

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

Школа: ИЯТШ  
Направление подготовки 03.04.02 «Физика»  
Отделение: Экспериментальная физика

**МАГИСТЕРСКАЯ ДИССЕРТАЦИЯ**

| Тема работы  |
|--|
| <b>Анализ колебательно-вращательного спектра высокого разрешения полосы <math>\nu_2+\nu_3</math> молекулы <math>\text{ND}^{\text{MS}}</math> (<math>M=32, 34</math>)</b> |

УДК 539.194:661.249.1

Студент

| Группа | ФИО        | Подпись | Дата |
|--------|------------|---------|------|
| ОБМ81  | Чэн Цзыхун |         |      |

Руководитель

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

**КОНСУЛЬТАНТЫ:**

По разделу «Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение»

| Должность        | ФИО                      | Ученая степень, звание | Подпись | Дата |
|------------------|--------------------------|------------------------|---------|------|
| Доцент ОСГН ШБИП | Кашук Ирина<br>Вадимовна | к.т.н<br>доцент        |         |      |

По разделу «Социальная ответственность»

| Должность  | ФИО        | Ученая степень, звание | Подпись | Дата |
|------------|------------|------------------------|---------|------|
| Доцент ЭБЖ | Сечин А.А. | к.т.н.                 |         |      |

**ДОПУСТИТЬ К ЗАЩИТЕ:**

| Зав. кафедрой | ФИО | Ученая степень, звание | Подпись | Дата |
|---------------|-----|------------------------|---------|------|
|               |     |                        |         |      |

|   |                        |
|---|------------------------|
| Утверждена приказом директора (дата, номер) | 30.01.2020 г., №30-9/с |
|---|------------------------|

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

Томск – 2020 г.

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

---

Школа: ИЯТШ  
Направление подготовки 03.04.02 «Физика»  
Отделение: Экспериментальная физика

УТВЕРЖДАЮ:

Зав. отделением

\_\_\_\_\_ 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        |
|--------|------------|
| ОБМ81  | Чэн Цзыхун |

Тема работы:

**Анализ колебательно-вращательного спектра высокого разрешения полосы  $\nu_2+\nu_3$   
молекулы  $HD^MS$  ( $M=32, 34$ )**

Утверждена приказом директора (дата, номер)

Срок сдачи студентом выполненной работы:

**ТЕХНИЧЕСКОЕ ЗАДАНИЕ:**

|  |  |
|--|--|
| <p>Исходные данные к работе<br/>(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.).</p> | <p>Объект исследования:<br/>Изотопическая модификация молекулы <math>H_2S</math>:<br/>молекула <math>HD^{32}S</math></p> |
|--|--|

|  |  |
|--|--|
| Перечень подлежащих исследованию, проектированию и разработке вопросов (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). | Обзор литературы.<br>Анализ спектра молекулы HD <sup>32</sup> S в диапазоне 3350-4050 см <sup>-1</sup> .<br>Решение обратной спектроскопической задачи (получение спектроскопических параметров).<br>Раздел «Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение»<br>Раздел «Социальная ответственность» |
| Консультанты по разделам выпускной квалификационной работы<br>(с указанием разделов)   |  |
| Раздел   | Консультант  |
| Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение  | Кащук И. В.  |
| Социальная ответственность   | Сечин А. А.  |
| Названия разделов, которые должны быть написаны на русском и иностранном языках:   |  |
|  |  |

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

Задание выдал руководитель:

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

Задание принял к исполнению студент:

| Группа | ФИО        | Подпись | Дата |
|--------|------------|---------|------|
| ОБМ81  | Чэн Цзыхун |         |      |

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

Студенту:

|               |            |
|---------------|------------|
| <b>Группа</b> | <b>ФИО</b> |
| ОБМ81         | Чэн Цзыхун |

|                            |              |                                  |                          |
|----------------------------|--------------|----------------------------------|--------------------------|
| <b>Школа</b>               | ИЯТШ         | <i>Отделение</i>                 | Экспериментальной физики |
| <b>Уровень образования</b> | Магистратура | <i>Направление/специальность</i> | 03.04.02 Физика          |

**Тема ВКР:**

Анализ колебательно-вращательного спектра высокого разрешения полосы  $\nu_2+\nu_3$  молекулы  $\text{HD}^{32}\text{S}$  ( $M=32, 34$ )

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

|  |  |
|--|--|
| 1. Стоимость ресурсов научного исследования (НИ): материально-технических, энергетических, финансовых, информационных и человеческих | 2. Стоимость материальных ресурсов и специального оборудования определены в соответствии с рыночными ценами г. Томска<br>3. Тарифные ставки исполнителей определены штатным расписанием НИ ТПУ |
| 4. Нормы и нормативы расходования ресурсов   | 5. Норма амортизационных отчислений на специальное оборудование  |
| 6. Используемая система налогообложения, ставки налогов, отчислений, дисконтирования и кредитования                                  | 7. Отчисления во внебюджетные фонды 30 %   |

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

|   |   |
|---|---|
| 1. Анализ конкурентных технических решений (НИ)               | 2. Расчет конкурентоспособности<br>3. SWOT-анализ   |
| 4. Формирование плана и графика разработки и внедрения (НИ)   | 5. Структура работ. Определение трудоемкости. Разработка графика проведения исследования  |
| 6. Составление бюджета инженерного проекта (НИ)               | 7. Расчет бюджетной стоимости НИ  |
| 8. Оценка ресурсной, финансовой, бюджетной эффективности (НИ) | 9. Интегральный финансовый показатель.<br>10. Интегральный показатель ресурсоэффективности.<br>11. Интегральный показатель эффективности. |

**Перечень графического материала**

1. Оценка конкурентоспособности ИР
2. Матрица SWOT
3. Диаграмма Ганта
4. Бюджет НИ
5. Основные показатели эффективности НИ

|   |  |
|---|--|
| <b>Дата выдачи задания для раздела по линейному графику</b> |  |
|---|--|

**Задание выдал консультант:**

| <b>Должность</b> | <b>ФИО</b>            | <b>Ученая степень, звание</b> | <b>Подпись</b> | <b>Дата</b> |
|------------------|-----------------------|-------------------------------|----------------|-------------|
| Доцент ОСГН ШБИП | Кашук Ирина Вадимовна | к.т.н доцент                  |                |             |

**Задание принял к исполнению студент:**

| <b>Группа</b> | <b>ФИО</b> | <b>Подпись</b> | <b>Дата</b> |
|---------------|------------|----------------|-------------|
| ОБМ81         | Чэн Цзыхун |                |             |

**ЗАДАНИЕ ДЛЯ РАЗДЕЛА  
«СОЦИАЛЬНАЯ ОТВЕТСТВЕННОСТЬ»**

Студенту:

|               |            |
|---------------|------------|
| <b>Группа</b> | <b>ФИО</b> |
| ОБМ81         | Чэн Цзыхун |

|                                |              |                                       |                              |
|--------------------------------|--------------|---------------------------------------|------------------------------|
| <b>Школа</b>                   | ИЯТШ         | <b>Отделение</b>                      | Экспериментально<br>й физики |
| <b>Уровень<br/>образования</b> | Магистратура | <b>Направление/специа<br/>льность</b> | Физика                       |

**Тема ВКР:**

Анализ колебательно-вращательного спектра высокого разрешения полосы  $\nu_2+\nu_3$  молекулы HD<sup>M</sup>S (M=32, 34)

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

|  |   |
|--|---|
| 1. Характеристика объекта исследования (вещество, материал, прибор, алгоритм, методика, рабочая зона) и области его применения | Объектом исследования являются колебательно-вращательный спектр молекулы HD34S и HD32S. Работа получения спектра используется прибор Фурье-спектроскопия. Данная работа может применяться в физике, планетологии и атмосферной оптике для решения некоторых прикладных задач. |
|--|---|

Перечень вопросов, подлежащих исследованию, проектированию и разработке:

|  |  |
|--|--|
| <p><b>1. Правовые и организационные вопросы обеспечения безопасности:</b></p> <ul style="list-style-type: none"> <li>– специальные (характерные при эксплуатации объекта исследования, проектируемой рабочей зоны) правовые нормы трудового законодательства;</li> <li>– организационные мероприятия при компоновке рабочей зоны.</li> </ul> | <ol style="list-style-type: none"> <li>1. СанПиН 2.2.2/2.4.1340-03 Гигиенические требования к персональным электронно-вычислительным машинам и организации работы.</li> <li>2. ГОСТ 12.0.003-2015. ССБТ. Опасные и вредные производственные факторы. Классификация.</li> <li>3. ГОСТ 12.1.005-88 (с изм. No1 от 2000 г.). ССБТ. Общие санитарно-гигиенические требования к воздуху рабочей зоны (01. 01. 89).</li> <li>4. СанПиН 2.2.4.548-96. Гигиенические требования к микроклимату производственных помещений.</li> <li>5. СНиП 23-05-95. Естественное и искусственное освещение.</li> <li>6. ГОСТ 12.1.019-79. ССБТ. Электробезопасность. Общие требования и номенклатура видов защиты.</li> <li>7. ГОСТ 12.1.038-82. ССБТ. Электробезопасность. Предельно допустимые уровни напряжений прикосновения и токов.</li> <li>8. ГОСТ 12.1.004-91. ССБТ. Пожарная безопасность. Общие требования.</li> <li>9. ГОСТ 12.1.003-83 ССБТ. Шум. Общие требования (01. 07. 92).</li> </ol> |
| <p><b>2. Производственная безопасность:</b></p> <p>2.1. Анализ выявленных</p>  | <ol style="list-style-type: none"> <li>1. Анализ выявленных вредных факторов:             <ol style="list-style-type: none"> <li>а) приводятся данные по оптимальным и допустимым значениям микроклимата на рабочем месте, перечисляются методы обеспечения этих значений</li> </ol> </li> </ol>   |

|   |   |
|---|---|
| <p>вредных и опасных факторов</p> <p>2.2. Обоснование мероприятий по снижению воздействия</p> | <p>б) приводятся данные по допустимым значениям шума на рабочем месте</p> <p>в) приводится 1 из расчетов (расчет освещенности на рабочем месте, расчет потребного воздухообмена на рабочем месте, расчет необходимого времени эвакуации рабочего персонала);</p> <p>г) приводятся данные по реальным значениям электромагнитных полей на рабочем месте, в том числе от компьютера или процессора, если они используются, перечисляются СКЗ и СИЗ;</p> <p>д) предлагаемые средства защиты</p> <p>2. Анализ выявленных опасных факторов:</p> <p>а) механические опасности (источники, средства защиты);</p> <p>б) термические опасности (источники, средства защиты);</p> |
| <p><b>3. Экологическая безопасность:</b></p>  | <p>Организация безотходного производства (приводится перечень отходов при эксплуатации установки, перечисляются методы улавливания, переработки, хранения и утилизации образовавшихся на вашем производстве промышленных отходов).</p>  |
| <p><b>4. Безопасность в чрезвычайных ситуациях:</b></p>                                       | <p>Приводятся возможные для Сибири ЧС; Возможные ЧС: морозы, диверсия разрабатываются превентивные меры по предупреждению ЧС;</p> <p>разработка мер по повышению устойчивости объекта к данной ЧС;</p> <p>разработка действий в результате возникшей ЧС и мер по ликвидации её последствий.</p>   |

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

**Задание выдал консультант:**

| Должность  | ФИО        | Ученая степень, звание | Подпись | Дата |
|------------|------------|------------------------|---------|------|
| Доцент ЭБЖ | Сечин А.А. | к.т.н.                 |         |      |

**Задание принял к исполнению студент:**

| Группа | ФИО        | Подпись | Дата |
|--------|------------|---------|------|
| ОБМ81  | Чэн Цзыхун |         |      |

## РЕФЕРАТ

Выпускная квалификационная работа выполнена на 125 с., содержит 10 рис., 33 табл., 1 приложение с использованием 30 источников.

Ключевые слова: HDS, сероводород, высокое разрешение, спектры молекул, параметры эффективного гамильтониана, изотопозамещение.

Цель работы: исследование вращательной структуры изолированных состояний молекулы HDS, локализованных в диапазоне 3350-4050 см<sup>-1</sup>, а также решение обратной спектроскопической задачи с целью получения параметров эффективного гамильтониана, описывающих экспериментальные данные.

Результатом исследования является определение около 2000 энергетических переходов с основного состояния на возбужденные (011) и (200), принадлежащих молекуле HDS. А также присвоение переходам квантовых чисел  $J$  и  $K_a$ . На основе экспериментальных данных были получены значения уровней вращательной энергии, которые являлись исходными данными в фитинге параметров эффективного гамильтониана. Для каждой из исследуемых полос был определен набор из 25 параметров диагональных блоков эффективного гамильтониана, который позволяет описать экспериментальные данные с точностью  $d_{rms} = 2,6 \times 10^{-4}$  см<sup>-1</sup>.

Полученные параметры эффективного гамильтониана пополняют спектральные базы данных России и зарубежа. Область применения: астрофизика, планетология и атмосферная оптика.

## ОГЛАВЛЕНИЕ

|   |           |
|---|-----------|
| <b>ВВЕДЕНИЕ</b> .....   | 11        |
| <b>1.ОБЗОР ЛИТЕРАТУРЫ</b> .....   | 14        |
| <b>2.ТЕОРЕТИЧЕСКИЕ МЕТОДЫ МОЛЕКУЛЯРНОЙ СПЕКТРОСКОПИИ</b>                            | <b>18</b> |
| 2.1 Модель эффективного гамильтониана.....  | 19        |
| 2.2 Изотопический эффект в «расширенном» приближении локальных мод.....             | 21        |
| <b>3. ОБЪЕКТ И МЕТОДЫ ИССЛЕДОВАНИЯ</b> .....  | <b>26</b> |
| 3.1 Общая характеристика молекулы HD <sup>32</sup> S.....                           | 26        |
| 3.2 Метод комбинационных разностей.....   | 28        |
| <b>4. ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНАЯ ЧАСТЬ</b> .....   | <b>31</b> |
| <b>5. РЕЗУЛЬТАТЫ ИССЛЕДОВАНИЯ</b> .....   | <b>33</b> |
| 5.1 Анализ вращательной структуры колебательного состояния (011).....               | 33        |
| 5.2 Анализ вращательной структуры колебательного состояния (200).....               | 40        |
| <b>6. ФИНАНСОВЫЙ МЕНЕДЖМЕНТ, РЕСУРСОЭФФЕКТИВНОСТЬ И<br/>РЕСУРСОСБЕРЕЖЕНИЕ</b> ..... | <b>46</b> |
| Введение.....   | 46        |
| 6.1 Оценка коммерческого потенциала и перспективности проведения.....               | 47        |
| 6.1.3 Технология QuaD.....  | 49        |
| 6.1.4 SWOT-анализ.....  | 51        |

|  |            |
|--|------------|
| 6.2 Планирование научно-исследовательских работ.....                             | 57         |
| 6.2.3 Разработка графика проведения научного исследования.....                   | 62         |
| 6.3 Бюджет научно-технического исследования (НТИ).....                           | 65         |
| 6.3.1 Расчет материальных затрат НТИ.....  | 66         |
| 6.3.3 Основная и дополнительная заработная плата исполнителей темы.....          | 69         |
| 6.4 Определение целесообразности и эффективности научного исследования....       | 76         |
| Вывод.....   | 83         |
| <b>7.СОЦИАЛЬНАЯ ОТВЕТСТВЕННОСТЬ.....</b>   | <b>85</b>  |
| 7.1 Анализ выявленных вредных факторов проектируемой производственной среды..... | 86         |
| 7.2 Организационные мероприятия обеспечения безопасности.....                    | 97         |
| 7.3 Особенности законодательного регулирования проектных решений.....            | 98         |
| 7.4 Безопасность в чрезвычайных ситуациях.....                                   | 100        |
| Вывод.....   | 102        |
| <b>ЗАКЛЮЧЕНИЕ.....</b>   | <b>103</b> |
| <b>СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ.....</b>  | <b>104</b> |
| <b>Приложение А.....</b>   | <b>108</b> |

## ВВЕДЕНИЕ

Развитие современной теоретической колебательно-вращательной спектроскопии молекул даёт возможность описывать полученную из экспериментов информацию о молекулярной структуре с высокой точностью. Путем интерпретации спектров можно исследовать основные характеристики молекул, которые проявят различные эффекты внутримолекулярной природы. С помощью интерпретации спектров можно определить систему уровней энергии молекулы и получить спектроскопические постоянные, структурные параметры и потенциальную функцию исследуемой молекулы [1].

**Предмет исследования** в диссертации – молекула  $\text{HD}^{32}\text{S}$ . Данная молекула является вторым по значимости и частоте исследований изотопологом сероводорода.

Сероводород является важным химическим веществом во многих областях, таких как химия, астрофизика, атмосферная оптика, планетология и т. т. Он в основном образуется в результате извержений вулканов и сжигания топлива в деятельности человека и поэтому играет важную роль. А также играет важную роль в качестве микроэлемента в атмосфере Земли. Будучи вовлеченными в цикл серы, различные изотопологи сульфида водорода создают основу как для изучения процессов, имевших место в ранней истории Земли, так и для определения изотопного состава серы атмосферных видов в наши дни [2-3]. Известно, что  $\text{HDS}$  более распространена в атмосферах газовых гигантов звездной системы, коричневых карликов, межзвездных облаков и т. д. (см.,

например, [4-5]). В космосе были обнаружены не только основные виды, но и различные изотопологи сероводорода (см., например, [6]). Сероводород также является одним из немногих примеров, где глобальная аналитическая потенциальная энергия и дипольные поверхности могут быть определены с очень высокой точностью. В этом контексте принципиально важно охарактеризовать спектроскопические свойства всех изотопологов сероводорода, имеющих одинаковую гиперповерхность электронного потенциала в приближении Борна-Оппенгеймера, настолько полно и точно насколько возможно. С этой точки зрения особенно интересно точное исследование спектров высокого разрешения дейтерированного сероводорода. По этим причинам в настоящее время вновь научные коллективы возобновили обширные лабораторные спектроскопические исследования основных видов сероводорода. В настоящей работе внимание посвящено изучению спектров полос  $\nu_2 + \nu_3$  и  $2\nu_1$  молекулы  $\text{HD}^{32}\text{S}$ , структура высокого разрешения которых обсуждалась ранее только в [7]. Сильные стороны этой полосы ранее не анализировались.

**Цель магистерской диссертации:** изучение и описание вращательной структуры колебательных состояний (011) и (200) молекулы  $\text{HDS}$ .

Для достижения поставленной цели необходимо решить установленные задачи: 1) Изучить материалы по теме «Молекулярная спектроскопия высокого разрешения»; 2) Изучить теорию симметрии; 3) Выполнить литературный обзор по молекулам  $\text{H}_2\text{S}$  и  $\text{HDS}$ ; 4) Исследовать вращательные структуры колебательных состояний  $\nu_2 + \nu_3$  и  $2\nu_1$  молекулы  $\text{HD}^{32}\text{S}$ . 5)

Определить параметры эффективного гамильтониана для исследуемых состояний.

В качестве методов исследования были использованы методы квантовой механики, теории неприводимых тензорных систем и теории изотопозамещения.

**Положения, выносимые на защиту:**

1) Учет параметров центробежного искажения, стоящих перед операторами углового момента  $J$  и  $J_z$  до десятой степени включительно, позволило описать вращательную структуру колебательных состояний (011) и (200) молекулы HDS до  $J \geq 20$  и  $Ka \geq 10$  со среднеквадратичным отклонением  $d_{rms} = 2,6 \cdot 10^{-4} \text{ см}^{-1}$ ;

2) Для исследования слабо интенсивной полосы  $2\nu_1$  молекулы HDS можно использовать изотопические соотношения для определения предварительных значений параметров

**Научная новизна работы.** В результате интерпретации спектра высокого разрешения молекулы HDS в диапазоне  $3350\text{-}4050 \text{ см}^{-1}$  были впервые определены энергетические переходы, принадлежащие состояниям (011) и (200), а также переходам присвоены квантовые числа.

## 1.ОБЗОР ЛИТЕРАТУРЫ

С развитием Фурье-спектроскопии активно развивалось и исследование получаемых спектров многоатомных молекул. В исследованиях такого рода молекула  $\text{H}_2\text{S}$  и её изотопологи заняли устойчивую позицию, в связи с чем изучение данной молекулы представляет огромный интерес как для теоретиков, так и для экспериментаторов. Молекула сероводорода представляет собой легкий асимметричный ротор, который проявляет большие эффекты центробежного искажения. Следовательно, поскольку измеренные микроволновые и субмиллиметровые переходы обычно ограничены относительно низкими линиями J и K, необходимо расширить анализ до дальнего инфракрасного диапазона, таким образом, охватывая все вращательные спектры для определения точных констант центробежного искажения высокого порядка [8]. В связи с этим регистрирование инфракрасных спектров и изучение свойств и структуры данных молекул производится по всему миру в научных лабораториях. Современная техника на текущий момент позволяет зарегистрировать спектры с оптическим разрешением с точностью порядка  $0.001 \text{ см}^{-1}$ . Новые технологии устройств увеличивают точность полученных результатов – определение энергетической структуры молекулы и ее внутренних свойств.

Исследование молекулы сульфида водорода, в том числе и исследование его колебательно-вращательной структуры, активно проводится с момента, когда исследуемая молекула была обнаружена в составе межзвездных облаков.

В 1985 году ученые из Франции J. M. Flaud, C. Camy-Peyret и J. W. C. Johns проделали большую работу по исследованию микроволновых и инфракрасных спектров молекул  $D_2^{32}S$ ,  $D_2^{34}S$ ,  $HD^{32}S$ , и  $HD^{34}S$ . Спектр чистого вращения сероводорода исследовали в диапазоне  $50-320 \text{ см}^{-1}$  с помощью Фурье-спектрометра при разрешении  $0,004 \text{ см}^{-1}$ . Было получено высокое разрешение и хорошее отношение сигнал / шум, которое привело к значительному улучшению точности волновых чисел вращательных переходов изотопных молекул. В данной работе были получены параметры для основного состояния каждой исследуемой молекулы [9].

В 1995 году, О. Н. Улеников, Р. Н. Толченев, Е. Н. Мелехина исследовали инфракрасные спектры высокого разрешения молекул  $D_2S$ ,  $HD^{32}S$  и  $HD^{34}S$  [10-11]. Для исследования вращательной структуры указанных молекул были зарегистрированы спектры в диапазоне  $2400-3000 \text{ см}^{-1}$ . Был проведен повторный анализ полос  $\nu_1+\nu_2$ ,  $\nu_2+\nu_3$ ,  $3\nu_2$  для  $D_2S$  и первичный анализ  $\nu_3$ ,  $\nu_1+\nu_2$ ,  $3\nu_2$  для  $HD^{32}S$  и  $\nu_1+\nu_2$   $HD^{34}S$ . Были определены энергетические переходы, на основе которых получены параметры эффективного гамильтониана.

Также в 1998 году была опубликована работа по изучению обертонов  $\nu_2$  молекулы  $HD^{32}S$  коллективом ученых О. Н. Улеников, Е.А. Дитенберг, И.М. Олехнович и др. [12].

Последующей работой данного коллектива было исследование полос, расположенных в диапазоне  $2740-3840 \text{ см}^{-1}$ , а именно  $2\nu_1$  и  $\nu_2+\nu_3$  [7]. Однако,

имеющееся на тот момент условия эксперимента, не позволили получить хорошие спектры для теоретической обработки. В спектре присутствовали линии водяного пара, которые затруднили процесс идентификации линий HDS. Более подробно влияние линий водяного пара на интерпретацию описано в главе 5.1.

Таблица 1 – Исследование полос  $2\nu_1$  и  $\nu_2+\nu_3$  молекулы  $\text{HD}^{32}\text{S}$  [7]

| Полоса        | Центр полосы,<br>$\text{см}^{-1}$ | Количество<br>переходов | $J_{\text{max}}$ | $K_a \text{ max}$ | $d_{\text{rms}} \cdot 10^{-4}$ ,<br>$\text{см}^{-1}$ |
|---------------|-----------------------------------|-------------------------|------------------|-------------------|--|
| $\nu_2+\nu_3$ | 3633,24                           | 541                     | 20               | 10                | 2,39   |
| $2\nu_1$      | 3756,37                           | 249                     | 15               | 6                 | 3,26   |

В таблице 1 представлены итоговые результаты по исследованию полос  $\nu_2+\nu_3$  и  $2\nu_1$  молекулы  $\text{HD}^{32}\text{S}$ , известные на данный момент. Нашей задачей являлось улучшение уже имеющейся информации и получение новой. Улучшение качества эксперимента позволяет нам это сделать.

В 2001 году В. Г. Тютерев, С. А. Ташкун, Д.Швенке опубликовали работу, где была получена потенциальная функция основного электронного состояния молекулы сероводорода [13].

Колебательно-вращательная структура молекулы сероводорода и её изотопических модификаций активно исследуется с 1983. Так как полуэмпирические методы исследования колебательно-вращательных спектров напрямую зависят от точности эксперимента, то улучшение техники и

методики эксперимента позволяет с более высокой точностью определить положение линий в спектре, что в свою очередь влияет на значение спектроскопических параметров молекулы. Более того, повторное исследование спектров даёт возможность определить большее количество энергетических переходов и определить запрещенные переходы, что с количественной точки зрения так же положительно влияет на точность определяемых параметров.

## 2. ТЕОРЕТИЧЕСКИЕ МЕТОДЫ МОЛЕКУЛЯРНОЙ СПЕКТРОСКОПИИ

В колебательно-вращательной спектроскопии молекул переходы между энергетическими уровнями молекулярных квантовых систем изучаются с точки зрения классической механики и описываются как вращение молекулы и колебание её атомных ядер. Поэтому каждому квантовому состоянию соответствует определенный энергетический уровень, а квантовые переходы происходят во время поглощения или испускания электромагнитного излучения. Частота  $\nu$  такого излучения представлена выражением:

$$\nu = (E_m - E_n) / h, \quad (1)$$

где  $E_m$  – энергия верхнего уровня,  $E_n$  – энергия нижнего уровня. Электромагнитное излучение поглощается, если молекула меняет своё квантовое состояние с меньшей энергией на состояние с большей энергией, и испускается в противоположном переходе [14].

Однако молекула – это больше квантово-механический объект и её необходимо рассматривать с точки зрения квантовой механики. Как хорошо известно, для описания состояния любого квантового объекта необходимо решить уравнение Шрёдингера, с целью получения собственных значений и функций оператора гамильтона. Собственные значения данного оператора и есть частоты переходов (или энергии), которые несут ценную информацию, необходимую для колебательно-вращательной спектроскопии. Это задача не простая. На данный момент уравнение Шрёдингера было решено учеными только для атома водорода и водородоподобных систем ( $\text{He}^{2+}$ ,  $\text{Li}^{3+}$  и т.п.).

Задача по определению собственных значений гамильтониана для молекулярных систем является очень сложной. Поэтому появилась необходимость применять различные методы, позволяющие упростить процедуру решения уравнения. В теории колебательно-вращательных спектров таким методом является модель эффективного гамильтониана.

## 2.1 Модель эффективного гамильтониана

Для анализа полученных из эксперимента данных, была использована модель колебательно вращательного эффективного гамильтониана, которая была получена на основе использования свойств симметрии молекулы и с использованием теории неприводимых тензорных операторов. Данная модель гамильтониана учитывает наличие резонансных взаимодействий и имеет следующий вид [1]:

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

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

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

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

$F$  - это оператор Ферми резонансного взаимодействия;

$C$  – соответствует типу Кориолиса взаимодействия.

Диагональные блоки гамильтониана в выражении (1), описывающие вращательную структуру невозмущенных колебательных состояний, взяты в виде оператора Уотсона [16]:

$$\begin{aligned}
 H^{v,\tilde{v}} = & E^v + \left[ A^v - \frac{1}{2}(B^v + C^v) \right] J_z^2 + \frac{1}{2}(B^v + C^v) J^2 + \frac{1}{2}(B^v - C^v) J_{xy}^2 - \\
 & - \Delta_K^v J_z^4 - \Delta_{JK}^v J_z^4 J^2 - \Delta_J^v J^4 - \delta_K^v [J_z^2, J_{xy}^2] - 2\delta_J^v J^2 J_{xy}^2 + \\
 & + H_K^v J_z^6 + H_{KJ}^v J_z^4 J^2 + H_{JK}^v J_z^2 J^4 + H_J^v J^6 + \\
 & + [J_{xy}^2, h_K^v J_z^4 + h_{JK}^v J^2 J_z^2 + h_J^v J^4] + L_K^v J_z^8 + L_{KJ}^v J_z^6 J^2 + \\
 & + L_{JK}^v J_z^4 J^4 + L_{JK}^v J_z^2 J^6 + L_J^v J^6 + \\
 & + [J_{xy}^2, l_K^v J_z^6 + l_{KJ}^v J_z^4 J^2 + l_{JK}^v J_z^2 J^4 + l_J^v J^6] + \\
 & + P_K^v J_z^{10} + [J_{xy}^2, p_K^v J_z^8] \dots,
 \end{aligned} \tag{4}$$

где  $J_{xy}^2 = J_x^2 - J_y^2$ .  $J_\alpha$  ( $\alpha = x, y, z$ ) – компоненты оператора углового момента, определенного в молекулярно-фиксированной системе координат;

$E$  – колебательная энергия,

$A, B, C$  – вращательные постоянные,

$\Delta_J, \Delta_{JK}, \Delta_K, \delta_K, \delta_{JK}$  – параметры центробежного искажения четвертой степени,

$H_K, H_{KJ}, H_{JK}, H_J, h_K, h_{JK}, h_J$  – параметры центробежного искажения шестой степени.

$L_K, L_{KJ}, L_{JK}, L_J, l_K, l_{JK}, l_J$  – параметры центробежного искажения восьмой степени.

$P_K, p_K$  – параметры центробежного искажения десятой степени.

## 2.2 Изотопический эффект в «расширенном» приближении локальных мод

В работе [16] было показано, что особые свойства трехатомных молекул  $XY_2$  (симметрия  $C_{2n}$ ) с внутренним углом  $2\alpha_e$ , близким к  $\pi/2$ , и массовым соотношением  $M_X/M_Y \gg 1$  дают возможность вывести «расширенный метод локальных мод», который позволяет получить наборы простых соотношений между различными спектроскопическими параметрами таких молекул «вблизи локальной моды». В этом случае сравнение теоретических формул с экспериментальными данными показывает, что полученный подход имеет хорошие возможности прогнозирования для молекул типа  $XH_2$  ( $H_2S$  и  $H_2Se$ , так далее).

Существуют молекулы, имеющие физико-химические свойства, очень близкие к свойствам молекул  $XH_2$ , но отличающиеся от них массами ядер; например,  $XHD$  ( $m_X \gg m_D, m_H$ ) можно рассматривать как замену, когда  $XH_2$  является исходным видом. В таком случае молекула  $XHD$  также может обоснованно рассматриваться как тип, близкий к локальной моде, и, с другой стороны, ее спектроскопические параметры и свойства в целом связаны с таковыми у исходных частиц. Последний факт важен для анализа слабых

вращательно-колебательных полос видов, которые спектроскопически изучены лишь слабо. Хорошим примером такой ситуации являются изгибающие обертоны молекулы HDS, которые ранее не анализировались. Анализ реальных спектров является хорошей пробной задачей для установления достоверности и эффективности полученных соотношений. С другой стороны, корректная интерпретация слабых полос не является легкой задачей, и любая дополнительная информация, например, которая может быть получена из предсказаний, является полезной и важной.

Для анализа положений линий в данной работе используются практически те же экспериментальные условия (температура и полное давление образца), что и в предыдущих работах коллег [7]. Следует отметить, что отличия в условиях проведения эксперимента всё-таки есть, но и они не позволяют избавиться от самой важной проблемы в регистрации спектров сероводорода и его изотопологов – появления водяного пара на окнах ячейки, что так же проявляется в спектре. Влияние появления водяного пара описано в главе 5.1. Одним словом, это затрудняет процесс первичной интерпретации спектра молекулы HDS. В связи с этим было принято решение использовать параметры эффективного гамильтониана, рассчитанные на основе результатов и утверждений теории изотопного замещения [17], с высокой точностью.

Основная идея при выводе изотопных связей между различными спектральными постоянными исходного вида  $\text{XH}_2$  и его XHD-замещением заключается в следующем: общие изотопные соотношения, полученные в работе [18] описывают зависимости различных молекулярных параметров

(структурные параметры  $l_{N\gamma\lambda}$ , коэффициенты кориолисовой связи  $\zeta_{\lambda\mu}^{\alpha}$ , колебательно-вращательные коэффициенты  $a^{\alpha\beta}_{\lambda}$ , константы ангармоничности  $k_{\lambda\dots\nu}$  и т. д.) замещенных частиц от соответствующих параметров исходной молекулы. Они могут быть использованы в известных формулах колебательно-вращательной теории, и любой спектроскопический коэффициент замещенной частицы может быть выражен как функция молекулярных параметров исходной молекулы, но, как правило, это сложно. Молекулярные параметры исходной молекулы, в свою очередь, могут быть связаны со спектроскопическими постоянными исходных частиц. В результате спектроскопические постоянные замещенных молекул могут быть выражены как функции спектроскопических постоянных от исходных молекул. В некоторых особых случаях, например, для симметричного замещения молекул  $\text{XH}_2$ , возможно получить простые типы изотопных соотношений. Однако для асимметричных подстановок практически невозможно вывести изотопные соотношения между спектроскопическими константами. В то же время для молекул, близких к локальной моде, существуют простые соотношения между различными молекулярными параметрами исходных частиц  $\text{XH}_2$ , которые приводят к значительным упрощениям общих изотопных соотношений, упомянутых выше.

Так как в данной работе исследовались только состояния (200) и (011), то рассмотрим здесь только те спектроскопические константы, которые соответствуют этим, а именно гармонические частоты и параметры ангармоничности.

Для определения гармонических частот изотопозамещенной молекулы необходимо использовать формулу, связывающую частоты соотношением:

$$\sum_a A_{ba} \omega_a^2 \alpha_{ac} = \alpha_{bc} \omega_c'^2. \quad (5)$$

Формула

$$l'_{N\gamma a} = \sum_{ab} K_{\alpha\gamma}^e \left( \frac{m_N}{m'_N} \right)^{1/2} l_{N\alpha b} (\alpha^{-1})_{ab} \quad (6)$$

определяет структурные постоянные  $l_{N\gamma\lambda}$  изотопозамещенной молекулы как функцию параметров исходной молекулы. Многие параметры изотопозамещенных молекул являются функциями этих коэффициентов. К примеру, с помощью данной формулы можно рассчитать колебательно-вращательные коэффициенты и параметры ангармоничности.

$$\begin{aligned} \alpha_3'^z &= \alpha_3^x + \alpha_3^z; \alpha_1'^z = \alpha_1^x = 0; \\ \alpha_1'^x &= \frac{1}{2\sqrt{2}} (\alpha_1^x + \alpha_1^z); \\ \frac{9\sqrt{2}}{8} \alpha_1'^y &= \alpha_1^y - \frac{B_e^2}{\omega} \cdot \frac{2\theta^2}{2-3\theta^2}; \\ \frac{9}{4} \alpha_3'^y &= \alpha_3^y - \frac{B_e^2}{\omega} \cdot \left\{ \frac{4\theta^2}{4-3\theta^2} - \frac{2\theta^2}{2-3\theta^2} \right\}; \end{aligned} \quad (7)$$

и

$$x_{11}' = \frac{1}{2} x_{33}' = x_{11}; x_{13}' = 0 \quad (8)$$

Все эти 9 параметров (7-8) были теоретически рассчитаны и представлены в таблице 2.

Таблица 2 – Некоторые спектроскопические параметры молекулы HDS (в см<sup>-1</sup>)

| Параметр      | Получен из формул (7-8) |
|---------------|-------------------------|
| $\alpha_1'^z$ | 0,0000                  |
| $\alpha_1'^x$ | 0,1001                  |
| $\alpha_1'^y$ | 0,0387                  |
| $\alpha_3'^z$ | 0,2967                  |
| $\alpha_3'^x$ | 0,0000                  |
| $\alpha_3'^y$ | 0,0291                  |
| $x'_{11}$     | -25,1                   |
| $x'_{13}$     | 0,0000                  |
| $x'_{33}$     | -50,2                   |

### 3. ОБЪЕКТ И МЕТОДЫ ИССЛЕДОВАНИЯ

#### 3.1 Общая характеристика молекулы HD<sup>32</sup>S

Молекула HD<sup>32</sup>S принадлежит к группе симметрии C<sub>s</sub> и является молекулой типа асимметричного волчка. Следовательно, молекула обладает различными моментами инерции и её вращательные постоянные A, B, C – отличны друг от друга [19]. На рис.1 представлена её равновесная структура.

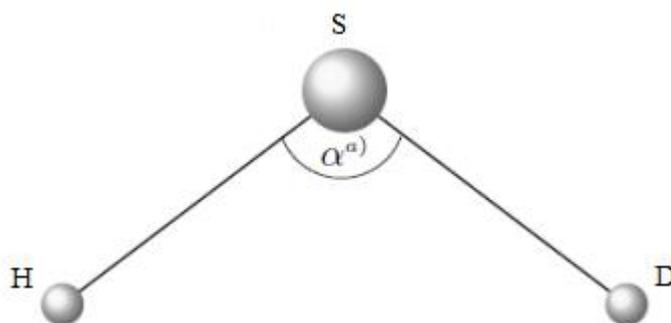


Рисунок 1 – Равновесная геометрия молекулы HDS

Типы симметрии и характеров неприводимых представлений, принадлежащие группе симметрии C<sub>s</sub>, отображены в таблице 3. Молекула HD<sup>32</sup>S имеет три фундаментальных колебания ( $\nu_1$ ,  $\nu_2$ ,  $\nu_3$ ), которые являются полносимметричными, т.е. принадлежат симметрии A'.

Таблица 3 – Типы симметрии и характеров неприводимых представлений для группы симметрии  $C_s$  [7]

| $C_s$ | E | $\sigma_h$ | Колебания       | Базисы        |
|-------|---|------------|-----------------|---------------|
| $A'$  | 1 | 1          | $q_1, q_2, q_3$ | $x, y, R_z$   |
| $A''$ | 1 | -1         |                 | $z, R_x, R_y$ |

В данной работе исследовалась тонкая структура спектра молекулы  $HD^{32}S$  в районе полос  $\nu_2+\nu_3$  и  $2\nu_1$ . Исследуемые полосы являются полосами смешанного типа: а и б. Это означает, что в спектре могут наблюдаться переходы как одного типа, так и другого. В связи с этим необходимо учитывать два варианта правил отбора: 1) для а-типа:  $\Delta J = 0, \pm 1$ ;  $\Delta K_a = 0$ ;  $\Delta K_c = \pm 1$ ; 2) для б-типа:  $\Delta J = 0, \pm 1$ ;  $\Delta K_a = \pm 1$ .  $\Delta K_c = \pm 1$ .

### 3.2 Метод комбинационных разностей

Анализ зарегистрированных с помощью Фурье-спектрометра экспериментальных данных производится методом комбинационных разностей [20]. Основная идея данного метода заключается в том, что рассматриваются переходы между вращательными уровнями основного и возбуждённого колебательных состояний. Необходимым условием является наличие переходов с нескольких вращательных уровней основного колебательного состояния на один вращательный уровень возбуждённого колебательного состояния. Обычно, основное колебательное состояние известно с высокой точностью. Вращательная структура основного состояния рассчитывается с использованием данных из микроволновых спектров. В свою очередь, колебательно – вращательный спектр содержит в себе информацию о переходах между энергетическими уровнями. Таким образом, зная тонкую структуру основного состояния и зная, что переходы совершаются на один и тот же уровень возбуждённого состояния, остается только опередить соответствующие переходы из спектра. Для этого создается «линейка». «Линейка» создается таким образом, что расстояния между делениями соответствуют вращательной структуре основного колебательного состояния (рисунок 2). Передвигая заданную «линейку» по экспериментальному спектру, обнаруживаются линии (количество которых определяется количеством делений линейки), которые совпадают с делениями.

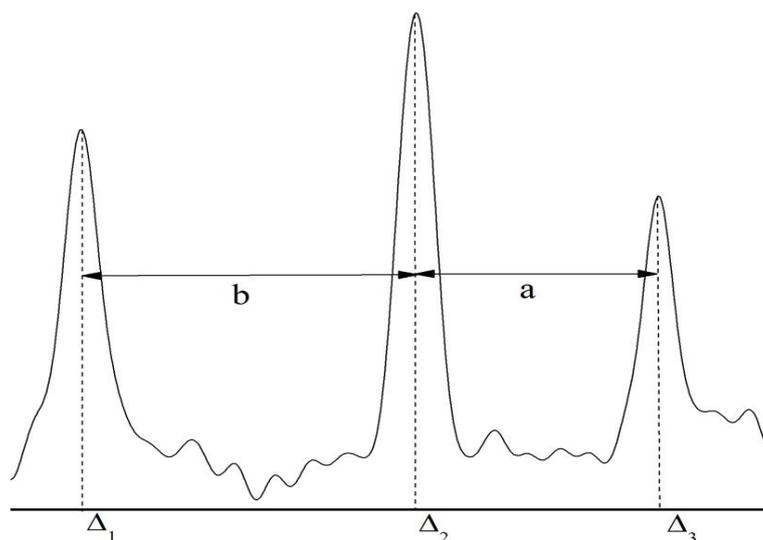


Рисунок 2 – Метод комбинационных разностей

Зная положение нижнего уровня, длины волн переходов, можно рассчитать энергию верхнего уровня. При поиске энергетических переходов наблюдается некое отклонение центра линии спектра от деления «линейки» на некоторую величину. В связи с этим задается точность поиска – « $c$ ». При наличии нескольких комбинаций совпадений выбирается тот, который советуется заданной точности поиска (т.е. комбинационная разность меньше или равна величине « $c$ »). Для корректного поиска энергетических переходов достаточно установить точность  $c \approx 0,0015 \text{ см}^{-1}$ .

Как было уже сказано ранее, исследуемые полосы – гибридные, т.е. переходы, принадлежащие им, могут быть двух типов: а именно «а» и «b»-типа. Поэтому мы указывали в компьютерной программе правила отбора двух типов и в результате получали 2 набора переходов. Переходы а-типа слабоинтенсивные, а у переходов b-типа R, Q-ветви интенсивные, по сравнению с P-ветвью.

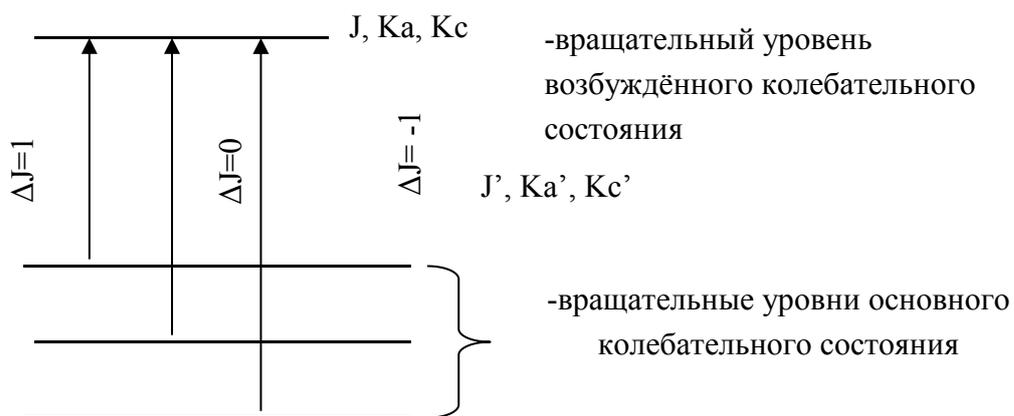


Рисунок 3 – Энергетические переходы с уровня (000) на возбужденное состояние

На рисунке 3 стрелками показаны возможные энергетические переходы, с вращательного уровня основного колебательного состояния на вращательный уровень возбужденного колебательного состояния. Переходы со значениями  $\Delta J = J - J' = 1$  соответствуют R-ветви спектра,  $\Delta J = 0$  соответствует Q-ветви, а  $\Delta J = -1$  – P-ветви.

#### 4. ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНАЯ ЧАСТЬ

Спектр молекулы  $\text{HD}^{32}\text{S}$  был зарегистрирован на Фурье спектрометре Bruker 125 HR в Техническом университете г. Брауншвейга (Германия). Спектрометр работает по принципу интерферометра Майкельсона (рисунок 4).

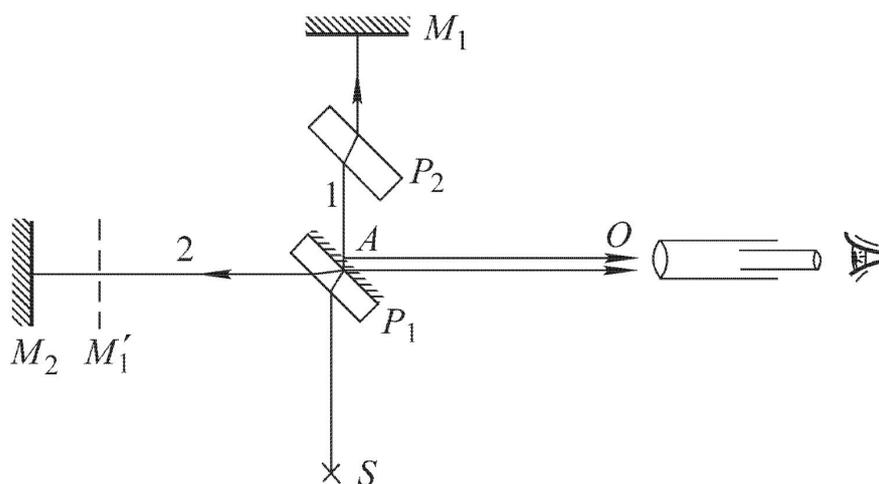


Рисунок 4 – Схема хода лучей в интерферометре Майкельсона

В работе использовались два спектра высокого разрешения. Оба спектра были зарегистрированы в диапазоне  $1600\text{--}4200\text{ см}^{-1}$ . Образец, состоящий из смеси газов  $\text{H}_2\text{S}$ ,  $\text{D}_2\text{S}$ ,  $\text{HDS}$ , был помещен в ячейку Уайта под давлением 4 и 6 мбар. В таблице 4 отображены экспериментальные условия регистрации спектров.

Таблица 4 – Условия эксперимента

| Спектр | Диапазон, $\text{см}^{-1}$ | Давление, мбар | Опт. длина пути, $\text{см}^{-1}$ | Температура, К | Разрешение, $\text{см}^{-1}$ |
|--------|----------------------------|----------------|-----------------------------------|----------------|------------------------------|
| I      | 1600-4200                  | 6,0            | 12                                | 296            | 0,002                        |
| II     | 1750-4200                  | 4,0            | 163                               | 296            | 0,003                        |

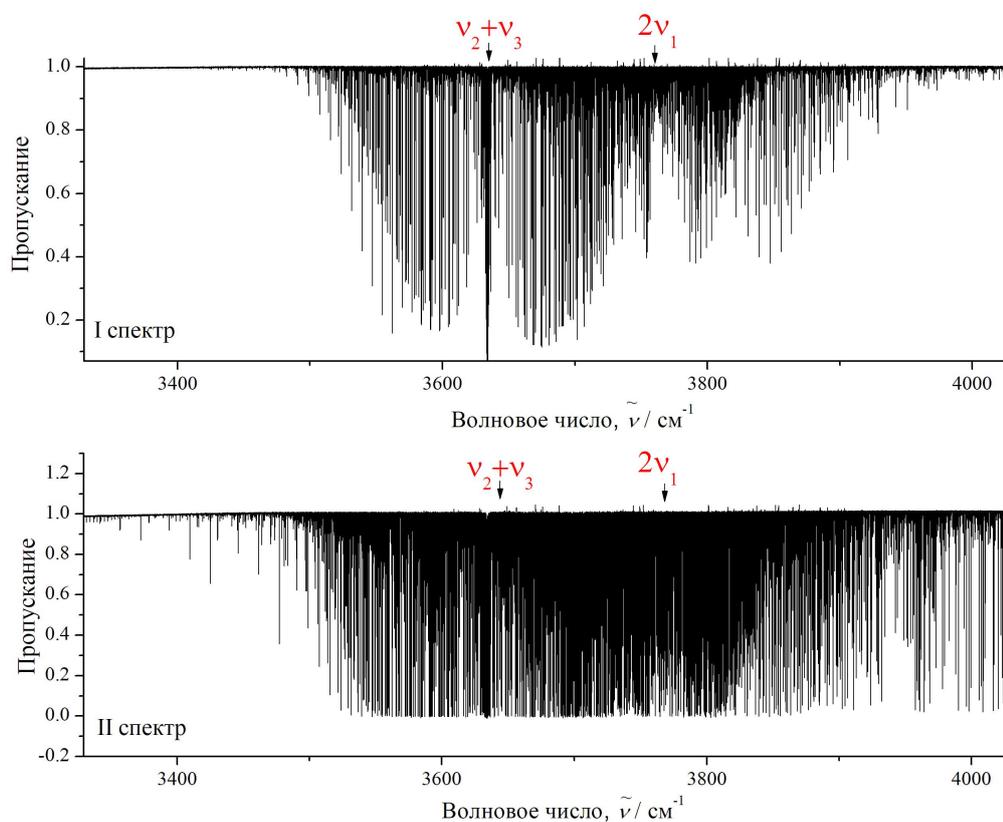


Рисунок 5 – Обзорные спектры молекулы HDS в диапазоне 3350-4050  $\text{см}^{-1}$

## 5. РЕЗУЛЬТАТЫ ИССЛЕДОВАНИЯ

### 5.1 Анализ вращательной структуры колебательного состояния (011)

Полоса  $\nu_2+\nu_3$  является комбинационной полосой, соответствующей однократному возбуждению колебательного состояния  $\nu_2$  и однократному возбуждению состояния  $\nu_3$ . Полоса сильно интенсивная, это можно отметить на рисунке 5. Как можно отметить, что в спектре хорошо просматриваются P-, Q-, R- ветви. Центр полосы –  $3634,3243 \text{ см}^{-1}$ .

Полный колебательно-вращательный анализ полосы заключается в четырёх этапах. Первый – провести первичную интерпретацию спектра, т.е. определить энергетические переходы, принадлежащие исследуемой полосе. Второй – на основе полученных энергий провести фитинг параметров исследуемого состояния. Определенные параметры должны корректно описывать вращательную структуру колебательного состояния, что позволяет предсказывать положения линий, принадлежащих исследуемой полосе с высокой точностью. Третий этап – имея предсказанные значения энергий закончить интерпретацию спектра полосы, найдя все оставшиеся слабоинтенсивные линии. И заключительный этап – определив полную вращательную структуру полосы, необходимо провести последний фитинг параметров, которые будут описывать вращательную структуру колебательного состояния с высокой точностью. Такой подход к колебательно-вращательному анализу полос является наиболее эффективным.

Полоса  $\nu_2+\nu_3$ , имея сильную интенсивность, ранее уже была изучена [7]. Однако, считать данный анализ полным нельзя. Это связано с тем, что в 1998 году не имелось достаточно точного оборудования, которое позволило бы зарегистрировать тонкую структуру спектров. Но это не главное. В то время ни одна химическая лаборатория не могла предоставить чистые образцы газа  $\text{HD}^{32}\text{S}$ . Исследуемое вещество имело в своем составе другие изотопологи сероводорода, а также большую концентрацию водяного пара.

Как же повлияло наличие водяного пара на исследование полосы  $\nu_2+\nu_3$ ? В результате исследования [7] центр полосы  $\nu_2+\nu_3$  определен как  $3634,32 \text{ см}^{-1}$ , а центр сильной фундаментальной полосы  $\nu_1$  молекулы  $\text{H}_2\text{O}$  находится в  $3657,05 \text{ см}^{-1}$ . И в спектре были проявлены обе полосы, что привело практически к полному перекрыванию линий, принадлежащих молекуле  $\text{HDS}$ . В связи с этим не представлялось возможным провести интерпретацию слабых линий молекулы  $\text{HDS}$  среди сильных линий водяного пара и применить уже на то время широко используемый метод комбинационных разностей. По этой причине, интерпретация линий была проделана одновременно с определением параметров эффективного гамильтониана. Результатом такой интерпретации послужили энергетические переходы с максимальными квантовыми числами  $J$  и  $K_a$  равными 15 и 10, соответственно.

В данной работе, в качестве первого приближения, использовались параметры для полосы  $\nu_2+\nu_3$  из данной работы [7]. Данные параметры позволили рассчитать с хорошей точностью положения линий, которые уже были определены ранее, тем самым провести первичную интерпретацию линий.

Так как в нашем случае спектр не отягощен наличием примеси других газов в исследуемом диапазоне, первичная интерпретация прошла успешно. Удалось выстроить красивые серии по квантовому числу  $K_a$  (рисунок 6).

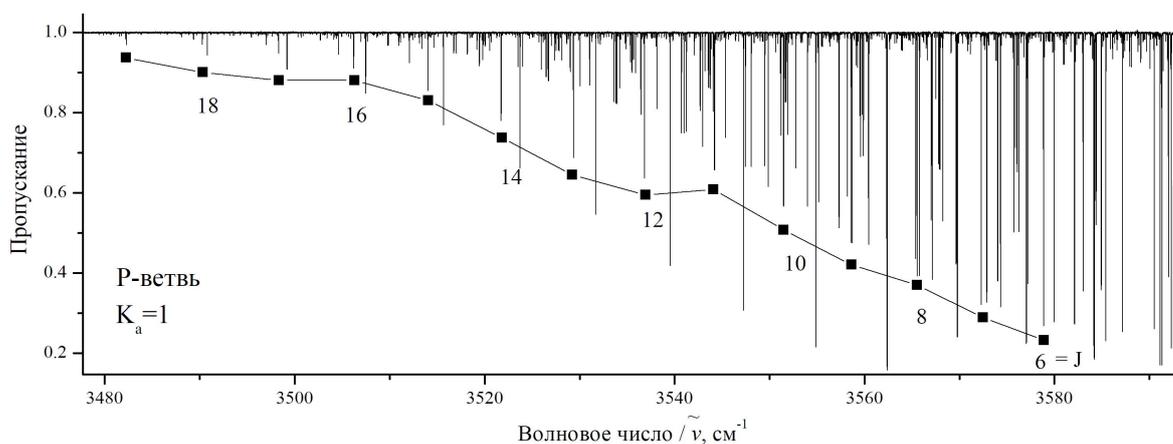


Рисунок 6 – Фрагмент проанализированного спектра (I); линии, принадлежащие полосе  $\nu_2 + \nu_3$  молекулы HDS, переходы со значениями  $J=6-19$  серии  $K_a=1$  отмечены черными квадратами.

Первичный фитинг параметров эффективного гамильтониана проводился с использованием полученных вращательных энергий. Параметры после данной процедуры позволили рассчитать/предсказать значения энергий для больших значений  $J$  и  $K_a$ . Результаты интерпретации колебательно-вращательной полосы  $\nu_2 + \nu_3$  представлены в Таблице 7. Полученные параметры эффективного Гамильтониана, представлены в Таблице 6. Состояние было рассмотрено как изолированное, поэтому при его описании ограничились лишь диагональным блоком эффективного гамильтониана. Для корректного описания проинтерпретированной вращательной структуры исследуемого состояния (1233 линии) достаточно 25 параметров, 16 из них

участвовали в фитинге, остальные параметры были фиксированы значениями соответствующих параметров из работы [7].

Таблица 5 – Статистическая таблица для полосы  $v_2+v_3$

|             |      |      |
|-------------|------|------|
| $N_{tr}$    | 1233 | 541* |
| $N_l$       | 312  | 219* |
| $J^{max}$   | 22   | 20*  |
| $K_a^{max}$ | 15   | 10*  |

$N_{tr}$  – количество переходов с основного колебательного состояния на возбужденное (011);  $N_l$  – количество энергий, которые были вовлечены в фитинг параметров эффективного гамильтониана;  $J^{max}$  и  $K_a^{max}$  – максимальные значения квантовых чисел  $J$  и  $K_a$  для указанных  $N$  энергий.\* - данные, взятые из работы [7].

Таблица 6 – Спектроскопические параметры основного и возбужденного (011) колебательного состояния молекулы HDS (в см<sup>-1</sup>)

| Параметр                  | Основное состояние <sup>a</sup> | v <sub>2</sub> +v <sub>3</sub> <sup>b</sup> |
|---------------------------|---------------------------------|---|
| 1                         | 2                               | 3   |
| E                         |                                 | 3634.324315(30)                             |
| A                         | 9.75178412                      | 9.727915(21)                                |
| B                         | 4.93213844                      | 5.026955(19)                                |
| C                         | 3.22570284                      | 3.162004(55)                                |
| $\Delta_K \times 10^3$    | -0.377125                       | -0.317660(74)                               |
| $\Delta_{JK} \times 10^3$ | 0.956467                        | 1.036046(36)                                |
| $\Delta_J \times 10^3$    | 0.087209                        | 0.100781(48)                                |
| $\delta_K \times 10^3$    | 0.648383                        | 0.816499(54)                                |
| $\delta_J \times 10^3$    | 0.0284447                       | 0.035637(72)                                |
| $H_K \times 10^6$         | 0.4191                          | 0.93338                                     |
| $H_{KJ} \times 10^6$      | -0.6773                         | -0.124461                                   |
| $H_{JK} \times 10^6$      | 0.43313                         | 0.656786                                    |
| $H_J \times 10^6$         | 0.002307                        | 0.531330                                    |
| $h_K \times 10^6$         | 0.9932                          | 1.55284                                     |

|                       |          |           |
|-----------------------|----------|-----------|
| $h_{JK} \times 10^6$  | 0.20978  | 0.302412  |
| $h_J \times 10^6$     | 0.001199 | 0.0026598 |
| $L_K \times 10^9$     | -2.655   | -4.6086   |
| $L_{KJ} \times 10^9$  | 3.760    | 6.0255    |
| $L_{KJK} \times 10^9$ | -1.189   | -1.7028   |
| $L_{JK} \times 10^9$  | -0.1201  | -0.24486  |
| $l_K \times 10^9$     | -1.722   | -3.2144   |
| $l_{KJ} \times 10^9$  | -0.479   | -0.721    |
| $l_{JK} \times 10^9$  | -0.0656  | -0.12211  |
| $P_K \times 10^{12}$  | 0.2922   | 0.2922    |
| $p_K \times 10^{12}$  | -6.43    | -6.43     |

<sup>a</sup> – параметры были взяты из работы [7]. <sup>b</sup> – параметры, полученные в результате фитинга в данной работе. Значения в скобках соответствуют  $1\sigma$  доверительному интервалу.

Таблица 7 — Фрагмент энергетических переходов, соответствующих полосе

 $\nu_2+\nu_3$  молекулы HDS\*

| J  | K <sub>a</sub> | K <sub>c</sub> | E          | $\delta$ | $\Delta$ | J  | K <sub>a</sub> | K <sub>c</sub> | E          | $\delta$ | $\Delta$ |
|----|----------------|----------------|------------|----------|----------|----|----------------|----------------|------------|----------|----------|
| 1  |                |                | 2          | 3        | 4        | 1  |                |                | 2          | 3        | 4        |
| 5  | 5              | 1              | 4019.07748 | 11       | 14       | 10 | 8              | 3              | 4441.93897 | 15       | 10       |
| 6  | 5              | 2              | 4066.78760 | 13       | 15       | 11 | 8              | 4              | 4532.42567 | 19       | 10       |
| 7  | 5              | 3              | 4122.63283 | 26       | -7       | 13 | 8              | 6              | 4739.16752 | -14      | 7        |
| 8  | 5              | 4              | 4186.69600 | 9        | 10       | 9  | 9              | 1              | 4453.62646 | -6       | 5        |
| 9  | 5              | 5              | 4259.03761 | -3       | 8        | 10 | 9              | 2              | 4534.91014 | 36       | 3        |
| 10 | 5              | 6              | 4339.68680 | -3       | 2        | 11 | 9              | 3              | 4624.53716 | -51      | 10       |
| 6  | 5              | 1              | 4066.78900 | -15      |          | 12 | 9              | 4              | 4722.56942 | -7       | 11       |
| 7  | 5              | 2              | 4122.65877 | -7       | -15      | 13 | 9              | 5              | 4829.07646 | -5       | 51       |
| 8  | 5              | 3              | 4186.80657 | -3       | 28       | 10 | 10             | 0              | 4639.57000 | -33      | 48       |
| 9  | 5              | 4              | 4259.40870 | 13       | 1        | 10 | 10             | 1              | 4639.57000 | -20      | 48       |
| 10 | 5              | 5              | 4340.73611 | 3        | 11       | 11 | 10             | 2              | 4728.39191 | -7       |          |
| 11 | 5              | 6              | 4431.17434 | 17       | 7        | 12 | 10             | 2              | 4825.49333 | 23       | 34       |
| 12 | 5              | 7              | 4531.17031 | 10       | 13       | 12 | 10             | 3              | 4825.49333 | 62       | 34       |

\* $\Delta$  – экспериментальная неопределенность в значении энергии, равном одному стандартному отклонению в единицах  $10^{-5} \text{ см}^{-1}$ .  $\delta = E_{\text{exp}} - E_{\text{calc}}$  (в единицах  $10^{-5} \text{ см}^{-1}$ ). Значение  $\Delta$  отсутствует, если значение энергии было получено только от одного перехода энергии.

## 5.2 Анализ вращательной структуры колебательного состояния (200)

Полоса  $2\nu_1$  – обертон, соответствующий двукратному возбуждению колебательной моды  $q_1$ . Центр полосы –  $3756,3360 \text{ см}^{-1}$ . Переходы, принадлежащие исследуемой полосе очень слабые. Поэтому метод комбинационных разностей, широко используемый для интерпретации спектральных линий, был применим лишь в определенных участках спектра, где интенсивность линий позволяла скомпоновать хотя бы 2 ветки (R- и Q-, к примеру). Как следствие, на первом этапе анализа спектров были использованы общие изотопные соотношения из раздела 2.2 для построения синтетического спектра. Эти рассчитанные спектры сформировали качественную базу для дальнейшего исследования. На втором этапе интерпретация линий была выполнена одновременно с фитингом полученных вращательных уровней энергии для колебательного состояния (200). Однако, следует отметить, что у данной полосы самые сильные линии в большинстве случаев принадлежат R-ветви и они расположены в менее плотных областях спектра (Рисунок 5). Это позволяет провести интерпретацию даже очень слабых пиков с высокой точностью. Как следствие, значения энергий верхних уровней будут определены правильно. Значения энергий основного состояния взяты из работы [7].

Как было упомянуто выше, интерпретация линий выполнялась одновременно с фитингом вращательных уровней. Вращательная структура

колебательных состояний (200) быть корректно описана в рамках модели изолированного колебательного состояния, для этого использовался гамильтониан в форме [7].

Таблица 8. – Статистическая таблица для полосы  $2\nu_1$

|             |     |      |
|-------------|-----|------|
| $N_{tr}$    | 753 | 249* |
| $N_l$       | 108 | 108* |
| $J^{max}$   | 22  | 15*  |
| $K_a^{max}$ | 11  | 6*   |

$N_{tr}$  – количество переходов с основного колебательного состояния на возбужденное (011);  $N_l$  – количество энергий, которые были вовлечены в фитинг параметров эффективного гамильтониана;  $J^{max}$  и  $K_a^{max}$  – максимальные значения квантовых чисел  $J$  и  $K_a$  для указанных  $N$  энергий. \* - данные, взятые из работы [7].

В результате проведенного анализа удалось проинтерпретировать практически в 3 раза больше энергетических переходов, чем в предыдущей работе коллег [7]. А также на основе информации о переходах, удалось определить вращательные уровни энергии колебательного состояния (200), которые представлены в столбце 2 таблиц 9. В столбце 3 этой таблицы представлены экспериментальные неопределенности в значениях энергии в единицах  $10^{-5} \text{ см}^{-1}$  в тех случаях, когда значение было получено из более чем одного перехода. Наборы параметров вращательного и центробежного

искажения для проанализированного колебательного состояния, которые были получены из фитинга соответствующих экспериментальных данных в таблице 9, представлены в таблице 10. Энергии верхнего состояния, которые были получены из одного надежного перехода также были включены в фитинг; но некоторые энергии, которые получены от слабых и к тому же накрытых линий, были исключены. Чтобы проиллюстрировать правильность полученных результатов, в столбце 4 таблицы 9 представлены значения  $\delta = E_{\text{exp}} - E_{\text{calc}}$  (в единицах  $10^{-5} \text{ см}^{-1}$ ).

Таблица 9 — Фрагмент энергетических переходов, соответствующих полосе  $2\nu_1$   
молекулы

## HDS

| J  | K <sub>a</sub> | K <sub>c</sub> | E          | Δ  | δ   | J  | K <sub>a</sub> | K <sub>c</sub> | E          | Δ  | δ   |
|----|----------------|----------------|------------|----|-----|----|----------------|----------------|------------|----|-----|
| 1  |                |                | 2          | 3  | 4   | 1  |                |                | 2          | 3  | 4   |
| 8  | 1              | 8              | 3954.69222 | 3  | 14  | 9  | 7              | 2              | 4393.36970 | 10 | 1   |
| 9  | 1              | 9              | 4068.00154 | 22 | -29 | 10 | 7              | 3              | 4472.52240 | 10 | -1  |
| 10 | 1              | 10             | 4134.06450 | 1  | 4   | 11 | 7              | 4              | 4559.9528  | 11 | 9   |
| 11 | 1              | 11             | 4206.38678 | 8  | 24  | 12 | 7              | 5              | 4655.43212 | 14 | -2  |
| 12 | 1              | 12             | 4284.95000 | 14 | 5   | 13 | 7              | 6              | 4759.33442 | 16 | -13 |
| 13 | 1              | 13             | 4369.74984 |    | -15 | 8  | 8              | 1              | 4407.96202 | 8  | -10 |
| 14 | 1              | 14             | 4460.77464 | 1  | -1  | 9  | 8              | 2              | 4478.4907  | 13 | 9   |
| 15 | 1              | 15             | 4558.01303 |    | -30 | 10 | 8              | 3              | 4557.0565  | 12 | 9   |
| 16 | 1              | 16             | 4661.45407 | 7  | 19  | 11 | 8              | 4              | 4643.46124 | 9  | 1   |
| 17 | 1              | 17             | 4771.04975 | 8  | 17  | 9  | 9              | 0              | 4575.58657 | 16 | -2  |
| 18 | 1              | 18             | 4886.86883 | 10 | -1  | 9  | 9              | 1              | 4575.58657 | 16 | -2  |
| 19 | 1              | 19             | 5008.87130 | 4  | -2  | 10 | 9              | 1              | 4653.51790 | 15 | 6   |
| 20 | 1              | 20             | 5137.14662 | 3  | 17  | 10 | 9              | 2              | 4653.51790 | 15 | 6   |

Таблица 10 – Спектроскопические параметры для состояния (200) молекулы

HDS (в  $\text{cm}^{-1}$ )

| Параметр                  | Основное состояние <sup>a</sup> | $2\nu_1^b$      |
|---------------------------|---------------------------------|-----------------|
| 1                         | 2                               | 3               |
| E                         |                                 | 3756.336031(21) |
| A                         | 9.75178412                      | 9.732130(28)    |
| B                         | 4.93213844                      | 4.733462(63)    |
| C                         | 3.22570284                      | 3.148135(81)    |
| $\Delta_K \times 10^3$    | -0.377125                       | -0.361766(67)   |
| $\Delta_{JK} \times 10^3$ | 0.956467                        | 0.968314(73)    |
| $\Delta_J \times 10^3$    | 0.087209                        | 0.0869133(59)   |
| $\delta_K \times 10^3$    | 0.648383                        | 0.655013(56)    |
| $\delta_J \times 10^3$    | 0.0284447                       | 0.028229(16)    |
| $H_K \times 10^6$         | 0.4191                          | 0.420           |
| $H_{KJ} \times 10^6$      | -0.6773                         | -0.79918        |
| $H_{JK} \times 10^6$      | 0.43313                         | 0.46167         |
| $H_J \times 10^6$         | 0.002307                        | 0.002307        |
| $h_K \times 10^6$         | 0.9932                          | 1.19064         |

|                       |          |         |
|-----------------------|----------|---------|
| $h_{JK} \times 10^6$  | 0.20978  | 0.21130 |
| $h_J \times 10^6$     | 0.001199 | 0.0012  |
| $L_K \times 10^9$     | -2.655   | -2.563  |
| $L_{KJ} \times 10^9$  | 3.760    | 3.256   |
| $L_{KJK} \times 10^9$ | -1.189   | -0.902  |
| $L_{JK} \times 10^9$  | -0.1201  | -0.136  |
| $l_K \times 10^9$     | -1.722   | -1.470  |
| $l_{KJ} \times 10^9$  | -0.479   | -0.487  |
| $l_{JK} \times 10^9$  | -0.0656  | -0.070  |
| $P_K \times 10^{12}$  | 0.2922   | 0.292   |
| $p_K \times 10^{12}$  | -6.43    | -6.43   |

<sup>a</sup> – параметры были взяты из работы [7]. <sup>b</sup> – параметры, полученные в результате фитинга в данной работе. Значения в скобках соответствуют  $1\sigma$  доверительному интервалу.

## 6. ФИНАНСОВЫЙ МЕНЕДЖМЕНТ, РЕСУРСОЭФФЕКТИВНОСТЬ И РЕСУРСОСБЕРЕЖЕНИЕ

### Введение

Развитие современной теоретической колебательно -вращательной спектроскопии молекул даёт возможность описывать полученную из эксперимента информацию о молекулярной структуре с высокой точностью. Путем интерпретации спектров можно исследовать основные характеристики молекул, которые проявят различные эффекты внутримолекулярной природы. Предметом исследования в данной работе являются изотопные составы молекулы сероводорода. Изучение HDS важно по нескольким причинам. С одной стороны, сероводород является одной из самых легких молекул типа асимметричного волчка, это хороший предмет для тестирования и развития теорий. Кроме того, молекулярная спектроскопия сероводорода может применяться для мониторинга пожаров, высокочувствительного газового мониторинга в подземных шахтных шахтах и обессеривания и денитрификации угольных электростанций.

Метод Инфракрасная молекулярная спектроскопия является экономичным, эффективным, удобным методом анализа с высокой точностью. По сравнению с другими традиционными методами обнаружения молекул газа инфракрасная спектроскопия безопаснее и быстрее. С развитием технологии, размер и требования к окружающей среде ИК-Фурье спектроскопии

продолжают уменьшаться. Поэтому инфракрасная молекулярная спектроскопия имеет огромный рыночный спрос и коммерческие перспективы.

## **6.1 Оценка коммерческого потенциала и перспективности проведения**

### **6.1.1 Потенциальные потребители результатов исследования**

Это исследование представляет интерес для технологии тестирования. Для введения результатов выпускной квалификационной работы на тему «Анализ колебательно -вращательного спектра высокого разрешения полосы  $2\nu_1$  и  $\nu_2 + \nu_3$  молекулы  $\text{HD}^M\text{S}$  ( $M=32, 34$ )» на целевой рынок, необходимо, прежде всего, произвести анализ потребителей результатов исследования и выявить сегмент рынка.

Сероводород является горючим веществом и представляет собой газ при нормальной температуре и давлении. Это разновидность молекулы, которой необходимо уделять пристальное внимание во время раскопок разведочных скважин и мониторинга окружающей среды. Инфракрасная спектроскопия может применяться во многих случаях для мониторинга. Энергетические уровни молекулярной спектроскопии сероводорода, полученная в данной работе, является основой данных спектрометрического анализа.

## 6.1.2 Анализ конкурентных технических решений

В настоящее время датчики обнаружения газа в основном включают в себя следующее:

- Металлооксидный полупроводниковый датчик
- Каталитический датчик горения
- Датчик постоянного электролитического газа
- Инфракрасный датчик

По сравнению с другими методами детектирования ИК спектроскопия работает более безопасно и точно, и имеет более широкий спектр применения. Но недостатком является то, что система обнаружения является более сложной.

С анализом различных молекулярных спектров и вычислением гамильтоновых констант можно получить более общие молекулярные спектральные законы, и применение инфракрасной спектроскопии станет все более и более популярным.

### 6.1.3 Технология QuaD

Таблица 7 – Оценочная карта для сравнения конкурентных технических решений (разработок)

| Критерии оценки  | Вес критерия | Баллы | Максимальный балл | Относительное значение | Средневзвешенное значение |
|--|--------------|-------|-------------------|------------------------|---------------------------|
| <b>Показатели оценки качества разработки</b>                 |              |       |                   |                        |                           |
| 1, Энергоэффективность                                       | 0,075        | 95    | 100               | 0,95                   | 7,125                     |
| 2, Надежность  | 0,15         | 85    | 100               | 0,85                   | 12,75                     |
| 3, Безопасность  | 0,1          | 100   | 100               | 1                      | 10                        |
| 4, Функциональная мощность                                   | 0,2          | 95    | 100               | 0,95                   | 19                        |
| 5, Простота эксплуатации                                     | 0,075        | 80    | 100               | 0,8                    | 6                         |
| <b>Показатели оценки коммерческого потенциала разработки</b> |              |       |                   |                        |                           |
| 6, Конкурентоспособность                                     | 0,075        | 80    | 100               | 0,8                    | 6                         |

|   |       |    |     |      |        |
|---|-------|----|-----|------|--------|
| продукта                                |       |    |     |      |        |
| 7, Уровень<br>проникновения<br>на рынок | 0,1   | 85 | 100 | 0,85 | 8,5    |
| 8,<br>Перспективность<br>рынка          | 0,15  | 75 | 100 | 0,75 | 11,25  |
| 9, Цена                                 | 0,075 | 70 | 100 | 0,7  | 5,25   |
| Итого                                   | 1     |    |     |      | 85,875 |

Проведем оценку качества и перспективности по технологии QuaD по формуле:

$$P_{\text{ср}} = \sum V_i * B_i = 85,875 \quad (8)$$

где  $P_{\text{ср}}$  – средневзвешенное значение показателя качества и перспективности научной разработки;

$V_i$  – вес показателя (в долях единицы);

$B_i$  – средневзвешенное значение  $i$ -го показателя.

Значение показателя  $P_{\text{ср}}$  получилось 85,9, то такая разработка считается перспективной. По результатам оценки качества и перспективности делается вывод об объемах инвестирования в текущую разработку и направлениях ее дальнейшего улучшения.

#### 6.1.4 SWOT-анализ

Для исследования внешней и внутренней среды проекта применяют анализ SWOT – комплексный анализ научно-исследовательского проекта. Специфика данного анализа формируется несколькими этапами.

На первом этапе выявляются сильные и слабые стороны реализованного проекта в выпускной работе, которые оказывают свое действие во внешней среде. Последним этапом является выявление угроз проекта, представляющих собой любую нежелательную ситуацию, тенденцию или изменение в условиях окружающей среды проекта. В конечном счете, производится анализ интерактивной таблицы в форме записи сильно 68 коррелирующих сильных сторон и возможностей, или слабых сторон и возможностей.

Итогом данного анализа является матрица SWOT, в которой приведены все составляющие данного проекта.

Таблица 8 – SWOT-анализ

|  |  |   |
|--|--|---|
|  | Сильные стороны научно-исследовательского проекта: | Слабые стороны научно-исследовательского проекта: |
|  | С1. Заявленная экономичность энергоэффективность   | Сл1. Сложность спектрального анализа              |

|  |  |  |
|--|--|--|
|  | метода.  |  |
|  | С2. Быстрый анализ полученных данных.  | Сл2. Трудности в количественном анализе  |
|  | С3. Без повреждения образца.   | Сл3. Высокие цены на оборудование  |
|  | С4. Высокая чувствительность.  |  |
|  | С5. Безопасность проведения исследований.  |  |
| Возможности:   | Заявленная повышенная  | Требование опытные   |
| В1. Решение фундаментальных задач исследования.        | экономичность, энергоэффективность и безопасность проекта способствует появлению | исследования талантов и проводит к увеличению стоимости применения технологии. |
| В2. Появление дополнительного спроса на новый продукт. | дополнительного спроса на данный продукт. Также быстрый анализ полученных        |  |
| В3. Необходимость высокоточного тестирования.          | экспериментальных данных повлечет дополнительное решение                         |  |

|  |   |  |
|--|---|--|
| <p>В4. Повышение стоимости конкурентных разработок.</p>  | <p>фундаментальных задач исследования.</p>  |  |
| <p>Угрозы:</p>   | <p>Более низкая стоимость</p>   | <p>Отсутствие необходимого</p>   |
| <p>У1.<br/>Несвоевременное финансирование научного исследования при дальнейшем развитии проекта.</p> | <p>производства по сравнению с другими технологиями повлечет изменение спецификаций стандартов на поставку экспериментальных металлических образцов</p> | <p>оборудования для проведения испытания опытного образца будет являться неотъемлемым фактором, представляющим собой барьер для экспорта</p> |
| <p>У2. Развитая конкуренция технологий производства.</p>   | <p>запрещенного типа.</p>   | <p>технологии. Также высокие цены на оборудование способствуют несвоевременному</p>  |
| <p>У3.<br/>Ограничения на экспорт технологии.</p>  |   | <p>финансированию научного исследования при дальнейшем развитии проекта.</p>   |

Выявления соответствия сильных и слабых сторон научно-исследовательского проекта внешним условиям окружающей среды.

Таблица 9 - Интерактивная матрица проекта

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

Таблица 10 - Интерактивная матрица проекта

|                     | Слабые стороны проекта |      |      |      |
|---------------------|------------------------|------|------|------|
| Возможности проекта |                        | Сл1. | Сл2. | Сл3. |
|                     | В1.                    | -    | 0    | -    |
|                     | В2.                    | -    | -    | -    |
|                     | В3.                    | 0    | 0    | 0    |
|                     | В4.                    | -    | -    | -    |

Таблица 11 - Интерактивная матрица проекта

|                | Сильные стороны проекта |     |     |     |     |     |
|----------------|-------------------------|-----|-----|-----|-----|-----|
| Угрозы проекта |                         | С1. | С2. | С3. | С4. | С5. |
|                | У1.                     | +   | 0   | 0   | 0   | 0   |
|                | У2.                     | -   | +   | +   | +   | +   |
|                | У3.                     | -   | 0   | 0   | 0   | +   |

Таблица 12 - Интерактивная матрица проекта

|                | Слабые стороны проекта |      |      |      |
|----------------|------------------------|------|------|------|
| Угрозы проекта |                        | Сл1. | Сл2. | Сл3. |
|                | У1.                    | -    | -    | -    |
|                | У2.                    | -    | -    | -    |
|                | У3.                    | -    | 0    | -    |

## 6.2 Планирование научно-исследовательских работ

### 6.2.1 Структура работ в рамках научного исследования

Для выполнения и планирования данной работы по теме *Анализ колебательно-вращательного спектра высокого разрешения полос  $2\nu_1$  и  $\nu_2 + \nu_3$  молекулы  $HD^{32}S$* , сначала нужно ее разделить на несколько частей, то есть различные этапы:

1. Подготовительный этап. Выбор темы; анализ актуальности темы, анализ информации по выбранной теме. Техничко-экономическое обоснование целесообразности проведения исследований по данной теме;
2. Изучение литературы по теме, формирование теоретической части. Выявление возможных направлений исследования, календарное планирование работ;
3. Проведение расчетов по теоретической части;
4. Количественная оценка расчетного исследования, выбор параметров, проведение численного моделирования;
5. Анализ результатов, выводы и предложения по теме, обобщение результатов разработки. Составление технологического отчета;
6. Завершающий этап. Утверждение результатов работы, заключение, подготовка отчетной документации.

Научные исследования выполнили научный руководитель и студент.

Таблица 13 – Перечень этапов, работ и распределение исполнителей

| Основные этапы                 | № раб. | Содержание работ                       | Должность исполнителя            |
|--------------------------------|--------|--|----------------------------------|
| Создание темы проекта          | 1      | Составление и утверждение темы НИР     | Научный руководитель             |
|                                | 2      | Анализ актуальности темы               |                                  |
| Выбор направления исследования | 3      | Поиск и изучение материала по теме     | Инженер                          |
|                                | 4      | Выбор направления исследований         | Научный руководитель,<br>Инженер |
|                                | 5      | Календарное планирование работ         |                                  |
| Теоретические исследования     | 6      | Изучение литературы по теме            | Инженер                          |
|                                | 7      | Подбор нормативных документов          |                                  |
|                                | 8      | Анализ используемых средств и методов  |                                  |
|                                | 9      | Систематизация и оформление информации |                                  |
| Оценка                         | 10     | Анализ результатов                     | Научный                          |

|                             |    |                                      |                                  |
|-----------------------------|----|--------------------------------------|----------------------------------|
| полученных<br>результатов   |    |                                      | руководитель, студент            |
|                             | 11 | Заключение                           | Научный<br>руководитель, студент |
| Оформление<br>отчета по НИР | 12 | Составление пояснительной<br>записки | Студент                          |
| Защита отчета               | 13 | Защита ВКР                           | Студент                          |

### 6.2.2 Определение трудоемкости выполнения работ

Трудоемкость выполнения НИОКР оценивается экспертным путем в человеко-днях и носит вероятностный характер, т.к. зависит от множества трудно учитываемых факторов. Расчет трудоемкости осуществляется опытно-статистическим методом, основанным на определении ожидаемого времени выполнения работ в человеко-днях по формуле:

$$t_{ожі} = \frac{3 \cdot t_{mini} + 3 \cdot t_{maxi}}{5}, \quad (9)$$

где  $t_{ожі}$  – ожидаемая трудоемкость выполнения  $i$ -ой работы, чел.-дн.;

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

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

Рассчитаем значение ожидаемой трудоёмкости работы:

Для установления продолжительности работы в рабочих днях используем формулу:

$$T_{pi} = \frac{t_{ожi}}{Ч_i}, \quad (10)$$

где  $T_{pi}$  – продолжительность одной работы, раб. дн.;

$t_{ожi}$  – ожидаемая трудоемкость выполнения одной работы, чел.-дн.;

$Ч_i$  – численность исполнителей, выполняющих одновременно одну и ту же работу на данном этапе, чел.

Для удобства построения календарного план-графика, длительность этапов в рабочих днях переводится в календарные дни и рассчитывается по следующей формуле:

$$T_{ki} = T_{pi} \cdot k, \quad (11)$$

где  $T_{ki}$  – продолжительность выполнения одной работы, календ. дн.;

$T_{pi}$  – продолжительность одной работы, раб. дн.;

$k$  – коэффициент календарности, предназначен для перевода рабочего времени в календарное.

Коэффициент календарности рассчитывается по формуле:

$$k = \frac{T_{\text{кг}}}{T_{\text{кг}} - T_{\text{вд}} - T_{\text{пд}}} \quad (5)$$

где  $T_{\text{кг}}$  – количество календарных дней в году;

$T_{\text{вд}}$  – количество выходных дней в году;

$T_{\text{пд}}$  – количество праздничных дней в году.

Определим длительность этапов в рабочих днях и коэффициент календарности:

$$k = \frac{T_{\text{кг}}}{T_{\text{кг}} - T_{\text{вд}} - T_{\text{пд}}} = \frac{365}{365 - 78} = 1,28 \quad (12)$$

тогда длительность этапов в рабочих днях, что расчетную величину продолжительности работ  $T_{\text{к}}$  нужно округлить до целых чисел.

### 6.2.3 Разработка графика проведения научного исследования

В таблице 14 приведены длительность этапов работ и число исполнителей, занятых на каждом этапе.

Таблица 14 – Длительность этапов работ и число исполнителей, занятых на каждом этапе

| Этап  | Исполнители | Продолжительность работ, дни |      |            |      |                 |      | Длительность работ, чел/дн. |      |                |      |
|---|-------------|------------------------------|------|------------|------|-----------------|------|-----------------------------|------|----------------|------|
|   |             | $t_{\min}$                   |      | $t_{\max}$ |      | $t_{\text{ож}}$ |      | $T_{\text{Pi}}$             |      | $T_{\text{K}}$ |      |
|   |             | НР                           | И    | НР         | И    | НР              | И    | НР                          | И    | НР             | И    |
| Постановка задачи                             | НР          | 3.0                          | 0.0  | 4.0        | 0.0  | 4.2             | 0.0  | 3.5                         | 0.0  | 4.5            | 0.0  |
| Разработка и утверждение технического задания | НР, И       | 2.0                          | 12.0 | 2.5        | 17.5 | 2.7             | 17.7 | 2.3                         | 16.1 | 2.9            | 20.6 |
| Подбор и изучение материалов по тематике      | НР, И       | 10.0                         | 15.0 | 14.5       | 22.0 | 14.7            | 22.2 | 12.3                        | 20.2 | 15.7           | 25.8 |
| Разработка календарного плана                 | НР, И       | 2.0                          | 3.0  | 2.5        | 4.0  | 2.7             | 4.2  | 2.3                         | 3.8  | 2.9            | 4.9  |
| Обсуждение                                    | НР, И       | 2.0                          | 6.0  | 2.5        | 8.5  | 2.7             | 8.7  | 2.3                         | 7.9  | 2.9            | 10.1 |



|   |   |               |    |  |
|---|---|---------------|----|--|
| 1 | Постановка задачи                             | Исп1          | 2  |  |
| 2 | Разработка и утверждение технического задания | Исп1,<br>Исп2 | 19 |  |
| 3 | Подбор и изучение материалов по тематике      | Исп1,<br>Исп2 | 19 |  |
| 4 | Разработка календарного плана                 | Исп1,<br>Исп2 | 4  |  |
| 5 | Обсуждение литературы                         | Исп1,<br>Исп2 | 8  |  |
| 6 | Проектирование структуры ПО                   | Исп1,<br>Исп2 | 19 |  |
| 7 | Разработка ПО                                 | Исп1,<br>Исп2 | 18 |  |
| 8 | Тестирование ПО                               | Исп2          | 1  |  |
| 9 | Оформление расчетно-пояснительной записки     | Исп2          | 19 |  |

|    |   |               |   |  |
|----|---|---------------|---|--|
| 10 | Оформление<br>графического<br>материала | Исп2          | 4 |  |
| 11 | Подведение итогов                       | Исп1,<br>Исп2 | 5 |  |



– Исп. 1 (научный руководитель),



– Исп. 2 (студент)

### 6.3 Бюджет научно-технического исследования (НТИ)

При планировании бюджета НТИ должно быть обеспечено полное и достоверное отражение всех видов расходов, связанных с его выполнением. В процессе формирования бюджета НТИ используется следующая группировка затрат по статьям

- материальные затраты НТИ;
- затраты на специальное оборудование для научных (экспериментальных) работ;
- основная заработная плата исполнителей темы;
- накладные расходы.

### 6.3.1 Расчет материальных затрат НТИ

Расчет материальных затрат осуществляется по следующей формуле:

$$Z_m = (1 + k_T) \cdot \sum_{i=1}^m C_i \cdot N_{расхi}, \quad (13)$$

где:  $m$  – количество видов материальных ресурсов, потребляемых при выполнении научного исследования;

$N_{расхi}$  – количество материальных ресурсов  $i$ -го вида, планируемых к использованию при выполнении научного исследования (шт., кг, м, м<sup>2</sup> и т.д.);

$C_i$  – цена приобретения единицы  $i$ -го вида потребляемых материальных ресурсов (руб./шт., руб./кг, руб./м, руб./м<sup>2</sup> и т.д.);

$k_T$  – коэффициент, учитывающий транспортно-заготовительные расходы.

Транспортные расходы принимаются в пределах 15-25% от стоимости материалов.

Таблица 16 – Материальные затраты

| Наименование | Единица измерения | количество |      | Цена за ед., руб. |       | Затраты на материалы,(зм), руб |       |
|--------------|-------------------|------------|------|-------------------|-------|--------------------------------|-------|
|              |                   | Ис         | Ис   | И                 | И     | И                              | И     |
|              |                   | п. 1       | п. 2 | сп. 1             | сп. 2 | сп. 1                          | сп. 2 |
| Печать       | лист              | 120        | 140  | 2                 | 2     | 2                              | 3     |

|                           |                  |   |   |    |    |     |     |
|---------------------------|------------------|---|---|----|----|-----|-----|
|                           |                  |   |   |    |    | 80  | 20  |
| Интернет                  | М/бит<br>(пакет) | 1 | 1 | 3  | 3  | 4   | 4   |
|                           |                  |   |   | 50 | 50 | 20  | 20  |
| Ручка                     | шт.              | 2 | 3 | 1  | 1  | 2   | 3   |
|                           |                  |   |   | 10 | 10 | 50  | 60  |
| Дополнительная литература | шт.              | 2 | 1 | 4  | 3  | 9   | 4   |
|                           |                  |   |   | 00 | 50 | 40  | 20  |
| Тетрадь                   | шт.              | 1 | 2 | 1  | 1  | 2   | 4   |
|                           |                  |   |   | 5  | 5  | 0   | 0   |
| Итого                     |                  |   |   |    |    | 1   | 1   |
|                           |                  |   |   |    |    | 490 | 520 |

При выполнении научно-исследовательского проекта использовался ПЭВМ - Asus. Срок полезного использования данного ноутбука по паспорту составляет 2 года.

Таблица 17 – Затраты на оборудование

| № | Наименование | Кол-во, шт. | Срок полезного | Цены единицы | Общая стоимость |
|---|--------------|-------------|----------------|--------------|-----------------|
|---|--------------|-------------|----------------|--------------|-----------------|

|              | оборудования |              | использовани<br>я, лет | оборудовани<br>я, тыс. руб. | оборудовани<br>я, тыс. руб. |
|--------------|--------------|--------------|------------------------|-----------------------------|-----------------------------|
| 1            | ПЭВМ         | 1            | 3                      | 20                          | 20                          |
| <b>Итого</b> |              | 20 тыс. руб. |                        |                             |                             |

Расчет амортизации проводится следующим образом:

Норма амортизации определяется по следующей формуле:

$$H_A = \frac{1}{n},$$

где  $n$  – срок полезного использования в годах.

Амортизация определяется по следующей формуле:

$$A = \frac{H_A \cdot I}{12} \cdot m,$$

где  $I$  – итоговая сумма, тыс. руб.;

$m$  – время использования, мес.

Рассчитаем норму амортизации для ноутбука, с учётом того, что срок полезного использования составляет 2 года:

$$H_A = \frac{1}{n} = 0,5$$

Общую сумму амортизационных отчислений находим следующим образом:

$$A = \frac{N_{\text{АИ}}}{12} \cdot m = \frac{0,5 * 20000}{12} = 833 \text{руб.}$$

### 6.3.3 Основная и дополнительная заработная плата исполнителей темы

Статья включает основную заработную плату работников, непосредственно занятых выполнением НИИ, (включая премии, доплаты) и дополнительную заработную плату:

$$Z_{\text{зп}} = Z_{\text{осн}} + Z_{\text{доп}} \quad (14)$$

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

$$Z_{\text{осн}} = Z_{\text{дн}} * T_{\text{р}} \quad (15)$$

где:  $Z_{\text{осн}}$  – основная заработная плата;

$T_{\text{р}}$  – продолжительность работ, выполняемых научно-техническим работником, раб. дн.;

$Z_{\text{дн}}$  – среднедневная заработная плата работника, руб.

Среднедневная заработная плата рассчитывается по формуле: для руководителя и бакалавра считается отдельно. (Бакалавр берет заработную плату как младший научный сотрудник 1-го уровня)

$$Z_{\text{дн}} = \frac{Z_{\text{м}} \cdot M}{F_{\text{д}}} \quad (16)$$

где  $Z_{\text{м}}$  – месячный должностной оклад работника, руб.;

$M$  – количество месяцев работы без отпуска в течение года:

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

$F_{\text{д}}$  – действительный годовой фонд рабочего времени научно-технического персонала, раб. дн. (таблица 10).

Таблица 17 – Баланс рабочего времени

| Показатели рабочего времени                                     | Руководитель | Студент |
|---|--------------|---------|
| Календарное число дней  | 365          | 365     |
| Количество нерабочих дней                                       | 52           | 52      |
| - выходные дни  | 26           | 26      |
| - праздничные дни   |              |         |
| Потери рабочего времени   | 48           | 48      |
| - отпуск  |              |         |
| Действительный годовой фонд рабочего времени ( $F_{\text{д}}$ ) | 239          | 239     |

Месячный должностной оклад работника:

$$Z_{\text{м}} = Z_{\text{тс}} \cdot (1 + k_{\text{пр}} + k_{\text{д}}) \cdot k_{\text{р}} \quad (18)$$



Основная заработная плата руководителя (от ТПУ) рассчитывается на основании отраслевой оплаты труда. Отраслевая система оплаты труда в ТПУ предполагает следующий состав заработной платы:

1) оклад – определяется предприятием. В ТПУ оклады распределены в соответствии с занимаемыми должностями, например, ассистент, ст. преподаватель, доцент, профессор (см. «Положение об оплате труда», приведенное на интернет-странице Планово-финансового отдела ТПУ).

2) стимулирующие выплаты – устанавливаются руководителем подразделений за эффективный труд, выполнение дополнительных обязанностей и т.д.

3) иные выплаты; районный коэффициент.

Таким образом, основная заработная плата руководителя равна 147645,19 рублей, студента – 140702,62 рублей.

Затраты по дополнительной заработной плате исполнителей темы учитывают величину предусмотренных Трудовым кодексом РФ доплат за отклонение от нормальных условий труда, а также выплат, связанных с обеспечением гарантий и компенсаций (при исполнении государственных и 32 общественных обязанностей, при совмещении работы с обучением, при предоставлении ежегодного оплачиваемого отпуска и т.д.).

Расчет дополнительной заработной платы ведется по следующей формуле:

$$Z_{\text{доп}} = k_{\text{доп}} \cdot Z_{\text{осн}} \quad (19)$$

где  $k_{\text{доп}}$  – коэффициент дополнительной заработной платы (на стадии проектирования принимается равным 0,12 – 0,15). Расчет дополнительной заработной платы приведен в таблице 12.

#### 6.3.4 Отчисления во внебюджетные фонды (страховые отчисления)

Величина отчислений во внебюджетные фонды определяется исходя из следующей формулы:

$$Z_{\text{внеб}} = k_{\text{внеб}} \cdot (Z_{\text{осн}} + Z_{\text{доп}}), \quad (20)$$

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

Общая ставка взносов составляет в 2018 году – 30% (ст. 425, 426 НК РФ). При этом сумма взносов к уплате зависит от того, превысил доход установленный лимит или нет. Ставка 30% будет действовать по 2020 год включительно (ст. 425, 426 НК РФ).

Таблица 19 – Отчисления во внебюджетные фонды

| Исполнитель          | Основная заработная плата, руб. | Дополнительная заработная плата, руб. |
|----------------------|---------------------------------|---------------------------------------|
| Научный руководитель | 147645,19                       | 20670,33                              |

|   |           |          |
|---|-----------|----------|
| Студент (Инженер)                               | 140702,62 | 19698,37 |
| Коэффициент отчислений<br>во внебюджетные фонды | 0,30      |          |
| Отчисления, руб                                 |           |          |
| Научный руководитель                            | 50494,65  |          |
| Студент (Инженер)                               | 48120,30  |          |

### 6.3.5 Накладные расходы

Накладные расходы учитывают прочие затраты организации, не попавшие в предыдущие статьи расходов: печать и ксерокопирование материалов исследования, оплата услуг связи, электроэнергии, почтовые и телеграфные расходы, размножение материалов и т.д. Их величина определяется по следующей формуле:

$$Z_{\text{накл}} = (\text{сумма статей } 1 \div 7) \cdot k_{\text{нр}} \quad (21)$$

где  $k_{\text{нр}}$  – коэффициент, учитывающий накладные расходы.

Величину коэффициента накладных расходов можно взять в размере 16%.

Расчет величины накладных расходов приведен в таблице 13.

Таблица 20 – Накладные расходы

|                      |             |
|----------------------|-------------|
|                      | Зкнал, руб. |
| Научный руководитель | 35248,03    |
| Инженер              | 33606,61    |

### 6.3.6 Формирование бюджета затрат научно- исследовательского проекта

Рассчитанная величина затрат научно-исследовательской работы (темы) является основой для формирования бюджета затрат проекта, который при формировании договора с заказчиком защищается научной организацией.

Определение бюджета затрат на научно-исследовательский проект по каждому варианту исполнения приведен в таблице 14:

Таблица 21 – Расчет бюджета затрат НТИ

| Наименование статьи  | Сумма, руб.          |           | Примечание |
|--|----------------------|-----------|------------|
|  | Научный руководитель | Инженер   |            |
| Материальные затраты НТИ                                     | 1490                 | 2353      | Таб. 9     |
| Затраты по основной заработной плате исполнителей темы       | 147645,19            | 140702,62 | Таб. 12    |
| Затраты по дополнительной заработной плате исполнителей темы | 20670,33             | 19698,37  | Таб. 12    |

|                                  |           |           |                       |
|----------------------------------|-----------|-----------|-----------------------|
| Отчисления во внебюджетные фонды | 50494,65  | 48120,30  | Таб. 12               |
| Накладные расходы                | 35248,03  | 33739,89  | 16 % от суммы ст. 1-4 |
| Бюджет затрат НИИ                | 255548,19 | 244614,18 | суммы ст. 1-5         |

Выводы: суммарный бюджет затрат НИИ составил – 500162,37 рублей.

## **6.4 Определение целесообразности и эффективности научного исследования**

### **6.4.1 Анализ и оценка научно-технического уровня проекта**

Для оценки научной ценности, технической значимости и эффективности исследования необходимо: рассчитать коэффициент научнотехнического уровня. Коэффициент НТУ рассчитывается при помощи метода балльных оценок, в котором каждому из признаков НТУ присваивается определенное число баллов по принятой шкале. Общую оценку приводят по сумме баллов по всем показателям с учетом весовых характеристик. Общая оценка рассчитывается по формуле:

$$\text{НТУ} = \sum_{i=1}^n k_i \cdot \Pi_i \quad (22)$$

где  $k_i$  – весовой коэффициент  $i$  – го признака;

$\Pi_i$  – количественная оценка  $i$  – го признака.

Таблица 22 – Весовые коэффициенты НТУ

| <b>Признаки НТУ</b>               | <b>Весовой коэффициент</b> |
|-----------------------------------|----------------------------|
| Уровень новизны                   | 0,4                        |
| Теоретический уровень             | 0,2                        |
| Возможность и масштабы реализации | 0,4                        |

Таблица 23 – Шкала оценки новизны

| <b>Баллы</b> | <b>Уровень</b>           |
|--------------|--------------------------|
| 1-4          | Низкий НТУ               |
| 5-7          | Средний НТУ              |
| 8-10         | Сравнительно высокий НТУ |
| 11-14        | Высокий НТУ              |

Таблица 24 – Значимость теоретических уровней

| <b>Характеристика значимости теоретических уровней</b> | <b>Баллы</b> |
|--|--------------|
|--|--------------|

|   |     |
|---|-----|
| Установка законов, разработка новой теории  | 10  |
| Глубокая разработка проблем, многосторонний анализ, взаимозависимость между факторами                       | 8   |
| Разработка алгоритма  | 6   |
| Элементарный анализ связей между факторами (наличие гипотезы, объяснение версий, практические рекомендации) | 2   |
| Описание отдельных факторов (вещества, свойств, опыта, результатов)   | 0.5 |

Таблица 25 - Возможность реализации по времени и масштабам

| <b>Время реализации</b>        | <b>Баллы</b> |
|--------------------------------|--------------|
| <u>В течение первых лет</u>    | <u>10</u>    |
| От 5 до 10 лет                 | 4            |
| Свыше 10 лет                   | 2            |
| <b>Масштабы реализации</b>     | <b>Баллы</b> |
| Одно или несколько предприятий | 2            |
| <u>Отрасль</u>                 | <u>4</u>     |
| Народное хозяйство             | 10           |

$$k_1 = 0,4, \quad \Pi_1 = 10, \quad k_2 = 0,2, \quad \Pi_2 = 8,$$

$$k_3 = 0,2, \quad \Pi_3 = 10, \quad k_4 = 0,2, \quad \Pi_4 = 4.$$

$$\text{НТУ} = 0,4 \cdot 10 + 0,2 \cdot 8 + 0,2 \cdot 10 + 0,2 \cdot 4 = 8,4$$

По полученным результатам расчета коэффициента научнотехнического уровня можно сделать вывод, что данный проект имеет высокую значимость теоретического и практического уровня, и при этом используется в широком спектре отраслей.

#### 6.4.2 Оценка важности рисков

При оценке важности рисков оценивается вероятность их наступления ( $P_i$ ). По шкале от 0 до 100 процентов: 100 – наступит точно, 75 – скорее всего наступит, 50 – ситуация неопределенности, 25 – риск скорее всего не наступит, 0 – риск не наступит. Оценка важности риска оценивается весовым коэффициентом ( $w_i$ ). Важность оценивается по 10 – балльной шкале  $b_i$ . Сумма весовых коэффициентов должна равняться единице. Оценка важности рисков приведена в таблице.

Таблица 26 – Экономические риски

| № | Риски    | $P_i$ | $b_i$ | $w_i$ | $P_i \cdot w_i$ |
|---|----------|-------|-------|-------|-----------------|
| 1 | Инфляция | 100   | 1     | 0.019 | 1.960           |

|   |   |    |    |       |        |
|---|---|----|----|-------|--------|
| 2 | Экономический кризис  | 25 | 2  | 0.039 | 0.980  |
| 3 | Недобросовестность поставщиков  | 25 | 6  | 0.117 | 2.941  |
| 4 | Непредвиденные расходы в плане работ                                    | 50 | 7  | 0.137 | 6.862  |
| 5 | Снижение уровня спроса на продукцию                                     | 50 | 10 | 0.196 | 9.803  |
| 6 | Сложность выхода на мировой рынок вследствие монополизированности рынка | 75 | 7  | 0.137 | 10.294 |
| 7 | Колебания рыночной конъюнктуры  | 25 | 6  | 0.117 | 2.941  |
| 8 | Отсутствие в числе сотрудников экономистов                              | 25 | 2  | 0.039 | 0.980  |
| 9 | Низкие объемы сбыта   | 50 | 10 | 0.196 | 9.803  |
|   | Сумма   |    | 50 | 1     | 46.564 |

Таблица 27 – Технологические риски

| № | Риски                                      | Pi | bi | wi    | Pi*wi |
|---|--|----|----|-------|-------|
| 1 | возможность поломки оборудования           | 25 | 7  | 0.250 | 6.250 |
| 2 | низкое качество поставленного оборудования | 25 | 9  | 0.321 | 8.036 |
| 3 | неправильная сборка оборудования           | 25 | 8  | 0.286 | 7.143 |

|   |  |    |    |       |        |
|---|--|----|----|-------|--------|
| 4 | опасность для работающего персонала и аппаратуры | 75 | 4  | 0.143 | 10.714 |
|   | Сумма  |    | 28 | 1.000 | 32.142 |

Таблица 28 – Научно-технические риски

| № | Риски  | $P_i$ | $p_i$ | $w_i$ | $P_i * w_i$ |
|---|--|-------|-------|-------|-------------|
| 1 | развитие конкурентных технологий                                 | 75    | 7     | 0.145 | 10.937      |
| 2 | создание новых методов синтеза                                   | 75    | 7     | 0.145 | 10.937      |
| 3 | риск невозможности усовершенствования технологии                 | 50    | 3     | 0.166 | 8.333       |
| 4 | отсутствие результата в установленные сроки                      | 50    | 7     | 0.145 | 7.292       |
| 5 | получение отрицательного результата при внедрении в производство | 25    | 10    | 0.208 | 5.208       |
| 6 | несвоевременное патентование                                     | 25    | 9     | 0.187 | 4.687       |
|   | Сумма  |       | 48    | 1.000 | 47.395      |

Таблица 29 – Общая оценка риска проекта

| Виды рисков в группе | Pi    | bi | wi   | Pi*wi |
|----------------------|-------|----|------|-------|
| Экономические        | 46,57 | 10 | 0,25 | 11,64 |
| Технологические      | 32,14 | 9  | 0,5  | 16,07 |
| Научнотехнические    | 47,4  | 6  | 0,25 | 11,85 |
| Итого                |       | 25 | 1    | 39,56 |

Итоговая оценка риска проекта составила порядка 40%, т.е. проект имеет право на жизнь, хотя и не лишен препятствий.

Для того чтобы избежать риски или минимизировать их воздействие на проект необходимо проводить мероприятия по борьбе с рисками.

Таким образом, анализируя результаты данного раздела, можно заключить, что проводимое исследование имеет высокую значимость теоретического и практического уровня, а также приемлемый уровень рисков. Это подтверждает целесообразность проводимого научного исследования.

## Вывод

В ходе выполнения раздела «Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение» были решены следующие задачи:

1. Проведена оценка коммерческого потенциала и перспективности проведения научного исследования на примере SWOT-анализа, результат которого показал большой потенциал применения методики, а так же возможность быстрого выхода на внешний рынок обеспечены принципиально новым подходом к решению поставленной задачи.

2. Определен полный перечень работ, проводимых при проектировании релейной защиты. Общее число работ составило 6. Определена трудоемкость проведения работ. Ожидаемая трудоемкость работ для научного руководителя составила 58 чел-дней, для студента-исполнителя составила 104 чел-дней. Общая максимальная длительность выполнения работы составила 180 календарных дней.

3. Суммарный бюджет затрат НИИ составил – 500162 рублей. Расчет бюджета осуществлялся на основе следующих пунктов: - расчет материальных затрат НИИ; - основная заработная плата исполнителей темы; - дополнительная заработная плата исполнителей темы; - отчисления во внебюджетные фонды (страховые отчисления); - накладные расходы.

4. Определена целесообразность и эффективность научного исследования путем анализа и оценки научно-технического уровня проекта, а

также оценки возможных рисков. В результате проводимое исследование имеет высокую значимость теоретического и практического уровня и приемлемый уровень рисков.

Следует отметить важность для проекта в целом проведенных в данной главе работ, которые позволили объективно оценить эффективность проводимого научно-технического исследования.

## 7.СОЦИАЛЬНАЯ ОТВЕТСТВЕННОСТЬ

Современное производство нацелено на увеличение объемов изготовленных товаров при минимизации затрат. С одной стороны, это повышает комфортность существования человечества, а с другой стороны, производственные процессы часто являются источниками опасности для человечества в целом. Эти опасности можно разделить на:

- порожденные наличием опасных и вредных производственных факторов;
- экологические, связанные с истощением природных ресурсов при добыче сырья и загрязнением окружающей среды производственными отходами;
- вызванные чрезвычайными происшествиями на производстве, инициированными природными катаклизмами, крупными авариями, военными действиями и т.д.

Содержание данного раздела должно быть конкретным и полностью соответствовать теме ВКР. Рассмотрению подлежат вопросы социальной направленности работы в целом, возможности возникновения негативных воздействий на человека и окружающую среду в процессе разработки, изготовления, эксплуатации и утилизации разрабатываемого объекта.

## **7.1 Анализ выявленных вредных факторов проектируемой производственной среды**

В лаборатории, где расположены рабочие места за персональными компьютерами могут быть следующие вредные факторы: наличие - а) некомфортных метеоусловий; б) шума; в) недостаточной освещенности; г) электромагнитных полей.

### **7.1.1 Метеоусловия**

Микроклимат на рабочем месте зависит от ряда многих факторов, в том числе таких, как теплофизические особенности технологического процесса и вида используемого оборудования, климат, сезон или период года, число работников, а также условий отопления и вентиляции, размеров и состояния производственного помещения и др. Микроклимат, особенно температура воздуха и тепловое излучение, может меняться на протяжении рабочего дня, быть различным на отдельных участках одного и того же помещения. Кроме этих параметров, являющихся основными, не следует забывать об атмосферном давлении, которое влияет на парциальное давление основных компонентов воздуха (кислорода и азота), а, следовательно, и на процесс дыхания.

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 1 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 30 – Оптимально допустимые показатели для рабочей зоны

| Период<br>года | Температура, ОС |                 |            |                | Относительная<br>влажность, % | Скорость<br>движения, м/с |                         |                        |         |            |
|----------------|-----------------|-----------------|------------|----------------|-------------------------------|---------------------------|-------------------------|------------------------|---------|------------|
|                | Оптим.          | Допустимая      |            |                |                               | Оптим.                    | Допуст.,<br>не<br>более | Оптим.,<br>не<br>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 |            |
| Тепло          | 23-25           | 23              | 27         | 20             | 18                            | 40-60                     | 15-75                   | 0,3                    | 0,2-0,4 |            |

При высокой температуре воздуха в помещении кровеносные сосуды кожи расширяются, происходит повышенный приток крови к поверхности тела, и выделение тепла в окружающую среду значительно увеличивается. При

низкой температуре окружающего воздуха реакция человеческого организма иная: кровеносные сосуды кожи сужаются, приток крови к поверхности тела замедляется, и теплоотдача конвекцией и излучением уменьшается. Таким образом, для теплового самочувствия человека важно определенное сочетание температуры, относительной влажности и скорости движения воздуха в рабочей зоне.

Повышенная влажность воздуха ( $\varphi > 85\%$ ) затрудняет терморегуляцию организма, т.к. происходит снижение 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.

### **7.1.2 Электромагнитные поля**

Дипломная работа выполнялась с применением персональных компьютеров (ПЭВМ) типа IBM PC. Основным вредным фактором,

воздействию которого подвергается инженер-исследователь при работе за компьютером, является электромагнитное излучение.

Безопасные уровни излучений регламентируются нормами СанПиН 2.2.2/2.4.1340–03 и представлены в таблице 15.

Таблица 31 – Временные допустимые уровни (ВДУ) электромагнитных полей, создаваемых ПЭВМ на рабочих местах

| Наименование параметров                | Нормы в диапазоне частот | ВДУ        |
|--|--------------------------|------------|
| Напряженность электрического поля      | 5 Гц - 2 кГц             | 25<br>В/м  |
|  | 2 кГц - 400 кГц          | 2,5<br>В/м |
| Плотность магнитного потока            | 5 Гц - 2 кГц             | 250<br>нТл |
|  | 2 кГц - 400 кГц          | 25<br>нТл  |
| Напряженность электростатического поля |                          | 15<br>кВ/м |

Вредное воздействие ПЭВМ на организм человека проявляется в нагрузке на зрение, заболеваниях кожи лица, нервных и психических заболеваниях и т.д. Допустимая напряжённость электрического поля: 25 В/м (5Гц-2кГц) и 2,5 В/м (2-400 кГц). Для защиты от электромагнитных полей используются различные фильтры. Ориентация светопроёмов должна быть северо-восточной или северной. Источники искусственного освещения: люминесцентные лампы типа ЛБ и ДРЛ. Оптимальные параметры микроклимата. При работе с ПЭВМ уровень звука не должен превышать значений, установленных для данных видов работ. Кроме этого, для ослабления влияния рассеянного рентгеновского излучения от монитора ПК рекомендуется использовать защитные фильтры (экраны).

### **7.1.3 Шум**

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 2 приведены допустимые уровни звукового давления на рабочем месте.

Таблица 32 – Допустимы уровни звукового давления на рабочем месте

| Вид деятельности                           | Частота, Гц                    |     |     |     |      |      |      |      |
|--|--------------------------------|-----|-----|-----|------|------|------|------|
|  | Уровень звукового давления, дБ |     |     |     |      |      |      |      |
| Научная<br>деятельность,<br>проектирование | 62                             | 125 | 250 | 500 | 1000 | 2000 | 4000 | 8000 |
|  | 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.

#### 7.1.4 Освещенность

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 света) мощностью 20, 40, 80 Вт. Для рабочих мест с искусственным 42 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 различения и условий зрительной работы. Принимаем четвертый разряд зрительной работы (средней точности). Допустимые значения наименьшей освещенности рабочих поверхностей в производственных помещениях в соответствии со СНиП 23-05-95 для четвертого разряда зрительной работы приведены в таблице 3. 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 33 – Нормирование значения освещенности на рабочих местах производственных помещений при искусственном освещении

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

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  $A = 5300$  мм, ширина  $B = 4700$  мм, высота  $3500$  мм. Высота рабочей поверхности над полом  $h_p = 800$  мм. Согласно СНиП 23-05-95 необходимо создать освещенность не ниже  $150$  лк, в соответствии с разрядом зрительной работы.

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

Коэффициент отражения свежепобеленных стен с окнами, без штор  $\rho_{\text{п}} = 50\%$  свежепобеленного потолка  $\rho_{\text{п}} = 70\%$ . Коэффициент запаса, соответствующий помещению с малым выделением пыли равен  $K_3 = 1,5$ . Коэффициент неравномерности для люминесцентных ламп  $Z = 1,5$ .

Для освещения комнаты, с представленными выше параметрами, выбираем лампу дневного света ЛД-40, световой поток которой равен  $\Phi_{\text{ЛД}} = 2300$  Лм.

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  $\lambda$ , 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

$$\text{формуле: } h = H - h_p - h_c = 2,4 \text{ м.}$$

Расстояние между соседними светильниками или рядами определяется по формуле:

$$L = \lambda \times h = 2,64 \text{ м.}$$

$$\text{Число рядов светильников в помещении: } N_A = \frac{A}{L} = 1,74 = 2$$

$$\text{Число светильников в ряду: } N_B = \frac{B}{L} = 2,01 = 2$$

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

Расстояние от крайних светильников или рядов до стены определяется по формуле:  $l = \frac{L}{3} = 0,88$  м

Индекс помещения определяется по формуле:

$$i = \frac{A \times B}{h(A \times B)} = 1,04$$

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

Потребный световой поток группы люминесцентных ламп светильника определяется по формуле:

$$\Phi_n = \frac{E \cdot A \cdot B \cdot K_3 \cdot Z}{N \cdot \eta} = 2836 \text{ лм.}$$

Делаем проверку выполнения условия:

$$\frac{\Phi_{\text{лд}} - \Phi_{\text{п}}}{\Phi_{\text{лд}}} \cdot 100\% = -9,07\% \quad , \quad -10\% \leq \frac{\Phi_{\text{лд}} - \Phi_{\text{п}}}{\Phi_{\text{лд}}} \cdot 100\% \leq 20\%$$

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

### **7.1.5 Охрана 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 на пластик, стекло, макулатура и алюминий. В частности, в городе Томск существует две компании, которые занимаются сбором и доставкой на перерабатывающие заводы подобного сырья. Например, компания «Чистый мир» устанавливает по всему городу желтые сетки с памяткой, какой мусор можно утилизировать путем переработки. Данная компания бесплатно обслуживает подобные сетки и проводит различные благотворительные акции.

### **7.2 Организационные мероприятия обеспечения безопасности**

Также обосновываются организационные мероприятия, обеспечивающие безопасную эксплуатацию компьютера: присутствие людей в рабочей зоне разрешается в течение 8 часов. Для обеспечения безопасности перед началом работы необходимо правильно надеть спецодежду, подготовить для работы необходимый инструмент и приспособления, приготовить рабочий стол. Также необходимо проверить отсутствие внешних повреждений электрооборудования, наличие и исправность контрольных, измерительных и сигнальных приборов, компьютера, тумблеров, переключателей и т.п. При

выявлении неисправностей, не допускается проводить ремонт самостоятельно, необходимо доложить руководителю лаборатории. Наладка прибора и его ремонт осуществляется только сервис-инженерами.

Запрещается приступать к работе, если выявлены неисправности любого используемого оборудования, если персонал не прошел в установленном порядке обучение и проверку знаний безопасности труда.

Работа с суперкомпьютером должна производиться в чистом помещении, свободном от пыли, паров, кислот и щелочей, агрессивных газов и других вредных примесей, вызывающих коррозию. Недопустимо наличие открытого огня около прибора.

### **7.3 Особенности законодательного регулирования проектных решений**

К работе на суперкомпьютере допускаются лица не моложе 18 лет, не имеющие медицинские противопоказания, прошедшие обучение безопасности труда и инструктаж на рабочем месте.

К самостоятельной работе допускаются работники после специального обучения и проверки знаний норма и правил работы с электроустановками, правил безопасности работы с газовыми баллонами, приобретенных навыков и безопасных способов выполнения работы на суперкомпьютере, имеющие не

менее II группы по электробезопасности и получившие допуск к работе с газовыми баллонами.

Повторная проверка знаний норм и правил электробезопасности, правил безопасной работы с газовыми баллонами проводится с работниками не реже 1 раза в 12 месяцев, повторный инструктаж на рабочем месте – не реже 1 раза в 3 месяца

Проведение всех видов инструктажа должно оформляться в Журнале регистрации инструктажа установленного образца, с обязательными подписями получившего и проводившего инструктаж, с указанием даты проведения инструктажа, наименования и номеров инструкции на виды работ, по которым проводится инструктаж.

По данной теме рассматриваются законодательный и нормативные документы:

–инструкция № 2-25 по охране труда при выполнении работ на установке Gas Reaction Controller;

–инструкция № 2-14 по охране труда при работе с электрооборудованием напряжением до 1000 В;

–инструкция № 2-07 по охране труда при работе с баллонами, работающими под давлением.

Документы по воздействию ПЭВМ:

–инструкция № 2-08 по охране труда при работе с ПЭВМ и ВДТ;

–СанПиН 2.2.2/2.4.1340-03. Гигиенические требования к персональным электронно-вычислительным машинам и организация работы;

–ГОСТ Р 50948-01. Средства отображения информации индивидуального пользования. Общие эргономические требования и требования безопасности;

–ГОСТ Р 50949-01. Средства отображения информации индивидуального пользования. Методы измерений и оценки эргономических параметров и параметров безопасности;

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

Микроклимат:

–ГОСТ 30494-96 Здания жилые и общественные помещения. Параметры микроклимата в помещении;

–ГОСТ 12.1.005 Общие санитарно-гигиенические требования к воздуху рабочей зоны;

–СанПиН 2.2.4.548-96 Гигиенические требования к микроклимату производственных помещений.

#### **7.4 Безопасность в чрезвычайных ситуациях**

При обнаружении неисправной работы суперкомпьютера необходимо прекратить работу, выйти из программы, отключить питание компьютера,

отключить насос, суперкомпьютеру от электросети и известить об этом руководителя.

При возникновении возгорания необходимо немедленно прекратить работу, отключить электрооборудование, позвонить в подразделение пожарной охраны по телефону 01 или 010, сообщить о случившемся руководителю подразделения и приступить к тушению огня первичными средствами пожаротушения.

Чтобы избежать опасности пожара и взрыва, можно принять следующие мероприятия:

1) планирование защиты населения и территорий от пожара и взрыва на уровне предприятия;

2) эвакуация работающих;

3) создание запасов средств индивидуальной защиты и поддержание их в готовности;

4) проектирование, размещение, строительство и эксплуатация объектов инфраструктуры, в том числе и потенциально опасных;

5) инженерное обеспечение защиты населения – строительство защитных сооружений (средств коллективной защиты).

В лаборатории обязательно показан план эвакуации: Заранее разработанный план (схема), в котором указаны пути эвакуации,

эвакуационные и аварийные выходы, установлены правила поведения людей, порядок и последовательность действий в условиях чрезвычайной ситуации.

### **Вывод**

В ходе рассмотрения безопасности и гигиены труда при осуществлении работ с помощью суперкомпьютера, были выявлены вредные и опасные факторы рабочей зоны, причины и средства защиты, рассмотрены чрезвычайные ситуации и поведение в них. Социальная ответственность представляет диалектическую взаимосвязь между лицом (работодателем) и обществом (работником), характеризующаяся взаимными правами и обязанностями по выполнению социальных норм и наложением воздействия в случае ее нарушения. На основе рассмотрения безопасности в процессе выполнения работы, было ясно, что студенты – будущий руководитель должен нести социальную ответственность за принимаемые решения.

## ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Проделав литературный обзор по исследованиям молекулы  $\text{HD}^{32}\text{S}$ , был сделан вывод, что данная молекула на данный момент слабо изучена. Принимая во внимание тот факт, что работы коллег по данной теме проводились 20-30 лет назад, во время работы спектрометров с разрешением  $0,01\text{-}0,004\text{ см}^{-1}$ , была поставлена задача об улучшении уже имеющейся информации и получение новой о вращательной структуре полос молекулы  $\text{HD}^{32}\text{S}$ , расположенных в диапазоне  $3350\text{-}4050\text{ см}^{-1}$ , а именно  $\nu_2+\nu_3$  и  $2\nu_1$ .

Результатом проделанной работы служит два набора параметров диагональных блоков, описывающих невозмущенные колебательные состояния (011) и (200) молекулы  $\text{HDS}$ . Вращательные параметры и центробежные постоянные были определены на основе экспериментально полученных уровней вращательных энергий. Для полосы  $\nu_2+\nu_3$  была проведена интерпретация линий до максимальных значений квантовых чисел  $J/K_a = 22/15$ , а для полосы  $2\nu_1$  при значениях  $22/11$ , соответственно. Полученные вращательные и центробежные параметры корректно описывают экспериментальные данные, с точностью  $2,6 \cdot 10^{-4}\text{ см}^{-1}$ . Кроме того, следует отметить, что параметры для состояний (200) и (011), представленные в таблицах 6 и 10, очень хорошо согласуются с соответствующими параметрами основного колебательного состояния (000).

## СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Макушкин Ю. С. Симметрия и её применения к задачам колебательно-вращательной спектроскопии молекул / Ю. С. Макушкин, О.Н. Улеников, А. Е. Чеглоков. – Томск: Изд-во Томского Университета, 1990. – С. 235.
2. Farquhar J. Atmospheric influence of earth's earliest sulfur cycle / H. Bao, M. Thiemens // Science. – 2000. – Vol. 289. – P. 756–8.
3. Farquhar J. Evidence of atmospheric sulphur in the martian regolith from sulphur isotopes in meteorites / J. Savarino, T.L. Jackson, M.H. Thiemens // Nature. – 2000. – Vol.404. – P. 50-2.
4. Irwin P.G.J. Detection of hydrogen sulfide above the clouds in Uranus atmosphere / D.Toledo, R. Garland, N.A. Teanby, L.N. Fletcher, G.S. Orton, B. Bézard // Nat. Astron. – 2018. Vol. 2. – P. 420-7.
5. Thaddeus P. Interstellar hydrogen sulfide / R.W. Wilson, M.L. Kutner, K.B. Jefferts, A.A. Penzias // Astrophys J. – 1972. Vol. 176. – P. 73-6.
6. Ukita N Hydrogen sulfide in a circumstellar envelope / M. Morris // Astron Astrophys. – 1983. Vol. 121. – P. 15–18.
7. Ulenikov O.N. High-Resolution Fourier Transform Spectra of HDS in the Regions of the bands  $\nu_1$  and  $2\nu_1/\nu_2+\nu_3$  / G.A. Onopenko, I.A. Olekhnovitch, S. Alanko, et al// Journ. Mol. Phys. – 1998. – Vol. 189. – P. 74-82.

8. Vastel C. First detection of doubly deuterated hydrogen sulfide / T.G. Phillips, C. Ceccarelli, J.C. Pearson // *Astrophys J.* – 2003. – Vol. 593. – P. 97-100.
9. Camy-Peuet C. The far-Infrared spectrum of Deuterated hydrogen sulfide: The ground state rotational constants of  $D_2^{32}S$ ,  $D_2^{34}S$ ,  $HD^{32}S$ , and  $HD^{34}S$  / J.-M. Flaud, L. Lechuga-Fossat L // *J. Mol. Spectr.* – 1985. – V.109. – P.300-333.
10. Ulenikov O.N. High resolution study of deuterated hydrogen sulfide in the region 2400-3000  $cm^{-1}$  / R.N. Tolchenov et al // *J. Mol. Spectr.* – 1995. – V.170.– P.397-416.
11. Ulenikov O.N. Study of fine rotational structure of  $v_2$  band of HDS / R.N. Tolchenov et al. // *J. Mol. Spectr.* – 1995. – V.170. – P.1-9
12. Ulenikov O.N. Isotope substitution in near local mode molecules: Bending overtones  $nv_2$  ( $n=2, 3$ ) of the HDS molecule / E.G. Ditenberg et al. // *L. Mol. Spectr.* – 1998. – V.191. – P.239-247.
13. Tyuterev V.G. An accurate isotopically invariant potential function of the hydrogen sulphide molecule / S.A.Tashkun, D.W.Schwenke // *Chemical Physics Letters* – 2001. – V. 348. – p. 223–234.
14. Papousek D. *Molecular Vibrational–Rotational Spectra* / M.R. Aliev // – 1982. – Elsevier. – Amsterdam.
15. Watson. J.K.G. Determination of centrifugal coefficients of asymmetric – top molecules // *J. Chem. Phys.* – 1967. –V. 46 – P.1935-49.
16. Ulenikov O.N. Tolchenov R.N. Qing-shi Zhu // *Spectrochimica Acta.* – 1996. Vol. A 52 – P. 1829-41.

17. Ulenikov ON . Study of the isotopic substitution effect in the molecular and spectroscopic parameters of polyatomic molecules. Tomsk: Atmospheric Optics Institute; 1975. PhD thesis .
18. Bykov A.D., Makushkin u.S., Ulenikov O.N. // L. Mol. Spectr. – 1981. – Vol. 85. – P.462-79.
19. Любарский Г.Я. Теория групп и физика. Изд. 2. URSS. 2014. 232 с. ISBN 978-5-9710-1138-5.
20. Ulenikov O.N. High Resolution Spectroscopic Study of C<sub>2</sub>H<sub>4</sub>: Re-Analysis of the Ground and  $\nu_4$ ,  $\nu_7$ ,  $\nu_{10}$ ; and  $\nu_{12}$  Vibrational Bands / O. V. Gromova, et al// J. Quant. Spectr. Rad. Transf. – 2013. – V.118. – P.14 – 25.
21. СанПиН 2.2.2/2.4.1340-03 Гигиенические требования к персональным электронно-вычислительным машинам и организации работы.
22. ГОСТ 12.0.003-74. ССБТ. Опасные и вредные производственные факторы. Классификация.
23. ГОСТ 12.1.005-88 (с изм. No1 от 2000 г.). ССБТ. Общие санитарно-гигиенические требования к воздуху рабочей зоны (01. 01. 89).
24. СанПиН 2.2.4.548-96. Гигиенические требования к микроклимату производственных помещений.
25. СНиП 23-05-95. Естественное и искусственное освещение.

26. ГОСТ 12.1.019-79. ССБТ. Электробезопасность. Общие требования и номенклатура видов защиты.
27. ГОСТ 12.1.038-82. ССБТ. Электробезопасность. Предельно допустимые уровни напряжений прикосновения и токов.
28. ГОСТ 12.1.004-91. ССБТ. Пожарная безопасность. Общие требования.
29. ГОСТ 12.1.003-83 ССБТ. Шум. Общие требования (01. 07. 92).
- 30.29. Жуков, Виктор Ильич. Защита и безопасность в чрезвычайных ситуациях : учебное пособие / В. И. Жуков, Л. Н. Горбунова; Сибирский федеральный университет (СФУ). — Москва; Красноярск: Инфра-М Изд-во СФУ, 2014. — 392 с.: ил. — Высшее образование. Бакалавриат. — Библиогр.: с. 384- 387

## ПРИЛОЖЕНИЕ А

(обязательное)

|  |
|--|
| <b>Work theme</b>  |
| <b>Analysis of the Vibrational-rotational Spectrum of High Resolution Bands <math>2\nu_1</math> and <math>\nu_2 + \nu_3</math> of the <math>\text{HD}^{32}\text{S}</math> Molecule</b> |

Студент

| Группа | ФИО        | Подпись | Дата |
|--------|------------|---------|------|
| ОБМ81  | Чэн Цзыхун |         |      |

Руководитель

| Должность       | ФИО            | Ученая степень,<br>звание | Подпись | Дата |
|-----------------|----------------|---------------------------|---------|------|
| Профессор ИШФВП | Бехтерева Е.С. | Д.ф.-м.н.                 |         |      |

Консультант-лингвист отделения иностранных языков ШБИП

| Должность             | ФИО                      | Ученая степень,<br>звание | Подпись | Дата |
|-----------------------|--------------------------|---------------------------|---------|------|
| Старший преподаватель | Утятина Янина Викторовна |                           |         |      |

## INTRODUCTION

The development of modern theoretical rotational-vibrational spectroscopy of molecules makes it possible to describe the molecular structure information obtained from experiments with high accuracy. By interpreting the spectra, it is possible to investigate the main characteristics of molecules that exhibit various effects of an intramolecular nature. Using the interpretation of the spectra, one can determine the system of energy levels of a molecule and obtain spectroscopic constants, structural parameters, and the potential function of the studied molecule [1].

The subject of research in the dissertation is the  $\text{HD}^{32}\text{S}$  molecule. This molecule is the second most important and frequent research isotope of hydrogen sulfide.

Hydrogen sulfide is an important chemical in many fields, such as chemistry, astrophysics, atmospheric optics, planetology, etc. It is mainly formed as a result of volcanic eruptions and fuel combustion in human activities and therefore plays an important role. And also plays an important role as a trace element in the Earth's atmosphere. Being involved in the sulfur cycle, various isotopologues of hydrogen sulfide form the basis both for studying the processes that took place in the early history of the Earth and for determining the isotopic composition of sulfur in atmospheric species today [2-3]. It is known that HDS is more common in the atmospheres of gas giants of the stellar system, brown dwarfs, interstellar clouds, etc.

[4-5]. In space, not only the main species were found, but also various isotopologues of hydrogen sulfide [6]. Hydrogen sulfide is also one of the few examples where the global analytical potential energy and dipole surfaces can be determined with very high accuracy. In this context, it is fundamentally important to characterize the spectroscopic properties of all hydrogen sulfide isotopologues with the same hypersurface of the electronic potential in the Born-Oppenheimer approximation, as completely and precisely as possible. From this point of view, it is especially interesting to accurately study high resolution spectra of deuterated hydrogen sulfide. For these reasons, at present, research teams have resumed extensive laboratory spectroscopic studies of the main types of hydrogen sulfide. In this paper, attention is devoted to studying the spectra of the  $\nu_2 + \nu_3$  and  $2\nu_1$  bands of the  $\text{HD}^{32}\text{S}$  molecule, the high-resolution structure of which was previously discussed only in [7]. Strengths of this band have not been previously analyzed.

**The purpose of the master's thesis:** the study and description of the rotational structure of the vibrational states (011) and (200) of the HDS molecule.

To achieve this goal, it is necessary to solve the **established tasks**: 1) To study materials on the topic "High Resolution Molecular Spectroscopy"; 2) To study the theory of symmetry; 3) Perform a literature review of  $\text{H}_2\text{S}$  and HDS molecules; 4) Investigate the rotational structures of the vibrational bands  $\nu_2 + \nu_3$  and  $2\nu_1$  of the  $\text{HD}^{32}\text{S}$  molecule; 5) Determine the parameters of the effective Hamiltonian for the states under study.

As research methods, methods of quantum mechanics, the theory of irreducible tensor systems, and the theory of isotope substitution were used.

**Protection provisions:**

1) Taking into account the centrifugal distortion parameters facing the angular momentum operators  $J$  and  $J_z$  to the tenth degree inclusive, it was possible to describe the rotational structure of the vibrational states (011) and (200) of the HDS molecule up to  $J \geq 20$  and  $Ka \geq 10$  with a standard deviation  $d_{rms} = 2.6 \cdot 10^{-4} \text{ cm}^{-1}$ ;

2) To study the weakly intense band  $2\nu_1$  of the HDS molecule, isotopic relations can be used to determine preliminary values of the parameters

The scientific novelty of the work. As a result of interpretation of the high-resolution spectrum of the HDS molecule in the range 3350-4050  $\text{cm}^{-1}$ , energy transitions belonging to states (011) and (200) were first determined, and quantum numbers were assigned to transitions.

## REVIEW OF LITERATURE

With the development of Fourier spectroscopy, the study of the obtained spectra of polyatomic molecules was also actively developing. In studies of this kind, the H<sub>2</sub>S molecule and its isotopologues have taken a stable position, and therefore the study of this molecule is of great interest to both theoreticians and experimenters. The hydrogen sulfide molecule is a light asymmetric rotor that exhibits great centrifugal distortion effects. Therefore, since the measured microwave and submillimeter junctions are usually limited by relatively low J and K lines, it is necessary to expand the analysis to the far infrared range, thus covering all rotational spectra to determine the exact high-order centrifugal distortion constants [8]. In this regard, the registration of infrared spectra and the study of the properties and structure of these molecules is carried out worldwide in scientific laboratories. Modern technology at the moment allows to register spectra with optical resolution with an accuracy of the order of 0.001 cm<sup>-1</sup>. New device technologies increase the accuracy of the results - determining the energy structure of a molecule and its internal properties.

The study of the hydrogen sulfide molecule, including the study of its vibrational-rotational structure, has been actively carried out from the moment when the studied molecule was detected in interstellar clouds.

In 1985, scientists from France, J. M. Flaud, C. Camy-Peyret, and J. W. C. Johns, did a great deal of research into the microwave and infrared spectra of D<sub>2</sub><sup>32</sup>S,

$D_2^{34}S$ ,  $HD^{32}S$ , and  $HD^{34}S$  molecules. The spectrum of the pure rotation of hydrogen sulfide was studied in the range of 50–320  $cm^{-1}$  using a Fourier spectrometer at a resolution of 0.004  $cm^{-1}$ . A high resolution and a good signal-to-noise ratio were obtained, which led to a significant improvement in the accuracy of the wave numbers of rotational transitions of isotopic molecules. In this work, parameters were obtained for the ground state of each studied molecule [9].

In 1995, O. N. Ulenikov, R. N. Tolchenov, and E. N. Melekhina studied high-resolution infrared spectra of the  $D_2S$ ,  $HD^{32}S$ , and  $HD^{34}S$  molecules [10-11]. To study the rotational structure of these molecules, spectra were recorded in the range of 2400–3000  $cm^{-1}$ . A reanalysis of the bands  $\nu_1 + \nu_2$ ,  $\nu_2 + \nu_3$ ,  $3\nu_2$  for  $D_2S$  and a primary analysis of  $\nu_3$ ,  $\nu_1 + \nu_2$ ,  $3\nu_2$  for  $HD^{32}S$  and  $\nu_1 + \nu_2$   $HD^{34}S$  were performed. Energy transitions were determined on the basis of which the parameters of the effective Hamiltonian were obtained.

Also in 1998, a study was published on the overtones  $n\nu_2$  of the  $HD^{32}S$  molecule by a team of scientists O. N. Ulenikov, E.A. Diitenberg, I.M. Olekhovich. [12]

The subsequent work of this team was to study bands located in the range 2740–3840  $cm^{-1}$ , namely  $2\nu_1$  and  $\nu_2 + \nu_3$  [7]. However, the experimental conditions available at that time did not allow obtaining good spectra for theoretical processing. The spectrum contained water vapor lines, which hindered the identification of HDS

lines. The effect of water vapor lines on interpretation is described in more detail in chapter 5.1.

Table 1 - Investigation of the  $2\nu_1$  and  $\nu_2 + \nu_3$  bands of the  $\text{HD}^{32}\text{S}$  molecule [7]

| Band            | Center of band,<br>$\text{cm}^{-1}$ | Number of<br>transitions | $J_{\text{max}}$ | $K_{\text{a max}}$ | $d_{\text{rms}} \cdot 10^{-4},$<br>$\text{cm}^{-1}$ |
|-----------------|-------------------------------------|--------------------------|------------------|--------------------|---|
| $\nu_2 + \nu_3$ | 3633.24                             | 541                      | 20               | 10                 | 2.39  |
| $2\nu_1$        | 3756.37                             | 249                      | 15               | 6                  | 3.26  |

Table 1 presents the final results of the study of the  $\nu_2 + \nu_3$  and  $2\nu_1$  bands of the  $\text{HD}^{32}\text{S}$  molecule, currently known. Our task was to improve existing information and obtain new information. Improving the quality of the experiment allows us to do this.

## 5. RESEARCH RESULTS

### 5.1 Analysis of the Rotational Structure of the Vibrational State (011)

The band  $\nu_2 + \nu_3$  is a combination band corresponding to a single excitation of the vibrational state  $\nu_2$  and a single excitation of the state  $\nu_3$ . The band is very strong; this can be noted in Figure 5. As can be noted, P-, Q-, R-branches are clearly visible in the spectrum. The center of the strip is  $3634.3243 \text{ cm}^{-1}$ .

Complete vibrational-rotational analysis of the strip consists of four stages. 1) to conduct an initial interpretation of the spectrum, determine the energy transitions belonging to the studied band. 2) to conduct a fitting of the parameters of the state under study based on the energies obtained. Certain parameters should correctly describe the rotational structure of the vibrational state, which allows predicting the positions of lines belonging to the studied band with high accuracy. 3) having the predicted values of the energies, complete the interpretation of the band spectrum by finding all the remaining low-intensity lines. 4) having determined the full rotational structure of the strip, it is necessary to carry out the last fitting of parameters that will describe the rotational structure of the vibrational state with high accuracy. This approach to vibrational-rotational analysis of the bands is the most effective.

The band  $\nu_2 + \nu_3$ , having a strong intensity, has already been studied previously [7]. However, this analysis cannot be considered complete. This is due to the fact that in 1998 there was not enough accurate equipment to record the fine structure of the spectra. But this is not the point. At that time, no chemical laboratory

could provide clean samples of HD<sup>32</sup>S gas. The studied substance contained other hydrogen sulfide isotopologues, as well as a large concentration of water vapor.

How did the presence of water vapor influence the study of the band  $\nu_2 + \nu_3$ ? As a result of the study [7], the center of the band  $\nu_2 + \nu_3$  is defined as 3634.32 cm<sup>-1</sup>, and the center of the strong fundamental band  $\nu_1$  of the H<sub>2</sub>O molecule is at 3657.05 cm<sup>-1</sup>. And both bands were shown in the spectrum, which led to almost complete overlap of the lines belonging to the HDS molecule. In this regard, it was not possible to interpret the weak lines of the HDS molecule among the strong lines of water vapor and apply the widely used method of combination differences already at that time. For this reason, the interpretation of the lines was done simultaneously with the determination of the parameters of the effective Hamiltonian. The result of this interpretation was energy transitions with maximum quantum numbers  $J$  and  $K_a$  equal to 15 and 10, respectively.

In this work, as a first approximation, we used the parameters for the band  $\nu_2 + \nu_3$  from this work [7]. These parameters made it possible to calculate with good accuracy the positions of the lines that were already determined earlier, thereby conducting an initial interpretation of the lines. Since in our case the spectrum is not burdened by the presence of impurities of other gases in the studied range, the primary interpretation was successful.

The primary fitting of the parameters of the effective Hamiltonian was carried out using the obtained rotational energies. The parameters after this procedure

allowed us to calculate / predict the energy values for large values of J and  $K_a$ . The results of the interpretation of the vibrational-rotational band  $\nu_2 + \nu_3$  are presented in Table 7. The obtained parameters of the effective Hamiltonian are presented in Table 6. The state was considered as isolated, therefore, when describing it, we limited ourselves only to the diagonal block of the effective Hamiltonian. For a correct description of the interpreted rotational structure of the state under study (1233 lines), 25 parameters are sufficient, 16 of them participated in the fitting, the remaining parameters were fixed with the values of the corresponding parameters from [7].

Table 5 - Statistical table for the band  $\nu_2 + \nu_3$

|             |      |      |
|-------------|------|------|
| $N_{tr}$    | 1233 | 541* |
| $N_l$       | 312  | 219* |
| $J^{max}$   | 22   | 20*  |
| $K_a^{max}$ | 15   | 10*  |

$N_{tr}$  is the number of transitions from the ground vibrational state to the excited state (011);  $N_l$  is the number of energies that were involved in fitting the parameters of the effective Hamiltonian;  $J^{max}$  and  $K_a^{max}$  are the maximum values of the quantum numbers J and  $K_a$  for the indicated N energies. \* are the data taken from [7].

Table 6 - Spectroscopic parameters of the ground and excited (011) vibrational states of the HDS molecule (in  $\text{cm}^{-1}$ )

| Parameter                 | Ground state <sup>a</sup> | $\nu_2+\nu_3^b$ |
|---------------------------|---------------------------|-----------------|
| 1                         | 2                         | 3               |
| E                         |                           | 3634.324315(30) |
| A                         | 9.75178412                | 9.727915(21)    |
| B                         | 4.93213844                | 5.026955(19)    |
| C                         | 3.22570284                | 3.162004(55)    |
| $\Delta_K \times 10^3$    | -0.377125                 | -0.317660(74)   |
| $\Delta_{JK} \times 10^3$ | 0.956467                  | 1.036046(36)    |
| $\Delta_J \times 10^3$    | 0.087209                  | 0.100781(48)    |
| $\delta_K \times 10^3$    | 0.648383                  | 0.816499(54)    |
| $\delta_J \times 10^3$    | 0.0284447                 | 0.035637(72)    |
| $H_K \times 10^6$         | 0.4191                    | 0.93338         |
| $H_{KJ} \times 10^6$      | -0.6773                   | -0.124461       |
| $H_{JK} \times 10^6$      | 0.43313                   | 0.656786        |
| $H_J \times 10^6$         | 0.002307                  | 0.531330        |

|                       |          |           |
|-----------------------|----------|-----------|
| $h_K \times 10^6$     | 0.9932   | 1.55284   |
| $h_{JK} \times 10^6$  | 0.20978  | 0.302412  |
| $h_J \times 10^6$     | 0.001199 | 0.0026598 |
| $L_K \times 10^9$     | -2.655   | -4.6086   |
| $L_{KJ} \times 10^9$  | 3.760    | 6.0255    |
| $L_{KJK} \times 10^9$ | -1.189   | -1.7028   |
| $L_{JK} \times 10^9$  | -0.1201  | -0.24486  |
| $l_K \times 10^9$     | -1.722   | -3.2144   |
| $l_{KJ} \times 10^9$  | -0.479   | -0.721    |
| $l_{JK} \times 10^9$  | -0.0656  | -0.12211  |
| $P_K \times 10^{12}$  | 0.2922   | 0.2922    |
| $p_K \times 10^{12}$  | -6.43    | -6.43     |

<sup>a</sup> - the parameters were taken from [7]. <sup>b</sup> - parameters obtained as a result of fitting in this work. The values in parentheses correspond to the  $1\sigma$  confidence interval.

Table 7 - Fragment of energy transitions corresponding to the band  $\nu_2 + \nu_3$  of the HDS molecule \*

| J  | K <sub>a</sub> | K <sub>c</sub> | E          | $\delta$ | $\Delta$ | J  | K <sub>a</sub> | K <sub>c</sub> | E          | $\delta$ | $\Delta$ |
|----|----------------|----------------|------------|----------|----------|----|----------------|----------------|------------|----------|----------|
| 1  |                |                | 2          | 3        | 4        | 1  |                |                | 2          | 3        | 4        |
| 5  | 5              | 1              | 4019.07748 | 11       | 14       | 10 | 8              | 3              | 4441.93897 | 15       | 10       |
| 6  | 5              | 2              | 4066.78760 | 13       | 15       | 11 | 8              | 4              | 4532.42567 | 19       | 10       |
| 7  | 5              | 3              | 4122.63283 | 26       | -7       | 13 | 8              | 6              | 4739.16752 | -14      | 7        |
| 8  | 5              | 4              | 4186.69600 | 9        | 10       | 9  | 9              | 1              | 4453.62646 | -6       | 5        |
| 9  | 5              | 5              | 4259.03761 | -3       | 8        | 10 | 9              | 2              | 4534.91014 | 36       | 3        |
| 10 | 5              | 6              | 4339.68680 | -3       | 2        | 11 | 9              | 3              | 4624.53716 | -51      | 10       |
| 6  | 5              | 1              | 4066.78900 | -15      |          | 12 | 9              | 4              | 4722.56942 | -7       | 11       |
| 7  | 5              | 2              | 4122.65877 | -7       | -15      | 13 | 9              | 5              | 4829.07646 | -5       | 51       |
| 8  | 5              | 3              | 4186.80657 | -3       | 28       | 10 | 10             | 0              | 4639.57000 | -33      | 48       |
| 9  | 5              | 4              | 4259.40870 | 13       | 1        | 10 | 10             | 1              | 4639.57000 | -20      | 48       |
| 10 | 5              | 5              | 4340.73611 | 3        | 11       | 11 | 10             | 2              | 4728.39191 | -7       |          |
| 11 | 5              | 6              | 4431.17434 | 17       | 7        | 12 | 10             | 2              | 4825.49333 | 23       | 34       |
| 12 | 5              | 7              | 4531.17031 | 10       | 13       | 12 | 10             | 3              | 4825.49333 | 62       | 34       |

\*  $\Delta$  - experimental uncertainty in the energy value equal to one standard deviation in units of  $10^{-5} \text{ cm}^{-1}$ .  $\delta = E_{\text{exp}} - E_{\text{calc}}$  (in units of  $10^{-5} \text{ cm}^{-1}$ ). The  $\Delta$  value is absent if the energy value was obtained from only one transition energy.

## 5.2 Analysis of the Rotational Structure of the Vibrational State (200)

The band  $2\nu_1$  is the overtone corresponding to the double excitation of the vibrational mode  $q_1$ . The center of the strip is  $3756.3360\text{ cm}^{-1}$ . Transitions belonging to the studied band are very weak. Therefore, the method of combinational differences, widely used to interpret spectral lines, was applicable only in certain parts of the spectrum, where the intensity of the lines made it possible to compose at least 2 branches (R- and Q-, for example). As a result, at the first stage of the analysis of the spectra, the general isotope ratios from Section 2.2 were used to construct the synthetic spectrum. These calculated spectra formed a qualitative basis for further research. At the second stage, the interpretation of the lines was performed simultaneously with the fitting of the obtained rotational energy levels for the vibrational state (200). However, it should be noted that in this band the strongest lines in most cases belong to the R-branches and they are located in less dense spectral regions (Figure 5). This allows the interpretation of even very weak peaks with high accuracy. As a result, the energies of the upper levels will be determined correctly. The energies of the ground state are taken from [7].

As mentioned above, the interpretation of the lines was performed simultaneously with the fitting of the rotational levels. The rotational structure of vibrational states (200) should be correctly described within the framework of the

model of an isolated vibrational state; for this, the Hamiltonian in the form [7] was used.

Table 8. - Statistical table for the band  $2\nu_1$

|             |     |      |
|-------------|-----|------|
| $N_{tr}$    | 753 | 249* |
| $N_l$       | 108 | 108* |
| $J^{max}$   | 22  | 15*  |
| $K_a^{max}$ | 11  | 6*   |

$N_{tr}$  is the number of transitions from the ground vibrational state to the excited state (200);  $N_l$  is the number of energies that were involved in fitting the parameters of the effective Hamiltonian;  $J^{max}$  and  $K_a^{max}$  are the maximum values of the quantum numbers J and  $K_a$  for the indicated N energies. \* Are the data taken from [7].

As a result of the analysis, it was possible to interpret almost 3 times more energy transitions than in the previous work of colleagues [7]. And also on the basis of information about the transitions, it was possible to determine the rotational energy levels of the vibrational state (200), which are presented in column 2 of Table 9. Column 3 of this table shows the experimental uncertainties in energy values in units of  $10^{-5} \text{ cm}^{-1}$  in those cases when the value was obtained from more than one transition. The sets of rotational and centrifugal distortion parameters for the analyzed vibrational state, which were obtained from the fitting of the corresponding

experimental data in Table 9, are presented in Table 10. The energies of the upper state that were obtained from one reliable transition were also included in the fitting; but some energies that were received from weak and also covered lines were excluded. To illustrate the correctness of the results, column 4 of Table 9 presents the values  $\delta = E_{\text{exp}} - E_{\text{calc}}$  (in units of  $10^{-5} \text{ cm}^{-1}$ ).

Table 9 - Fragment of energy transitions corresponding to the  $2\nu_1$  band of the molecule HDS

| J  | K <sub>a</sub> | K <sub>c</sub> | E          | $\Delta$ | $\delta$ | J  | K <sub>a</sub> | K <sub>c</sub> | E          | $\Delta$ | $\delta$ |
|----|----------------|----------------|------------|----------|----------|----|----------------|----------------|------------|----------|----------|
| 1  |                |                | 2          | 3        | 4        | 1  |                |                | 2          | 3        | 4        |
| 8  | 1              | 8              | 3954.69222 | 3        | 14       | 9  | 7              | 2              | 4393.36970 | 10       | 1        |
| 9  | 1              | 9              | 4068.00154 | 22       | -29      | 10 | 7              | 3              | 4472.52240 | 10       | -1       |
| 10 | 1              | 10             | 4134.06450 | 1        | 4        | 11 | 7              | 4              | 4559.9528  | 11       | 9        |
| 11 | 1              | 11             | 4206.38678 | 8        | 24       | 12 | 7              | 5              | 4655.43212 | 14       | -2       |
| 12 | 1              | 12             | 4284.95000 | 14       | 5        | 13 | 7              | 6              | 4759.33442 | 16       | -13      |
| 13 | 1              | 13             | 4369.74984 |          | -15      | 8  | 8              | 1              | 4407.96202 | 8        | -10      |
| 14 | 1              | 14             | 4460.77464 | 1        | -1       | 9  | 8              | 2              | 4478.4907  | 13       | 9        |
| 15 | 1              | 15             | 4558.01303 |          | -30      | 10 | 8              | 3              | 4557.0565  | 12       | 9        |
| 16 | 1              | 16             | 4661.45407 | 7        | 19       | 11 | 8              | 4              | 4643.46124 | 9        | 1        |
| 17 | 1              | 17             | 4771.04975 | 8        | 17       | 9  | 9              | 0              | 4575.58657 | 16       | -2       |
| 18 | 1              | 18             | 4886.86883 | 10       | -1       | 9  | 9              | 1              | 4575.58657 | 16       | -2       |
| 19 | 1              | 19             | 5008.87130 | 4        | -2       | 10 | 9              | 1              | 4653.51790 | 15       | 6        |
| 20 | 1              | 20             | 5137.14662 | 3        | 17       | 10 | 9              | 2              | 4653.51790 | 15       | 6        |

Table 10 -Spectroscopic parameters for the state (200) of the HDS molecule (in cm<sup>-1</sup>)

| <b>Parameter</b>          | <b>Ground state<sup>a</sup></b> | <b>2v<sub>1</sub><sup>b</sup></b> |
|---------------------------|---------------------------------|-----------------------------------|
| <b>1</b>                  | <b>2</b>                        | <b>3</b>                          |
| E                         |                                 | 3756.336031(21)                   |
| A                         | 9.75178412                      | 9.732130(28)                      |
| B                         | 4.93213844                      | 4.733462(63)                      |
| C                         | 3.22570284                      | 3.148135(81)                      |
| $\Delta_K \times 10^3$    | -0.377125                       | -0.361766(67)                     |
| $\Delta_{JK} \times 10^3$ | 0.956467                        | 0.968314(73)                      |
| $\Delta_J \times 10^3$    | 0.087209                        | 0.0869133(59)                     |
| $\delta_K \times 10^3$    | 0.648383                        | 0.655013(56)                      |
| $\delta_J \times 10^3$    | 0.0284447                       | 0.028229(16)                      |
| $H_K \times 10^6$         | 0.4191                          | 0.420                             |
| $H_{KJ} \times 10^6$      | -0.6773                         | -0.79918                          |
| $H_{JK} \times 10^6$      | 0.43313                         | 0.46167                           |
| $H_J \times 10^6$         | 0.002307                        | 0.002307                          |

|                      |          |         |
|----------------------|----------|---------|
| $h_K \times 10^6$    | 0.9932   | 1.19064 |
| $h_{JK} \times 10^6$ | 0.20978  | 0.21130 |
| $h_J \times 10^6$    | 0.001199 | 0.0012  |
| $L_K \times 10^9$    | -2.655   | -2.563  |
| $L_{KJ} \times 10^9$ | 3.760    | 3.256   |
| $L_{KK} \times 10^9$ | -1.189   | -0.902  |
| $L_{JK} \times 10^9$ | -0.1201  | -0.136  |
| $l_K \times 10^9$    | -1.722   | -1.470  |
| $l_{KJ} \times 10^9$ | -0.479   | -0.487  |
| $l_{JK} \times 10^9$ | -0.0656  | -0.070  |
| $P_K \times 10^{12}$ | 0.2922   | 0.292   |
| $p_K \times 10^{12}$ | -6.43    | -6.43   |

<sup>a</sup> - the parameters were taken from [7]. <sup>b</sup> - parameters obtained as a result of fitting in this work. The values in parentheses correspond to the  $1\sigma$  confidence interval.