

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 (ИЯТШ)

Направление подготовки 03.04.02 Физика

Отделение школы (НОЦ) Отделение Экспериментальной Физики (ОЭФ)

МАГИСТЕРСКАЯ ДИССЕРТАЦИЯ

| Тема работы |
|---|
| Анализ колебательно-вращательного спектра высокого разрешения полос $\nu_4, \nu_6, \nu_7, \nu_8, \nu_{10}$ молекулы C_2H_3D |

УДК 539.194

Студент

| Группа | ФИО | Подпись | Дата |
|--------|------------------------------|---------|------|
| ОБМ71 | Жданович Станислав Андреевич | | |

Руководитель ВКР

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

КОНСУЛЬТАНТЫ ПО РАЗДЕЛАМ:

По разделу «Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение»

| Должность | ФИО | Ученая степень, звание | Подпись | Дата |
|--|-----------------------------------|---------------------------|---------|------|
| Отделение социально-гуманитарных наук, Доцент | Меньшикова Екатерина Валентиновна | к.ф.н. | | |

По разделу «Социальная ответственность»

| Должность | ФИО | Ученая степень, звание | Подпись | Дата |
|--|----------------------------|---------------------------|---------|------|
| Отделение общетехнических дисциплин, Старший преподаватель | Исаева Елизавета Сергеевна | | | |

ДОПУСТИТЬ К ЗАЩИТЕ:

| Руководитель ООП | ФИО | Ученая степень, звание | Подпись | Дата |
|------------------|-----------------------|---------------------------|---------|------|
| Физика | Лидер Андрей Маркович | д.т.н., доцент | | |

1. РЕЗУЛЬТАТЫ ОБУЧЕНИЯ

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

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

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 (ИЯТШ)
 Направление подготовки (специальность) 03.04.02 Физика
 Отделение школы (НОЦ) Отделение Экспериментальной Физики (ОЭФ)

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

ЗАДАНИЕ
на выполнение выпускной квалификационной работы

В форме:

| |
|--------------------------|
| Магистерской диссертации |
|--------------------------|

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

Студенту:

| Группа | ФИО |
|--------|------------------------------|
| ОБМ71 | Жданович Станислав Андреевич |

Тема работы:

| | |
|---|--|
| Анализ колебательно-вращательного спектра высокого разрешения полос ν_4 , ν_6 , ν_7 , ν_8 , ν_{10} молекулы C_2H_3D | |
| Утверждена приказом директора (дата, номер) | |

| | |
|--|--|
| Срок сдачи студентом выполненной работы: | |
|--|--|

ТЕХНИЧЕСКОЕ ЗАДАНИЕ:

| | |
|---|---|
| <p>Исходные данные к работе</p> <p><i>(наименование объекта исследования или проектирования; производительность или нагрузка; режим работы (непрерывный, периодический, циклический и т. д.); вид сырья или материал изделия; требования к продукту, изделию или процессу; особые требования к особенностям функционирования (эксплуатации) объекта или изделия в плане безопасности эксплуатации, влияния на окружающую среду, энергозатратам; экономический анализ и т. д.).</i></p> | <p>Объект исследования:</p> <p>Молекула C_2H_3D</p> |
|---|---|

| | |
|--|---|
| <p>Перечень подлежащих исследованию, проектированию и разработке вопросов</p> <p><i>(аналитический обзор по литературным источникам с целью выяснения достижений мировой науки техники в рассматриваемой области; постановка задачи исследования, проектирования, конструирования; содержание процедуры исследования, проектирования, конструирования; обсуждение результатов выполненной работы; наименование дополнительных разделов, подлежащих разработке; заключение по работе).</i></p> | <p>Обзор литературы; Анализ спектра молекулы C₂H₃D в области 600-1250 см⁻¹; Раздел «Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение»; Раздел «Социальная ответственность».</p> |
|--|---|

| |
|--|
| <p>Перечень графического материала</p> <p><i>(с точным указанием обязательных чертежей)</i></p> |
|--|

Консультанты по разделам выпускной квалификационной работы
(с указанием разделов)

| Раздел | Консультант |
|---|-----------------------------------|
| Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение | Меньшикова Екатерина Валентиновна |
| Социальная ответственность | Исаева Елизавета Сергеевна |

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

| |
|---|
| 2.1 Общая информация о молекуле C ₂ H ₃ D |
| 2.2 Модель эффективного гамильтониана |
| 2.3 Метод комбинационных разностей |
| 2.4 Принцип работы Фурье-спектрометра |

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

Задание выдал руководитель:

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

Задание принял к исполнению студент:

| Группа | ФИО | Подпись | Дата |
|--------|------------------------------|---------|------|
| 0БМ71 | Жданович Станислав Андреевич | | |

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 (ИЯТШ)
 Направление подготовки (специальность) 03.04.02 Физика
 Уровень образования магистратура
 Отделение школы (НОЦ) Отделение Экспериментальной Физики (ОЭФ)
 Период выполнения осенний семестр 2018 - весенний семестр 2019 учебного года

Форма представления работы:

Магистерская диссертация

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

КАЛЕНДАРНЫЙ РЕЙТИНГ-ПЛАН выполнения выпускной квалификационной работы

Срок сдачи студентом выполненной работы:

| Дата контроля | Название раздела (модуля) / вид работы (исследования) | Максимальный балл раздела (модуля) |
|---------------|--|------------------------------------|
| 12.09.2018 | <i>Существующие исследования в области молекулярной спектроскопии высокого разрешения проведенные для молекулы C₂H₃D</i> | 5 |
| 12.12.2018 | <i>Восстановление экспериментального энергетического спектра с помощью модели эффективного гамильтониана</i> | 5 |
| 25.12.2018 | <i>Восстановление интенсивностей спектра с помощью модели эффективного дипольного момента</i> | 5 |
| 01.04.2019 | <i>Результаты анализа группы полос молекулы C₂H₃D в области 600-1250 см⁻¹</i> | 5 |

СОСТАВИЛ:

Руководитель ВКР

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

СОГЛАСОВАНО:

Руководитель ООП

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

ЗАДАНИЕ ДЛЯ РАЗДЕЛА «СОЦИАЛЬНАЯ ОТВЕТСТВЕННОСТЬ»

Студенту:

| | |
|--------|------------------------------|
| Группа | ФИО |
| 0БМ71 | Жданович Станислав Андреевич |

| | | | |
|---------------------|-------------------------------------|---------------------------|------------------------------------|
| Школа | Инженерная школа ядерных технологий | Отделение (НОЦ) | Отделение экспериментальной физики |
| Уровень образования | Магистратура | Направление/специальность | 03.04.02 Физика |

Тема ВКР:

| | |
|--|---|
| Анализ колебательно-вращательного спектра высокого разрешения полос ν_4, ν_6, ν_7, ν_8, ν_{10} молекулы C_2H_3D | |
| Исходные данные к разделу «Социальная ответственность»: | |
| 1. Характеристика объекта исследования (вещество, материал, прибор, алгоритм, методика, рабочая зона) и области его применения | <i>Проводится исследование ИК-спектра поглощения молекулы C_2H_3D в области $600-1250\text{ см}^{-1}$. Полученные данные будут использоваться для пополнения как российских, так и международных баз данных (HITRAN).</i> |
| Перечень вопросов, подлежащих исследованию, проектированию и разработке: | |
| 1. Правовые и организационные вопросы обеспечения безопасности: – специальные (характерные при эксплуатации объекта исследования, проектируемой рабочей зоны) правовые нормы трудового законодательства; – организационные мероприятия при компоновке рабочей зоны. | – Трудовой кодекс РФ – Конституция РФ – Федеральный закон "О персональных данных" от 27.07.2006 N 152-ФЗ – Федеральный закон от 28.12.2013 N 426-ФЗ (ред. от 27.12.2018) "О специальной оценке условий труда" – Федеральный закон от 24.07.1998 № 125-ФЗ «Об обязательном социальном страховании от несчастных случаев на производстве и профессиональных заболеваний» – ГОСТ 12.2.032-78 – СанПиН 2.2.2/2.4.1340-03 – ПНД Ф 12.13.1-03 – ГОСТ Р 50923-96 |
| 2. Производственная безопасность: 2.1. Анализ выявленных вредных и опасных факторов 2.2. Обоснование мероприятий по снижению воздействия | 1. Отклонение показателей микроклимата 2. Превышение уровня шума 3. Отсутствие или недостаток естественного света 4. Недостаточная освещенность рабочей зоны 5. Повышенное значение напряжения в электрической цепи, замыкание которой может произойти через тело человека |
| 3. Экологическая безопасность: | – Загрязнение литосферы неуполученными отходами |
| 4. Безопасность в чрезвычайных ситуациях: | – возможные ЧС: сильные морозы, несанкционированное проникновение на рабочее место, пожар |

| | |
|--|---|
| | – наиболее типичная ЧС – сильные морозы |
|--|---|

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

Задание выдал консультант:

| Должность | ФИО | Ученая степень, звание | Подпись | Дата |
|---------------------------|----------------------------|------------------------|---------|------|
| Старший преподаватель ООД | Исаева Елизавета Сергеевна | | | |

Задание принял к исполнению студент:

| Группа | ФИО | Подпись | Дата |
|--------|------------------------------|---------|------|
| ОБМ71 | Жданович Станислав Андреевич | | |

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

Студенту:

| | |
|--------|------------------------------|
| Группа | ФИО |
| ОБМ71 | Жданович Станислав Андреевич |

| | | | |
|---------------------|-------------------------------------|---------------------------|------------------------------------|
| Школа | Инженерная школа ядерных технологий | Отделение школы (НОЦ) | Отделение экспериментальной физики |
| Уровень образования | Магистратура | Направление/специальность | 03.04.02 Физика |

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

| | |
|--|--|
| 1. Стоимость ресурсов научного исследования (НИ): материально-технических, энергетических, финансовых, информационных и человеческих | - норматив заработной платы (101348,61 руб.) - бюджет проекта (184854,11 руб.) |
| 2. Нормы и нормативы расходования ресурсов | - тариф на промышленную электроэнергию 5,8 за 1 кВт - районный коэффициент города Томска -1,3 |
| 3. Используемая система налогообложения, ставки налогов, отчислений, дисконтирования и кредитования | - отчисления во внебюджетные фонды (27,1%). |

Перечень вопросов, подлежащих исследованию, проектированию и разработке:

| | |
|---|---|
| 1. Оценка коммерческого и инновационного потенциала НТИ | - потенциальные потребители результатов исследования. - технология QuaD |
| 2. Разработка устава научно-технического проекта | - цели и результат проекта; - организационная структура проекта. |
| 3. Планирование процесса управления НТИ: структура и график проведения, бюджет, риски и организация закупок | - структура работ в рамках научного исследования; - диаграмма Исикавы; - разработка графика проведения научного исследования; - бюджет научно-технического исследования. |

Перечень графического материала (с точным указанием обязательных чертежей):

| |
|----------------------------------|
| 1. Матрица SWOT |
| 2. Диаграмма Исикавы |
| 3. График проведения и бюджет НИ |

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

Задание выдал консультант:

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

Задание принял к исполнению студент:

| Группа | ФИО | Подпись | Дата |
|--------|------------------------------|---------|------|
| ОБМ71 | Жданович Станислав Андреевич | | |

РЕФЕРАТ

Выпускная квалификационная работа 92 с., 12 рис., 29 табл., 47 источников, 1 прил.

Ключевые слова: Молекулярная спектроскопия, ИК-спектр, высокое разрешение, спектроскопические параметры, молекула C₂H₃D.

Объектом исследования является (ютя) ИК-спектр поглощения молекулы C₂H₃D.

Цель работы – анализ спектра поглощения высокого разрешения молекулы C₂H₃D в области 600-1250 см⁻¹.

В процессе исследования проводились интерпретация спектра с помощью метода комбинационных разностей, на основе полученных результатов интерпретации была решена обратная спектроскопическая задача, с использованием результатов последних двух этапов исследования найдены основные вклады эффективного оператора дипольного момента.

В результате исследования В результате анализа спектра было проинтерпретировано порядка 19000 переходов. По теории изотопозамещения были получены параметры взаимодействия между полосами ν_4 , ν_6 , ν_7 , ν_8 , и ν_{10} , в качестве исходных использованы параметры молекулы C₂H₄. При решении обратной спектроскопической задачи получено около 40 спектроскопических параметров, восстанавливающих исходные данные с погрешностью, не превышающей экспериментальную ($d_{rms} = 1,5 \cdot 10^{-4}$ см⁻¹). Получены параметры модели эффективного оператора дипольного момента, которые позволяют описывать соотношения интенсивностей полос, расположенных в области 600-1250 см⁻¹ с точностью лучше 5%.

Область применения: астрофизика, планетология и атмосферная оптика.

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

В будущем планируется изучение других изотопологов молекулы этилена.

Оглавление

| | |
|---|----|
| Введение | 14 |
| 1. Существующие исследования в области молекулярной спектроскопии высокого разрешения проведенные для молекулы C_2H_3D | 16 |
| 2. Восстановление экспериментального энергетического спектра с помощью модели эффективного гамильтониана | 18 |
| 2.1 Общая информация о молекуле C_2H_3D | 21 |
| 2.2 Модель эффективного гамильтониана | 23 |
| 2.3 Метод комбинационных разностей..... | 24 |
| 2.4 Применение теории изотопозамещения для оценки спектроскопических параметров взаимодействия выделенных состояний..... | 26 |
| 3 Восстановление интенсивностей спектра с помощью модели эффективного дипольного момента..... | 28 |
| 3.1 Закон поглощения Бугера — Ламберта — Бера. | 28 |
| 3.2 Характеристики интенсивности поглощения. | 30 |
| 3.3 Модель оператора эффективного дипольного момента. | 32 |
| 3.4 Принцип работы Фурье-спектрометра | 34 |
| 4. Результаты анализа группы полос молекулы C_2H_3D в области $600-1250\text{ см}^{-1}$ | 36 |
| 4.1. Условия получения спектра поглощения на Фурье-спектрометре..... | 36 |
| 4.2. Идентификация переходов спектра. | 38 |
| 4.3. Дополнение данных из анализа новых переходов..... | 38 |
| 4.4. Анализ системы взаимодействующих состояний $(\nu_4 = 1)$, $(\nu_6 = 1)$, $(\nu_7 = 1)$, $(\nu_8 = 1)$, $(\nu_{10} = 1)$ | 39 |
| 4.5. Анализ интенсивностей линий полос ν_4 , ν_6 , ν_7 , ν_8 , ν_{10} | 40 |
| 5. Социальная ответственность..... | 42 |
| 5.1. Правовые и организационные вопросы обеспечения безопасности..... | 42 |
| 5.1.1. Специальные (характерные для рабочей зоны исследователя) правовые нормы трудового законодательства..... | 42 |
| 5.1.2. Организационные мероприятия при компоновке рабочей зоны исследователя. | 44 |
| 5.2. Производственная безопасность. Анализ вредных и опасных факторов, которые могут возникнуть на рабочем месте при проведении исследований. Обоснование мероприятий по защите исследователя от действия опасных и вредных факторов..... | 45 |
| 5.2.1. Отклонение показателей микроклимата | 46 |
| 5.2.2. Превышение уровня шума | 47 |
| 5.2.3. Недостаток естественного света, освещенности рабочей зоны..... | 48 |
| 5.2.4. Повышенное значение напряжения в электрической цепи, замыкание которой может произойти через тело человека | 52 |

| | |
|---|----|
| 5.3. Экологическая безопасность. Анализ влияния процесса исследования на окружающую среду. Обоснование мероприятий по защите окружающей среды. | 54 |
| 5.4. Безопасность в чрезвычайных ситуациях. Анализ вероятных ЧС, которые могут возникнуть на рабочем месте при проведении исследований. Обоснование мероприятий по предотвращению ЧС и разработка порядка действия в случае возникновения ЧС..... | 55 |
| Выводы по разделу | 58 |
| Список использованных источников | 58 |
| 6. Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение | 60 |
| 6.1. Предпроектный анализ..... | 60 |
| 6.1.1. Потенциальные потребители результатов исследования..... | 60 |
| 6.1.2. Технология QuaD | 60 |
| 6.1.3. Диаграмма Исикавы..... | 61 |
| 6.1.4. SWOT-анализ..... | 62 |
| 6.2. Инициация проекта..... | 66 |
| 6.2.1. Цели и результат проекта. | 66 |
| 6.2.2. Организационная структура проекта. | 67 |
| 6.2.3 Ограничения и допущения проекта..... | 68 |
| 6.3. Планирование управления научно-техническим проектом..... | 68 |
| 6.3.1. План проекта..... | 69 |
| 6.3.2. Бюджет научного исследования | 70 |
| 6.4. Реестр рисков проекта | 74 |
| Список использованных источников | 75 |
| Заключение..... | 77 |
| Список публикаций | 78 |
| Список используемых источников | 79 |
| Приложение А..... | 84 |

Введение

На сегодняшний день в астрофизике актуальна проблема определения состава газа, а также физических условий в которых он находится в атмосфере планет. Эта проблема решается моделированием спектров поглощения, которое становится возможно после исследования спектров высокого разрешения, снятых в контролируемых условиях на Земле. Экспериментальные спектры атмосферы получают с помощью инфракрасных спектрометров, размещаемых как на Земле в обсерваториях (например ИК-обсерватория на Мауна-Кеа [A1]), так и на её орбите (например ИК-обсерватория ISO [A2]), а также на исследовательских зондах (например исследование системы Плутона зондом «Новые рубежи» [A3]).

Данное исследование посвящено выяснению энергетической структуры взаимодействующих фундаментальных состояний ($v_4 = 1$), ($v_6 = 1$), ($v_7 = 1$), ($v_8 = 1$), ($v_{10} = 1$) молекулы C_2H_3D , что с одной стороны позволяет моделировать положения спектральных линий этилена, с другой - несет информацию о структурных параметрах и внутренней динамике молекулы. В конечном итоге найденные собственные значения гамильтониана для исследованных состояний позволят рассчитать дипольные характеристики молекулы C_2H_3D , необходимые для определения компонентного состава и макропараметров газовых смесей: концентрации, температуры, давления. Таким образом определены следующие цели и задачи работы:

Цель - Анализ спектра поглощения высокого разрешения молекулы C_2H_3D в области $600-1250\text{ см}^{-1}$

Задачи:

- 1. Идентификация переходов в спектре молекулы C_2H_3D в области $600-1250\text{ см}^{-1}$;**
- 2. Определение спектроскопических параметров эффективного гамильтониана, моделирующего частоты переходов в спектре;**
- 3. Определение параметров оператора эффективного дипольного момента моделирующего интенсивности в спектре.**

Молекула этилена присутствует в атмосфере планет Солнечной системы [A1-A3, A11-A13], что дает основание полагать, что он присутствует на подобных планетах в других звездных системах, также молекула обнаружена на некоторых спутниках в Солнечной системе [A2] и в межзвездных облаках [A13-A16]. Концентрация этилена в земной атмосфере меняется от 0,02 до 200 ppb [A4], эта молекула играет важную роль в формировании глобального климата и выделяется в атмосферу в том числе и антропогенным путем [A17]. Спектры этилена важны также при получении экспериментальных спектров смеси газов, где линии поглощения этилена необходимо выделить для определения концентрации других газов, поглощающих в той же области спектра [A4], например, таковым является метан. Этилен также является одним из летучих компонентов растений: плоды и листья многих древесных, кустарниковых и травянистых растений выделяют его в атмосферу [A5-A8]. Поэтому этилен можно рассматривать как биомаркер [A18] при поиске жизни на экзопланетах и спутниках планет Солнечной системы [A19].

Следует отметить, что исследование соотношения изотопов водорода, дейтерия и протия в астрофизике является важным для экспериментального подтверждения предполагаемой звездной и планетарной эволюции [A9-A10, A14]. Соотношение D/H оказывается основной характеристикой, по которой можно отследить источник исследуемого вещества: галактика, протозвезды, планеты-гиганты, кометы, межпланетные частицы все имеют разное значение D/H. Этот факт обусловлен процессом кинетического разделения изотопов – изотопы оказываются разделены вследствие того, что скорости некоторых химических реакций оказываются различны для каждого из них [A20]. Таким образом, становится значимым исследование изотопически замещенных молекул. Монодейтерированный изотополог этилена (C_2H_3D) является первым по распространенности изотопологом C_2H_4 , поэтому обычно оказывается первичным объектом подобных исследований [A2].

1. Существующие исследования в области молекулярной спектроскопии высокого разрешения проведенные для молекулы C_2H_3D .

Международный каталог спектроскопических данных HITRAN имеет большое количество информации о молекуле этилена [Б1-Б2]. Однако, для решения задач астрофизики, в частности, связанных с моделированием спектров необходимо постоянно пополнять и уточнять эту информацию. Также для решения таких задач как нахождение потенциальной функции необходима информация о изотопических модификациях молекулы этилена.

Относительно исследований молекулы C_2H_3D в области молекулярной спектроскопии высокого разрешения можно сказать, что из-за повышения точности эксперимента по снятию спектра данные статьи приведенные в таблице 1 в первых трех строках [Б3-Б5] можно считать устаревшими, поскольку точности использованных экспериментальных данных недостаточно для решения обратной задачи.

В статье [Б6] был проведен анализ колебательно-вращательного спектра молекулы C_2H_3D в области $1330-1475\text{ см}^{-1}$. На основе проведенного анализа из экспериментальных данных получена вращательная структура основного колебательного состояния молекулы. Из анализа фундаментальной полосы ν_{12} авторами было проинтерпретировано 1444 перехода, для соответствующего состояния найдены спектроскопические постоянные, восстанавливающие экспериментальные значения уровней со среднеквадратичным отклонением $d_{rms} = 5,5 \cdot 10^{-4}$. Неопределенность положения линии в спектре составила $6,5 \cdot 10^{-4}\text{ см}^{-1}$. Параметры основного колебательного состояния, полученные в данной статье, были взяты в качестве начального приближения при фитинге.

В работе [Б7] исследовались валентные колебания молекул C_2H_3D и C_2HD_3 , с помощью теории локальных мод для этих молекул были найдены спектроскопические постоянные, параметр среднеквадратичное отклонение d_{rms} для C_2H_3D составил 7 см^{-1} .

В таблице 1 приведены основные результаты интерпретации спектра молекулы C_2H_3D , ранее проведенные в области $600-1250\text{ см}^{-1}$ для полос $\nu_4, \nu_6, \nu_7, \nu_8, \nu_{10}$, иными словами, тех, что исследуются в данной работе.

Таблица 1 – Существующий анализ спектра в области $600-1250\text{ см}^{-1}$

| Статья, год опубликования | Полосы в области $600-1250\text{ см}^{-1}$ | Разрешение спектра, см^{-1} | Неопределенность положения линии, см^{-1} | d_{rms} | Проинтерпретировано переходов | Максимальные J/K_a |
|---------------------------|--|--------------------------------------|--|-----------|-------------------------------|-------------------------------------|
| [Б3], 1982 | ν_7 | 0,08 | 0,002 | - | | 24/9 |
| [Б4], 1984 | ν_7, ν_8 | | 0,001 | - | 1775 | 31/13, 27/10 |
| [Б5], 1987 | ν_{10} | | 0,001 | - | 140 | 26/3-10 |
| [Б8], 1988 | $\nu_4, \nu_6, \nu_7, \nu_8, \nu_{10}$ | | 0,0003 | 0,03 | 18 000 | 35/14, 30/13, 35/14, 35/14, 28/3-14 |
| [Б9], 2010 | ν_6 | 0,0063 | 0,0006 | 0,006 | 947 | |

Авторы работы [Б8] не смогли точно воспроизвести (с $d_{rms} < 0,0003$) экспериментальный спектр с помощью модели при решении обратной задачи, тем не менее в некоторой степени согласие с экспериментом наблюдалось ($d_{rms} = 0,03\text{ см}^{-1}$).

2. Восстановление экспериментального энергетического спектра с помощью модели эффективного гамильтониана

Природные явления часто изучаются с помощью построения модели процесса или объекта. Молекулярная спектроскопия изучает поглощение света молекулами в различных диапазонах частот при различных значениях параметров окружающей среды (температуры, давления, электрических и магнитных полей). Моделирование процессов поглощения света молекулами сводится, в первую очередь, к построению конкретного гамильтониана молекулы.

Молекула, поглощающая электромагнитное излучение, представляется в виде электронов и ядер составляющих ее. Затем решается задача об их движении в отсутствие внешних полей. Процесс поглощения электромагнитного излучения – это переход молекулы из низкоэнергетического состояния в состояние с большей энергией, переход осуществляется за счет энергии кванта излучения. Для описания уровней энергии молекулы необходимо решить уравнение Шредингера (2.1) с операторов Гамильтона H , зависящем от координат и спинов частиц составляющих молекулу, а также учитывающего взаимодействия между этими частицами. В молекулярной спектроскопии используют нерелятивистские гамильтонианы имеющие вид (2.2).

$$H\psi = E\psi, \quad (2.1)$$

где ψ – волновая функция состояния, E энергия состояния.

$$H = T_{nucl} + T_{el} + V, \quad (2.2)$$

где T_{nucl} и T_{el} – операторы кинетической энергии ядер и электронов, V – оператор потенциальной энергии молекулы. Эти операторы в пространственно-фиксированной системе (ПФС) координат имеют вид:

$$\begin{aligned} T_{nucl} &= -\frac{\hbar^2}{2} \sum_N \frac{1}{m_N} \left(\frac{\partial^2}{\partial x_N^2} + \frac{\partial^2}{\partial y_N^2} + \frac{\partial^2}{\partial z_N^2} \right), \\ T_{el} &= -\frac{\hbar^2}{2} \sum_i \frac{1}{m_{el}} \left(\frac{\partial^2}{\partial x_i^2} + \frac{\partial^2}{\partial y_i^2} + \frac{\partial^2}{\partial z_i^2} \right), \end{aligned} \quad (2.3)$$

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

где m_N и m_{el} – массы ядер и электронов; Z_N и e – заряды ядер и электронов; r_{ij} – расстояние между i -той и j -той частицами.

Точное решение уравнения Шрёдингера с таким гамильтонианом – очень сложная задача. Поэтому, существуют многочисленные приближения. Также возникает задача получения гамильтониана, зависящего от вращательных и колебательных переменных, – перевод классического гамильтониана (2.2) в гамильтониан во внутримолекулярных координатах. В итоге такого перевода получаем колебательно-вращательный гамильтониан Уотсона [В1]. Опишем теперь кратко основные положения теорий, используемых в колебательно-вращательной спектроскопии молекул для упрощения задачи решения уравнения Шрёдингера.

Согласно *приближению Борна-Оппенгеймера*, решение уравнения Шрёдингера разбивается на две части, как и гамильтониан (2.4):

$$H = H_{el} + \Delta H_1 + \Delta H_2 \quad (2.4)$$

1. О движении электронов в поле медленно движущихся ядер (части соответствует слагаемое H_{el});

2. О движении ядер в эффективном поле электронов (ΔH_1 и ΔH_2).

Части 1, 2 теперь можно решать отдельно, а полная волновая функция ψ (2.5) выражается как произведение электронной $\psi_э$ и ядерной $\psi_я$.

$$\psi = \psi_э * \psi_я \quad (2.5)$$

Метод эффективных операторов позволяет заменить исходный гамильтониан H , решение с которым уравнения Шрёдингера невозможно или затруднительно, новым H' обладающим следующими свойствами:

1. Решение уравнения Шрёдингера с H' можно определить в явном виде;

2. Множество B' всех решений уравнения Шрёдингера с оператором H' тождественно совпадает с некоторым подмножеством B множества A решений уравнения Шрёдингера с оператором H .

Согласно *операторной теории возмущений* гамильтониан обычно выбирается в виде (2.4). При этом собственные функции выражаются в виде произведений соответствующих собственных функций слагаемых H .

$$H = H_0 + \sum_{n=1}^{\infty} H_n(\kappa^n) \quad , \quad (2.5)$$

где символ κ^n означает, что соответствующий оператор H_n является малым по сравнению с H_0 , решения с которым известны, порядок малости H_n определяется как κ^n , где $\kappa = (m_e/M_N)^{1/4}$, m_e – масса электрона, M_N – средняя масса ядер молекулы [B2-B3].

2.1 Общая информация о молекуле C_2H_3D .

Молекула C_2H_3D (Рисунок 1) это молекула типа асимметричного волчка. Группа симметрии этой молекулы изоморфна точечной группе симметрии C_s .

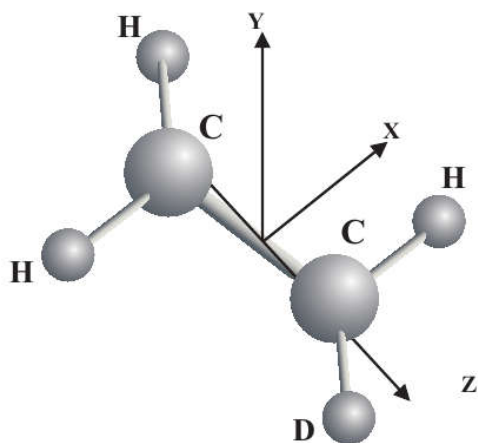


Рисунок 1 – Молекула C_2H_3D

В данной работе мы рассмотрели фундаментальные полосы ν_4 , ν_6 , ν_7 , ν_8 и ν_{10} , которые расположены в области $600-1250\text{ см}^{-1}$. Соответствующие колебательные координаты, Q_4 , Q_6 , Q_7 , Q_8 , Q_{10} (Рисунок 2) преобразуются при операциях симметрии по неприводимым представлениям A' и A'' группы C_s (Таблица 2) [B4-B5].

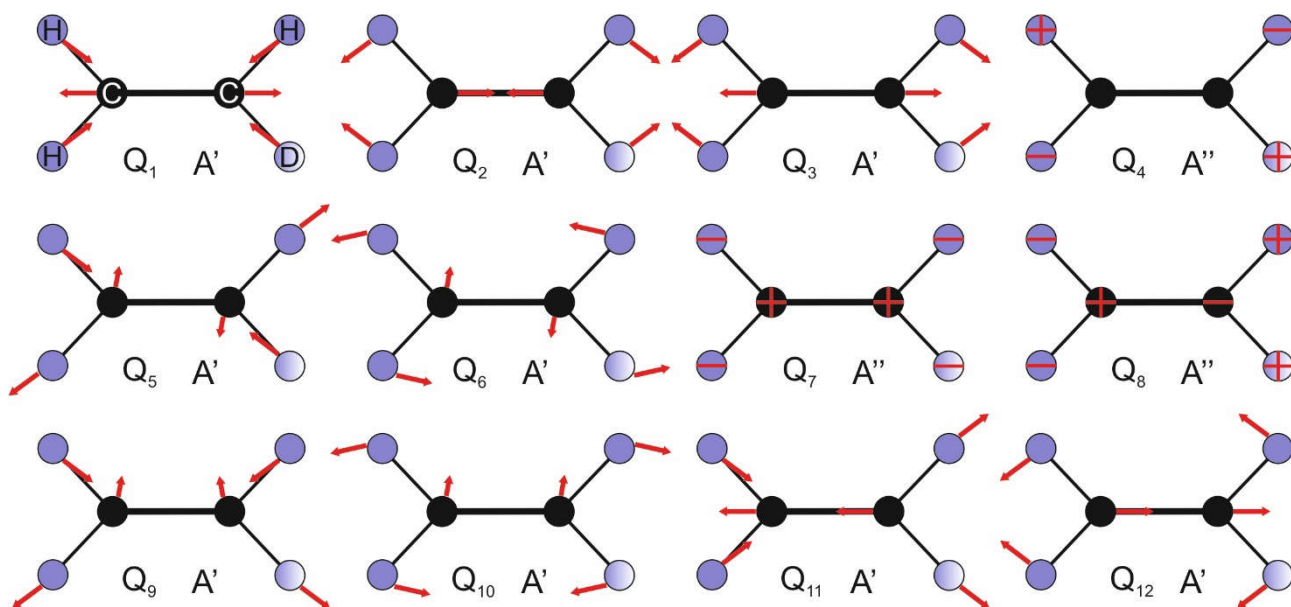


Рисунок 2 – Нормальные колебания молекулы C_2H_3D

Таблица 2 - Преобразование элементов входящих группу C_s

| C_s | E | σ_h | Нормальные колебательные координаты | Операторы момента импульса |
|-------|-----|------------|--|-------------------------------|
| A' | 1 | 1 | $Q_1, Q_2, Q_3, Q_5, Q_6, Q_9, Q_{10}, Q_{11}, Q_{12}$ | J_x, J_z |
| A'' | 1 | -1 | $Q_4, Q_7, Q_8,$ | J_y |

Исходя из симметрии молекулы, между полосами A' и A'' должны быть распределены три типа переходов а, б, и с, правила отбора, соответствующие этим типам переходов имеют вид:

$$\begin{aligned}
 \Delta J &= \pm 1 \quad \Delta K_a = \text{чет.} \quad \Delta K_c = \text{нечет.} \\
 \Delta J &= \pm 1 \quad \Delta K_a = \text{нечет.} \quad \Delta K_c = \text{нечет.} \\
 \Delta J &= \pm 1 \quad \Delta K_a = \text{нечет.} \quad \Delta K_c = \text{чет.}
 \end{aligned}
 \tag{2.6}$$

В дополнение, для всех типов переходов должно соблюдаться условия:

$$\begin{aligned}
 K_a + K_c &= J, J + 1 \\
 K_a, K_c &\leq J
 \end{aligned}
 \tag{2.7}$$

2.2 Модель эффективного гамильтониана

Как говорилось ранее, для упрощения решения уравнения Шредингера возникает необходимость перевода гамильтониана (2.2) в гамильтониан во внутримолекулярных координатах. В работе [B1] было показано что при переходе к $(3N - 6)$ колебательным координатам Q_λ , которые описывают относительное движение ядер в молекуле, колебательно-вращательный гамильтониан молекулы принимает следующий вид

$$H = \frac{1}{2} \sum_{\lambda} P_{\lambda}^2 + \frac{1}{2} \sum_{\alpha\beta} \mu_{\alpha\beta} (J_{\alpha} - G_{\alpha})(J_{\beta} - G_{\beta}) + V(Q), \quad (2.8)$$

где $P_{\lambda} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial Q_{\lambda}}$ - импульс, сопряженный координате Q_{λ} ;

Потенциальная функция $V(Q)$ может быть представлена в виде разложения в ряд Тейлора:

$$V(Q) = E_0 + \frac{(2\pi c)^2}{2} \sum_{\lambda} \omega_{\lambda}^2 Q_{\lambda}^2 + \sum_{\lambda\mu\nu} K_{\lambda\mu\nu} Q_{\lambda} Q_{\mu} Q_{\nu} + \sum_{\lambda\mu\nu\xi} K_{\lambda\mu\nu\xi} Q_{\lambda} Q_{\mu} Q_{\nu} Q_{\xi} + \dots \quad (2.9)$$

здесь:

$$G_{\alpha} = \sum_{\lambda\mu} \zeta_{\lambda\mu}^{\alpha} Q_{\lambda} P_{\mu} \quad (2.10)$$

- компоненты колебательного углового момента;

$$\zeta_{ab}^{\alpha} = \sum_N \sum_{\beta\gamma} \epsilon_{\alpha\beta\gamma} l_{N\beta a} l_{N\gamma b} \quad (2.11)$$

- кориолисовы постоянные;

$\epsilon_{\alpha\beta\gamma}$ - полностью антисимметричный тензор (символ Леви-Чивита);

$l_{N\beta a}$ - константы форм колебаний;

$\mu_{\alpha\beta}$ - элементы матрицы обратных моментов инерции;

J_{α} - компоненты оператора полного углового момента [B1, B6].

2.3 Метод комбинационных разностей

Анализ спектра проводился методом комбинационных разностей. Рассматриваются вращательные уровни основного и возбуждённого колебательно-вращательных состояний. Согласно правилам отбора, имеется несколько переходов с вращательных уровней основного колебательного состояния на один и тот же уровень возбуждённого колебательного состояния (Рисунок 3). Как правило, структура основного колебательного состояния известна с высокой точностью, её можно определить из анализа микроволновых спектров.

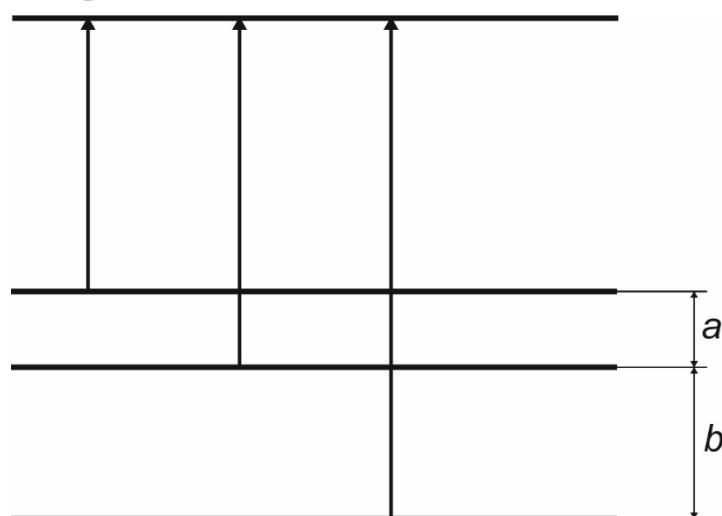


Рисунок 3 - Иллюстрация метода комбинационных разностей

Наша цель – отыскание энергии возбужденного колебательного состояния. Для того, чтобы найти ее нужно предположить на какое примерно расстояние она отстоит от соответствующей энергии невозбужденного состояния. Поскольку достаточно точно известны расстояния между вращательными уровнями основного колебательного состояния, можно сделать «линейку», расстояния между делениями которой будут соответствовать расстояниям между вращательными уровнями основного колебательного состояния (a и b на рисунке 3).

Допустим, мы составили «линейку» из трех делений. Будем двигать «линейку» по спектру. В спектре необходимо найти такие три линии, которые совпадут с делениями линейки (Рисунок 4). Зная положения нижних уровней, длины волн переходов, можно определить энергию верхнего уровня. Если

будем «линейку» двигать по спектру, то можем обнаружить ещё несколько линий, которые совпадут с делениями «линейки». Из числа выбранных таким образом линий нужно найти верную комбинацию. Описанный процесс является одним из способов интерпретацией линий.

Конечно, точное совпадение линий спектра с делениями линейки в процессе идентификации маловероятно. Поэтому задается точность поиска « d ». Это значит, что при отклонении центра линии спектра от деления «линейки» на величину меньшую или равную « d » линия попадает в выборку [B6-B8].

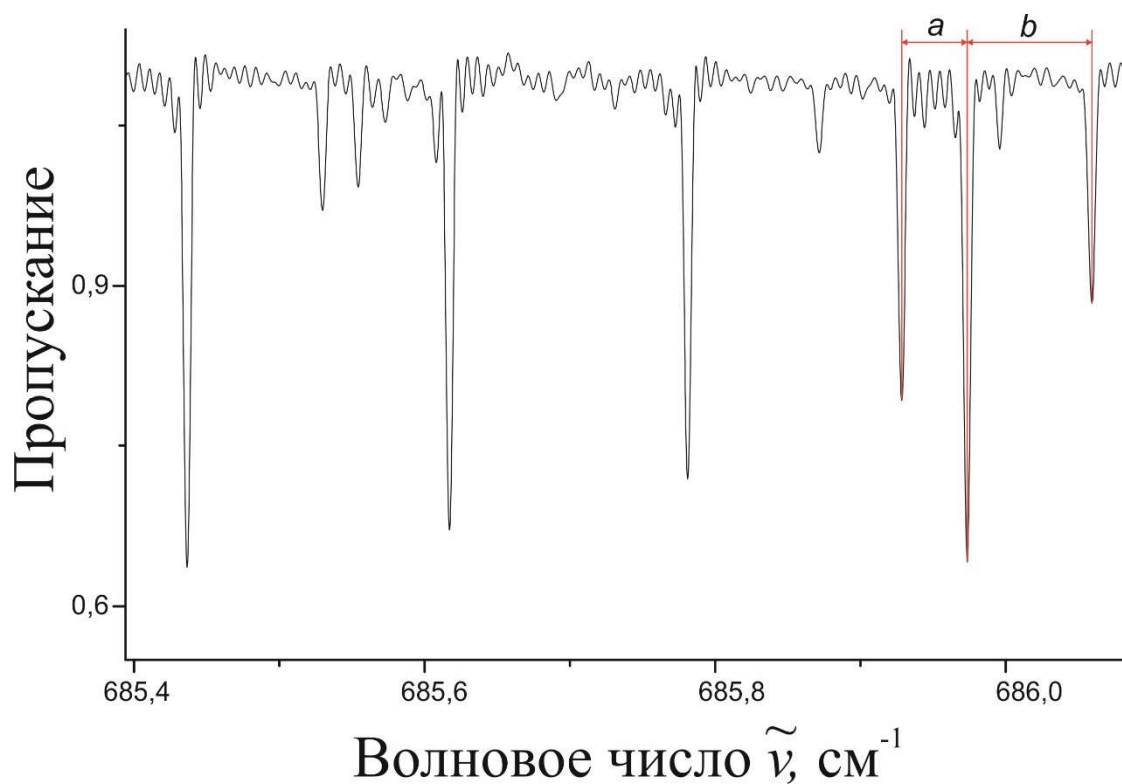


Рисунок 4 – «Линейка» движется по спектру

2.4 Применение теории изотопозамещения для оценки спектроскопических параметров взаимодействия выделенных состояний

В данной работе была выполнена численная оценка параметров эффективного гамильтониана, описывающих взаимодействия между исследуемыми состояниями. Для подобных расчетов постоянных резонансного взаимодействия обычно используется общая теория изотопозамещения [В9].

Перечислим здесь некоторые следствия из теории изотопозамещения, справедливые для любой изотопической замены в многоатомных молекулах, необходимые для расчета спектроскопических параметров.

Первое следствие. Основываясь на связи между вращательными, трансляционными и колебательными координатами можно определить гармонические частоты изотопозамещенной молекулы, ω'_c , как функции гармонических частот основной молекулы, ω_a , с помощью набора коэффициентов A_{ab} или, наоборот, определить коэффициенты A_{ab} как функцию гармонических частот «материнской» и изотопозамещенной молекул:

$$\sum_a A_{ba} \omega_a^2 \alpha_{ac} = \alpha_{bc} \omega'_c{}^2, \quad (2.1.1)$$

где α_{bc} – элементы матрицы, связывающей нормальные координаты материнской молекулы с нормальными координатами изотопозамещенной. Дополнительное условие, определяющее ортогональную матрицу A_{ab}

$$A_{ab} = \sum_c \alpha_{ac} \alpha_{bc} \quad (2.1.2)$$

Второе следствие. Дополнительные уравнения для определения α_{bc}

$$A_{ab} = \delta_{ab} - \sum_{N\alpha} \frac{m'_N - m_N}{m'_N} l_{N\alpha a} l_{N\alpha b}, \quad (2.1.3)$$

где m_N и m'_N - массы атомов до и после изотопозамещения. Представленные выше соотношения (3.1-3.3), определяют коэффициенты A_{ab} через структурные постоянные, массы и $l_{N\alpha a}$ -параметры основной модификации.

Третье следствие трансформационные коэффициенты изотопозамещенной молекулы могут быть записаны:

$$l'_{N\gamma a} = \sum_{ab} K_{\alpha\gamma}^e \left(\frac{m_N}{m'_N}\right)^{1/2} l_{N\alpha b} \alpha_{ab}^{-1} \quad (2.1.4)$$

Выражение (3.4) используется для $l'_{N\gamma a}$ -параметров изотопозамещенной молекулы, с использованием параметров «материнской» молекулы. В данном уравнении $K_{\alpha\gamma}^e$ является матрицей поворота координатных осей, соответствующих равновесной конфигурации при переходе от основной модификации к изотопозамещенной.

С помощью уравнений (3.1) — (3.4) можно рассчитать структурные постоянные $l'_{N\gamma a}$ для любой изотопозамещенной молекулы. Для этого необходимо знать только массы и соответствующие постоянные $l_{N\alpha b}$ исходной молекулы. Таким образом, с помощью представленных выше расчётов были численно получены значения всех трансформационных коэффициентов, $l'_{N\gamma a}$ молекулы C_2H_3D , необходимых для дальнейшей работы, из которых по формуле (2.11) были получены ζ_{ab}^α кориолисовы постоянные, необходимые для определения резонансов [B7-B9].

3 Восстановление интенсивностей спектра с помощью модели эффективного дипольного момента

3.1 Закон поглощения Бугера — Ламберта — Бера.

Типичный спектроскопический эксперимент изображен на рисунке 5, он иллюстрирует ослабление луча излучения при прохождении образца. I_0 и I представляют собой поток энергии на единицу поверхности и времени, или интенсивность (единицы измерения в СИ – Вт/м²) пучка излучения до и после прохождения через образец соответственно. Вместо интенсивности можно также использовать поток фотонов на единицу поверхности и времени ($I_{ph,0}$ и I_{ph}) поскольку верно

$$I = I_{ph} h\nu \quad (3.1)$$

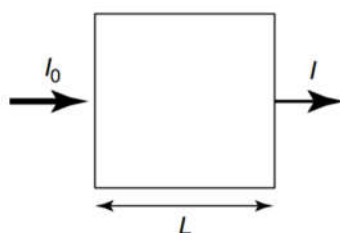


Рисунок 5 - Типичный спектроскопический эксперимент. Исследуемый образец помещен в камеру размера L .

Поток фотонов на единицу поверхности и времени может быть выражен как

$$I_{ph} = c \cdot C_{ph} \quad (3.2)$$

где c - скорость света, а C_{ph} - концентрация фотонов в световом пучке в виде плотности частиц.

Число поглощенных фотонов на единицу длины dx пропорционально концентрации C_i поглощающих частиц (концентрации как плотности частиц) и интенсивности:

$$dI = \sigma_{fi} I C_i dx \quad (3.3)$$

где σ_{fi} - сечение молекулярного поглощения, связанное с переходом из состояния i в состояние f . σ_{fi} зависит от частоты, и из уравнения (3) видно, что

оно должно иметь размерность м^2 , или как чаще всего употребляют – см^2 . σ_{fi} можно интерпретировать как поверхность полностью поглощающего диска, поглощающим так же, как и исследуемый атом или молекула. Интегрируя уравнение (3) по длине камеры с образцом, получим

$$-\int_{I_0}^I \frac{dI}{I} = -\int_0^L \sigma_{fi} C_i dx \quad (3.4)$$

Результатом интегрирования является известный закон Ламберта-Бера:

$$\ln\left(\frac{I_0}{I}\right) = \sigma_{fi} C_i L \quad (3.5)$$

Величина $\ln\left(\frac{I_0}{I}\right)$ известна как неперово поглощение, она легко переводится в пропускание $\frac{I}{I_0}$. Другая форма закона Ламберта-Бера,

используемая при проведении эксперимента по снятию спектра поглощения –

$$\lg\left(\frac{I_0}{I}\right) = \varepsilon_{fi} c_{i,m} L \quad (3.6)$$

где $\lg\left(\frac{I_0}{I}\right)$ - десятиричное поглощение, ε_{fi} - коэффициент молярной экстинкции, обычно выраженный в $\text{дм}^3 / (\text{см} \cdot \text{моль})$, а $c_{i,m}$ - концентрация в $\text{моль} / \text{дм}^3$ [Г1].

3.2 Характеристики интенсивности поглощения.

Коэффициент поглощения α можно выразить через коэффициент молярной экстинкции как

$$\alpha = \frac{4\pi\varepsilon_{fi}}{\lambda} \quad (3.7)$$

где λ - длина волны излучения соответствующая данному коэффициенту поглощения.

В отсутствии внешних полей интенсивность излучения равна площади под контуром линии, то есть интегралу от коэффициента поглощения в пределах одной линии:

$$k_\sigma = \int_{\sigma_1}^{\sigma_2} \alpha(\sigma') d\sigma' = \frac{8\pi^3\sigma}{4\pi\varepsilon_0 3hc} (1 - \exp(-\frac{hc\sigma}{kT})) N \frac{g_A}{Z(T)} \exp(-\frac{E_A}{kT}) R_A^B \quad (3.8)$$

Здесь:

- A и B – это соответственно уровни нижнего и верхнего состояния (a и b обозначены сами состояния) для перехода.

- $\sigma = \frac{E_B - E_A}{hc}$ - это волновое число перехода.

- Величина $R_A^B = \sum_a \sum_b 3 \left| \langle a | \mu_z | b \rangle \right|^2$ выражается через матричные

элементы эффективного оператора дипольного момента, который будет обсуждаться в главе 3.

- g_A - это коэффициент вырождения для состояния a (обычно равен 0 или 1).

- $Z(T)$ - статистическая сумма в зависимости от температуры T .

- N – число молекул участвующих в процессе поглощения на единицу объема.

Однако, вместо k_σ чаще используются относительные величины k_σ^P и k_σ^N , выражаемые обычно в $(\text{см}^{-2} * \text{атм}^{-1})$ и $(\text{см}^{-1} / (\text{молекула} * \text{см}^{-2}))$ соответственно:

$$k_\sigma^P = \frac{k_\sigma}{P} \quad (3.9),$$

где P – давление исследуемого газа.

$$k_\sigma^N = \frac{k_\sigma}{N} \quad (3.10)$$

Эти величины связаны между собой следующим образом:

$$k_\sigma^P = \frac{k_\sigma^N}{kT} \quad (3.11),$$

где k – постоянная Больцмана [Г1-Г5].

3.3 Модель оператора эффективного дипольного момента.

Ранее было показано, что для восстановления интенсивностей экспериментального спектра необходимо определить значения матричных элементов эффективного дипольного момента μ'_Z .

Проекцию оператора дипольного момента в пространственно-фиксированной системе координат можно выразить как сумму по координатам в фиксированной с молекулой системе:

$$P_Z = \sum_{\alpha} \lambda_{Z\alpha} \mu_{\alpha}, \quad (3.12)$$

где $\lambda_{Z\alpha}$ - постоянные элементы матрицы преобразования координат.

Определяя $\langle \alpha | P_Z | \beta \rangle$ мы можем воспользоваться тем фактом, что собственные значения для оператора дипольного момента совпадают с найденными для оператора эффективного колебательно-вращательного Гамильтониана \tilde{H} , а собственные функции $|\alpha\rangle$ выражаются через соответствующие $|A\rangle$ для \tilde{H} :

$$|\alpha\rangle = G|A\rangle, \quad (3.13)$$

где G это унитарный оператор, используемый в теории эффективных операторов, и определяемый при решении задачи на собственные значения для \tilde{H} .

Отсюда следует, что искомое $\langle \alpha | P_Z | \beta \rangle = \langle A | G^+ P_Z G | B \rangle$, и мы можем определить оператор \tilde{P}_Z через унитарное преобразование (в общем случае имеет колебательную $R_i(\lambda_{Z\alpha}, J_{\beta})$ и вращательную часть $V_i(q_{\lambda}, p_{\mu})$):

$$\tilde{P}_Z = G^+ P_Z G = \sum_i r_i R_i(\lambda_{Z\alpha}, J_{\beta}) V_i(q_{\lambda}, p_{\mu}), \quad (3.14)$$

Оператор μ'_Z связан с оператором проекции дипольного момента на ось OZ в фиксированной с молекулой системе координат следующим образом:

$$\mu'_z = G^+ \mu_z G = G^+ \left(\sum_{\alpha} k_{z\alpha} (\mu_{\alpha}^e + \sum_{\lambda} \mu_{\alpha}^{\lambda} q_{\lambda} + \sum_{\lambda, v \geq \lambda} \mu_{\alpha}^{\lambda v} q_{\lambda} q_v + \dots) \right) G \quad (3.15)$$

где, $k_{z\alpha}$ - элементы матрицы направляющих косинусов, q_{λ} - нормальные колебательные координаты [Г1-Г6].

Точные выражения матричных элементов $\langle a | \mu'_z | b \rangle$ оператора эффективного дипольного момента μ'_z найдены в [Г3, Г6] с использованием формализма неприводимых тензорных множеств.

3.4 Принцип работы Фурье-спектрометра

Фурье-спектрометр представляет собой интерферометр Майкельсона, в который попадает исследуемое излучение, при этом одно из зеркал будет перемещаться с постоянной скоростью. Оптическая схема типичного интерферометра Майкельсона приведена на рисунке 6.

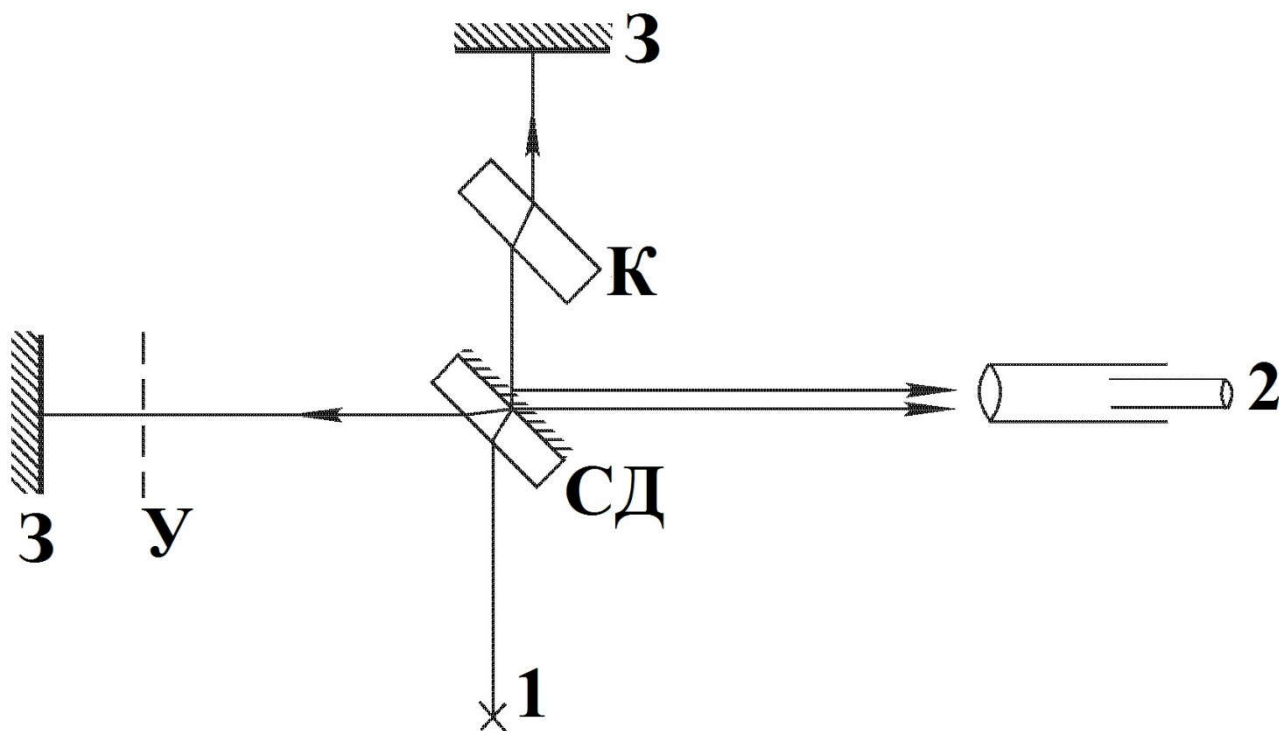


Рисунок 6 – Оптическая схема интерферометра

Исследуемый пучок света выходит из 1 – источника. З – зеркала расставлены так, чтобы после светоделителя – СД, - лучи накладывались друг на друга. К – компенсатор разности хода, вызванной тем, что один прошел через пластинку светоделителя один раз, а другой – три. Результат интерференции регистрируется в фотоприемнике – 2.

Фотоприемник связан через усилитель с АЦП (аналогово-цифровым преобразователем), который и преобразует аналоговый электрический сигнал в цифровую последовательность. Массив данных, полученный подобным образом, называется интерферограммой источника. Массив преобразуется на ЭВМ, где с помощью Фурье-преобразования вычисляется спектр в координатах положение зеркала – интенсивность сигнала. Интерферограмма снимается за рабочий цикл интерферометра – сканирование. Оно

осуществляется путем перемещения одного из зеркал с помощью У – устройства изменения разности хода. Для того, чтобы связать зарегистрированный отсчет с определенной величиной разности хода и получить спектр в нужных координатах одновременно снимается опорная интерферограмма.

По мере движения зеркала на приемник попадает световой пучок, интенсивность которого в случае монохроматического источника меняется по косинусоидальному закону. Если в источник излучения добавить вторую частоту то результирующая зависимость в координатах “положение зеркала - интенсивность” будет представляться в виде суммы двух косинусоидальных волн [Г7]. Итоговую интерферограмму можно представить как сумму косинусоидальных волн представляющих все возможные частоты присутствующих в источнике:

$$I(\delta) = \int_0^{\infty} B(\nu) \cos(2\pi\delta\nu) d\nu \quad (3.16),$$

где $B(\nu)$ - интенсивность (яркость) источника, в зависимости от излучаемой частоты ν , а δ – разность хода.

Распределение $B(\nu)$ интересующее нас мы получаем, применив к $I(\delta)$ Фурье-преобразование [Г8].

4. Результаты анализа группы полос молекулы C_2H_3D в области $600-1250\text{ см}^{-1}$.

4.1. Условия получения спектра поглощения на Фурье-спектрометре.

Спектр высокого разрешения монодейтерированного этилена был получен на Фурье-спектрометре Brucker 120HR в диапазоне волновых чисел $600 - 1250\text{ см}^{-1}$ (Рисунок 7) при комнатной температуре, использовался изотопически чистый образец $CH_2=CHD$.

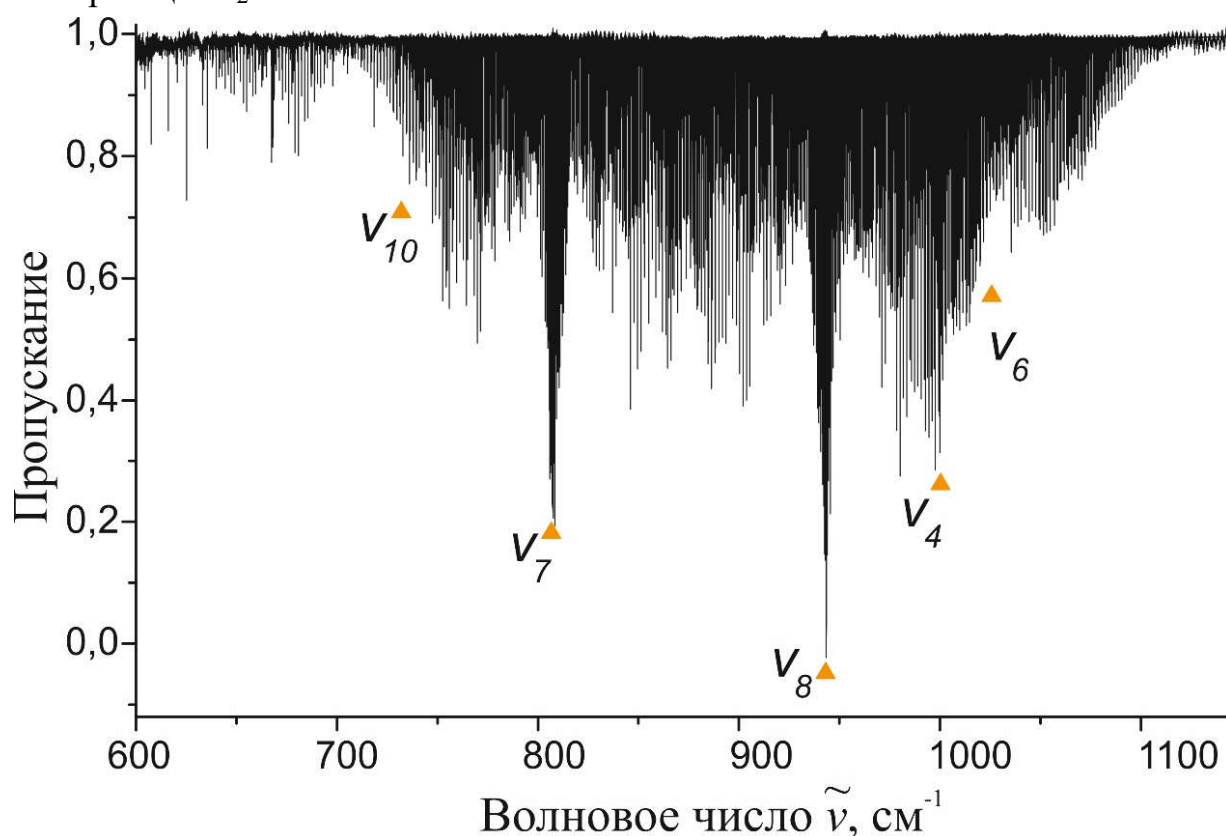


Рисунок 7 – Обзорный спектр высокого разрешения (SB003) молекулы C_2H_3D в диапазоне $600 - 1150\text{ см}^{-1}$

Условия снятия спектра высокого разрешения при четырех измерениях указаны в таблице 3. Экспериментальная неопределенность положения линии спектра составила $2-3 \cdot 10^{-4}\text{ см}^{-1}$.

Таблица 3 – Экспериментальные условия регистрации спектров.

| Номер серии | Код измерения | Диапазон, см^{-1} | Длина оптический | Давление, мбар | Температура, К | Разрешение, см^{-1} |
|-------------|---------------|----------------------------|------------------|----------------|----------------|------------------------------|
|-------------|---------------|----------------------------|------------------|----------------|----------------|------------------------------|

| экспериментов | | | КОГО пути, м | | | |
|---------------|-------|--------------|-----------------|-----|-----|--------|
| 1 | T02 | 600- 1250 | 4 | 0,7 | 300 | 0,0021 |
| | T03 | 600- 1250 | 4 | 1,5 | 300 | 0,0021 |
| 2 | SB003 | 600- 1210 | 4 | 0,6 | 300 | 0,0021 |
| | SB011 | 880- 1210 | 24 | 2,0 | 300 | 0,0021 |

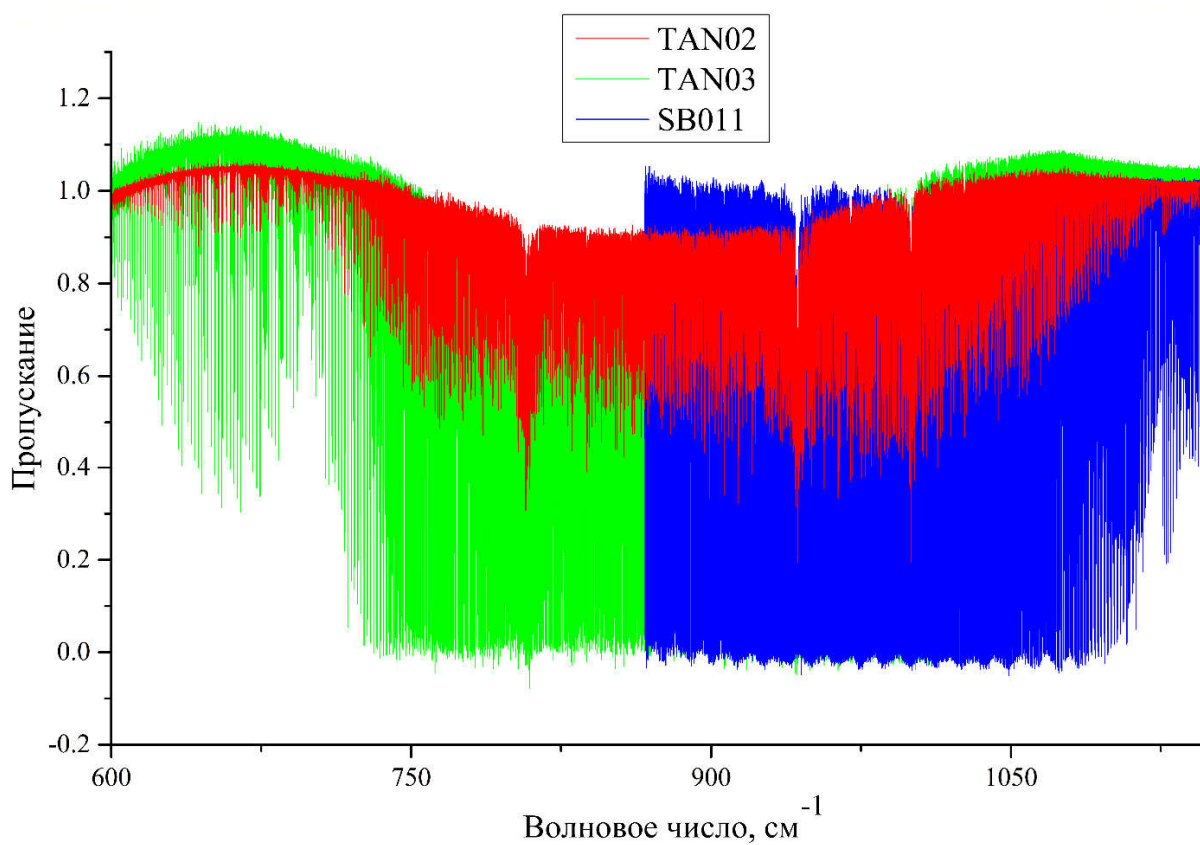


Рисунок 8 – Обзорный спектр высокого разрешения молекулы C_2H_3D в диапазоне $600 - 1250 \text{ см}^{-1}$ для спектров в которых производилась идентификация переходов

4.2. Идентификация переходов спектра.

В результате анализа 19 000 разрешенных и запрещенных переходов были отнесены к исследуемым колебательно-вращательным полосам поглощения ν_4 , ν_6 , ν_7 , ν_8 , ν_{10} . Детальная информация о максимальных значениях квантовых чисел и количестве переходов, найденных для каждой полосы представлена в таблице 4.

Таблица 4 – Статистическая информация по проинтерпретированным полосам молекулы C_2H_3D .

| | ($\nu_4=1$) | ($\nu_6=1$) | ($\nu_7=1$) | ($\nu_8=1$) | ($\nu_{10}=1$) |
|---------------------|---------------|---------------|---------------|---------------|------------------|
| J^{max}/K_a^{max} | 37/14 | 32/14 | 36/14 | 35/14 | 31/14 |
| Число переходов | 3912 | 3971 | 3634 | 3765 | 3688 |

4.3. Дополнение данных из анализа новых переходов.

Спектр, указанный в таблице 3 как «SB011» снят при высоком давлении и большой длине оптического пути, что означает существенное повышение интенсивностей переходов в спектре относительно интенсивностей в спектрах «T03» и «T02» (таблица 3). Чтобы полученную информацию можно было бы использовать, решая задачу моделирования спектра, необходимо привести в соответствие положения линий (с погрешностью, не превышающей экспериментальную неопределенность положения линии) в разных экспериментальных сериях. Для этого случайным образом было выбрано 80 переходов, проинтерпретированных в спектрах «SB011» и «T02» и затем посчитана средняя величина аддитивного сдвига одного спектра относительно другого. В результате проведенной работы данные по интерпретации были дополнены, полную статистическую информацию можно найти в таблице 4.

4.4. Анализ системы взаимодействующих состояний ($\nu_4 = 1$), ($\nu_6 = 1$), ($\nu_7 = 1$), ($\nu_8 = 1$), ($\nu_{10} = 1$)

Набор спектроскопических параметров (Таблица 5) полученный из решения обратной спектроскопической задачи воспроизводит данные исходного эксперимента с точностью до погрешности эксперимента ($d_{rms} = 1,5 \cdot 10^{-4} \text{ см}^{-1}$). При моделировании экспериментального спектра методом наименьших квадратов использовались параметры резонансного взаимодействия типа Кориолиса $C_{\alpha}^{\nu\nu'} = 2B_{\alpha}\zeta_{\alpha}^{\nu\nu'}$, которые не варьировались (Таблица 6). Эти параметры были рассчитаны на основании теории изотопозамещения (раздел 2.4). Параметры взаимодействия типа Ферми были получены в ходе решения обратной задачи (Таблица 7).

Таблица 5 - Параметры резонансного взаимодействия Кориолиса

| α | ν | ν' | $C, \text{ см}^{-1}$ | α | ν | ν' | $C, \text{ см}^{-1}$ |
|----------|-------|--------|----------------------|----------|-------|--------|----------------------|
| x | 10 | 8 | -.2945 | x | 6 | 7 | -.2226 |
| z | 10 | 7 | .2622 | z | 6 | 7 | .1740 |
| x | 10 | 7 | -.9358 | z | 6 | 8 | -.2985 |
| z | 10 | 8 | .2102 | x | 6 | 8 | .1208 |
| z | 10 | 4 | .1560 | z | 6 | 4 | -.1129 |
| x | 10 | 4 | .1097 | x | 6 | 4 | -.6790 |

Таблица 6 – Параметры диагонального блока матрицы эффективного гамильтониана молекулы $\text{C}_2\text{H}_3\text{D}$

| Параметр | Основное состояние [Б6] | ($\nu_4 = 1$) | ($\nu_6 = 1$) | ($\nu_7 = 1$) | ($\nu_8 = 1$) | ($\nu_{10} = 1$) |
|--------------------------|-------------------------|-----------------|-----------------|-----------------|-----------------|--------------------|
| E | | 1000,0400(2) | 1125,2760(3) | 806,4714(4) | 943,5032(2) | 732,1423(5) |
| A | 4.0058896 | 3,9445(2) | 4,1038(3) | 3,9698(1) | 3,9307(4) | 4,018(2) |
| B | 0.9163247 | 0,913977(3) | 0,921897(5) | 0,9141(6) | 0,91132(3) | 0,9099(3) |
| C | 0.7437730 | 0,744283(4) | 0,741015(2) | 0,744875(3) | 0,744650(5) | 0,742305(5) |
| $\Delta_K \cdot 10^4$ | 0,7069 | 0,526(2) | 0,157(2) | 0,25(3) | 0,10(2) | 0,15(5) |
| $\Delta_{JK} \cdot 10^5$ | 0,6023 | 0,8033(4) | 0,4204(3) | 0,74487(1) | 0,4463(4) | 0,75(4) |

| | | | | | | |
|------------------------|---------|----------|----------|----------|-----------|----------|
| $\Delta_J \cdot 10^5$ | 0,12941 | 0,104(1) | 0,120(5) | 0,704(1) | 0,1253(4) | 0,131(2) |
| $\delta_J \cdot 10^6$ | 0,2839 | 0,2839 | 0,2839 | 0,2839 | 0,2839 | 0,2839 |
| $\delta_K \cdot 10^5$ | 0,789 | 0,789 | 0,789 | 0,789 | 0,789 | 0,789 |
| $H_J \cdot 10^{11}$ | 0,21 | 0,21 | 0,21 | 0,21 | 0,21 | 0,21 |
| $H_{JK} \cdot 10^{10}$ | 0,58 | 0,58 | 0,58 | 0,58 | 0,58 | 0,58 |
| $H_{KJ} \cdot 10^9$ | -0,53 | -0,53 | -0,53 | -0,53 | -0,53 | -0,53 |
| $H_K \cdot 10^8$ | 0,7 | 0,7 | 0,7 | 0,7 | 0,7 | 0,7 |

Таблица 7 - Параметры взаимодействия Ферми-типа

| Параметр | Значение, см^{-1} |
|-----------------------|------------------------------|
| $(v_4/v_8)F_{KKJ}$ | $0.11128(01) \times 10^{-2}$ |
| $(v_4/v_8)F_{xyK}$ | $0.1745(48) \times 10^{-4}$ |
| $(v_6/v_{10})F_{xyK}$ | $-0.5137(22) \times 10^{-2}$ |
| $(v_6/v_{10})F_{xyJ}$ | $0.1892(53) \times 10^{-3}$ |

4.5. Анализ интенсивностей линий полос v_4 , v_6 , v_7 , v_8 , v_{10}

Для получения экспериментальных интенсивностей спектра проводилась аппроксимация линий контуром Армана-Трана (Рисунок 9). Все 44 интегральные значения получены из спектра SB003. При моделировании интенсивностей использовалась система колебательно-вращательных уровней молекулы, полученная при интерпретации спектра и решении обратной спектроскопической задачи. Экспериментальные интенсивности воспроизводятся с точностью лучше 5%. Рассчитанные параметры эффективного оператора дипольного момента можно найти в таблице 8.

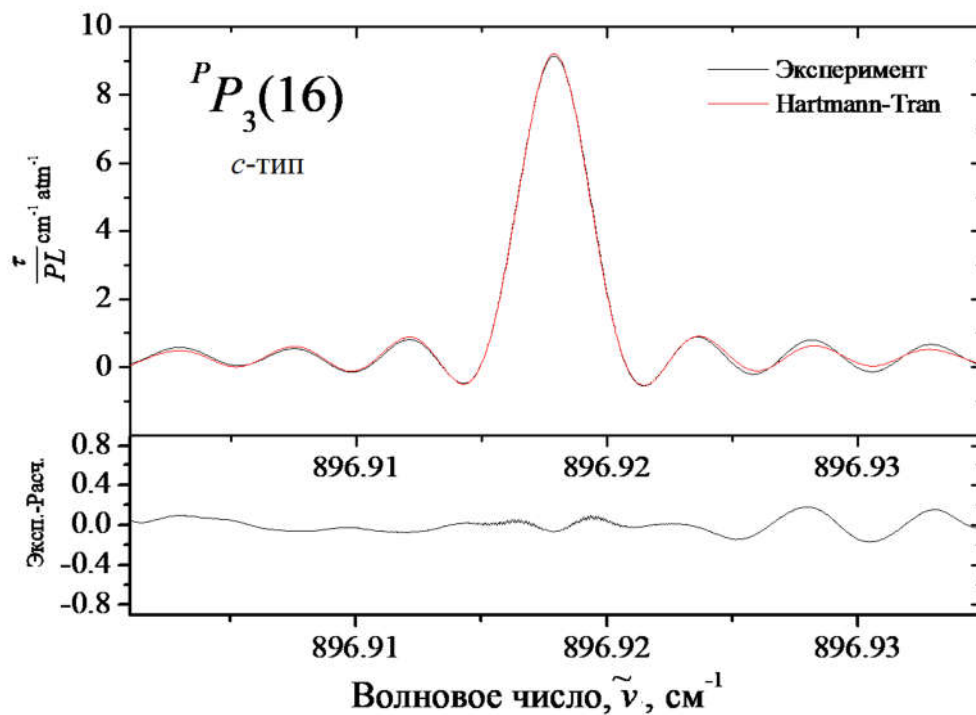


Рисунок 9 - Аппроксимация линии поглощения контуром Армана-Трана,

$$\frac{\tau}{PL} = \frac{k_{\sigma}}{P}$$

Таблица 8 - Параметры эффективного дипольного момента

| Параметр | Значение, Дебай |
|--------------------------|-----------------|
| $\nu^{10} \mu \times 10$ | 0,931(86) |
| $\nu^6 \mu \times 10$ | 0,604(84) |
| $\nu^7 \mu$ | 0,4977(32) |
| $\nu^8 \mu$ | 0,4828(30) |
| $\nu^4 \mu$ | 0,3033(44) |

5. Социальная ответственность

В данной работе проводится моделирование ИК-спектра поглощения молекулы C_2H_3D в области $600-1250\text{ см}^{-1}$.

Результатом исследования является идентификация линий экспериментального спектра, а также набор спектроскопических параметров модели спектра поглощения молекулы C_2H_3D . 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.

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

5.1. Правовые и организационные вопросы обеспечения безопасности.

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

Режим рабочего времени, защиту персональных данных работника, оплату и нормирование труда регулирует *Трудовой кодекс РФ*, а также *Конституция РФ*.

Согласно Трудовому кодексу нормальная продолжительность рабочего времени не может превышать 40 часов в неделю. Режим рабочего времени должен предусматривать продолжительность рабочей недели (пятидневная с двумя выходными днями, шестидневная с одним выходным днем, рабочая неделя с предоставлением выходных дней по скользящему графику, неполная рабочая неделя), работу с ненормированным рабочим днем для отдельных категорий работников, продолжительность ежедневной работы (смены), в том числе неполного рабочего дня (смены), время начала и окончания работы, время перерывов в работе, число смен в сутки, чередование рабочих и

нерабочих дней, которые устанавливаются правилами внутреннего трудового распорядка в соответствии с трудовым законодательством и иными нормативными правовыми актами, содержащими нормы трудового права, коллективным договором, соглашениями, а для работников, режим рабочего времени которых отличается от общих правил, установленных у данного работодателя, - трудовым договором.

Необходимо проводить обязательные предварительные (при поступлении на работу) и периодические медицинские осмотры (обследования) работников. Во избежание несчастных случаев, следует проводить обучение и проверять знания работников. К самостоятельной работе допускаются лица прошедшие медицинское освидетельствование, курсовое обучения по теоретическим знаниям и практическим навыкам в работе в объёме программы, аттестацию квалификационной комиссии и инструктаж по охране труда на рабочем месте. Первичный инструктаж рабочий получает на рабочем месте до начала производственной деятельности.

Согласно *Федеральному закону "О персональных данных" от 27.07.2006 N 152-ФЗ* персональными данными является любая информация, относящаяся к определенному или определяемому на основании такой информации физическому лицу (субъекту персональных данных). Согласно Трудовому кодексу обработка персональных данных работника может осуществляться исключительно в целях обеспечения соблюдения законов и иных нормативных правовых актов, содействия работникам в трудоустройстве, получении образования и продвижении по службе, обеспечения личной безопасности работников, контроля количества и качества выполняемой работы и обеспечения сохранности имущества.

Оклад – определяется предприятием (*Положением об оплате труда*). В ТПУ оклады распределены в соответствии с занимаемыми должностями, например, ассистент, ст. преподаватель, доцент, профессор. Базовый оклад определяется исходя из размеров окладов, определенных штатным

расписанием предприятия. Размер окладов ППС и НС ТПУ представлен на корпоративном портале ТПУ. В ходе данных исследований месячный оклад представлял из себя стипендию студента в размере 2477,8 руб.

Компенсация за вредные условия труда не предусмотрена, согласно *Федеральному закону от 28.12.2013 N 426-ФЗ (ред. от 27.12.2018) "О специальной оценке условий труда"* условия труда являются допустимыми.

В соответствии с *Федеральным законом от 24.07.1998 № 125-ФЗ «Об обязательном социальном страховании от несчастных случаев на производстве и профессиональных заболеваний»* обязательному социальному страхованию подлежат все лица, выполняющие работу в организациях на основании трудовых договоров, а также физические лица, выполняющие работу на основании гражданско-правового договора, если в соответствии с этим договором страхователь (организация) обязан уплачивать страховщику (ФСС) страховые взносы. Все страхователи (предприятия, организации) обязаны перечислять страховщику (ФСС) страховые взносы, которые определены на основании страховых тарифов к фонду оплаты труда предприятия и устанавливаются федеральными законами по видам экономической деятельности. Из этих средств ФСС возмещает работнику, получившему повреждение здоровья на производстве, его утраченный заработок (доход), а также связанные с этим дополнительные расходы. В случае смерти пострадавшего указанные пособия получают определенные члены его семьи и лица, состоявшие у него на иждивении. Условия страховых выплат устанавливаются федеральными законами и, как правило, корректируются на каждый очередной финансовый год.

5.1.2. Организационные мероприятия при компоновке рабочей зоны исследователя.

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

продуктивность труда. Площадь рабочего места должна быть такой чтобы работник не делал лишних движений и не чувствовал неудобства во время работы. Важно иметь также возможность изменить рабочую позу, то положение корпуса, рук, ног. Однако целесообразно исключить или минимизировать все физиологических неестественные и неудобные положения тела.

Эргономические требования и планировку рабочего места регулируют следующие документы:

1. ГОСТ 12.2.032-78 Система стандартов безопасности труда (ССБТ). Рабочее место при выполнении работ сидя. Общие эргономические требования.

2. СанПиН 2.2.2/2.4.1340-03 "Гигиенические требования к персональным электронно-вычислительным машинам и организации работы" (с изменениями на 21 июня 2016 года).

3. ПНД Ф 12.13.1-03 Методические рекомендации. Техника безопасности при работе в аналитических лабораториях (общие положения).

4. ГОСТ Р ИСО 6385-2016 Эргономика. Применение эргономических принципов при проектировании производственных систем.

5. ГОСТ Р 50923-96. Дисплеи. Рабочее место оператора. Общие эргономические требования и требования к производственной среде. Методы измерения.

5.2. Производственная безопасность. Анализ вредных и опасных факторов, которые могут возникнуть на рабочем месте при проведении исследований. Обоснование мероприятий по защите исследователя от действия опасных и вредных факторов.

В лаборатории, где расположены рабочие места за персональными компьютерами могут быть следующие вредные факторы.

Таблица 1 - Возможные опасные и вредные факторы

| Факторы (ГОСТ 12.0.003-2015) | Проведение работ | Нормативные документы |
|--|---------------------|--|
| 1.Отклонение показателей микроклимата | + | СН 245-71, ГОСТ 12.11.005-88 |
| 2. Превышение уровня шума | + | ГОСТ 12.1.003-83, СН 2.2.4/2.1.8.562-96 |
| 3.Отсутствие или недостаток естественного света | + | СанПиН 2.2.1/2.1.1.1278-03, СНиП 23-05-95, СИиП 23-05-95 |
| 4.Недостаточная освещенность рабочей зоны | + | |
| 5.Повышенное значение напряжения в электрической цепи, замыкание которой может произойти через тело человека | + | ГОСТ 12.1.009 – 2009, ГОСТ 12.1.030 – 81, ГОСТ 12.1.038-82 |

5.2.1. Отклонение показателей микроклимата

Требования, предъявленные к воздуху, т.е. оптимальные и допустимые значения показателей микроклимата в производственных помещениях для работ разной категории тяжести и в зависимости от периода года, представлены в санитарных нормах проектирования промышленных предприятий СН 245-71 и ГОСТ 12.11.005-88 ССБТ «Общие санитарно-технические требования к воздуху рабочей зоны». В таблице 5 представлены оптимальные и допустимые параметры рабочей зоны для конкретной категории работ - 2а, т.е. работы, связанные с постоянной ходьбой, выполняемые стоя или сидя, но не требующие перемещения тяжестей.

Таблица 2 – Оптимальные и допустимые параметры для рабочей зоны

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

| | | | | | | | | | |
|-------|-------|----|----|----|----|-------|-------|-----|---------|
| Тепл. | 23-25 | 23 | 27 | 20 | 18 | 40-60 | 15-75 | 0,3 | 0,2-0,4 |
|-------|-------|----|----|----|----|-------|-------|-----|---------|

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

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

5.2.2. Превышение уровня шума

Для определения допустимого уровня шума на рабочих местах используется ГОСТ 12.1.003-83. ССБТ «Шум. Общие требования безопасности», СН 2.2.4/2.1.8.562-96 «Шум на рабочих местах, в помещениях жилых, общественных зданий и на территории жилой застройки». Согласно ГОСТ 12.1.003 - 83, нормируемой шумовой характеристикой рабочих мест при шуме являются уровни звуковых давлений в децибелах в октановых полосах. В таблице 6 приведены допустимые уровни звукового давления на рабочем месте.

Таблица 3 - Допустимы уровни звукового давления на рабочем месте

| Вид деятельности | Частота, Гц | | | | | | | |
|------------------|--------------------------------|-----|-----|-----|------|------|------|------|
| | Уровень звукового давления, дБ | | | | | | | |
| | 62 | 125 | 250 | 500 | 1000 | 2000 | 4000 | 8000 |
| | | | | | | | | |

| | | | | | | | | |
|---|----|----|----|----|----|----|----|----|
| Научная деятельность, проектирование | 71 | 61 | 54 | 49 | 45 | 42 | 40 | 38 |
|---|----|----|----|----|----|----|----|----|

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

Для защита лаборатории от воздействия шума целесообразно применить в качестве средства коллективной защиты (СКЗ) рациональную планировку предприятий и производственных помещений. При проектировании ограждающих конструкций, предназначенных для защиты от шума следует принимать наиболее эффективные по изоляции воздушного шума конструкции – *однослойные с пустотами или из бетонов на пористых заполнителях и ячеистых бетонов, или однослойные конструкции с тонкой облицовкой толщиной не более 1,5 см (сухая штукатурка и другие подобные материалы) с воздушным промежутком не менее 4 см.*

5.2.3. Недостаток естественного света, освещенности рабочей зоны

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

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

допустимая освещенность, согласно действующим санитарным нормам и правилам СНиП 23-05-95.

«Гигиенические требования к естественному, искусственному и совмещенному освещению жилых и общественных зданий. СанПиН 2.2.1/2.1.1.1278-03» определяет наименьшую освещенность рабочих поверхностей в производственных помещениях в зависимости от вида производимой деятельности. В соответствии со СНиП 23-05-95 все зрительные работы делятся на 8 разрядов и 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 со СНиП 23-05-95 для четвертого разряда зрительной работы приведены в таблице 7. На рабочей поверхности должны отсутствовать резкие тени, которые создают неравномерное распределение поверхностей с различной яркостью в поле зрения, искажает размеры и формы объектов различия, в результате повышается утомляемость и снижается производительность труда.

Таблица 4 – Нормирование значения освещенности на рабочих местах производственных помещений при искусственном освещении

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

| | | | | | | |
|--|--|--|---------|---------|-----|-----|
| | | | Большой | Средний | 300 | 150 |
|--|--|--|---------|---------|-----|-----|

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

Расчёт общего равномерного искусственного освещения горизонтальной рабочей поверхности выполняется методом коэффициента светового потока, учитывающим световой поток, отражённый от потолка и стен. Длина помещения $A = 5,3$ м, ширина $B = 4,7$ м, высота = 3,5 м. Высота рабочей поверхности над полом $h_p = 0,8$ м. Согласно СНиП 23-05-95 необходимо создать освещенность не ниже 150 лк, в соответствии с разрядом зрительной работы.

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

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

Интегральным критерием оптимальности расположения светильников является величина λ , которая для люминесцентных светильников с защитной решёткой ОДОР лежит в диапазоне 1,1-1,3. Возьмем минимальное значение $\lambda = 1,1$ и расстояние светильников от перекрытия (свес) $h_c = 0,3$ м.

Высота светильника над рабочей поверхностью определяется по формуле: $h = H - h_{pp} - h_c = 2,4$ м.

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

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

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

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

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

На рисунке 7 изображен план помещения и размещения светильников с люминесцентными лампами.

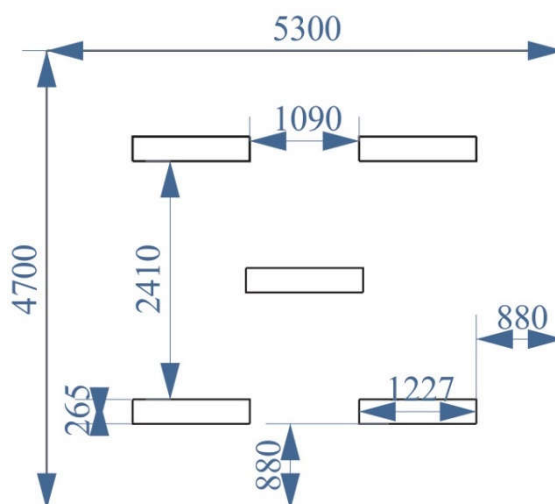


Рисунок 1 – План помещения и размещения светильников с люминесцентными лампами

Индекс помещения определяется по формуле:

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

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

Потребный световой поток группы люминесцентных ламп светильника определяется по формуле:

$$\Phi_{\Pi} = \frac{EABK_3Z}{N\eta} = 2836 \text{ лм.}$$

Делаем проверку выполнения условия:

$$-10\% \leq \frac{\Phi_{ЛД} - \Phi_{\Pi}}{\Phi_{ЛД}} * 100\% \leq 20\%,$$

$$\frac{\Phi_{ЛД} - \Phi_{\Pi}}{\Phi_{ЛД}} * 100\% = -9,07\%.$$

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

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

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. Использование этих средств позволяет обеспечить защиту людей от прикосновения к токоведущим частям, от опасности перехода напряжения к металлическим нетокведущим частям, от шагового напряжения.

Преднамеренное соединение с землей металлических нетокведущих частей, которые могут оказываться под напряжением, называют защитным заземлением (ГОСТ 12.1.009 - 2009). Чтобы защитить человека от поражения

электрическим током, защитное заземление должно удовлетворять ряду требований, изложенных в ПУЭ и ГОСТ 12.1.030 – 81 “ССВТ.

Требования электробезопасности зависят от напряжения электроустановок и мощности источника питания. К средствам защиты относятся: электрическая изоляция токоведущих частей, защитное заземление и отключение, электрическое разделение сети. Использование этих средств позволяет обеспечить защиту людей от прикосновения к токоведущим частям, от опасности перехода напряжения к металлическим нетоковедущим частям, от шагового напряжения.

Особое внимание необходимо уделять защите от статического электричества. Для его снижения применяют специальное покрытие полов, которое выполнено из линолеума антистатического поливинилхлоридного. К другому методу защиты можно отнести нейтрализацию зарядов ионизированным воздухом.

Рабочая среда (сырость, высокая температура, токопроводящая пыль, едкие пары и газы, токопроводящие полы и т.д.) могут оказывать в той или иной степени оказывать воздействие - усиливать или уменьшать опасность поражения током. При проектировании способов и средств защиты от поражения электрическим током руководствуются безопасными значениями тока при данной длительности и пути его прохождения через тело в соответствии с ГОСТ 12.1.038-82. При длительном воздействии допустимый безопасный ток принят в $0,1 \text{ А}$, $U < 36 \text{ В}$, $R_{\text{зазем}} = 4 \text{ Ом}$.

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.

5.3. Экологическая безопасность. Анализ влияния процесса исследования на окружающую среду. Обоснование мероприятий по защите окружающей среды.

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

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

Макулатура (черновики, отработанная бумага и т.п.) будет собираться в размерах более одного килограмма и утилизироваться по адресу 634024, г. Томск, ул. Трудовая, 11 компанией ООО «Пирс». Предварительно макулатура должна быть отчищена от посторонних предметов, таких как, например, скрепки.

Компания ООО «Экоорг» осуществляет утилизацию отработанных картриджей от принтеров практически всех компаний. Предварительная обработка картриджей бывших в употреблении не требуется.

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

5.4. Безопасность в чрезвычайных ситуациях. Анализ вероятных ЧС, которые могут возникнуть на рабочем месте при проведении исследований. Обоснование мероприятий по предотвращению ЧС и разработка порядка действия в случае возникновения ЧС.

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

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

Возможно несанкционированное проникновение на рабочее место. Угрозы могут быть как ложным, так и действительными, поэтому необходимы меры предосторожности по этому поводу. В качестве мер безопасности приняты следующие действия - установка системы видеонаблюдения и круглосуточной охраны, сохранение конфиденциальной информации о охранной системе. Для защиты от несанкционированного проникновения также должна быть введена пропускная система. Необходимо так же

проводить информирование должностных лиц и тренировки по отработке действий на случай экстренной эвакуации. Помещение лаборатории закрывается на замок, ведется охрана вахтовым методом. В помещении установлена сигнализация.

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.

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

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

- а) использование только исправного оборудования;

б) проведение периодических инструктажей по пожарной безопасности;

в) отключение электрооборудования, освещения и электропитания при предполагаемом отсутствии обслуживающего персонала или по окончании работ;

г) курение в строго отведенном месте;

д) содержание путей и проходов для эвакуации людей в свободном состоянии.

Здание должно соответствовать требованиям пожарной безопасности, а именно, наличие охранно-пожарной сигнализации, плана эвакуации, порошковых или углекислотных огнетушителей с поверенным клеймом, табличек с указанием направления к запасному (эвакуационному) выходу (рисунок 2).

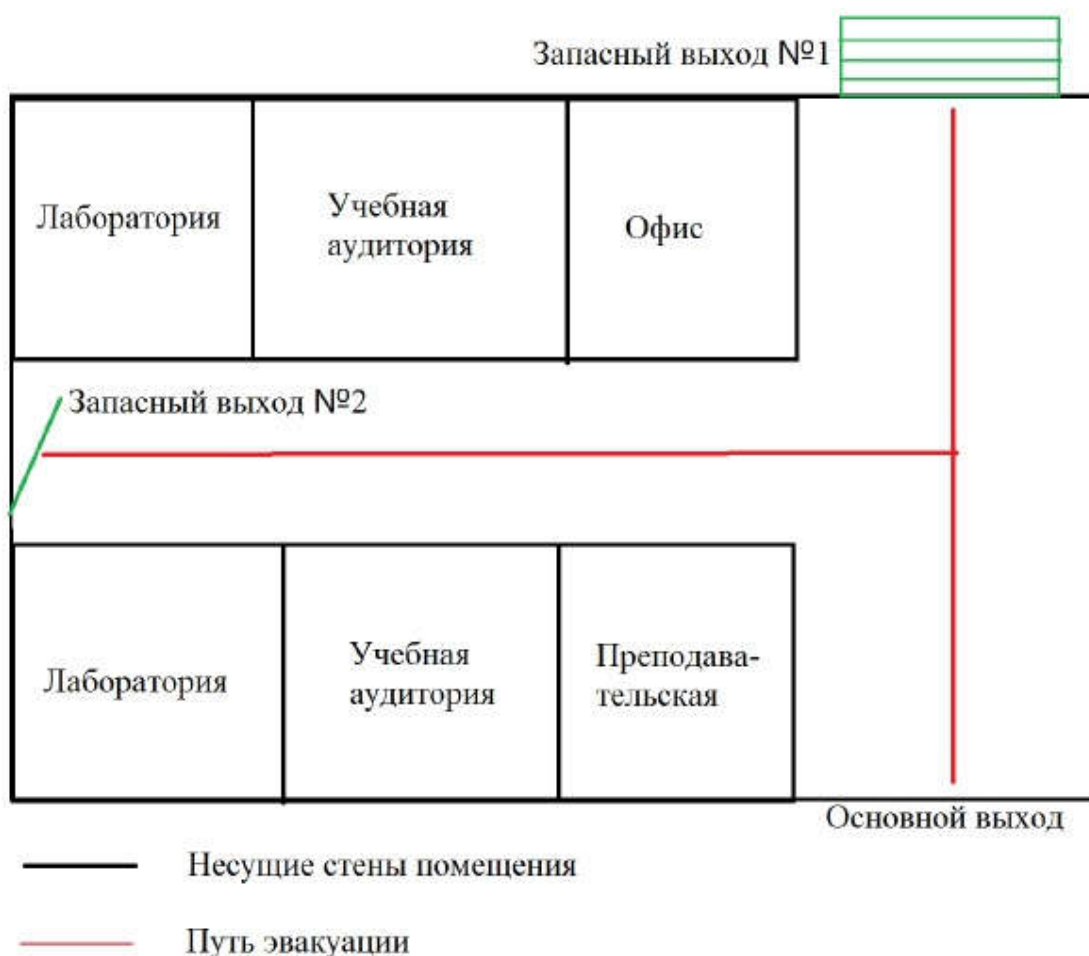


Рисунок 2 – План эвакуации из лаборатории

Выводы по разделу

В разделе социальной ответственности данной работы перечислены законодательные и нормативные документы для обеспечения организации труда, производственной, экологической безопасности, а также безопасности в чрезвычайных ситуациях. Анализ вредных и опасных факторов процесса исследования показал, что отклонения показателей микроклимата, шума, освещенности, напряжения от допустимых значений не происходит вследствие применения активных мер по повышению производственной безопасности. Персоналом лаборатории принимаются следующие меры по сохранению окружающей среды: сортировка мусора и последующая утилизация. Также рассмотрены чрезвычайные ситуации и методы их предотвращения: сильные морозы, несанкционированное проникновение на рабочее место, пожар.

Список использованных источников

1. Трудовой кодекс РФ.
2. Конституция РФ.
3. Федеральный закон "О персональных данных" от 27.07.2006 N 152-ФЗ.
4. Федеральный закон от 28.12.2013 N 426-ФЗ (ред. от 27.12.2018) "О специальной оценке условий труда".
5. Федеральный закон от 24.07.1998 № 125-ФЗ «Об обязательном социальном страховании от несчастных случаев на производстве и профессиональных заболеваний».
6. ГОСТ 12.2.032-78 Система стандартов безопасности труда (ССБТ). Рабочее место при выполнении работ сидя. Общие эргономические требования.

7. СанПиН 2.2.2/2.4.1340-03 "Гигиенические требования к персональным электронно-вычислительным машинам и организации работы" (с изменениями на 21 июня 2016 года).
8. ПНД Ф 12.13.1-03 Методические рекомендации. Техника безопасности при работе в аналитических лабораториях (общие положения).
9. ГОСТ Р ИСО 6385-2016 Эргономика. Применение эргономических принципов при проектировании производственных систем.
10. ГОСТ Р 50923-96. Дисплеи. Рабочее место оператора. Общие эргономические требования и требования к производственной среде. Методы измерения.
11. ГОСТ 12.0.003-2015. Опасные и вредные производственные факторы. Классификация.
12. СН 245-71. Санитарные нормы проектирования промышленных предприятий.
13. ГОСТ 12.11.005-88. Общие санитарно-технические требования к воздуху рабочей зоны.
14. ГОСТ 12.1.003-83. Шум. Общие требования безопасности.
15. СН 2.2.4/2.1.8.562-96. Шум на рабочих местах, в помещениях жилых, общественных зданий и на территории жилой застройки»
16. СНиП 23-05-95. Естественное и искусственное освещение.
17. ГОСТ 12.1.009 - 2009. Система стандартов безопасности труда. Электробезопасность. Термины и определения
18. ГОСТ 12.1.030 - 81. Электробезопасность. Защитное заземление. Зануление.
19. ГОСТ 12.1.038-82 (2001). Электробезопасность. Предельно допустимые значения прикосновения и токов.
20. НПБ 105-03. Определение категорий помещений, зданий и наружных установок по взрывопожарной и пожарной опасности.
21. СНиП 21-01-97. Пожарная безопасность зданий и сооружений.

6. Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение

6.1. Предпроектный анализ

6.1.1. Потенциальные потребители результатов исследования

Результатом исследования является идентификация линий экспериментального спектра, а также набор спектроскопических параметров модели спектра поглощения молекулы C_2H_3D . Полученные данные будут использоваться для пополнения как российских (ИВС Спектроскопия атмосферных газов), так и международных баз данных (HITRAN, GEISA). Последние, в свою очередь, широко используются для решения многочисленных как теоретических, так и прикладных задач астрофизики, планетологии, атмосферной оптики, и т.д.

6.1.2. Технология QuaD

В соответствии с технологией QuaD каждый показатель оценивается экспертным путем по стобальной шкале, где 1 – наиболее слабая позиция, а 100 – наиболее сильная. Веса показателей, определяемые экспертным путем, в сумме должны составлять 1.

Таблица 1 – Оценочная карта для сравнения конкурентных технических решений (разработок)

| Критерии оценки | Вес критерия | Баллы | Максимальный балл | Относительное значение (3/4) | Средневзвешенное значение (3*2) |
|--|---------------------|--------------|--------------------------|-------------------------------------|--|
| 1 | 2 | 3 | 4 | 5 | |
| Показатели оценки качества разработки | | | | | |
| 1. Распространенность модели | 0,1 | 90 | 100 | 0,9 | 9 |
| 2. Надежность | 0,1 | 80 | 100 | 0,8 | 8 |
| 3. Унифицированность | 0,1 | 95 | 100 | 0,95 | 9,5 |

| | | | | | |
|--|------|-----|-----|------|-------|
| 4. Функциональная мощность (предоставляемые возможности) | 0,15 | 85 | 100 | 0,85 | 12,75 |
| 5. Простота доступа к результатам в международном сообществе | 0,05 | 90 | 100 | 0,9 | 4,5 |
| Показатели оценки коммерческого потенциала разработки | | | | | |
| 1. Конкурентоспособность продукта | 0,15 | 80 | 100 | 0,8 | 12 |
| 2. Уровень проникновения на рынок | 0,2 | 95 | 100 | 0,95 | 19 |
| 3. Перспективность рынка | 0,15 | 75 | 100 | 0,75 | 11,25 |
| Итого | 1 | 690 | 100 | 6,9 | 86 |

Оценка качества и перспективности по технологии определяется по формуле:

$$P_{cp} = \sum B_i B_i,$$

где P_{cp} - средневзвешенное значение показателя качества и перспективности научной разработки;

B_i - вес показателя (в долях единицы);

B_i - средневзвешенное значение i -го показателя.

По результатам оценки качества и перспективности можно сделать вывод о том, что разработка является перспективной (86 балла).

6.1.3. Диаграмма Исикавы

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

На рисунке 1 рассмотрена проблема несовпадения смоделированного спектра с экспериментальным.

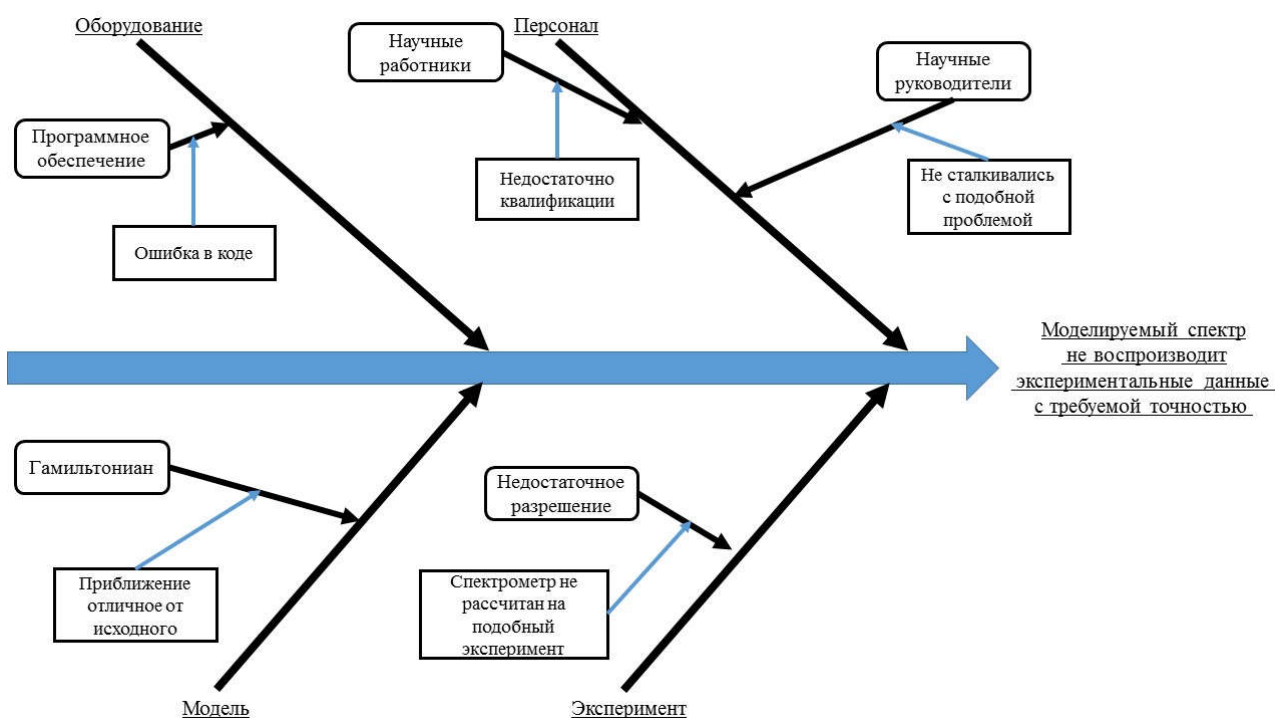


Рисунок 1 – Диаграмма Исикавы для проблемы возникающей при моделировании спектров

6.1.4. SWOT-анализ

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

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 2.

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 3) 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: В1С1С2С3; В2С1С2С3. 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».

Таблица 2 - Матрица SWOT

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

| | | |
|--|--|--|
| В1. Интерес к подобным исследованиям со стороны иностранных партнеров В2. Использование научно-исследовательских достижений ТПУ В3. Возможность улучшения программного обеспечения | | |
| Угрозы: | | |
| У1. Отсутствие спроса на новые технологии У2. Развитая конкуренция с другими научными центрами У3. Несвоевременное финансовое обеспечение научного исследования со стороны государства | | |

Таблица 3 - Интерактивная матрица проекта

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

Третий этап включает в себя итоговую матрицу SWOT-анализа (таблица 4). 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 4 - SWOT-анализ

| | | |
|--|--|---|
| | <p>Сильные стороны научно-исследовательского проекта:</p> <p>С1. Моделирование с помощью МНК.</p> <p>С2. Использование собственного программного обеспечения.</p> <p>С3. Уникальная, но широко распространенная модель.</p> <p>С4. Результаты применимы в любом исследовании атмосферы.</p> <p>С5. Функциональная мощность.</p> | <p>Слабые стороны научно-исследовательского проекта:</p> <p>Сл1. Длительный период некоторых частей исследования.</p> <p>Сл2. Программное обеспечение с закрытым исходным кодом</p> <p>Сл3. Отсутствие доступа к коллективным исследованиям</p> <p>Сл4. Большой срок поставки эксперим. данных</p> |
| <p>Возможности:</p> <p>В1. Интерес к подобным исследованиям со стороны иностранных партнеров</p> <p>В2. Использование научно-исследовательские достижения ТПУ</p> <p>В3. Возможность улучшения программного обеспечения</p> | <p>Интерес к подобным исследованиям со стороны иностранных партнеров можно поддержать проводя моделирование с помощью широко известных методов и моделей, а улучшение программного обеспечения позволит опередить конкурирующие лаборатории.</p> | <p>Научно-исследовательские достижения ТПУ могут быть использованы при отсутствии необходимых экспериментальных данных и недостатке финансирования.</p> <p>Интерес зарубежных партнеров предоставляет доступ к коллективным исследования и доп. финансированию</p> |

| | | |
|--|---|--|
| <p align="center">Угрозы:</p> <p>У1. Отсутствие спроса на новые технологии</p> <p>У2. Развитая конкуренция с другими научными центрами</p> <p>У3. Несвоевременное финансовое обеспечение научного исследования со стороны государства</p> | <p>Аналогичное программное обеспечение может быть разработано в конкурирующих лабораториях, спрос на улучшение и разработку новых моделей может не возникнуть в связи с унифицированностью используемой модели.</p> | <p>Отсутствие необходимых экспериментальных данных и длительность периода исследований может привести к отсутствию спроса на новые технологии.</p> |
|--|---|--|

6.2. Инициация проекта

6.2.1. Цели и результат проекта.

Цель:

Анализ спектра поглощения высокого разрешения молекулы C_2H_3D в области $600-1250\text{ см}^{-1}$

Задачи:

1. Идентификация переходов в спектре молекулы C_2H_3D в области $600-1250\text{ см}^{-1}$;
2. Определение спектроскопических параметров эффективного гамильтониана, моделирующего энергии переходов в спектре.
3. Определение параметров оператора эффективного дипольного момента моделирующего интенсивности в спектре.

Таблица 5 - Заинтересованные стороны проекта

| Заинтересованные стороны проекта | Ожидания заинтересованных сторон |
|----------------------------------|---|
| ТПУ | Публикация результатов, пополнение спектроскопических баз данных таких как Информационно- |

| | |
|--|--|
| | <p>вычислительная система "Спектроскопия атмосферных газов", HITRAN, GEISA</p> |
|--|--|

Таблица 6 - Цели и результат проекта

| | |
|---|---|
| Цели проекта: | Анализ спектра поглощения высокого разрешения молекулы C ₂ H ₃ D в области 600-1250 см ⁻¹ |
| Ожидаемые результаты проекта: | Идентификация переходов в спектре молекулы C ₂ H ₃ D в области 600-1250 см ⁻¹ ; Определение спектроскопических параметров эффективного гамильтониана, моделирующего энергии переходов в спектре. Определение параметров оператора эффективного дипольного момента моделирующего интенсивности в спектре. |
| Критерии приемки результата проекта: | Получение спектроскопических параметров восстанавливающих исходные данные с погрешностью, не превышающей экспериментальную |
| Требования к результату проекта: | Требование: |
| | Идентификация переходов всех полос расположенных в области 600-1250 см ⁻¹ |
| | Возможность восстановления экспериментального спектра с помощью полученных параметров |

6.2.2. Организационная структура проекта.

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

Таблица 7 – Рабочая группа проекта

| № п/п | ФИО, основное место работы, должность | Роль в проекте | Функции | Трудо- затраты, час. |
|----------|---|---------------------------|---|----------------------------|
| 1 | Бехтерева Елена Сергеевна, Профессор ИШФВП ТПУ | Руководитель | Постановка задачи, контроль выполнения работ | 84 |
| 2 | Жданович Станислав Андреевич, студент гр. ОБМ71 ТПУ | Исполнитель по проекту | Анализ спектра поглощения высокого разрешения молекулы C ₂ H ₃ D в области 600-1250 см ⁻¹ | 498 |
| ИТОГО: | | | | 582 |

6.2.3 Ограничения и допущения проекта

Ограничения проекта – это все факторы, которые могут послужить ограничением степени свободы участников команды проекта, а также «границы проекта» – параметры проекта или его продукта, которые не будут реализованных в рамках данного проекта.

Таблица 8 – Ограничения проекта

| Фактор | Ограничения/ допущения |
|---|--------------------------------|
| 1. Бюджет проекта | 184854,11 руб. |
| 1.1. Источник финансирования | Государственное финансирование |
| 2. Сроки проекта: | 01.02.2019 – 14.05.2019 гг. |
| 2.1. Дата утверждения плана управления проектом | 04.02.2019 г. |
| 2.2. Дата завершения проекта | 14.05.2019 г. |

6.3. Планирование управления научно-техническим проектом

6.3.1. План проекта

Таблица 9 – Календарный план контрольных событий проекта

| № раб | Событие | Т _{раб} , раб. дн. | Дата нач. | Дата оконч. | Участники |
|----------|---|-----------------------------------|--------------|----------------|-----------|
| | | | | | |
| 1 | Составление и утверждение технического задания | 3 | 01.02.2019 | 04.02.2019 | Р, И |
| 2 | Подбор и изучение материалов по теме | 28 | 05.02.2019 | 11.03.2019 | И |
| 3 | Выбор направления исследований | 5 | 12.03.2019 | 16.03.2019 | Р, И |
| 4 | Календарное планирование работ по теме | 4 | 18.03.2019 | 21.03.2019 | Р, И |
| 5 | Проведение теоретических расчетов и обоснований | 7 | 22.03.2019 | 29.03.2019 | И |
| 6 | Построение моделей и проведение экспериментов | 20 | 30.03.2019 | 22.04.2019 | И |
| 7 | Сопоставление результатов экспериментов с теоретическими исследованиями | 4 | 23.04.2019 | 26.04.2019 | Р, И |
| 8 | Оценка эффективности полученных результатов | 5 | 27.04.2019 | 04.05.2019 | Р, И |
| 9 | Составление пояснительной записки | 7 | 05.05.2019 | 14.05.2019 | И |

Диаграмма Ганта – это тип столбчатых диаграмм (гистограмм), который используется для иллюстрации календарного плана проекта, на котором работы по теме представляются протяженными во времени отрезками, характеризующимися датами начала и окончания выполнения данных работ.

Таблица 10 – Календарный план-график проведения НИОКР по теме

| № раб | Вид работ | Исполнители | Т _{раб} , раб. 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 | 28 | | | | | | | | | | | | | | | |
| 3 | Выбор направления исследований | Р, И | 5 | | | | | | | | | | | | | | | |
| 4 | Календарное планирование работ по теме | Р, И | 4 | | | | | | | | | | | | | | | |
| 5 | Проведение теоретических расчетов и обоснований | И | 7 | | | | | | | | | | | | | | | |
| 6 | Построение моделей и проведение экспериментов | И | 20 | | | | | | | | | | | | | | | |
| 7 | Сопоставление результатов экспериментов с теоретическими исследованиями | Р, И | 4 | | | | | | | | | | | | | | | |
| 8 | Оценка эффективности полученных результатов | Р, И | 5 | | | | | | | | | | | | | | | |
| 9 | Составление пояснительной записки | И | 7 | | | | | | | | | | | | | | | |
| Р, И | И | Р – руководитель, И – Инженер | | | | | | | | | | | | | | | | |

6.3.2. Бюджет научного исследования

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

Так как все исследования теоретические и проводились на компьютерах, то необходимо учесть затраты на электроэнергию. Примерное потребление одного компьютера за сутки – 180 Ватт, плюс монитор, еще 40 Ватт, т.е. 220 Ватт (или 0.22 кВт). Весь период работы составляет 83 дня или 498 часа.

Электроэнергетические затраты за время работы над проектом можно рассчитать, как

$$Q_3 = W \cdot P \cdot t = 0,22 \cdot 498 \cdot 5,8 = 635,45 \text{ руб.}$$

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

электроэнергетические затраты компьютера за весь период работы (компьютер – 0.22 кВт), t – время работы над проектом в часах.

Итого, электроэнергетические затраты на компьютеры составляют 635,45 рублей за весь период исследовательской работы.

Основная заработная плата рассчитывается на основании отраслевой оплаты труда. Отраслевая система оплаты труда в ТПУ предполагает следующий состав заработной платы: оклад – определяется предприятием. В ТПУ оклады распределены в соответствии с занимаемыми должностями; стимулирующие выплаты – устанавливаются руководителем подразделений за эффективный труд и выполнение дополнительных обязанностей. В раздел включается основная заработная плата научных и инженерно-технических работников непосредственно участвующих в выполнении работ. Величина расходов по заработной плате определяется исходя из трудоемкости выполняемых работ и действующей системы окладов и тарифных ставок. В состав основной заработной платы включается премия, выплачиваемая 61 ежемесячно из фонда заработной платы в размере 20 –30 % от тарифа или оклада. Расчет основной заработной платы $Z_{осн}$ представлен в таблице. Полная заработная плата включает в себя основную и дополнительную (12-20 % от $Z_{осн}$):

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

Основная заработная плата рассчитывается по следующей формуле:

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

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

Среднедневная заработная плата рассчитывается по формуле:

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

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

(таблица 11).

Таблица 11 – Фонд рабочего времени

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

Руководитель – профессор

Месячный должностной оклад работника:

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

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

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

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

где $k_{доп}$ – коэффициент дополнительной заработной плат (0,1). Расчет основной и дополнительной заработной платы приведён в таблице 12.

Таблица 12 – Расчет основной и дополнительной заработной платы

| Участники | $Z_{ок}$, руб | k_p | Z_m , руб | $Z_{дн}$, руб | T_p | $Z_{осн}$, руб | $Z_{доп}$, руб |
|--------------|----------------|-------|-------------|----------------|-------|-----------------|-----------------|
| Руководитель | 47 104 | 1.3 | 61 235,2 | 2 537,2 | 14 | 35520,8 | 3552,08 |
| Инженер | 12 664 | 1.3 | 16 463,2 | 682,1 | 83 | 56614,3 | 5661,43 |
| Итого | | | | | | 92135,1 | 9213,51 |

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

Таблица 13 – Расчет затрат по статье «Спецоборудование 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 |

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

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

где $k_{внб}$ – коэффициент отчислений на уплату во внебюджетные фонды (пенсионный фонд, фонд обязательного медицинского страхования и пр.). На 2014 г. в соответствии с Федеральным законом от 24.07.2009 №212-ФЗ установлен размер страховых взносов равный 30%. На основании пункта 1 ст.58 закона №212-ФЗ для учреждений, осуществляющих образовательную и научную деятельность в 2014 году водится коэффициент – 0,271. Контрольные цифры отчислений во внебюджетные фонды представлены в таблице 14. Полный сформирование бюджет затрат научно-исследовательского проекта (таблица 16).

Таблица 14 – Отчисления во внебюджетные фонды

| Участники | Сумма, руб |
|--------------|------------|
| Руководитель | 10588,75 |

| | |
|--------------|-----------------|
| Инженер | 16876,72 |
| Итого | 27465,47 |

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

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

где $k_{\text{нр}}$ – коэффициент, учитывающий накладные расходы (равен 0,30).

Накладные расходы представлены в таблице 21.

Таблица 15 – Накладные расходы

| Участники | Сумма, руб |
|--------------|-----------------|
| Руководитель | 11721,86 |
| Инженер | 18682,72 |
| Итого | 30404,58 |

Таблица 16 – Расчет бюджета затрат

| Наименование | Сумма, руб |
|--|------------------|
| Отчисления во внебюджетные фонды | 27465,47 |
| Затраты по основной заработной плате | 92135,1 |
| Затраты по дополнительной заработной плате | 9213,51 |
| Затраты на специальное оборудование | 25000 |
| Затраты на электроэнергию | 635,45 |
| Накладные расходы | 30404,58 |
| Бюджет затрат | 184854,11 |

6.4. Реестр рисков проекта

Идентифицированные риски проекта включают в себя возможные неопределенные события, которые могут возникнуть в проекте и вызвать последствия, которые повлекут за собой нежелательные эффекты. В таблице 17 сведены возможные риски проекта

Таблица 17 – Реестр рисков проектов

| Риск | Потенциальное воздействие | Вероятность наступления (1-5) | Влияние риска (1-5) | Уровень риска | Способы смягчения риска | Условия наступления |
|--|--|-------------------------------|---------------------|---------------|--|---|
| Интерпретация не достаточно количественных результатов | Невозможность проведения необходимых исследований для научной работы | 3 | 4 | высокий | Привлечение дополнительных рабочих сил | Неправильное предсказание |
| Недостоверность полученных результатов | Низкая точность выводов обратной задачи | 3 | 4 | высокий | Тщательное проведение расчетных работ | Неправильное использование используемого программного обеспечения |

Список использованных источников

1. Кузьмина Е.А., Кузьмин А.М. Методы поиска новых идей и решений "Методы менеджмента качества" №1 2003 г.
2. Кузьмина Е.А., Кузьмин А.М. Функционально-стоимостный анализ. Экскурс в историю. "Методы менеджмента качества" №7 2002 г.
3. Основы функционально-стоимостного анализа: Учебное пособие / Под ред. М.Г. Карпунина и Б.И. Майданчика. - М.: Энергия, 1980. - 175 с.
4. Сущность методики FAST в области ФСА [Электронный ресурс] <http://humeur.ru/page/sushhnost-metodiki-fast-v-oblasti-fsa>
5. Руководство к своду знаний по управлению проектами (Руководство РМВОК), 4-е издание, 2008 г.
6. Мазур И.И., Шапиро В.Д., Ольдерогге Н.Г. Управление проектами: Учебное пособие. – М.: Омега-Л, 2004. – 664 с.
7. Попова С.Н. Управление проектами. Часть I: учебное пособие / С.Н. Попова; Томский политехнический университет. – Томск: Изд-во Томского политехнического университета, 2009. – 121 с.

8. Методические рекомендации по оценке эффективности инвестиционных проектов (вторая редакция), утверждено Министерство экономики РФ, Министерство финансов РФ № ВК 477 от 21.06.1999 г. [Электронный ресурс]. - Режим доступа . - <http://www.cfin.ru/>

Заклучение

В результате анализа спектра было проинтерпретировано порядка 19000 переходов. По теории изотопозамещения были получены параметры взаимодействия между полосами ν_4 , ν_6 , ν_7 , ν_8 , и ν_{10} , в качестве исходных использованы параметры молекулы C_2H_4 . При решении обратной спектроскопической задачи получено около 40 спектроскопических параметров, восстанавливающих исходные данные с погрешностью, не превышающей экспериментальную ($d_{rms} = 1,5 \cdot 10^{-4} \text{ см}^{-1}$). Получены параметры модели эффективного оператора дипольного момента, которые позволяют описывать соотношения интенсивностей полос, расположенных в области $600\text{-}1250 \text{ см}^{-1}$ с точностью лучше 5%.

Список публикаций

1. Конов И.А., Чертавских Ю.В., Фомченко А.Л., Аслаповская Ю.С., Жданович С.А., Зидо К. Анализ фурье-спектра высокого разрешения полосы ν_6 молекулы cis-C₂H₂D₂ // Известия высших учебных заведений. Физика. 2015;

2. Konov I.A., Chertavskikh Y.V., Fomchenko A.L., Aslapovskaya Y.S., Zhdanovich S.A., Sydow C. Analysis of The High-Resolution Fourier Spectrum of The ν_6 Band of The Cis-C₂H₂D₂ Molecule // Russian Physics Journal. - 2016 - Vol. 58 - №. 11. - p. 1587-1591.

Список используемых источников

А – Исследования и литература, подкрепляющие актуальность работы

1. Romani P. N. et al. Temporally varying ethylene emission on Jupiter // *Icarus*. – 2008. – Т. 198. – №. 2. – С. 420-434.
2. Encrenaz T. ISO observations of planetary atmospheres // *Advances in Space Research*. – 2002. – Т. 30. – №. 9. – С. 1967-1970.
3. Stern S. A. et al. The Pluto system: Initial results from its exploration by New Horizons // *Science*. – 2015. – Т. 350. – №. 6258. – С. aad1815.
4. Солодов А.А. Фурье-спектроскопия этилена в макро- и нанообъемах в ближней ИК-области: дис. ... к. ф-м наук / А.А. Солодов. – Томск, 2011 – с. 1-11.
5. Исидоров В.А. Органическая химия атмосферы / В.А. Исидоров. – Санкт-Петербург, 2001. – 352 с.
6. Pehak K. // *Folia prirodoved. Fak. UJEP. Brno*, 1973. V. 12. 101 p.
7. Elstner E. F., Konze J. R. // *Nature*. 1976. V. 263. P. 351-352
8. Ben-David A, Bashan Y., Okon Y. // *Physiol. Mol. Plant. Pathol.* 1986. V. 29. P. 305-316
9. Шкловский И. С. Звезды: их рождение, жизнь и смерть: 3-е изд., перераб.. // Шкловский И. С. - Москва «Наука», Главная редакция физико-математической литературы, 1984, 384 с.
10. Б. В. Вайнер, Ю. А. Щекинов. Происхождение дейтерия // *Успехи физических наук* – 1985 – т. 146, вып. 1 – с 144.
11. Bézard B. et al. Detection of Ethylene (C₂H₄) on Jupiter and Saturn in Non--Auroral Regions // *Bulletin of the American Astronomical Society*. – 2001. – Т. 33. – С. 1079.
12. Kostiuk T. et al. Temperature and abundances in the Jovian auroral stratosphere: 2. Ethylene as a probe of the microbar region // *Journal of Geophysical Research: Planets*. – 1993. – Т. 98. – №. E10. – С. 18823-18830.

13. Willaert F. et al. The spectrum of ethylene from microwave to submillimetre-wave //Molecular Physics. – 2006. – T. 104. – №. 2. – C. 273-292.
14. Millar T. J. Organic molecules in the interstellar medium //Astrobiology: future perspectives. – Springer, Dordrecht, 2004. – C. 17-31.
15. Satorre M. Á. et al. Densities and refractive indices of ethane and ethylene at astrophysically relevant temperatures //Icarus. – 2017. – T. 296. – C. 179-182.
16. Cernicharo J. et al. Methylpolyynes and small hydrocarbons in CRL 618 //The Astrophysical Journal Letters. – 2001. – T. 546. – №. 2. – C. L127.
17. Dolan W. et al. Satellite observations of ethylene (C₂H₄) from the Aura Tropospheric Emission Spectrometer: A scoping study //Atmospheric Environment. – 2016. – T. 141. – C. 388-393.
18. Villanueva G. L. et al. A sensitive search for organics (CH₄, CH₃OH, H₂CO, C₂H₆, C₂H₂, C₂H₄), hydroperoxyl (HO₂), nitrogen compounds (N₂O, NH₃, HCN) and chlorine species (HCl, CH₃Cl) on Mars using ground-based high-resolution infrared spectroscopy //Icarus. – 2013. – T. 223. – №. 1. – C. 11-27.
19. McKay C. P. et al. The possible origin and persistence of life on Enceladus and detection of biomarkers in the plume //Astrobiology. – 2008. – T. 8. – №. 5. – C. 909-919.
20. Robert F. Solar system deuterium/hydrogen ratio //Meteorites and the early solar system II. – 2006. – T. 943. – C. 341-351.

Б – Существующие исследования спектра C₂H₃D

1. Rothman L.S., Barbe A., Benner D.C., Brown L.R., Camy-Peyret C., Carleer M., et al. The HITRAN molecular spectroscopic database: edition of 2000 including updates through 2001 // J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transf. – 2003. – Vol. 82. – pp. 5 – 44.

2. Rothman L.S., Gordon I.E., Babikov Y., Barbe A., Benner D.C., Bernath P.F., et al. The HITRAN 2012 molecular spectroscopic database // *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transf.* – 2013 – Vol. 130. – pp. 4 – 50.
3. Herbin P., Blanquet G., Walrand J., Courtoy C.P., Fayt A. Infrared Spectra of C₂H₃D in the Region between 728 and 907 cm⁻¹ // *J. Mol. Spectrosc.* – 1982 – Vol. 93 – pp. 389 – 394.
4. Herbin P., Blanquet G., Walrand J., Courtoy C.P., Fayt A. Tunable Diode Laser Spectra of C₂H₃D between 830 and 890 cm⁻¹ // *J. Mol. Spectrosc.* – 1984 – Vol. 104 – pp. 262 – 270.
5. Herbin P., Blanquet G., Walrand J., Courtoy C.P., Fayt A. Tunable Diode Laser Spectra of the Very Weak ν_{10} Absorption Band of C₂H₃D // *J. Mol. Spectrosc.* – 1987 – Vol. 122 – pp. 94 – 102.
6. Lebron G.B., Tan T.L. Improved rovibrational constants for the ν_{12} band of C₂H₃D // *J. Mol. Spectrosc.* – 2011 – Vol. 265 – pp. 55 – 57.
7. Duncan J. L., Ferguson A. M., Goodlad S. T. Local mode interpretation of the CH and CD stretching vibrational manifolds of isotopic ethylenes, C₂H₃D and C₂HD₃ // *Spectrochimica Acta* – 1993 – Vol. 49A, No.2 - pp. 149-160.
8. Herbin P., Blanquet G., Valentin A. Vibration-Rotation Analysis of C₂H₃D from 725 to 1170 cm⁻¹ // *J. Mol. Spectrosc.* – 1988 – Vol. 127 – pp. 390 – 398.
9. Lebron G.B., Tan T.L. The high-resolution FTIR spectrum of the ν_6 band of C₂H₃D // *J. Mol. Spectrosc.* – 2010 – Vol. 263 – pp. 160 – 165.

В – Восстановление экспериментального энергетического спектра с помощью модели эффективного гамильтониана

1. Watson J. Simplification of the molecular vibration-rotation Hamiltonian // *Molecular Physics.* – 1968. – Vol. 15. – № 5. – pp. 479 – 490.
2. Давыдов А.С. Квантовая механика: учеб. пособие // А.С. Давыдов – Москва «Наука», 1973. С. 9 – 372.

3. Соколов А.А. Квантовая механика: учеб. пособие // А.А. Соколов, И.М. Тернов, В.Ч. Жуковский – Москва «Наука», 1979. С. 8 – 456.
4. О. Н. Улеников Симметрия и ее применения к задачам колебательно-вращательной спектроскопии молекул // Ю. С. Макушкин, О. Н. Улеников, А. Е. Чеглоков – Томск «Издательство Томского университета», 1990. С. 5 – 150.
5. Любарский Г.Я. Теория групп и ее применение в физике: учеб. пособие // Г.Я. Любарский – Москва «Гос. Издат. Ф-м Лит.», 1958. С. 7 – 259.
6. Кривчикова Ю.В. Анализ спектра высокого разрешения взаимодействующих колебательных состояний ν_1 и ν_3 молекулы $32S18O_2$: дис. ... магистра физики / Ю.В. Кривчикова – Томск, 2015 – 70 с.
7. Чертавских Ю.В. Изучение резонансного взаимодействия в многоатомной молекуле $C_2H_2D_2$ -cis, основанное на высокоточных экспериментальных данных сильнорезонирующих полос ν_{10} , ν_8 , ν_7 , ν_4 , ν_6 , ν_{12} , $2\nu_{10}$: дис. ... магистра физики / Ю.В. Чертавских – Томск, 2016 – 98 с.
8. Каширина Н.В. Исследование колебательно-вращательного спектра высокого разрешения молекулы as- $C_2H_2D_2$ в диапазоне 600-1300 cm^{-1} : дис. ... магистра физики / Н.В. Каширина – Томск, 2016 – 110 с.
9. Быков А.Д., Макушкин Ю.С., Улеников О.Н. Изотопозамещение в многоатомных молекулах / А.Д. Быков, Ю.С. Макушкин, О.Н. Улеников – Новосибирск «Наука», 1985. – 156 с.
10. Martin J. M. L. et al. The anharmonic force field of ethylene, C_2H_4 , by means of accurate ab initio calculations //The Journal of chemical physics. – 1995. – Т. 103. – №. 7. – С. 2589-2602.

Г – Восстановление интенсивностей спектра с помощью модели эффективного дипольного момента

1. Merkt F., Quack M. Molecular Quantum Mechanics and Molecular Spectra, Molecular Symmetry, and Interaction of Matter with Radiation // Laboratorium fur Physikalische Chemie, ETH Zurich, Zurich, Switzerland
2. O.N. Ulenikov, E.S. Bekhtereva, O.V. Gromova, V.-M. Horneman, C. Sydow, S. Bauerecker High resolution FTIR spectroscopy of sulfur dioxide in the 1550–1950 cm^{-1} region: First analysis of the $\nu_1\nu_+/2\nu_2\nu_+$ bands of $32S16O18O$

and experimental line intensities of ro-vibrational transitions in the $\nu_1\nu_2+\nu_3$ bands of $^{32}\text{S}^{16}\text{O}_2$, $^{34}\text{S}^{16}\text{O}_2$, $^{32}\text{S}^{18}\text{O}_2$ and $^{32}\text{S}^{16}\text{O}^{18}\text{O}$ // Journal of Quantitative Spectroscopy & Radiative Transfer – 2017 - № 203 – pp. 377–391.

3. J. Flaud, C. Camy-peyret Vibration-Rotation Intensities in H₂O-Type Molecules Application to the $2\nu_2$, ν_1 , and ν_3 Bands of H₂ ¹⁶O // Journal of molecular spectroscopy – 1975 - № 55 – pp. 278-310.

4. M. Rotger, V. Boudon, J. Vander Auwera Line positions and intensities in the ν_2 band of ethylene near 1450 cm⁻¹: An experimental and theoretical study // Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer – 2008 - № 109 – pp. 952–962.

5. W.J. Lafferty, J.-M. Flaud, F. Kwabia Tchana. The high-resolution infrared spectrum of ethylene in the 1800–2350 cm⁻¹ spectral region // An International Journal at the Interface Between Chemistry and Physics – 2011 - Vol. 109, № 21 – pp. 2501–2510

6. V N Saveliev, O N Ulenikov. Calculation of vibration-rotation line intensities of polyatomic molecules based on the formalism of irreducible tensorial sets // J. Phys. B: At. Mol. Phys. - 1987 - № 20 – pp. 67-83

7. Тарасевич Б.Н. Основы ИК спектроскопии с преобразованием Фурье. Подготовка проб в ИК спектроскопии.: учеб. пособие / Б.Н. Тарасевич – Москва, 2012. – 22 с.

8. Perkins W. D. Fourier transform-infrared spectroscopy: Part 1. Instrumentation //Journal of Chemical Education. – 1986. – Т. 63. – №. 1. – С. А5.

Приложение А

Chapter 2

The mathematical model used for spectrum analysis and the least squares fitting of spectroscopic data

Студент:

| Группа | ФИО | Подпись | Дата |
|--------|------------------------------|---------|------|
| ОБМ71 | Жданович Станислав Андреевич | | |

Консультант школы отделения (НОЦ) – Экспериментальной физики:

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

Консультант – лингвист ОИЯ ШБИП:

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

1. The mathematical model used for spectrum analysis and the least squares fitting of spectroscopic data

Natural phenomena are often studied by constructing a model of a process or an object. Molecular spectroscopy studies the absorption of light by molecules in different frequency ranges under different environmental conditions (temperature, pressure, electric and magnetic fields). The modeling of this processes first of all leads to the construction of a Hamiltonian specific for the molecule.

A molecule that absorbs electromagnetic radiation is represented in the form of electrons and the nuclei. The next step is to solve the problem of their motion in the absence of external fields. Absorption of the energy of the electromagnetic radiation quantum results in the transition of a molecule from a low-energy state to a state with a higher energy. It is necessary to solve the Schrödinger equation (2.1) to describe the energy levels of a molecule, where H is the Hamilton operator, which depends of the coordinates and spins of the particles that construct the molecule, the operator must describe interactions between these particles. Nonrelativistic Hamiltonians of the form (2.2) are usually used in the field of molecular spectroscopy.

$$H\psi = E\psi, \quad (2.1)$$

where ψ is the wave function of the state, E is the energy of the state.

$$H = T_{nucl} + T_{el} + V, \quad (2.2)$$

where T_{nucl} and T_{el} are the kinetic energy operators of nuclei and electrons respectively, V is the operator of the potential energy of the molecule. These operators have the following form in the coordinates of the space-fixed system (SFS):

$$\begin{aligned} T_{nucl} &= -\frac{\hbar^2}{2} \sum_N \frac{1}{m_N} \left(\frac{\partial^2}{\partial x_N^2} + \frac{\partial^2}{\partial y_N^2} + \frac{\partial^2}{\partial z_N^2} \right), \\ T_{el} &= -\frac{\hbar^2}{2} \sum_i \frac{1}{m_{el}} \left(\frac{\partial^2}{\partial x_i^2} + \frac{\partial^2}{\partial y_i^2} + \frac{\partial^2}{\partial z_i^2} \right), \\ V &= \sum_{i,j>i} \frac{e^2}{r_{ij}} + \sum_{N,N'>N} \frac{Z_N Z_{N'}}{r_{NN'}} - \sum_{i,N} \frac{e Z_N}{r_{iN}}, \end{aligned} \quad (2.3)$$

where m_N and m_{el} are the masses of nuclei and electrons respectively; Z_N and e are the charges of nuclei and electrons; r_{ij} is the distance between the i -th and j -th particles.

Finding the exact solution of the Schrödinger equation with Hamiltonian of the same kind is a very complex problem. Therefore, there are numerous approximations. Another problem to be solved then is obtaining a rotational and vibrational variables dependent Hamiltonian, in other words, the translation of the classical Hamiltonian (2.2) into a Hamiltonian in intramolecular coordinates. As a result of such a translation, we obtain the rotational-vibrational Watsons Hamiltonian. We now briefly describe the main theses of the theories used in rotational-vibrational molecular spectroscopy to simplify the problem of solving the Schrödinger equation.

According to the *Born-Oppenheimer approximation*, the solution of the Schrödinger equation is divided into two parts and Hamiltonian is of the form (2.4):

$$H = H_{el} + \Delta H_1 + \Delta H_2 \quad (2.4)$$

1. Describing the motion of electrons in the field of slowly moving nuclei (part corresponds to the term H_{el});
2. Describing the motion of nuclei in the effective field of electrons (ΔH_1 and ΔH_2).

Parts 1 and 2 could now be solved separately, and the full wave function ψ (2.5) is expressed as the product of the electron ψ_{el} and the nuclear ψ_{nucl} wave functions:

$$\psi = \psi_{el} * \psi_{nucl} \quad (2.5)$$

The method of effective operators allows us to replace the original Hamiltonian H (if a process of finding a solution is impossible or difficult) by a new H' , which has the following properties:

1. The solution of the Schrodinger equation with H' can be determined in an explicit form;

2. The set B' of all solutions of the Schrödinger equation with the operator H' identically coincides with some subset B of the set of solutions A of the Schrödinger equation with the operator H .

According to *the operator perturbation theory*, the Hamiltonian is usually chosen in the form (2.4). In this case, the eigenfunctions are expressed in the form of products of the corresponding eigenfunctions of the terms of H .

$$H = H_0 + \sum_{n=1}^{\infty} H_n(\kappa^n) \quad , \quad (2.5)$$

where the symbol κ^n means that the corresponding operator H_n is small in comparison with H_0 , the solution with H_0 is known. The infinitesimal order of H_n is defined as κ^n , where $\kappa = (m_e/M_N)^{1/4}$, m_e is the electron mass, M_N is the average mass of the nuclei of the molecule.

1.1. General information about the C_2H_3D molecule.

C_2H_3D (Figure 1) is the asymmetric top molecule. The symmetry group of this molecule is isomorphic to the C_s point symmetry group.

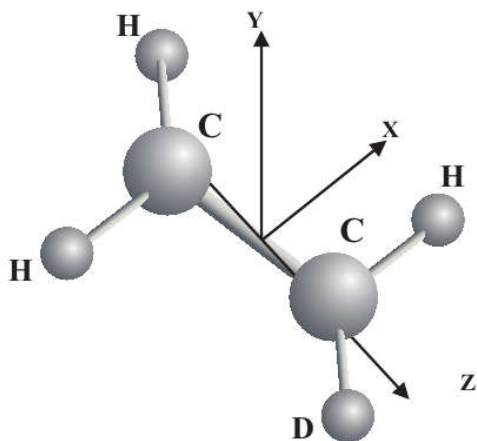


Figure 1 – C_2H_3D molecule

The fundamental bands ν_4 , ν_6 , ν_7 , ν_8 and ν_{10} , which are located in the region of 600-1250 cm^{-1} , were studied by the authors. The corresponding vibrational coordinates, Q_4 , Q_6 , Q_7 , Q_8 , Q_{10} (Figure 2) are transformed under symmetry operations over the irreducible representations A' and A'' of the group C_s (Table 2).

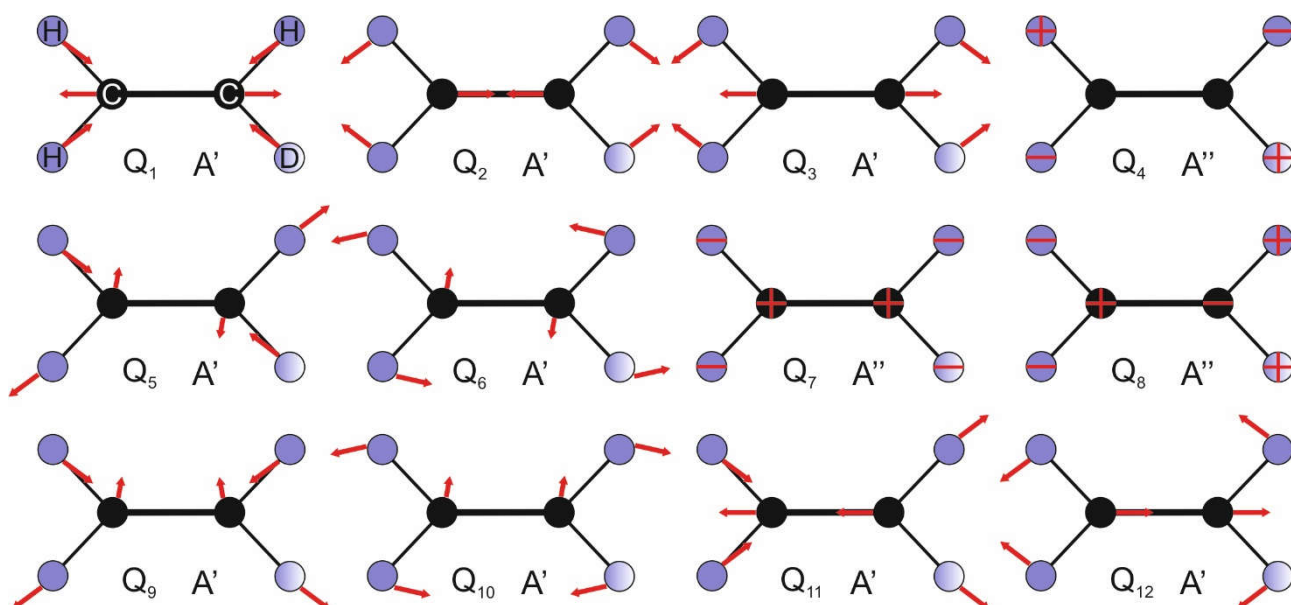


Figure 2 – Normal vibrations of the C_2H_3D molecule

Table 2 - Conversion of the elements of the C_s group

| C_s | E | σ_h | Normal vibrational coordinates | The angular momentum operators |
|-------|-----|------------|--|--------------------------------|
| A' | 1 | 1 | $Q_1, Q_2, Q_3, Q_5, Q_6, Q_9, Q_{10}, Q_{11}, Q_{12}$ | J_x, J_z |
| A'' | 1 | -1 | $Q_4, Q_7, Q_8,$ | J_y |

According to the symmetry of the molecule, three types of transitions a, b, and c should be distributed between the bands of A' and A'' types, the selection rules corresponding to these types of transitions have the following form:

$$\begin{aligned} \Delta J &= \pm 1 \quad \Delta K_a = \text{even} \quad \Delta K_c = \text{odd} \\ \Delta J &= \pm 1 \quad \Delta K_a = \text{odd} \quad \Delta K_c = \text{odd} \\ \Delta J &= \pm 1 \quad \Delta K_a = \text{odd} \quad \Delta K_c = \text{even} \end{aligned} \quad (2.6)$$

In addition, for all types of transitions, the following conditions must be met:

$$\begin{aligned} K_a + K_c &= J, J + 1 \\ K_a, K_c &\leq J \end{aligned} \quad (2.7)$$

1.2. The model of the effective Hamiltonian

As stated earlier, to simplify the solution of the Schrödinger equation it becomes necessary to transfer the Hamiltonian (2.2) to the Hamiltonian in

intramolecular coordinates. The vibrational-rotational Hamiltonian of the molecule takes the following form (2.8) upon transition to $(3N - 6)$ vibrational coordinates Q_λ , which describe the relative motion of nuclei in a molecule.

$$H = \frac{1}{2} \sum_{\lambda} P_{\lambda}^2 + \frac{1}{2} \sum_{\alpha\beta} \mu_{\alpha\beta} (J_{\alpha} - G_{\alpha})(J_{\beta} - G_{\beta}) + V(Q), \quad (2.8)$$

where $P_{\lambda} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial Q_{\lambda}}$ is the momentum conjugate to the Q_{λ} coordinate;

The potential function $V(Q)$ can be represented as a Taylor series expansion:

$$V(Q) = E_0 + \frac{(2\pi c)^2}{2} \sum_{\lambda} \omega_{\lambda}^2 Q_{\lambda}^2 + \sum_{\lambda\mu\nu} K_{\lambda\mu\nu} Q_{\lambda} Q_{\mu} Q_{\nu} + \sum_{\lambda\mu\nu\xi} K_{\lambda\mu\nu\xi} Q_{\lambda} Q_{\mu} Q_{\nu} Q_{\xi} + \dots \quad (2.9)$$

here:

$$G_{\alpha} = \sum_{\lambda\mu} \zeta_{\lambda\mu}^{\alpha} Q_{\lambda} P_{\mu} \quad (2.10)$$

- vibrational angular momentum components;

$$\zeta_{ab}^{\alpha} = \sum_N \sum_{\beta\gamma} \epsilon_{\alpha\beta\gamma} l_{N\beta a} l_{N\gamma b} \quad (2.11)$$

- Coriolis constants;

$\epsilon_{\alpha\beta\gamma}$ is a completely antisymmetric tensor (Levi-Civita symbol);

$l_{N\beta a}$ - constants of vibration modes;

$\mu_{\alpha\beta}$ - elements of the matrix of the reciprocal moments of inertia;

J_{α} - total angular momentum operator components.

1.3 Combination differences method

The spectrum analysis was carried out by the method of combination differences. Rotational levels of the ground and excited vibrational-rotational states are considered. According to the selection rules, there are several transitions from rotational levels of the ground vibrational state to the same level of the excited vibrational state (Figure 3). Usually, the structure of the fundamental vibrational state is known with high accuracy, it can be determined from the analysis of microwave spectra.

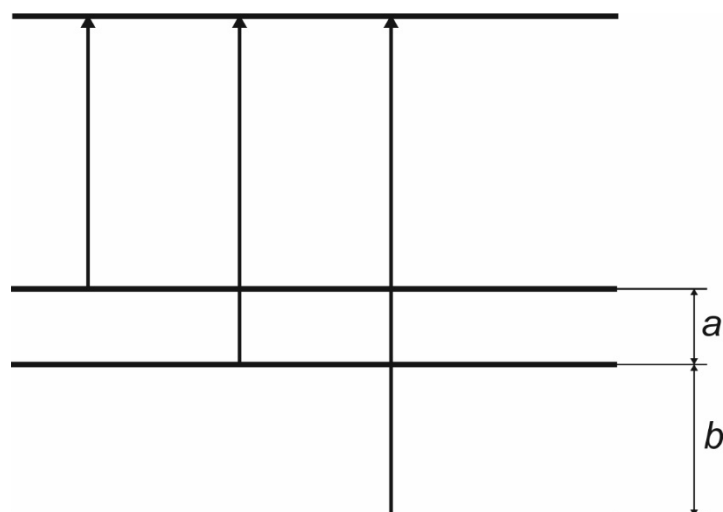


Figure 3 - Illustration of the Combination Differences Method

Our goal is to find the energy of an excited vibrational state. In order to find it, it is necessary to assume at what distance it is separated from the corresponding energy of the ground state. Since the distances between the rotational levels of the ground vibrational state are known sufficiently accurately, you can make a "ruler", the distances between the divisions of which will correspond to the distances between the rotational levels of the ground vibrational state (a and b in Figure 3).

Let us suppose we made a "ruler" of three divisions. We will move the "ruler" along the spectrum. In the spectrum, it is necessary to find three lines that coincide with the rulings of the ruler (Fig. 4). Knowing the positions of the lower levels, the wavelengths of the transitions, we can determine the energy of the upper level. If we "move" the ruler along the spectrum, we can find a few more lines that coincide with the divisions of the "ruler". From among the lines chosen in this way, you need to find the right combination. The described process is one of the ways of interpreting the lines.

Of course, the exact alignment of the spectral lines with the divisions of the ruler in the process of identification is unlikely. Therefore, the accuracy of the search " d " is specified. This means that if the center of the spectrum line deviates from rulings by an amount less than or equal to " d ", the line falls into the sample.

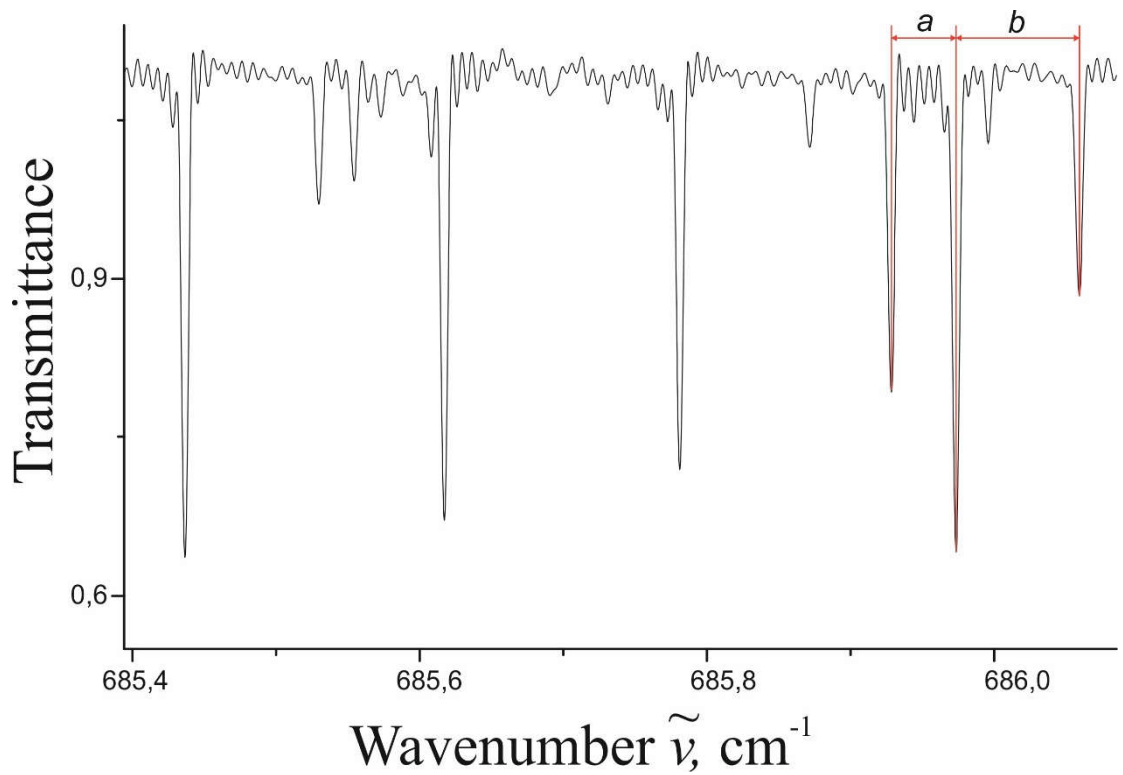
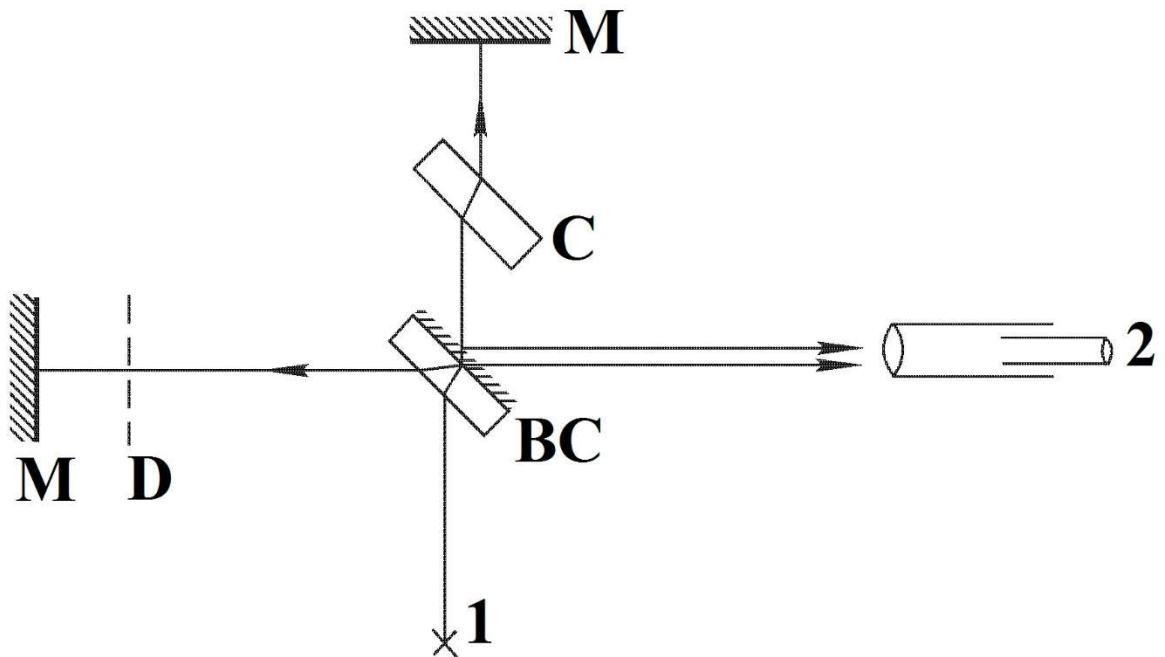


Figure 4 - "Ruler" is moving across the spectrum

1.4 Principle of operation of the Fourier spectrometer

Basically, the Fourier spectrometer is a Michelson interferometer, when the investigated radiation enters the interferometer one of the mirrors moves at a constant speed. The optical scheme of a typical Michelson interferometer is shown



in Figure 5.

Figure 5 - Optical scheme of the interferometer

The investigated light beam leaves the source (1). M - mirrors are arranged so that after the beamsplitter - BC, - the rays are interfering with each other. C is the compensator of the path difference caused by the fact that one of the beams passed through the plate of the beam splitter once, and the other – three times. The result of interference is recorded in the photodetector - 2.

The photodetector is connected through an amplifier with an ADC (analog-to-digital converter), which converts the analog electrical signal into a digital sequence. A data array obtained this way is called a source interferogram. The array is converted via a computer, where a Fourier transform results in a spectrum in the coordinates of the position of the mirror and the intensity of the signal. Interferogram is received during the working cycle of the interferometer - scanning. It is carried out by moving one of the mirrors with the help of the D - device changing the path difference. In order to relate the recorded count to a certain value of the path difference and to obtain the spectrum in the required coordinates, a reference interferogram is taken simultaneously.

As the mirror moves to the receiver, a light beam enters the receiver, its intensity in the case of a monochromatic source varies in accordance with the cosine law. If the second frequency is added to the radiation source, then the resulting dependence in the coordinates "mirror position - intensity " will be represented as the sum of two cosine waves and so on to an infinite number of frequencies.