

**Ю.А. Варакса, А.М. Гончаренко, А.В. Ляхнович,
В.Л. Малевич, Г.В. Сеницын**
ГНУ «Институт физики им. Б.И.Степанова
Национальной академии наук Беларуси», Минск, Беларусь

МЕТОД ОБРАБОТКИ СИГНАЛОВ, ОТРАЖЕННЫХ ОТ ПЛОСКИХ ПОВЕРХНОСТЕЙ СРЕД, В ТЕРАГЕРЦОВОЙ СПЕКТРОСКОПИИ

Введение

Интенсивные исследования в области генерации, детектирования и применений излучения терагерцового диапазона частот ($\sim 1 - 10$ ТГц и выше), которые проводятся ведущими научными центрами в настоящее время, в значительной степени обусловлены безопасностью данного типа излучения и возможностью расширения используемого для детектирования веществ спектрального диапазона за пределы традиционного оптического диапазона частот [1]. Наличие линий поглощения в терагерцовом диапазоне, обусловленных, например, вращательными степенями свободы или продольными колебаниями длинных молекул, позволяет идентифицировать ряд веществ по их терагерцовым спектрам поглощения [2, 3]. Такой анализ требует подготовки образца, потенциально содержащего искомого вещества, для его использования в терагерцовом абсорбционном спектрометре. Для экспресс-контроля наличия вещества в образце при использовании в промышленности, сельском хозяйстве, пищевой промышленности, на транспорте и т.п. намного более привлекательной является альтернативная возможность, а именно, применение для детектирования вещества его спектров отражения, которые могут быть получены дистанционно.

В связи с тем, что при прохождении излучения через образец эффективная длина взаимодействия излучения с веществом равна длине образца, а при отражении от его поверхности эффективная длина взаимодействия составляет порядка длины волны (для терагерцового диапазона частот – 300 мкм и менее), то чувствительность отражательной терагерцовой спектроскопии в целом значительно уступает абсорбционной спектроскопии. В связи с этим возникает необходимость дополнительной обработки терагерцового сигнала, полученного при отражении от поверхности образца, с целью выявления слабо заметной линии поглощения и тем самым детектирования наличия (либо отсутствия) искомого вещества

в образце.

В данной работе рассматривается метод обработки терагерцового сигнала, отраженного от плоской поверхности вещества, имеющего линию поглощения в терагерцовой области спектра (на примере моногидрата альфа-лактозы, код производителя SIGMA-ALDRICH L2643, далее – альфа-лактоза), с целью идентификации вещества по спектру отражения.

1. Относительные спектры пропускания и отражения плоских образцов

При регистрации терагерцовых спектров широкополосный импульс терагерцового излучения от источника на основе фотопроводящей антенны, возбуждаемой лазерным импульсом фемтосекундной длительности, направляется на образец, и проводится регистрация вейвформы (временного профиля напряженности электрического поля) прошедшего сквозь образец или отраженного от него излучения. Типичные спектры падающего и отраженного терагерцового импульса показаны на рисунке 1.

Информация об отклике материала образца на воздействие ТГц излучения содержится в относительном спектре образца, получаемом в результате деления спектра, прошедшего (отраженного) излучения на спектр генерируемого источником излучения. На рисунке 2А показан полученный таким образом спектр пропускания плоскопараллельной пластинки, спрессованной из порошка альфа-лактозы.

В данном спектре пропускания альфа-лактозы отчетливо выделяются пики поглощения вблизи частот 0,53 ТГц и 1,35 ТГц (отмечены пунктирными линиями).

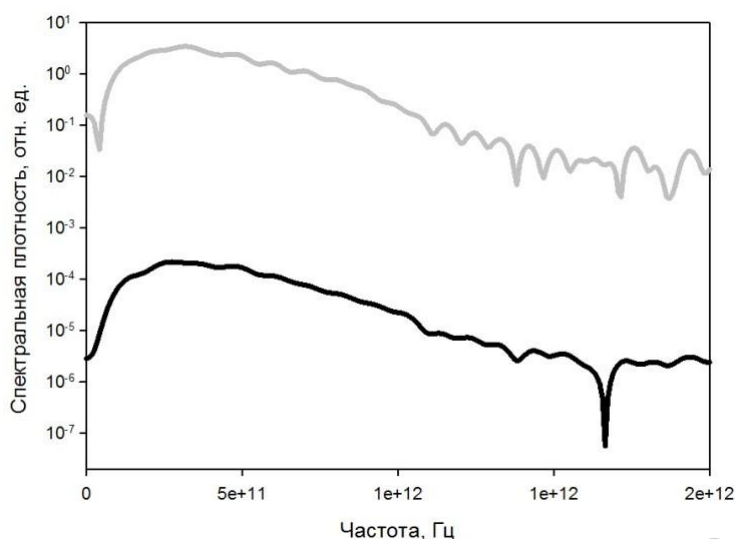


Рисунок 1 – Спектры падающего на образец (верхняя кривая) и отраженного от него (нижняя кривая) излучения в диапазоне 0–2 ТГц

В отличие от спектров пропускания, где линии поглощения вещества проявляются весьма отчетливо, спектры отражения не позволяют детектировать эти линии с такой же легкостью. Как видно из рисунка 2В, на месте наиболее выраженной линии поглощения альфа-лактозы вблизи 0.53 ТГц в спектре отражения имеется перегиб, который в общем случае слабо заметен, особенно при наличии интерференционной модуляции спектра. В связи с этим возникает необходимость в разработке методов обработки отраженного ТГц сигнала с целью уверенного обнаружения линии поглощения, в том числе в автоматизированном режиме, пригодных для массовой обработки сигналов в практических применениях.

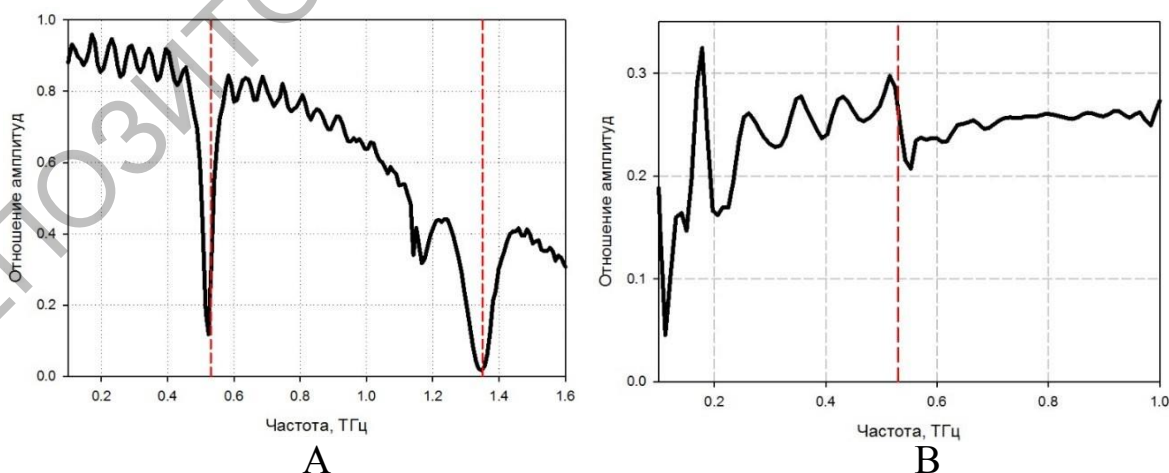


Рисунок 2 – Относительный спектр пропускания (А) и отражения (В) плоскопараллельной пластинки альфа-лактозы

2. Описание метода обработки отраженного от плоской поверхности сигнала

Для уверенного обнаружения линии поглощения вещества в спектре сигнала, отраженного от плоской поверхности образца, нами был разработан следующий метод, апробированный затем на примере линии поглощения альфа-лактозы.

Вейвформы терагерцового излучения, генерируемого источником и отраженного от плоской поверхности образца, детектируются приемником и записываются в электронном виде. Из полной отраженной вейвформы с помощью временного окна выделяется обрабатываемая часть вейвформы, соответствующая значимой части сигнала, а именно, отраженной от передней грани образца. Соответствующий по положению в вейвформе интервал выделяется и из генерируемой источником вейвформы (т.е. из сигнала, падающего на образец). Затем производится расчет фурье-спектров обоих выделенных сигналов (падающего и отраженного от передней грани) и относительного спектра отраженного сигнала, подобного приведенному на рисунке 3. Производится расчет дифференциального спектра отражения (под которым здесь подразумевается первая производная относительного спектра). При наличии линии поглощения в спектре исследуемого вещества дифференциальный спектр демонстрирует провал на частоте поглощения (см. рисунок 3).

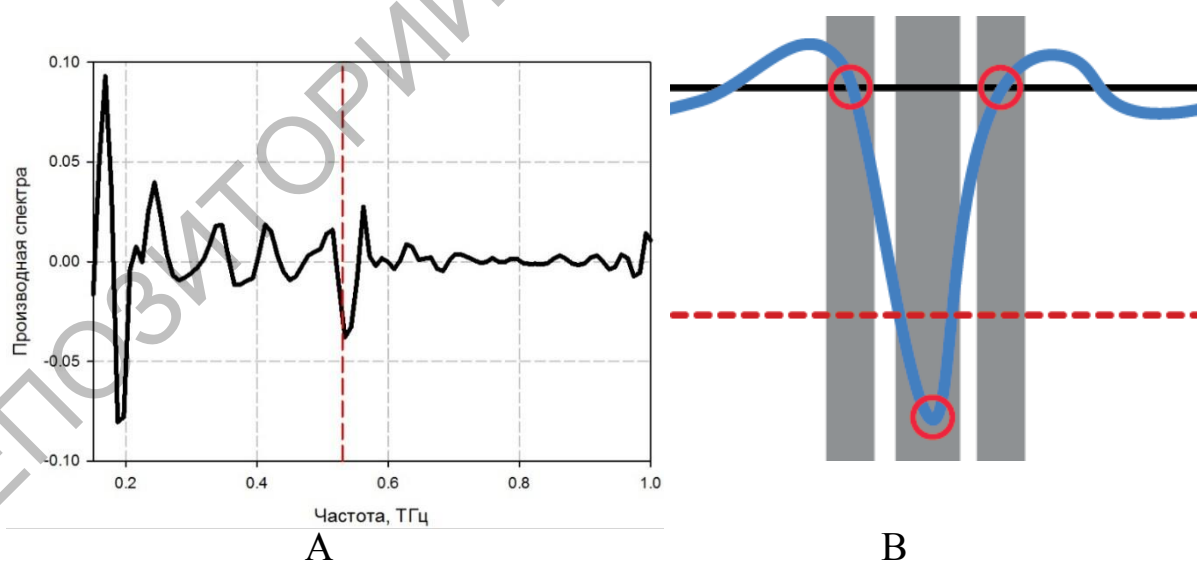


Рисунок 3 – Дифференциальный спектр отражения плоскопараллельной пластинки альфа-лактозы (А) и схема проверки наличия линии поглощения в дифференциальном спектре (В)

Для надежного детектирования линии провала в дифференциальном спектре (центр рисунка 3А) метод использует три контрольные точки (показаны кругами на рисунке 3В), три горизонтальных контрольных интервала (там же, показаны серыми вертикальными полосами) и контрольный уровень (показан пунктирной линией). Контрольными точками являются минимум линии поглощения (т.е. точка в центре провала с самым малым значением ординаты) и точки пересечения краев провала с линией нулевого уровня (осью абсцисс). Контрольными интервалами являются допустимые положения контрольных точек по оси частот. Контрольный уровень задает минимально допустимую глубину провала.

Положения контрольных интервалов и контрольного уровня выбираются по набору реальных полученных в эксперименте относительных спектров отражения плоских образцов. Положения контрольных точек рассчитываются для каждого тестируемого образца по спектрам падающей на образец и отраженной от него вейвформы.

Это дает возможность определить, попадают ли контрольные точки в заданные для них интервалы по горизонтальной оси частот, и удовлетворяет ли положение центральной контрольной точки допустимой глубине провала.

Если все эти условия выполняются, то считается, что относительный спектр отражения образца имеет линию поглощения на заданной частоте, идентичную линии поглощения реального поглощающего вещества.

После подбора значений всех контрольных величин проводится тестирование метода на наборе образцов, включающем как образцы материала с рассматриваемой линией поглощения, так и образцов иных материалов с плоской поверхностью. При необходимости значения контрольных величин могут быть скорректированы, например, для учета особенностей конкретной реализации измерительного оборудования.

Заключение

В настоящей работе описан метод обработки сигналов, отраженных от плоских поверхностей сред, с целью определения наличия линий поглощения с заданными частотами. Реализация метода была протестирована на образцах альфа-лактозы с линией поглощения на частоте 0.53 ТГц, и наборе образцов из иных материалов, не имеющих указанной линии поглощения, например, пластмасс (текстолит, фторопласт, оргстекло) и лекарственных препаратов (аспирин, цефалек

син). Было продемонстрировано уверенное определение поглощающего вещества по заданной спектральной линии.

Метод может быть использован для дистанционной идентификации и контроля качества образцов по их спектрам отражения от поверхности в терагерцовой области спектра, в том числе для экспресс- контроля готовых изделий в промышленных приложениях. Особенно метод перспективен в тех случаях, когда доступ к обратной стороне изделия для регистрации прошедшего зондирующего излучения отсутствует или ограничен.

Литература

1. The 2017 terahertz science and technology roadmap / S.S. Dhillon [et al.] // J. Phys. D: Appl. Phys. – 2017. – Vol. 50. – P. 043001.
2. El Haddad, J. Review in terahertz spectral analysis / J. El Haddad, B. Bousquet, L. Canioni, P. Mounaix // Trends in Analytical Chemistry. – 2013. – Vol. 44. – P. 98–105.
3. Mathanker, S. Terahertz Applications in Food and Agriculture: A Review / S. Mathanker, P. R. Weckler, Ning Wang // Transactions of the ASABE. – 2013. – Vol. 56. – P. 1213–1226.