессе фитинга являются параметры  $F$ ) мы использовали численные производные  $\frac{dX_{ij}}{dF_{ijkt}}$ . Для иллюстрации в таблице 9

приведены некоторые производные  $X$ -параметров по  $F$ .

Таблица 9 – Производные некоторых  $x$ -параметров по  $F$ .

	$^{(2)}F_{11}$	$^{(2)}F_{22}$	$^{(2)}F_{44}$	$^{(2)}F_{1111}$	$^{(3)}F_{199}$	$^{(3)}F_{11111}$	$^{(4)}F_{11111}$	$^{(4)}F_{1166}$
$X_{11}$	7,00	0,50	0,27	-13,0	0,17	6,10	0,069	0,00
$X_{12}$	13,0	160	-0,70	-5,80	-0,01	3,00	0,28	0,00

Продолжение таблицы 9

	<sup>(2)</sup> $F_{11}$	<sup>(2)</sup> $F_{22}$	<sup>(2)</sup> $F_{44}$	<sup>(2)</sup> $F_{1111}$	<sup>(3)</sup> $F_{199}$	<sup>(3)</sup> $F_{11111}$	<sup>(4)</sup> $F_{11111}$	<sup>(4)</sup> $F_{1166}$
$X_{13}$	-5,80	3,20	0,00	3,10	0,00	0,00	0,00	0,00
$X_{14}$	2,90	2,60	0,37	3,40	13,0	0,14	0,00	0,00
$X_{15}$	0,00	0,00	0,00	42,00	19,0	1,50	0,00	0,00
$X_{16}$	14,00	0,83	8,7	0,00	1,30	0,55	0,00	0,00
$X_{17}$	3,10	0,73	1,50	6,60	18,00	0,50	0,00	0,00
$X_{18}$	0,00	0,00	100	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
$X_{19}$	2,00	1,70	6,60	-43,00	30,0	0,81	0,00	0,00
$X_{110}$	-0,00	0,02	0,086	0,37	-0,89	0,00	0,00	-0,25
$X_{111}$	0,90	0,00	-0,37	10,00	0,00	19,00	0,09	0,00
$X_{112}$	0,00	0,01	-0,02	0,05	-0,98	-0,08	0,00	0,00
$X_{22}$	3,10	0,30	5,20	2,80	0,00	0,041	0,00	0,00
$X_{23}$	2,20	-4,50	-1,50	-0,28	3,00	2,00	0,00	0,00
$X_{24}$	0,48	11,00	1,80	0,67	0,93	4,60	0,00	0,00
$X_{25}$	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
$X_{26}$	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
$X_{27}$	1,20	-0,55	1,20	0,37	0,00	-1,90	-5,20	-1,50
$X_{28}$	6,60	-0,69	30,00	10,00	0,00	-0,08	5,40	0,03
$X_{29}$	2,00	-1,30	-0,39	0,05	0,00	-2,10	0,09	1,70

Из приведенной таблицы 9 можно заключить, что для определения, к примеру, параметра  $F_{22}$  необходимо в качестве входных данных (из эксперимента определенных) использовать энергии колебательных состояний  $\nu_1$ ,  $\nu_2$ ,  $\nu_1+\nu_2$ . Дополнительная обусловленность параметров  $F$  большим количеством уравнений возможна, также, при включении в формулировку задачи других изотопологов этилена, а также колебательно-вращательной части.

Как показал анализ литературных источников, для молекулы этилен, на настоящий момент, доступны колебательные центры, представленные в Таблице 10.

Таблица 10 – Центры колебательных полос молекулы C<sub>2</sub>H<sub>4</sub>.

$\nu$	Симметрия	$\nu_0, \text{см}^{-1}$	$\Delta, \text{см}^{-1}$	Работа
$\nu_{10}$	B <sub>2u</sub>	825,9265	0,5	[16]
$\nu_8$	B <sub>2g</sub>	939,9	0,77	[15]
$\nu_7$	B <sub>1u</sub>	948,7709	1,8	[16]
$\nu_4$	A <sub>u</sub>	1025,589	1,5	[16]
$\nu_6$	B <sub>1g</sub>	1225,4	-0,65	[15]
$\nu_3$	A <sub>g</sub>	1343,3	-0,55	[15]
$\nu_{12}$	B <sub>3u</sub>	1442,443	0,7	[16]
$\nu_2$	A <sub>g</sub>	1623	0,23	[15]
$\nu_8+\nu_{10}$	A <sub>u</sub>	1766,665	-0,2	[21]
$\nu_7+\nu_8$	B <sub>3u</sub>	1888,978	1,1	[21]
$\nu_7+\nu_{10}$	B <sub>3g</sub>	1955,082	5,5	[20]
$\nu_4+\nu_8$	B <sub>2u</sub>	1958,282	-3,7	[21]
$\nu_6+\nu_{10}$	B <sub>3u</sub>	2047,759	-5,2	[17]
$\nu_3+\nu_{10}$	B <sub>2u</sub>	2171,24	1,5	[17]
$\nu_6+\nu_7$	A <sub>u</sub>	2178,011	0,8	[17]
$\nu_4+\nu_6$	B <sub>1u</sub>	2252,803	2,1	[17]
$\nu_{10}+\nu_{12}$	B <sub>1g</sub>	2439,038	2,3	[20]
$\nu_{11}$	B <sub>3u</sub>	2988,635	2,2	[15]
$\nu_1$	A <sub>g</sub>	3026	0,11	[15]
$\nu_2+\nu_{12}$	B <sub>3u</sub>	3078,46	3,8	[17]
$\nu_5$	B <sub>1g</sub>	3083,4	0,98	[15]
$\nu_9$	B <sub>2u</sub>	3104,874	-0,9	[15]
$\nu_2+\nu_6+\nu_{12}$	B <sub>2u</sub>	4288,4	12	[18]
$\nu_6+2\nu_{10}+\nu_{12}$	A <sub>g</sub>	4312,63	-10,1	[18]
$\nu_3+\nu_{11}$	B <sub>2u</sub>	4321,77	3,2	[18]
$\nu_6+\nu_9$	B <sub>3u</sub>	4328,65	4,7	[18]
$\nu_5+\nu_{12}$	B <sub>2u</sub>	4514,665	5,4	[19]
$\nu_5+\nu_{11}$	B <sub>2u</sub>	5994,798	-6,2	[15]
$\nu_5+\nu_9$	B <sub>3u</sub>	6150,993	2,8	[15]
				Всего: 29 центров

Полное разложение ФПП этилена содержит в квадратичной части 18 параметров, в кубичной – 60, в квартичной – 246. Всего искомым параметров - 324. Следует оценить необходимое и достаточное количество экспериментальных данных для их определения.

Исходя из сведений о функциональной зависимости колебательно-вращательных спектроскопических параметров от силовых констант, мы имеем

возможность сказать какие экспериментальные данные обеспечат определение тех или иных параметров ФПП.

К примеру, для определения квадратичной части потенциала необходима информация о колебательных центрах всех 12 фундаментальных полос. При этом, из 18  $F^{(2)}$ -параметров, в лучшем случае, определятся 12.

Из фундаментальных же полос, привлекая экспериментальную информацию о 36-и колебательно-вращательных параметрах  $\alpha'_\lambda$  (это вклады во вращательные параметры) мы можем определить максимум 36 искомых параметра кубичной части. Для этого необходимо знать все вращательные параметры фундаментальных полос, т.е. иметь исследованные структуры однократно возбужденных состояний.

Если для молекулы этилен были бы известны все дважды возбужденные центры, то можно было бы рассчитывать на определение всех 18-ти  $X$ -параметров, которые являются функциями кубичных и квартичных параметров.

Таким образом, при наличии всех экспериментальных данных только о материнской молекуле,  $C_2H_4$ :

$12(\text{омеги}) + 36(\text{альфа-параметры}) + 78(X\text{-параметры}) = 126$  мы могли бы составить 126 уравнений на  $18+60+246 = 324$  неизвестных.

В действительности, на данный момент нам известны 12 (центров фундаментальных полос) + 36(альфа-параметры) + 15(дважды возбужденных состояний), таким образом - 63 уравнений. При таких исходных условиях мы имеем существенно не доопределённую систему. В реальности, имеющиеся данные нам позволят определить 63 параметра из 324.

Таким образом, имеющихся данных об основной модификации недостаточно для решения поставленной задачи определения полного разложения ФПП этилена. Для решения задачи в полном объеме необходимо привлекать информацию об изотопологах этилена.

В данной ситуации, мы имеем возможность оценить лишь некоторые силовые параметры, исходя из имеющегося набора колебательных центров.

## 8. Определение Параметров ФПП. Решение обратной задачи

Исходя из вышеизложенного, располагая данными для 63 колебательных центров полос нам удалось определить 51 параметр потенциальной функции на основе решения обратной задачи по средству итерационной процедуры.

В таблице 11 приведены параметры ФПП. Следует отметить, что в процессе решения обратной задачи часть параметров оказалась плохо обусловленными, что означает, недостаточность количества уравнений (фактический дефицит экспериментальных данных). По этой причине, для устойчивости решения, параметры квадратичной части, имевшие большие доверительные интервалы, были фиксированы значениям соответствующих параметров из работы [3]. Ненулевые кубичные и квартичные силовые константы приводятся без сравнений, поскольку на настоящий момент информация о них в литературе отсутствует. Значения, приведенные в круглых скобках – 1-sigma доверительные интервалы.

Таблица 10 – Параметры ФПП молекулы этилен.

Параметр	Значение [3]	Решение ОЗ	
$F_{1,1}$	5,64080	5,7210(42)	CH – stretching 1
$F_{2,1}$	0,12375	0,12375	
$F_{2,2}$	9,41026	9,3118(33)	CC – stretching
$F_{3,1}$	-0,13965	-0,13965	
$F_{3,2}$	0,50168	0,50168	
$F_{3,3}$	1,49089	1,5155(08)	
$F_{4,4}$	0,27657	0,2723(11)	Twisting 1
$F_{5,5}$	5,59741	5,6114(35)	CH – stretching 2
$F_{6,5}$	0,21156	0,21156	
$F_{6,6}$	0,64042	0,63948(09)	
$F_{7,7}$	0,20092	0,18994(25)	Twisting 1
$F_{8,8}$	0,13660	0,14101(23)	Twisting 1
$F_{9,9}$	5,62732	5,59632(47)	CH – stretching 3
$F_{10,9}$	0,46283	0,46283	
$F_{10,10}$	0,46283	0,25017(15)	
$F_{11,11}$	5,63084	5,6375(44)	CH – stretching 4
$F_{12,11}$	-0,19877	-0,2022(65)	

Продолжение таблицы 11

Параметр	Значение [3]	Решение ОЗ	
F <sub>12,12</sub>	1,37117	1,4202(32)	
F <sub>1,1,1</sub>		-15.171(14)	
F <sub>2,2,2</sub>		-15.497(72)	
F <sub>3,1,1</sub>		13.065(28)	
F <sub>3,3,3</sub>		15.0919(16)	
F <sub>6,6,1</sub>		-15.575(46)	
F <sub>11,11,1</sub>		13.769(60)	
F <sub>1,1,1,1</sub>		37.4171(01)	
F <sub>2,2,1,1</sub>		-5.0126(40)	
F <sub>2,2,2,2</sub>		51.047(03)	
F <sub>3,3,1,1</sub>		40.6485(50)	
F <sub>5,5,9,9</sub>		-40.042(73)	
F <sub>11,11,9,9</sub>		41.140(33)	
F <sub>7,7,8,8</sub>		3.118(59)	

Полученные параметры, варьировались 26 параметров, позволяют воспроизвести исходные 29 колебательных центров со среднеквадратичным отклонением  $d_{rms} = 4,3 \text{ см}^{-1}$ .

## **9. Социальная ответственность**

### **Введение**

Данная работа представляет собой исследование, модификацию и применение полуэмперического метода для расчета функции потенциальной поверхности молекулы этилена  $C_2H_4$ . Результаты работы будут использоваться, в первую очередь, для пополнения спектроскопических баз данных, например, HITRAN. Определение ФПП этилена является своевременной задачей, поскольку за последнее время было накоплено много экспериментальной информации, как об исследовании основной модификации, так и изотопологов необходимой для восстановления ФПП.

В силу теоретического характера работы для ее исполнения применялся письменный труд и так же активная работа с применением ЭВМ. Как следствие, в лаборатории, где расположены рабочие места за персональными компьютерами могут быть следующие вредные факторы: наличие - а) недопустимых микроклиматических условий; б) шума; в) недостаточной освещенности; г) электромагнитных полей. Лаборатория располагается на территории города Томска, по адресу Проспект Ленина 2, кабинет 337.

### **9.1. Правовые и организационные вопросы обеспечения безопасности**

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

Правовые нормы трудового законодательства, относительно работы в описанных выше условиях регулируются таким документом как, трудовой кодекс Российской Федерации от 30.12.2001 N 197-ФЗ (ред. от 27.12.2018) [27]. Таким образом, нормальная продолжительность рабочего времени не может превышать 40 часов в неделю, а режим работы предусматривает продолжительность рабочей недели, в данном случае шестидневная рабочая

неделя. Как следствие, применяется следующий режим работы: с понедельника по пятницу 7 часов в день, в субботу 5 часов в день. Оплата труда производится в размере не меньше МРОТ, и нормы труда установлены в соответствии с уровнем техники, технологии, организации производства и труда.

9.1.2 Организационные мероприятия при компоновке рабочей зоны исследователя.

Согласно ГОСТ 12.2.032-78 «ССБТ. Рабочее место при выполнении работ сидя. Общие эргономические требования» [28], должны быть соблюдены требования о размере зоны досягаемости моторного поля в вертикальной и горизонтальной плоскостях, высоты рабочей поверхности, пространства для ног и рабочего сиденья. Отрегулировано размещение средств отображения информации, именно мониторов ЭВМ: под углом  $\pm 15^\circ$  от нормальной линии взгляда и в горизонтальной плоскости под углом  $\pm 15^\circ$  от сагиттальной плоскости.

## **9.2. Производственная безопасность**

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

В ходе анализа рабочего места при проведении исследований было выявлено, что в лаборатории возможно наличие таких вредных и опасных факторов, как недостаточная освещенность рабочего помещения, как естественным, так и искусственным освещением. Так же возможны нарушения температуры, давления, влажности и конвекции воздуха. В дополнение потенциальное превышение уровня шума от рабочего компьютерного оборудования так же может послужить вредом. Все вышеописанные факторы объединены в таблице 12 и классифицированы в соответствии с ГОСТ 12.0.003-2015[29].

Таблица 12 - Возможные опасные и вредные факторы

Факторы (ГОСТ 12.0.003-2015)	Этапы работ		Нормативные документы
	Разра- ботка	Эксплу атация	
1. Отклонение показателей микроклимата	+	+	1. ГОСТ 12.1.003-2014 ССБТ. Шум. Общие требования безопасности. 2. СанПиН 2.2.1/2.1.1.1278–03. Гигиенические требования к естественному, искусственному и совмещённому освещению жилых и общественных зданий. 3. СанПиН 2.2.4.548–96. Гигиенические требования к микроклимату производственных помещений.
2. Превышение уровня шума	+	+	
3. Отсутствие или недостаток необходимого естественного освещения	+	+	
4. Отсутствие или недостатки необходимого искусственного освещения	+	+	

Рассмотрим факторы таблицы 12 подробнее.

1) Отклонение показателей микроклимата.

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

При высокой температуре воздуха в помещении кровеносные сосуды кожи расширяются, происходит повышенный приток крови к поверхности тела, и выделение тепла в окружающую среду значительно увеличивается. При низкой температуре окружающего воздуха реакция человеческого организма иная: кровеносные сосуды кожи сужаются, приток крови к поверхности тела замедляется, и теплоотдача конвекцией и излучением уменьшается.

В таблицах 13-14 представлены оптимальные и допустимые параметры рабочей зоны для различных категорий работ. В нашем случае, категория работ - Па, т.е. работы, связанные с постоянной ходьбой, выполняемые стоя или сидя, но не требующие перемещения тяжестей.

Таблица 13 – Оптимальные и допустимые параметры температуры для рабочей зоны

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

Таблица 14 – Оптимальные и допустимые параметры скорости движения воздуха для рабочей зоны

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

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

## 2) Превышение уровня шума

Источниками шума в лаборатории, в которой проводилось исследование, могут быть неисправные компьютера, а именно их системы охлаждения. Помимо этого, система вентиляции при ошибке в конструкции или повреждении так же может создавать шум. Лаборатория расположена среди учебных комнат, что означает, что в соседних комнатах отсутствует производственное оборудование и, как следствие, источники шума.

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

Для определения допустимого уровня шума на рабочих местах используется ГОСТ 12.1.003-2014 ССБТ. «Шум. Общие требования безопасности.» [30], СН 2.2.4/2.1.8.562–96. «Шум на рабочих местах, в помещениях жилых, общественных зданий и на территории застройки» [31]. В таблице 15 приведены допустимые уровни звукового давления на рабочем месте согласно нормам, из СН 2.2.4/2.1.8.562–96.

Таблица 15 – Допустимы уровни звукового давления на рабочем месте, согласно [5]

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

В первую очередь следует использовать средства коллективной защиты. По отношению к источнику возбуждения шума коллективные средства защиты подразделяются на средства, снижающие шум в источнике его возникновения, и

средства, снижающие шум на пути его распространения от источника до защищаемого объекта.

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

Снижение шума с помощью звукоизоляции. Звукоизоляция относится к строительно-акустическим методам борьбы с шумом и состоит в том, что звуковая волна, падающая на ограждение, приводит его в колебательное движение с частотой, равной частоте колебаний частиц воздуха. В результате ограждающая конструкция сама становится источником звука, но интенсивность этого звука в сотни раз меньше интенсивности звука, падающего на преграду. Средства индивидуальной защиты (СИЗ) применяются в том случае, если другими способами обеспечить допустимый уровень шума на рабочем месте не удается.

Принцип действия СИЗ – защитить наиболее чувствительный канал воздействия шума на организм человека – ухо. СИЗ включают в себя противозумные вкладыши (беруши), наушники, шлемы и каски, специальные костюмы. Однако для работы с ПЭВМ в СИЗ нет необходимости.

3) Отсутствие или недостаток необходимого и искусственного освещения

Источником возникновения данного фактора может служить как недостаток окон и короткий солнечный день, в случае нехватки естественного освещения, так и недостаточный световой поток системы освещения помещения.

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

в) Приведение допустимых норм с необходимой размерностью

СанПиН 2.2.1/2.1.1.1278–03. «Гигиенические требования к естественному, искусственному и совмещённому освещению жилых и общественных зданий»[32] определяет наименьшую освещенность рабочих поверхностей в производственных помещениях в зависимости от вида

производимой деятельности. В соответствии с СП 52.13330.2016 «Естественное и искусственное освещение. Актуализированная редакция СНиП 23-05-95\*»[33] все зрительные работы делятся на 8 разрядов и зависимости от размера объекта различия и условий зрительной работы. Принимаем четвертый разряд зрительной работы (средней точности). Допустимые значения наименьшей освещенности рабочих поверхностей в производственных помещениях в соответствии с выше обозначенным документом, для четвертого разряда зрительной работы приведены в таблице 16. На рабочей поверхности должны отсутствовать резкие тени, которые создают неравномерное распределение поверхностей с различной яркостью в поле зрения, искажает размеры и формы объектов различия, в результате повышается утомляемость и снижается производительность труда.

Таблица 16 – 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
				Средний	Светлый	400
в	Малый	Светлый	400	200		
	Средний	Светлый	400	200		

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

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 СП

52.13330.2016[34]. Согласно СП 52.13330.2016 газоразрядные лампы приняты в качестве основного источника света. Основными преимуществами таких ламп перед лампами накаливания являются высокая световая отдача - 40-110 лм/Вт, большой срок службы (до 8000-12000 ч), возможность получения светового потока практически с любым спектром. В частности, люминесцентные лампы, рекомендуемые для использования в производственных помещениях, обеспечивают достаточный уровень освещения, сохраняют зрение, снижают утомляемость, повышают работоспособность. Необходимо учитывать, пульсацию светового потока, слепящее действие, а также возникновение стробоскопического эффекта. Для уменьшения коэффициента пульсации люминесцентные лампы включают в разные фазы трехфазной электрической сети.

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

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

Преднамеренное соединение с землей металлических нетоковедущих частей, которые могут оказываться под напряжением, называют защитным заземлением (ГОСТ 12.1.019 – 2017[35]). Чтобы защитить человека от поражения электрическим током, защитное заземление должно удовлетворять ряду требований, изложенных в ПУЭ и ГОСТ 12.1.030 – 81 “ССВТ. Электробезопасность. Защитное заземление. Зануление” [36]. Эти требования зависят от напряжения электроустановок и мощности источника питания. К средствам защиты относятся: электрическая изоляция токоведущих частей, защитное заземление и отключение, электрическое разделение сети.

К электрозащитным средствам относятся:

СКЗ от поражения электротоком:

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

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

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

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

Факторы пожарной и взрывной природы

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

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

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

Для устранения причин возникновения и локализации пожаров в помещении лаборатории должны проводиться следующие мероприятия: использование только исправного оборудования; проведение периодических инструктажей по пожарной безопасности; отключение электрооборудования, освещения и электропитания при предполагаемом отсутствии обслуживающего персонала или по окончании работ; курение в строго отведенном месте; содержание путей и проходов для эвакуации людей в свободном состоянии.

Пожарная безопасность обеспечивается наличием огнетушителей:

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

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

### **9.3. Экологическая безопасность**

#### **9.3.1. Анализ влияния процесса исследования на окружающую среду.**

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

#### **9.3.2. Обоснование мероприятий по защите окружающей среды.**

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

Макулатура (черновики, отработанная бумага и т.п.) будет собираться в размерах более одного килограмма и утилизироваться по адресу 634009, г. Томск, ул. Войкова, 70 компанией ООО «Пирс». Предварительно макулатура должна быть отчищена от посторонних предметов, таких как, например, скрепки.

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

### **9.4. Безопасность в чрезвычайных ситуациях**

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

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

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

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

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

В случае переморозки труб должны быть предусмотрены запасные газовые обогреватели с катализатором. Их количества и мощности должно хватать для того, чтобы работа на производстве не прекратилась. Необходимо иметь суточный запас воды на складе, чтобы избежать обезвоживания персонала. В случае перебоев в расписании движения общественного транспорта должен быть предоставлен транспорт служебный.

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

## **Выводы по разделу социальная ответственность**

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

## **10. Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение**

Цель дипломной работы: уточнение квадратичных и определение кубичных и квартичных параметров потенциальной функции молекулы этилена.

Цель раздела «Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение»: установить коммерческий и инновационный потенциал новой информации о параметрах потенциальной функции молекулы этилен, полученной в результате научно-исследовательской работы; определить ресурсную, финансовую и экономическую эффективности работы по уточнению известных и определению новых параметров.

Для достижения поставленной цели необходимо решить следующие задачи:

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

### **10.1. Потенциальные потребители результатов исследования**

Результатом исследования является метод, программное обеспечение для расчета параметров потенциальной функции 6-и атомной молекулы и сами параметры потенциальной функции молекулы  $C_2H_4$ . 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, и т.д.

Сегментировать рынок услуг по анализу молекулярных спектров поглощения можно согласно таблице 17.

Таблица 17 – Карта сегментирования рынка услуг по анализу молекулярных спектров.

	Параметры потенциальной функции	Программное обеспечение
Исследовательские центры университетов		
Научные центры		
Базы спектроскопических данных		

## 10.2. Анализ конкурентных технических решений

С помощью теоретических расчетов (например, используя *ab initio* методы) можно определить параметры потенциальной функции, однако для молекул с тремя и более атомами точность таких расчетов уступает экспериментальным на 4-5 порядков. В дополнение, подобные расчеты требуют больших объемов вычислительной мощности, для проведения расчетов параметров высших порядков. На данный момент необходимые мощности труднодостижимы. Для более наглядного сравнения полуэмпирических методов и методов *ab initio* составим оценочную карту преимуществ.

Таблица 18 – Оценочная карта преимуществ работы

Критерии оценки	Вес критерия	Баллы		Конкурентоспособность	
		Бф	Бк1	Ккф	Кк1
1	2	3	4	6	7
<b>Технические критерии оценки ресурсоэффективности</b>					
1) Удобство в эксплуатации (соответствует требованиям потребителей)	0,2	4	4	0,8	0,8
2) Точность получаемых результатов	0,3	5	2	1,5	0,6
3) Энергоэкономичность	0,05	4	3	0,2	0,15
4) Надежность	0,1	4	3	0,4	0,2
5) Простота получения информации	0,05	3	4	0,15	0,2
6) Безопасность	0,05	5	5	0,25	0,25
<b>Экономические критерии оценки эффективности</b>					
1) Конкурентоспособность продукта	0,05	5	3	0,25	0,15
2) Уровень проникновения на рынок	0,02	5	5	0,1	0,1
3) Цена	0,03	4	4	0,12	0,12

Продолжение таблицы 18

Критерии оценки	Вес критерия	Баллы		Конкурентоспособность	
		Бф		Ккф	Кк1
1	2	3	4	6	7
Экономические критерии оценки эффективности					
4) Предполагаемый срок эксплуатации	0,02	4	4	0,08	0,08
5) Финансирование научной разработки	0,08	4	3	0,32	0,24
6) Срок выхода на рынок	0,05	5	2	0,25	0,1
Итого	1	52	38	4,42	2,99

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

### 10.3.SWOT-анализ

Анализ проводится в несколько этапов.

Первый этап заключается в описании сильных и слабых сторон проекта, в выявлении возможностей и угроз для реализации проекта, которые проявились или могут появиться в его внешней среде. Результаты первого этапа SWOT-анализа представлены в таблице 19.

После того как сформулированы четыре области SWOT переходят к реализации второго этапа.

Второй этап заключается в выявлении соответствия сильных и слабых сторон научно-исследовательского проекта внешним условиям окружающей среды. Это соответствие или несоответствие должны помочь выявить степень необходимости проведения стратегических изменений.

Использование интерактивной матрицы (таблица 20) помогает разобраться с различными комбинациями взаимосвязей областей SWOT. Возможно использование этой матрицы в качестве одной из основ для оценки вариантов стратегического выбора. Анализ интерактивных таблиц представляется в форме записи сильно коррелирующих сильных сторон и возможностей, или слабых сторон и возможностей и т.д. следующего вида: B1C1C2C3; B2C1C2C3. Каждая из записей представляет собой направление реализации проекта. В таблице факторы помечаются: соответствие сильных сторон возможностям знаком плюс «+»; слабое соответствие знаком минус «-»; если есть сомнения в том, что поставить «+» или «-» - знак «0».

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

- Моделирование с помощью метода наименьших квадратов.
- Использование программного обеспечения, созданного командой лаборатории.
- Точность полученных результатов совпадает с точностью экспериментальных данных
- Большое удобство в применении результатов исследования в областях астрофизики и оптики атмосферы.

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

- Необходимость в высокой квалификации кадров.
- Долгое время ожидания поставки и обработки экспериментальных данных.

К возможностям данной работы можно отнести:

- Потенциал в улучшении эффективности и удобства ПО.
- Использование научно-исследовательских достижений.

К угрозам данной работы можно отнести:

- Отсутствие спроса на новые технологии производства
- Ограничения на экспорт технологии.

- Задержки финансирования.
- Ограничение точности.
- Повышение издержек.

Более наглядно данные по сильным, слабым сторонам исследования и его угрозам, и возможностям представлены в таблице 6.3.

Таблица 19 – SWOT-анализ

	Сильные стороны научно-исследовательского проекта:	Слабые стороны научно-исследовательского проекта:
	<p>С1. Моделирование с помощью МНК.</p> <p>С2. Экологичность технологии.</p> <p>С3. Уникальная, но широко распространенная модель.</p> <p>С4. Наличие бюджетного финансирования.</p>	<p>Сл1. Длительный период при некоторых видах исследований.</p> <p>Сл2 Длительный период обучения персонала.</p> <p>Сл3. Отсутствие доступа к коллективным исследованиям</p> <p>Сл4. Большой срок поставки эксперим. данных</p>
Возможности:		
<p>В1. Интерес к подобным исследованиям со стороны иностранных партнеров</p> <p>В2. Использование научно-исследовательские достижений ТПУ</p> <p>В3. Ценовая стабильность на рынке товаров-конкурентов</p>		
Угрозы:		
<p>У1. Отсутствие спроса на новые технологии</p> <p>У2. Ограничения на экспорт технологии</p> <p>У3. Несвоевременное финансовое обеспечение научного исследования со стороны государства</p>		

Таблица 20 – Интерактивная матрица работы

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

Третий этап включает в себя итоговую матрицу SWOT-анализа (таблица 21). Результаты SWOT- анализа учитываются при разработке структуры работ, выполняемых в рамках научно-исследовательского проекта.

Приведённый анализ показал, что технология, находясь на этапе разработки, имеет хорошие шансы на коммерциализацию, с учетом проявляемого интереса партнеров и удачных исследований. При этом, если переход разработки в стадию коммерциализации затянется, то возможна потеря спроса на готовую технологию.

Таблица 21 – Проведенный SWOT-анализ

	<p>Сильные стороны научно-исследовательского проекта:</p> <p>C1. Моделирование с помощью МНК.</p> <p>C2. Экологичность технологии.</p> <p>C3. Уникальная, но широко распространенная модель.</p> <p>C4. Наличие бюджетного финансирования.</p>	<p>Слабые стороны научно-исследовательского проекта:</p> <p>Сл1. Длительный период при некоторых видах исследований.</p> <p>Сл2. Длительный период обучения персонала.</p> <p>Сл3. Отсутствие доступа к коллективным исследованиям</p> <p>Сл4. Большой срок поставки</p>
--	--	--

Продолжение таблицы 21

<p>Возможности:                  В1. Интерес к подобным исследованиям со стороны иностранных партнеров В2. Использование научно-исследовательские достижений ТПУ                  В3. Ценовая стабильность на рынке товаров- конкурентов</p>	<p>Интерес к подобным исследованиям со стороны иностранных партнеров можно поддержать проводя моделирование с помощью широко известных методов и моделей а ценовая стабильность на рынке товаров- конкурентов обуславливается уникальностью модели .</p>	<p>Научно-исследовательские достижения ТПУ могут быть использованы при отсутствии необходимых экспериментальных данных и недостатке финансирования. Интерес зарубежных партнеров предоставляет доступ к коллективным исследования и доп. финансированию</p>
<p>Угрозы:                  У1. Отсутствие спроса на новые технологии производства                  У2. Ограничения на экспорт технологии                  У3. Несвоевременное финансовое обеспечение научного исследования со стороны государства</p>	<p>Бюджетное финансирование может быть прервано отсутствием спроса на новые технологии, ограничениями на экспорт и несвоевременным финансированием научного исследования.</p>	<p>Отсутствие необходимых экспериментальных данных и длительность периода исследований может привести к отсутствию спроса на новые технологии.</p>

### 10.4. Планирование научно-исследовательских работ

Структура работ в рамках научного исследования

Для выполнения научных исследований сформирована рабочая группа, для определения общего содержания работ, уточнения целей и разработки последовательных действий составлен перечень работ (таблица 22).

Таблица 22 – Перечень этапов, работ и распределение исполнителей

Основные этапы	№ раб	Содержание работ	Должность исполнителя
Разработка технического задания	1	Составление и утверждение технического задания	Руководитель

Продолжение таблицы 22

Основные этапы	№ раб	Содержание работ	Должность исполнителя
Выбор направления исследований	2	Подбор и изучение материалов по теме	Инженер
	3	Выбор направления исследований	Руководитель, Инженер
	4	Календарное планирование работ по теме	Руководитель, Инженер
Теоретические и экспериментальные исследования	5	Проведение теоретических расчетов и обоснований	Инженер
	6	Построение моделей и проведение тестовых расчетов	Инженер
	7	Проверка результатов расчетов	Руководитель, Инженер
Обобщение и оценка результатов	8	Оценка эффективности полученных результатов	Руководитель, Инженер
	9	Определение целесообразности проведения ВКР	Руководитель, Инженер
Оформление отчета	10	Составление ВКР	Инженер

### Определение трудоемкости выполнения работ

Трудоемкость выполнения научного исследования оценивается как:

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

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

$t_{\text{min}}$  – минимально возможная трудоемкость выполнения заданной работы (оптимистическая оценка: в предположении наиболее благоприятного стечения обстоятельств), чел.-дн.;

$t_{\max}$  – максимально возможная трудоемкость выполнения заданной работы (пессимистическая оценка: в предположении наиболее неблагоприятного стечения обстоятельств), чел.-дн.

Проведем расчет ожидаемой трудоемкости для научного руководителя:

$$t_{\text{ож}} = \frac{3 \cdot 20 + 2 \cdot 30}{5} = 24 \text{ чел.-дн.}$$

и для инженера:

$$t_{\text{ож}} = \frac{3 \cdot 70 + 2 \cdot 115}{5} = 88 \text{ чел.-дн.}$$

Из этих расчетов видно, что предполагаемые трудозатраты инженера превышают предполагаемые трудозатраты научного руководителя больше, чем в 3,5 раза.

После проведения расчётов ожидаемой трудоёмкости работ, имеет смысл определить продолжительность каждой работы в рабочих днях  $T_{\text{pi}}$ , учитывая параллельность выполнения работ несколькими исполнителями, по следующей формуле:

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

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

$K_{\text{вн}}$  – коэффициент выполнения работ, учитывающий влияние внешних факторов на соблюдение определённых длительностей, для данного случая, можно принять его равным  $K_{\text{вн}} = 1$ ;

$K_{\text{д}}$  – коэффициент, учитывающий дополнительное время на компенсацию непредвиденных задержек и согласование работ, так же в данном случае имеет смысл принять его  $K_{\text{д}} = 1$ .

Произведём расчёт продолжительности работы выполнения научного исследования для научного руководителя:

$$T_{\text{pi}} = \frac{24}{1} \cdot 1 = 24 \text{ раб.дн.}$$

Произведём расчёт продолжительности работы выполнения научного исследования для инженера:

$$T_{pi} = \frac{88}{1} \cdot 1 = 88 \text{ раб.дн.}$$

Показатели трудоемкости можно найти в таблице 23.

Таблица 23 – Временные показатели проведения научного исследования

Название работы	Трудоемкость работ			Исполнители	Длительность работ в рабочих днях $T_{pi}$
	$t_{min}$ , чел-дни	$t_{max}$ , чел-дни	$t_{ож}$ , чел-дни		
Составление и утверждение технического задания	1	11	5	Р, И	3
Подбор и изучение материалов по теме	12	39	23	И	23
Выбор направления исследований	3	16	8	Р, И	5
Календарное планирование работ по теме	3	12	7	Р, И	4
Проведение теоретических расчетов и обоснований	2	11	6	И	6
Построение моделей и проведение тестовых расчетов	15	47	28	И	29
Проверка результатов расчетов	3	12	7	Р, И	4
Оценка эффективности полученных результатов	3	16	8	Р, И	5
Определение целесообразности проведения ВКР	3	12	7	Р, И	3
Составление ВКР	2	11	6	И	6

## Разработка графика проведения научного исследования

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

$$T_{ki} = T_{pi} \cdot k_{кал},$$

где  $k_{кал}$  – коэффициент календарности:

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

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

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

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

Рассчитаем коэффициент календарности:

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

По результатам расчета, будет целесообразно построить таблицу, с указанием трудоемкостей и длительности работ (таблица 24)

Таблица 24 – Перечень этапов, работ и распределение исполнителей

№ раб	Вид работ	Исполнители	$T_{ki}$ , кал. дн.	Продолжительность выполнения работ											
				февр			март			апр			май		
				1	2	3	1	2	3	1	2	3	1	2	3
1	Составление и утверждение технического задания	Р, И	3	■											
2	Подбор и изучение материалов по теме	И	23	■	■	■									
3	Выбор направления исследований	Р, И	5				■								
4	Календарное планирование работ по теме	Р, И	4				■								
5	Проведение теоретических расчетов и обоснований	И	6					■							

Продолжение таблицы 24

№ раб	Вид работ	Исполнители	$T_{ki}$ , кал. дн.	Продолжительность выполнения работ											
				февр			март			апр			май		
				1	2	3	1	2	3	1	2	3	1	2	3
6	Построение моделей и проведение тестовых расчетов	И	29							■	■	■			
7	Проверка результатов расчетов	Р, И	4										■		
8	Оценка эффективности полученных результатов	Р, И	5											■	
9	Определение целесообразности проведения ВКР	Р, И	3												■
10	Составление ВКР	И	6												■
Р,И	И			Р – руководитель, И – Инженер											

Исходя из представленных данных, можно утверждать, что в календарных днях длительность работ для руководителя составляет 25 дней, а для инженера – 88 дней. Самая продолжительная по времени работа – это «Построение моделей и проведение тестовых расчетов».

### 10.5. Бюджет научно-технического исследования (НТИ)

#### Расчет материальных затрат НТИ

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

Таблица 25 – Материальные затраты

Материал	Единица измерения	Количество	Цена за ед., руб.	Затраты на материалы, ( $Z_M$ ), руб.
Бумага	Упаковка	0,5	200	100

Продолжение таблицы 25

Материал	Единица измерения	Количество	Цена за ед., руб.	Затраты на материалы, ( $Z_M$ ), руб.
Шариковые ручки	Шт.	5	40	200
Итого				300

**Расчет затрат на специальное оборудование для научных (экспериментальных) работ**

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

Таблица 26 – Расчет бюджета затрат на приобретение спецоборудования для научных работ

Наименование оборудования	Кол-во единиц оборудования	Цена единицы оборудования, тыс. руб.	Общая стоимость оборудования, тыс. руб.
Персональный компьютер (ноутбук)	1	25	25
Итого:			25

**Основная заработная плата исполнителей темы**

Статья включает основную заработную плату работников, непосредственно занятых выполнением проекта, включая премии, доплаты:

$$Z_{zn} = Z_{осн} + Z_{доп}$$

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

$Z_{доп}$  - дополнительная заработная плата.

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

$$Z_{осн} = Z_{дн} \cdot T_p,$$

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

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

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

Среднедневная заработная плата рассчитывается по формуле:

$$Z_{он} = \frac{Z_M \cdot M}{F_D},$$

где  $Z_M$  - месячный должностной оклад работника, руб. (окладом инженера выступает стипендия, 1750 руб.);

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

$F_D$  - действительный годовой фонд рабочего времени научно-технического персонала, раб.дн.

Месячный должностной оклад:

$$Z_M = Z_б \cdot (1 + k_{np} + k_D) \cdot k_p,$$

где  $Z_б$  - базовый оклад, руб.;

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

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

$k_D$  - коэффициент доплат и надбавок составляет примерно 0,2.

Таблица 27 – Баланс рабочего времени

Показатели рабочего времени	Руководитель	Инженер
Календарное число дней	365	365
Количество нерабочих дней		
- выходные дни	52	52
- праздничные дни	14	14
Потери рабочего времени		
- отпуск	48	48
- невыходы по болезни	-	-
Действительный годовой фонд рабочего времени	251	251

Таблица 28 – Расчёт основной заработной платы

Исполнители	$Z_{\sigma}$ , руб.	$k_{np}$	$k_{д}$	$k_{p}$	$Z_{M}$ , руб	$Z_{он}$ , руб.	$T_p$ , раб.дн.	$Z_{осн}$ , руб.
Руководитель	39 000	0,3	0,2	1,3	76050	3151	24	59 869
Инженер	1750	-	-	1,3	2275	111	88	9102
Итого $Z_{осн}$								68 971

### Отчисления во внебюджетные фонды (страховые отчисления)

Статья включает в себя отчисления во внебюджетные фонды:

$$Z_{внеб} = k_{внеб} \cdot (Z_{осн} + Z_{дон}) = 0,302 \cdot 68971 = 20829,24 \text{ руб.}$$

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

### Накладные расходы

В силу теоретического характера исследований, в качестве накладных расходов выступают расходы на электроэнергию. Учитывая, что тариф составляет 5,8 руб./(кВт·ч), мощность оборудования (персональный компьютер) равна 0,9 кВт, а трудозатраты – 606 ч, можем посчитать накладные расходы:

$$Q_s = W \cdot P \cdot t = 5,8 \cdot 606 \cdot 0,9 = 3163 \text{ руб.},$$

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

$P$  – энергоэнергетические затраты компьютера за весь период работы (компьютер – 0,22 кВт);

$t$  – время работы над проектом в часах.

### Формирование бюджета затрат научно-исследовательского проекта

Определение бюджета затрат на научно-исследовательский проект по каждому варианту исполнения приведен в табл. 6.13.

Таблица 29 – Расчет бюджета затрат НТИ

Наименование статьи	Сумма, руб.
1. Материальные затраты НТИ	300
2. Затраты на специальное оборудование для научных (экспериментальных) работ	25000
3. Затраты по основной заработной плате исполнителей темы	68971
4. Затраты по дополнительной заработной плате исполнителей темы	0
5. Отчисления во внебюджетные фонды	20829,24
6. Накладные расходы	3163
7. Бюджет затрат НТИ	118263,24

По данным таблицы 29 видно, что большую часть бюджета потребляет основная заработная плата исполнителей. Это характерно для теоретического исследования, в которое не вовлечены дорогостоящие установки и образцы. На втором месте по потреблению бюджета находится позиция 2: «Затраты на специальное оборудование для научных (экспериментальных) работ». Однако, в ней заключены затраты на приобретение персонального компьютера. Таковую закупку производит университет при комплектации помещения оборудованием и этот компьютер используется на протяжении всего срока эксплуатации при проведении большого числа исследований.

#### **10.6.Определение ресурсной (ресурсосберегающей), финансовой, бюджетной, социальной и экономической эффективности исследования**

Определение эффективности происходит путем сравнения значений интегральных показателей эффективности по всем вариантам исполнения. Поскольку существует единственный вариант исполнения, считаем его наиболее эффективным вариантом решения технической задачи.

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

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

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

3. Помимо прочего, продемонстрировано, что в календарных днях длительность работ для руководителя составляет 24 дней, а для инженера – 88 день. Временные показатели в календарном плане-графике показывают, что наиболее продолжительной работой является «Построение моделей и проведение тестовых расчетов»

После формирования бюджета затрат на проектирование суммарные капиталовложения составили 118263,24 рублей.

4. Таким образом, капиталовложения в размере 118263,24 рублей дают возможность провести исследование параметров потенциальной функции молекулы этилен и провести их расчет. В последствии результаты данной научно-исследовательской работы дают возможность для проведения более глубоких исследований молекулы.

## 11. Заключение

В работе основные поставленные задачи выполнены, а именно

1. Разработана аналитическая модель для определения координатного представления потенциальной функции этилена.
2. Разработан алгоритм симметризации базисных состояний.
3. Создана программа численного расчета энергетических состояний этилена.
4. Определены, обусловленные экспериментальными данными, параметры, а именно, 18 квадратичных, 6 кубических и 7 квартичных параметров ФПП.

Вывод по работе:

Проведенную работу можно рассматривать как часть большой задачи, позволяющую провести анализ проблемы и получить предварительные оценки. О нехватке данных для более точного определения параметров ФПП говорит среднеквадратичное отклонение  $d_{rms}=4,3 \text{ см}^{-1}$ . Так, например, в работе [22] среднеквадратичное отклонение при восстановлении колебательных центров из полученных параметров потенциальной функции молекулы  $\text{SO}_2$  составило  $0,152 \text{ см}^{-1}$ . Для, как можно более полного, решения поставленной задачи необходимо привлечение дополнительной экспериментальной информации об изотопологах этилена, а также включение в алгоритмическую схему метода колебательно-вращательной части проблемы. В дальнейшем планируется привлечь информацию о таких изотопологах, как  $\text{C}_2\text{D}_4$ ,  $^{12}\text{C}^{13}\text{CH}_4$ ,  $\text{CH}_2\text{D}_2$ , данные о которых представлены, например, в работах [23], [24], [25], и других.

## Список литературы

1. The abundance of C<sub>2</sub>H<sub>4</sub> in the circumstellar envelope of IRC+10216 / J.P. Fonfría et al. // The Astrophysical Journal – 2017 – Vol. 835, №2. – P. 196-206.
2. Соколов, Арсений Александрович. Квантовая механика / А. А. Соколов, Ю. М. Лоскутов, И. М. Тернов. — 2-е изд., испр. и доп.. — Москва: Просвещение, 1965. — 638 с.: ил.. — Предм. указ. с. 622-632.
3. The anharmonic force field of ethylene, C<sub>2</sub>H<sub>4</sub>, by means of accurate ab initio calculations / Martin, J.M.L., Lee, T.J., Taylor, P.R., François, J.-P. // The Journal of Chemical Physics – 1995 – Vol. 103, №7. – P. 2589-2602.
4. Pulay P. Ab initio calculation of the force field of ethylene / P. Pulay, W. Meyer; Journal of Molecular Spectroscopy – 1971 – Vol. 40, №1 – P. 59-70.
5. Extended analysis of the  $\nu_{12}$  band of <sup>12</sup>C<sub>2</sub>H<sub>4</sub> for astrophysical applications: Line strengths, widths, and shifts / O.N. Ulenikov, E.S. Bekhtereva, O.V. Gromova, A.N. Kakaulin, C. Sydow, S. Bauerecker // Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer – 2019 – Vol. 233 – P. 57-66.
6. Extended analysis of the lowest bands of <sup>12</sup>C<sub>2</sub>H<sub>4</sub>: Line strengths, widths, and shifts in the  $\nu_7$ ,  $\nu_{10}$ , and  $\nu_4$  bands / Ulenikov, O.N., Bekhtereva, E.S., Gromova, O.V., Raspopova, N.I., Sydow, C., Bauerecker, S. // Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer – 2019 – Vol. 239.
7. Study of resonance interactions in polyatomic molecules on the basis of highly accurate experimental data: Set of strongly interacting Bands  $\nu_{10}/\nu_7/\nu_4/\nu_8/\nu_3/\nu_6$  of CH<sub>2</sub>=CD<sub>2</sub> / O. N. Ulenikov, O. V. Gromova, E. S. Bekhtereva, K. B. Berezkin, N. V. Kashirina, T. L. Tan, C. Sydow, C. Maul, S. Bauerecker. // Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer – 2016 – Vol. 180 –P. 14-28
8. First high-resolution analysis of the  $\nu_2+\nu_6$  band of the C<sub>2</sub>H<sub>2</sub>D<sub>2</sub>-cis isotopologue of ethylene / O.N. Ulenikov, O.V. Gromova, E.S. Bekhtereva, Y.V. Konova, C. Sydow, S. Bauerecker // Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer – 2019 – Vol. 233 – P. 99-109.

9. Duncan J.L. An Improved general harmonic force field for ethylene / J.L. Duncan, E. Hamilton // *Journal of Molecular Structure* – 1981 – Vol. 76 – P. 65-80.
10. Duncan J.L. Infrared crystal spectra of  $C_2H_4$ ,  $C_2D_4$ , and *as*- $C_2H_2D_2$  and the general harmonic force field of ethylene / J.L. Duncan, D.C. McKean, P.D. Mallinson, *Journal of Molecular Spectroscopy* – 1973 – Vol. 45, №2 – P. 221-246.
11. Timothy Lee J. The analytic evaluation of energy first derivatives for two-configuration self-consistent-field configuration interaction (TCSCF-CI) wave functions. Application to ozone and ethylene. / Timothy J. Lee, Wesley D. Allen, Henry F. Schaefer III. // *The Journal of Chemical Physics* – 1987 – Vol. 87 – P. 7062-7075.
12. Ю.С. Макушкин, Симметрия и ее применение к задачам колебательно-вращательной спектроскопии молекул / Ю.С. Макушкин, О.Н. Улеников, А.Е. Чеглоков, части 1 и 2 – Томск, Изд-во ТГУ, 1990.
13. Ulenikov O.N. “Expanded” local mode approach for  $XY_2(C_{2v})$  molecules / O.N. Ulenikov, R.N. Tolchenov, Zhu Quig-Shi // *Spectrochimica Acta Part A* – 1996 – Vol. 52 – P. 1829-1842.
14. Slit-jet Fourier transform infrared spectroscopy in  $^{12}C_2H_4$ : cold and hot bands near  $3000\text{ cm}^{-1}$  / M. Bach, R. Georges, M. Hepp, M. Herman. // *Chemical Physics Letters* – 1998 – Vol. 294, №6 – P. 533-537.
15. High-resolution spectroscopy and preliminary global analysis of C–H stretching vibrations of  $C_2H_4$  in the  $3000$  and  $6000\text{ cm}^{-1}$  regions / M.A. Loroño Gonzalez, V. Boudon, M. Loëte, M. Rotger, M.-T. Bourgeois, K. Didriche, M. Herman, V.A. Kapitanov, Yu.N. Ponomarev, A.A. Solodov, A.M. Solodov, T.M. Petrova // *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer* – 2010 – Vol. 111, №15 – P. 2265-2278.
16. Global frequency and intensity analysis of the  $\nu_{10}/\nu_7/\nu_4/\nu_{12}$  band system of  $^{12}C_2H_4$  at  $10\mu\text{m}$  using the  $D_{2h}$  Top Data System / A. Alkadrou, M.-T. Bourgeois, M. Rotger, V. Boudon, J. Vander Auwera // *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer* – 2016 – Vol. 182 – P. 158-171.

17. Lafferty W.J. (2011) The high-resolution infrared spectrum of ethylene in the 1800–2350  $\text{cm}^{-1}$  spectral region, *Molecular Physics* / W.J. Lafferty, J.-M. Flaud, F. Kwabia Tchana // *Molecular Physics* – 2011 – Vol. 109, №21 – P. 2501-2510.
18. Georges R. High resolution FTIR spectroscopy using a slit jet: sampling the overtone spectrum of  $^{12}\text{C}_2\text{H}_4$  / Georges R., Bach M., Herman M. // *Molecular Physics* – 1997 – Vol. 90, №3 – P. 381 — 387
19. High resolution study of the  $\nu_5 + \nu_{12}$  band of  $\text{C}_2\text{H}_4$  / O.N. Ulenikov, G.A. Onopenko, E.S. Bekhtereva, T.M. Petrova, A.M. Solodov, A.A. Solodov // *Molecular Physics* – 2010 – Vol. 108, №5 – P. 637-647
20. High resolution FTIR study of the  $\nu_7 + \nu_{10} - \nu_{10}$  and  $\nu_{10} + \nu_{12} - \nu_{10}$  “hot” bands of  $\text{C}_2\text{H}_4$  / O.N. Ulenikov, O.V. Gromova, E.S. Bekhtereva, G.A. Onopenko, Yu.S. Aslapovskaya, K.-H. Gericke, S. Bauerecker, V.-M. Horneman // *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer* – 2014 – Vol. 149 – P. 318-333.
21. Precise ro-vibrational analysis of molecular bands forbidden in absorption: The  $\nu_8 + \nu_{10}$  band of the  $^{12}\text{C}_2\text{H}_4$  molecule / O.N. Ulenikov, O.V. Gromova, E.S. Bekhtereva, N.V. Kashirina, S. Bauerecker, V.-M. Horneman // *Journal of Molecular Spectroscopy* – 2015 – Vol. 313 – P. 4-13
22. On the high resolution spectroscopy and intramolecular potential function of  $\text{SO}_2$  / O.N. Ulenikov, E.S. Bekhtereva, S. Alanko, V.-M. Horneman, O.V. Gromova, C. Leroy // *Journal of Molecular Spectroscopy* – 2009 – Vol. 257, №2 – P. 137-156
23. Extended high-resolution analysis of the  $\nu_{10}$  band of  $\text{C}_2\text{D}_4$  / O.N. Ulenikov, E.S. Bekhtereva, O.V. Gromova, A.L. Fomchenko, M.A. Merkulova, G.Ch. Mellau, C. Sydow, S. Bauerecker // *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer* – 2018 – Vol. 219 – P. 262-273
24. Ethylene-1- $^{13}\text{C}$  ( $^{13}\text{C}^{12}\text{CH}_4$ ): First analysis of the  $\nu_2$ ,  $\nu_3$  and  $2\nu_{10}$  bands and re-analysis of the  $\nu_{12}$  band and of the ground vibrational state / O.N. Ulenikov, O.V. Gromova, E.S. Bekhtereva, Yu.S. Aslapovskaya, T.L. Tan, C. Sydow, C. Maul, S. Bauerecker // *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer* – 2017 – Vol. 187 – P. 403-413

25. High-resolution Fourier transform spectra of CH<sub>2</sub>D<sub>2</sub>: The 2ν<sub>5</sub>(A<sub>1</sub>), ν<sub>3</sub> + ν<sub>9</sub>(B<sub>2</sub>), ν<sub>5</sub> + ν<sub>9</sub>(B<sub>1</sub>), and ν<sub>3</sub> + ν<sub>7</sub>(B<sub>1</sub>) vibrational bands / O.N. Ulenikov, A.B. Malikova, G.A. Shevchenko, G. Guelachvili, M. Morillon-Chapey // Journal of Molecular Spectroscopy – 1992 – Vol. 154, №1 – P. 22-29
26. Трудовой кодекс Российской Федерации от 30.12.2001 N 197-ФЗ (ред. от 27.12.2018)
27. ГОСТ 12.2.032-78 «ССБТ. Рабочее место при выполнении работ сидя. Общие эргономические требования.»
28. ГОСТ 12.0.003-2015 Система стандартов безопасности труда (ССБТ). Опасные и вредные производственные факторы. Классификация
29. ГОСТ 12.1.003-2014 ССБТ. «Шум. Общие требования безопасности.».
30. СН 2.2.4/2.1.8.562–96. «Шум на рабочих местах, в помещениях жилых, общественных зданий и на территории застройки»
31. СанПиН 2.2.1/2.1.1.1278–03. «Гигиенические требования к естественному, искусственному и совмещённому освещению жилых и общественных зданий»
32. СП 52.13330.2016 «Естественное и искусственное освещение. Актуализированная редакция СНиП 23-05-95\*»
33. ГОСТ 12.1.019-2017 Система стандартов безопасности труда (ССБТ). Электробезопасность. Общие требования и номенклатура видов защиты.
34. ГОСТ 12.1.030 – 81 “ССБТ. Электробезопасность. Защитное заземление. Зануление”
35. СНиП 21-01-97. Пожарная безопасность зданий и сооружений.