

ОПТИКО-ЭЛЕКТРОННЫЕ ПРИБОРЫ И КОМПЛЕКСЫ

УДК 621.373.826:662.237.3

DOI 10.33764/2411-1759-2022-27-3-157-163

Идентификация тринитротолуола (TNT) в дальней ИК-области с помощью параметрического лазера

В. С. Айрапетян^{1*}, А. В. Шабурова¹

¹ Сибирский государственный университет геосистем и технологий, г. Новосибирск, Российская Федерация

* e-mail: v.s.ayrapetyan@ssga.ru

Аннотация. Проведены расчетные и экспериментальные исследования амплитудно-временных и спектроскопических характеристик ИК параметрического лазера на основе титогаллата ртути с перестройкой частоты в диапазоне от 5 до 9 мкм, выходной энергией 10 мДж и спектральной шириной излучения $\leq 0,7 \text{ см}^{-1}$. Разработан, создан и испытан многофункциональный ИК параметрический лазерный комплекс для дистанционного обнаружения и идентификации атмосферных газов, в том числе взрывчатых и химически агрессивных веществ в диапазоне длин электромагнитных волн 1,41–9,07 мкм, методом дифференциального поглощения и рассеяния. В работе приведены результаты расчетных и экспериментальных исследований по дистанционному определению спектроскопических характеристик наиболее известных взрывчатых веществ TNT, RDX, PETN. Показана возможность высокочувствительного определения концентраций (~1 ppm) взрывчатых веществ с помощью многофункциональной оптической системы на основе ИК параметрического лазера.

Ключевые слова: инфракрасный параметрический лазер, взрывчатые вещества, дифференциальное поглощение и рассеяние, колебательно-вращательный спектр

Введение

Актуальной задачей современности является локальное дистанционное зондирование взрывчатых веществ (ВВ). Одним из наиболее высокоточных и чувствительных способов дистанционного обнаружения и идентификации ВВ является метод, основанный на дифференциальном поглощении и рассеянии ИК перестраиваемого лазерного излучения [1].

Основные сложности дистанционного обнаружения и идентификации ВВ в открытой атмосфере можно характеризовать несколькими факторами:

– давление паров наиболее известных ВВ при комнатной температуре составляет 10^{-12} –

10^{-15} г/см^3 , что ниже порогового значения чувствительности современных устройств дистанционного зондирования;

– в открытой атмосфере колебательно-вращательные (КВ) полосы поглощения ВВ плотно экранированы парами воды, что препятствует взаимодействию электромагнитного излучения с молекулами ВВ;

– в стандартных условиях ВВ не являются изолированными молекулами, а представляют собой смеси, содержащие в своем составе как примеси и добавки, так и продукты химических превращений ВВ, что приводит к расширению и искажению формы КВ полосы ВВ [2].

Лазерное дистанционное обнаружение и идентификация ВВ основано на резонанс-

ном взаимодействия частоты электромагнитного излучения с частотой собственных колебаний молекулы ВВ. В результате такого взаимодействия можно получить информацию о спектроскопических и физико-химических свойствах ВВ. Для обеспечения резонансного взаимодействия необходимо разрабатывать параметрический лазер с плавной

перестройкой частоты излучения в ближнем и среднем ИК диапазоне. Хорошо известно [3], что фундаментальные КВ полосы поглощения наиболее известных ВВ находятся в среднем ИК-диапазоне (6–8 мкм) (рис. 1), а некоторые интенсивные изолированные вращательные линии – в ближнем ИК-диапазоне (1,4–1,8 мкм).

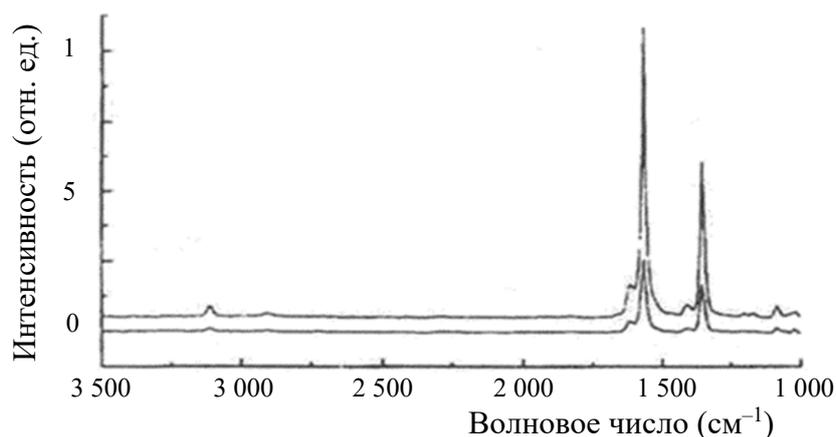


Рис. 1. КВ спектр поглощения молекулы ТНТ при температуре 120 °С (нижняя кривая) и 140 °С (верхняя кривая)

В данной работе с помощью программы Gauss View-6 были рассчитаны максимальные значения интенсивностей и определены центральные частоты КВ полосы поглощения молекулы тринитротолуола (ТНТ). Моделированная молекулярная структура ТНТ с некоторыми валентными и деформационными константами [4] приведена на рис. 2.

В табл. 1 приведены расчетные данные интенсивностей и собственных частот отдельных линий КВ-полосы молекулы ТНТ в диапазоне от 700 до 3 300 см^{-1} . Рассчитанные амплитудно-временные параметры отдельных линий КВ-полосы поглощения ТНТ хорошо согласуются с результатами теоретических расчетов частот ($\nu_{\text{теор}}$) и экспериментальных данных ($\nu_{\text{эксп}}$) из [5, 6].

Анализ результатов теоретических вычислений и экспериментальных измерений частот собственных колебаний молекулы ТНТ показывает, что наиболее информативное исследование ТНТ можно проводить с помощью многофункционального оптического комплекса на основе высокоинтенсивного (энергия в импульсе до 10 мДж) и вы-

сокомонохроматического (спектральная ширина излучения менее 1 см^{-1}) импульсного параметрического лазера, позволяющего плавную и/или дискретную перестройку частоты излучения в ближнем и среднем ИК-диапазонах [5, 6].

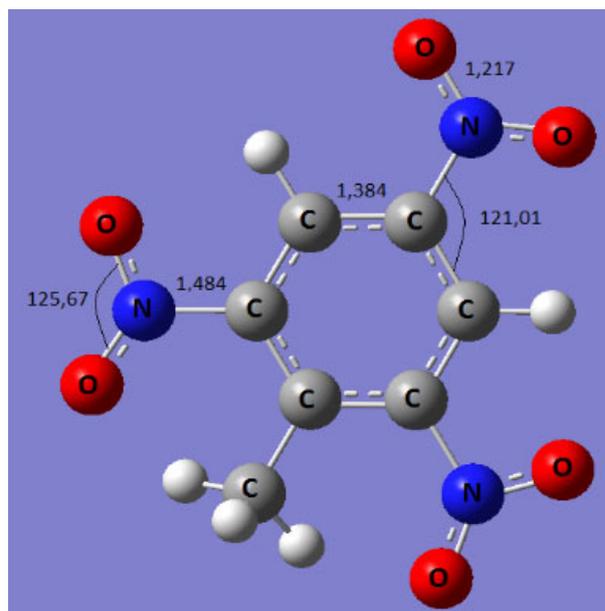


Рис. 2. Молекулярная структура ТНТ

Таблица 1

Расчетные, теоретические и экспериментальные спектроскопические характеристики
КВ-спектра поглощения молекул ТНТ
в диапазоне 700–3 200 см⁻¹

$I_{расч.},$ отн. ед.	$\nu_{расч.},$ см ⁻¹	$\nu_{теор.},$ см ⁻¹ [4]	$\nu_{эксп}$ см ⁻¹ [5]	$I_{расч.},$ отн. ед.	$\nu_{расч.},$ см ⁻¹	$\nu_{теор.},$ см ⁻¹ [4]	$\nu_{эксп}$ см ⁻¹ [5]
31,50	701,40	726,04	725,51	39,63	1 428,95	1 437,08	1 436,73
4,55	774,16	779,32	790,38	112,35	1 467,46	–	1 510,31
8,92	797,19	816,86	827,49	42,88	1 517,84	1 565,17 1 582,34	1 560,55
16,17	893,61	885,22 917,64	908,17	24,65	1 643,83	1 599,76 1 600,51 1 627	1 609,68
42,43	1 120,69	1 145,12 1 156,97	1 168,34	5,11	3 160,73	3 034	2 860,07
300,92	1 278,92	–	–	3,54	3 197,14	–	2 900,12
248,34	1 280,98	–	–	38,11	3 276,86	3 112	3 022,49
5,79	1 381,68	1 346,78 1 352,82	1 350,46	13,94	3 276,33	3 159	3 108,55

Проведенные теоретические [7, 8] и экспериментальные [9, 10] исследования генерационных характеристик ИК-параметрического лазера с активными элементами из вновь синтезированных нелинейных кристаллов (НК) HgGa₂S₄, AgGaS₂, AgGaSe₂, GaSe [6, 11–14] позволили разработать и создать [15] мно-

гофункциональную лазерную систему для дистанционного зондирования атмосферных газов, в том числе взрывчатых и химически агрессивных веществ.

Оптическая схема многофункционального ИК лазерного комплекса приведена на рис. 3.

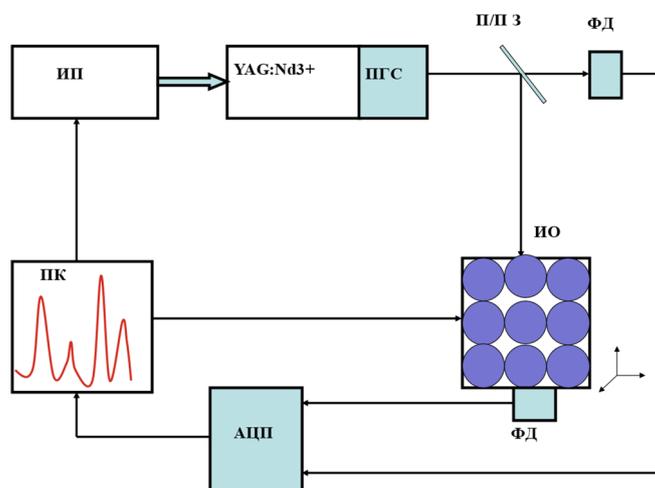


Рис. 3. Блок схема многофункциональной оптической системы:

ИП – источник питания лазера; YAG:Nd³⁺ – лазер; ПГС – параметрический генератор света; П/ПЗ – полупрозрачное зеркало; ФД – фотодиод; ИО – исследуемый объект; АЦП – аналогово-цифровой преобразователь; ПК – персональный компьютер

Экспериментальное измерение

Перестраиваемая частота импульсного лазерного излучения сканируют молекулы ВВ. После резонансного взаимодействия лазерного излучения с молекулами ВВ прошедшее или рассеянное излучение вводится на монитор персонального компьютера в виде КВ-спектра исследуемого вещества. После идентификации детектированного КВ-спектра ВВ со спектроскопи-

ческой базой данных HITRAN [3], с помощью специализированной компьютерной программы Matlab–6, определяются основные параметры (концентрация, состав, строение, величина и направление скорости движения) исследуемого ВВ.

Результаты измерений спектроскопических характеристик некоторых ВВ методом дифференциального поглощения и рассеяния приведены в табл. 2.

Основные технические характеристики многофункционального лазерного комплекса:

- 1) лазер накачки YAG:Nd³⁺;
- 2) длина волны перестройки 1,41–9,07 мкм;
- 3) энергия в импульсе до 50 мДж;
- 4) спектральная ширина излучения 0,6–0,9 см⁻¹;
- 5) длительность светового импульса 10 нс;
- 6) частота повторения импульсов 20–30 Гц;
- 7) перестройка длины волны до 12 нм;
- 8) температура окружающей среды от –10 до +45 °С;
- 9) чувствительность регистрации 1 ppm (по метану).

Таблица 2

Расчетные и экспериментально измеренные спектроскопические характеристики некоторых ВВ

Взрывчатое вещество	ν_0 , см ⁻¹	λ , мкм	$\Delta\nu$, см ⁻¹	σ , см ² /моль	α , см ⁻¹	Дальность объекта	Конц., ppm
TNT	1606 1559	6,22 6,41	17,05	$5,1 \cdot 10^5$	$1,5 \cdot 10^{-7}$	30	7,5
RDX	1272 1602	7,86 6,24	24,09	$7,8 \cdot 10^5$	$2,0 \cdot 10^{-10}$	50	14,0
PETN	1279 1626	7,82 6,15	21,0	$1,4 \cdot 10^5$	$1,1 \cdot 10^{-10}$	50	40,0
Диоксид азота	2909	3,44	3,87	$16,1 \cdot 10^5$	$0,7 \cdot 10^{-10}$	500	1,3
Закись азота	6295 6192	1,588 1,615	0,4	–	–	500	3,4

Примечание. $\Delta\nu$ – полуширина спектра поглощения; σ – дифференциальное сечение поглощения; α – коэффициент поглощения.

Область применения многофункционального лазерного комплекса:

– плавная и/или дискретная перестройка частоты лазерного излучения, позволяет осуществлять селективное воздействие лазерного излучения на вещество с целью определения его спектроскопических параметров;

– определение концентраций отдельных компонент сложной газовой смеси методом дифференциального поглощения и рассеяния, в том числе агрессивных и биологически активных, взрывчатых и наркотических веществ [14];

– контроль загрязненности окружающей среды с помощью ИК-лидара [15], установ-

ленного на передвижной и/или летательной платформе, в том числе контроль утечки газов из труднодоступной газовой магистрали;

– проведение фундаментального высокочувствительного спектроскопического исследования атомов и молекул, недоступного даже лучшим масс-спектрометрам (экспериментально реализуются методы детектирования отдельных молекул в одном квантовом состоянии);

– контроль радиационного фона окружающей среды и определение концентраций изотопного состава в газовом потоке антропогенного или техногенного происхождения [16].

Заключение

Разработана и создана многофункциональная оптическая система на основе ИК параметрического лазера, позволяющего осуществлять перестройку длины волны излучения в ближнем и среднем ИК-диапазоне (от 1,41 до 9,07 мкм) и шириной излучения, не превышающей 1 см^{-1} . Максимальная выходная энергия в одном световом импульсе $> 10 \text{ мДж}$ во всем диапазоне перестройки длины волны. Проведенные исследования показали, что совместное использование ИК параметрического лазера и метода дифференциального поглоще-

ния и рассеяния позволит применять его как источник узкополосного излучения для дистанционного обнаружения и идентификации многоатомных органических веществ, имеющих КВ-спектры, попадающие в диапазон перестройки параметрического лазерного излучения.

Для обеспечения измерений следовых количеств ВВ с высокой чувствительностью и точностью целесообразно использовать перестраиваемые ИК-лазеры, со спектральной шириной излучения ($< 1 \text{ см}^{-1}$) меньше окна прозрачности атмосферы и ширины отдельной линии КВ полосы поглощения ВВ.

БИБЛИОГРАФИЧЕСКИЙ СПИСОК

1. Murrey E. R., Byer R. L. Remote Measurements of Air Pollutants : SRI International Report. N. Y., 1980.
2. Набиев Ш. Ш., Ставровский Д. Б., Палкина Л. А., Збарский В. Л., Юдин Н. В., Голубева Е. Н., Вакс В. Л., Домрачева Е. Г., Собакинская Е. А., Черняева М. Б. Спектрохимические особенности некоторых бризантных взрывчатых веществ в парообразном состоянии // Оптика атмосферы и океана. – 2013. – Т. 26, № 4. – С. 273–285.
3. Rothman L. S., Gordon I. E., Babikov Y., Barbe A., Benner D. Chris, Bernath P. F., Birk M., Bizzocchi L., Boudon V., Brown L. R., Campargue A., Chance K., Cohen E. A., Coudert L. H., Devi V. M., Drouin B. J., Fayt A., Flaud J.-M., Gamache R. R., Harrison J. J., Hartmann J.-M., Hill C., Hodges J. T., Jacquemart D., Jolly A., Lamouroux J., LeRoy R. J., Li G., Long D. A., Lyulin O. M., Mackie C. J., Massie S. T., Mikhailenko S., Müller H. S. P., Naumenko O. V., Nikitin A. V., Orphal J., Perevalov V., Perrin A., Polovtseva E. R., Richard C., Smith M. A. H., Starikova E., Sung K., Tashkun S., Tennyson J., Toon G. C., Tyuterev V. G., Wagner G. The HITRAN2012 molecular spectroscopic database // Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer. – 2013. – Vol. 130. – P. 4–50. doi: 10.1016/J.JQSRT.2013.07.002.
4. Лопанов А. Н. Взрывы и взрывчатые вещества : монография. – Белгород : Изд-во БГТУ, 2008. – 516 с.
5. Айрапетян В. С., Макеев А. В., Параметрический генератор света на кристалле HgS с плавной перестройкой длины волны в диапазоне 4,75–9,07 мкм // Оптика атмосферы и океана. – 2021. – Vol. 34, № 1 (384). – С. 57–60.
6. Айрапетян В. С., Маганакова Т. В. Расчет концентрации наркотических веществ методом дифференциального поглощения и рассеяния // Интерэкспо Гео-Сибирь-2015. XI Междунар. научн. конгр. : Межд. науч. конф. «СибОптика-2015» : сб. материалов в 3 т. (Новосибирск, 13–25 апреля 2015 г.). – Новосибирск : СГУГиТ, 2015. Т. 1. – С. 141–147.
7. Ловошкин А. В., Волков М. В., Журба В. М. Об одном способе плавной перестройки энергии и длительности импульса лазера с пассивной модуляцией добротности // Оптический журнал. – 2018. – Т. 85, № 10. – С. 17–21.
8. Кашин В. В. Удвоение частоты лазерного излучения в монокристаллическом волокне на основе стехиометрического кристалла LiNbO_3 // Квантовая электроника. – 2015. – Т. 45, № 1. – С. 47–49.
9. Bunaciu A. A., Aboul-Enein H. Y., Fleschin S. Recent Applications of Fourier Transform Infrared Spectrophotometry in Herbal Medicine Analysis // Applied Spectroscopy Reviews. – 2011. – Vol. 46 (4). – P. 251–260.
10. Катаев М. Ю., Никитин А. В., Бойченко И. В., Михайленко С. Н., Суханов А. Я. Влияние спектроскопической погрешности на решение задачи восстановления концентрации метана // Оптика атмосферы и океана. – 2008. – Т. 21, № 1. – С. 13–18.
11. Бадиков В. В., Дон А. К., Митин К. В., Серегин А. М., Синайский В. В., Щebetова Н. И., Щетинкина Т. А. Оптический параметрический генератор среднего ИК диапазона на кристалле HgGa_2S_4 накачкой импульсно-периодическим Nd:YAG-лазером // Квантовая электроника – 2007. – Т. 37, № 4. – С. 363–365.

12. Колкер Д. Б., Шерстов И. В., Костюкова Н. Ю., Бойко А. А., Кистенев Ю. В., Нюшков Б. Н., Зенов К. Г., Шадринцева А. Г., Третьякова Н. Н. Перестраиваемый в широком спектральном интервале источник лазерного излучения среднего ИК диапазона для оптико-акустической спектроскопии // Квантовая электроника. – 2019. – Т. 49. – С. 29–34.

13. Тарасов А. Е., Ладыгина В. П., Камратова В. В., Горбунова М. А., Бадашина Э. Р., Новые ИК-спектральные методики определения содержания гидроксильных групп в олигомерах // Журнал прикладной спектроскопии. – 2017. – Т. 84, № 2. – С. 186–191.

14. Андрианов В. М., Королевич М. В., Вельченко А. А. Расчет и сравнительный анализ ИК спектров гомобрассинолида и (22s,23s)-24-эпибрассинолида // Журнал прикладной спектроскопии. – 2019. – Т. 86, № 6. – С. 847–857.

15. Ayrapetyan V. S., Fomin P. A., Laser detection of explosives based on differential absorption and scattering // Optics and Laser Technology. – 2018. – Vol. 106. – P. 202–208.

16. Афонин Г. И., Кошкарлов А. С., Мальцев Г. Н. Лидарная модель формирования натриевой «лазерной звезды» при приближении и угловым сопровождении космических объектов // Оптический журнал. – 2019. – Т. 86, № 6. – С. 36–44.

Об авторах

Валерик Сергеевич Айрапетян – доктор технических наук, заведующий кафедрой специальных устройств, инноватики и метрологии.

Аэлита Владимировна Шабурова – доктор экономических наук, директор Института оптики и технологий информационной безопасности.

Получено 18.02.2022

© В. С. Айрапетян, А. В. Шабурова, 2022

Identification of trinitrotoluene (TNT) in the far IR region using a parametric laser

V. S. Ayrapetyan¹*, A. V. Shaburova¹

¹ Siberian State University of Geosystems and Technologies, Novosibirsk, Russian Federation

* e-mail: v.s.ayrapetyan@ssga.ru

Abstract. Computational and experimental studies of the amplitude-time and spectroscopic characteristics of an IR parametric laser based on mercury thiogallate with frequency tuning in the range from 5 to 9 microns, an output energy of 10 MJ and a spectral emission width of $\leq 0,7$ cm⁻¹ have been carried out. A multifunctional IR parametric laser complex for remote detection and identification of atmospheric gases, including explosive and chemically aggressive substances in the range of electromagnetic wavelengths from 1,41–9,07 microns, by differential absorption and dispersing has been developed, created and tested. The paper presents the results of computational and experimental studies on remote determination of spectroscopic characteristics of the most famous explosives TNT, RDX, PETN. It shows the possibility of highly sensitive determination of the concentration (~1 ppm) of explosives using a multifunctional optical system based on an IR parametric laser.

Keywords: infrared parametric laser, explosives, differential absorption and dispersing, vibrational-rotational spectrum

REFERENCES

1. Murrey, E. R., & Byer, R. L. (1980). Remote Measurements of Air Pollutants: SRI International Report. New York.

2. Nabiev, Sh. Sh., Stavrovskii, D. B., Palkina, L. A., Zbarskii, V. L., Yudin, N. V., Golubeva, E. N., Vaks, V. L., Domracheva, E. G., Sobakinskaya, E. A., & Chernyaeva, M. B. (2013). Spectrochemical peculiarities of certain brisant explosives in vapor state. *Optika atmosfery i okeana [Atmospheric and Oceanic Optics]*, 26(4), 273–285 [in Russian].

3. Rothman, L. S., Gordon, I. E., Babikov, Y., Barbe, A., Benner, D. Chris, Bernath, P. F., Birk, M., Biz-zocchi, L., Boudon, V., Brown, L. R., Campargue, A., Chance, K., Cohen, E. A., Coudert, L. H., Devi, V. M., Drouin, B. J., Fayt, A., Flaud, J.-M., Gamache, R. R., Harrison, J. J., Hartmann, J.-M., Hill, C., Hodges, J. T.,

- Jacquemart, D., Jolly, A., Lamouroux, J., LeRoy, R. J., Li, G., Long, D. A., Lyulin, O. M., Mackie, C. J., Massie, S. T., Mikhailenko, S., Müller, H. S. P., Naumenko, O. V., Nikitin, A. V., Orphal, J., Perevalov, V., Perrin, A., Polovtseva, E. R., Richard, C., Smith, M. A. H., Starikova, E., Sung, K., Tashkun, S., Tennyson, J., Toon, G. C., Tyuterev, V. G., & Wagner, G. (2013). The HITRAN2012 molecular spectroscopic database. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 130, 4–50. doi: 10.1016/J.QSRT.2013.07.002.
4. Lopanov, A. N. (2008). *Vzryvy i vzryvchatye veshchestva [Explosions and explosives]*. Belgorod: BSTU Publ., 516 p. [in Russian].
5. Ayrapetyan, V. S., & Makeev, A. V. (2021). HgS – Crystal optical parametric oscillator tunable in the wavelength range 4.75–9.07 μM . *Optika atmosfery i okeana [Atmospheric and Oceanic Optics]*, Vol. 34, No. 1(384), 57–60 [in Russian].
6. Ayrapetyan V. S., & Maganakova T. V. (2015). Calculation of the concentration of narcotic substances by the method of differential absorption and scattering. In *Sbornik materialov Interekspo GEO-Sibir'-2015: Mezhdunarodnoy nauchnoy konferentsii: T. 1. SibOptika–2015 [Proceedings of Interexpo GEO-Siberia-2015: International Scientific Conference: Vol. 1. SibOptics–2015]* (pp. 141–147). Novosibirsk: SSUGT Publ. [in Russian].
7. Levoshkin, A. V., Volkov, M. V., & Zhurba, V. M. (2018). Method for smooth tuning of the pulse energy and width of a passively Q-switched laser. *Journal of Optical Technology*, 85(10), 610–613.
8. Kashin, V. V., Nikolaev, D. A., Rusanov, S. Ya., & Tsvetkov, V. B. (2015). Laser radiation frequency doubling in a single-crystal fibre based on a stoichiometric LiNbO₃ crystal. *Kvantovaya elektronika [Quantum Electronics]*, 45(1), 47–49 [in Russian].
9. Bunaciu, A. A., Aboul-Enein, H. Y., & Fleschin, S. (2011). Recent Applications of Fourier Transform Infrared Spectrophotometry in Herbal Medicine Analysis. *Applied Spectroscopy Reviews*, 46(4), 251–260.
10. Kataev, M. Yu., Nikitin, A. V., Boichenko, I. V., Mikhailenko, S. N., & Sukhanov, A. Ya. (2008). Influence of spectroscopic error on solution of the problem of the methane concentration retrieval. *Optika atmosfery i okeana [Atmospheric and Oceanic Optics]*, 21(1), 13–18 [in Russian].
11. Badikov, V. V., Don, A. K., Mitin, K. V., Seregin, A. M., Sinaiskii, V. V., Shchebetova, N. I., & Shchetinkina, T. A. (2007). Optical parametric mid-ir hgha2s4 oscillator pumped by a repetitively pulsed Nd: YAG Laser. *Kvantovaya elektronika [Quantum Electronics]*, 37(4), 363–365 [in Russian].
12. Kolker, D. B., Sherstov, I. V., Kostyukova, N. Y., Boyko, A. A., Nyushkov, B. N., Kistenev, Y. V., Zenov, K. G., Shadrintseva, A. G., & Tretyakova, N. N. (2019). Broadband tunable source of mid-IR laser radiation for photoacoustic spectroscopy. *Kvantovaya elektronika [Quantum Electronics]*, 49(1), 29–34 [in Russian].
13. Tarasov, A. E., Lodygina, V. P., Komratova, V. V., Gorbunova, M. A., & Badamshina, E. R. (2017). New IR-spectroscopic methods for determining the hydroxyl content in oligomers. *Journal of Applied Spectroscopy*, 84(2), 211–216.
14. Andrianov, V. M., Korolevich, M. V., & Velchenko, A. A. (2019). Calculation and comparative analysis of the ir spectra of homobrassinolide and (22s, 23s)-24-epibrassinolide. *Journal of Applied Spectroscopy*, 86(6), 847–857.
15. Ayrapetyan, V. S., & Fomin, P. A. (2018). Laser detection of explosives based on differential absorption and scattering. *Optics and Laser Technology*, 106, 202–208.
16. Afonin, G. I., Koshkarov, A. S., & Mal'Tsev, G. N. (2019). Lidar model of the formation of a sodium laser star when space objects are being observed and angularly tracked. *Journal of Optical Technology*, 86(6), 355–361.

Author details

Valerik S. Ayrapetyan – D. Sc., Head Special Devices, Innovations and Metrology Department.

Aelita V. Shaburova – D. Sc., Director of the Institute of Optics and Information Security Technologies.

Received 18.02.2022

© V. S. Ayrapetyan, A. V. Shaburova, 2022