

Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ»

На правах рукописи

Плеханов

Плеханов Андрей Александрович

**ТЕРАГЕРЦОВАЯ СПЕКТРОСКОПИЯ И ВИЗУАЛИЗАЦИЯ
КОНДЕНСАТОВ НИТРОСОЕДИНЕНИЙ**

1.3.8 – Физика конденсированного состояния

АВТОРЕФЕРАТ

диссертации на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук

Москва – 2025

Работа выполнена в Федеральном государственном автономном образовательном учреждении высшего образования «Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ»

Научный руководитель: **Чистяков Александр Александрович**
доктор физико-математических наук, профессор,
заведующий кафедрой Физики микро- и наносистем № 81
НИЯУ МИФИ, г. Москва

Официальные оппоненты: **Грузнов Владимир Матвеевич**
доктор технических наук, доцент,
главный научный сотрудник ИНГГ СО РАН, г. Новосибирск

Муравьев Вячеслав Михайлович
доктор физико-математических наук,
ведущий научный сотрудник ИФТТ РАН, г. Черноголовка

Пономарев Дмитрий Сергеевич
кандидат физико-математических наук, доцент,
заместитель руководителя отделения по научной работе
ОСВЧПЭ им. В.Г. Мокерова КК НБИКС-пт
НИЦ «Курчатовский институт», г. Москва

Защита состоится «23» сентября 2025 г. в 16 час. 30 мин. на заседании диссертационного совета МИФИ.1.07 федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования «Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ» (115409, г. Москва, Каширское шоссе, 31).

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке и на сайте <https://ds.mephi.ru/> федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования «Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ».

Автореферат разослан "_____" _____ 2025 г.

Ученый секретарь
диссертационного совета
МИФИ.1.07
к.ф.-м.н., доцент



Савченко Александр
Алексеевич

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

Актуальность темы исследований

В настоящее время наблюдается стремительный рост количества научных публикаций, связанных с терагерцовым (ТГц) излучением [1]. Такой интерес вызван целым рядом свойств ТГц диапазона. Среди них можно выделить наличие в терагерцовой области спектра характеристических полос (линий) поглощения множества молекулярных сред, находящихся как в конденсированном, так и газообразном состоянии. Благодаря этому ТГц спектроскопия оказывается высокоинформативным методом, пригодным не только для проведения фундаментальных исследований физических процессов на внутри- и межмолекулярном масштабе, но и для решения прикладных задач, где требуется обнаружение и идентификация веществ [2]. Стоит отметить, что большое внимание также привлекает изучение терагерцовых метаматериалов [3, 4] и фотонных кристаллов [5, 6], для которых характерно резонансное взаимодействие с ТГц излучением, что приводит к выраженным особенностям в их ТГц спектрах пропускания и отражения. С другой стороны, слабое поглощение терагерцового излучения во многих непроводящих средах делает весьма актуальным использование ТГц визуализации (радиовидения) для изучения объектов, скрытых за различными диэлектрическими преградами (неразрушающий контроль) [7]. Таким образом, одним из перспективных направлений ТГц фотоники можно считать ТГц радиовидение, в том числе со спектральным разрешением. Причем, интенсивное развитие ТГц техники, и в первую очередь ТГц источников и детекторов, создаёт предпосылки для эффективного развития этого направления в таких сферах как неразрушающий контроль [8, 9], биомедицинская визуализация [10, 11], досмотровые системы безопасности [12, 13] и т.д.

Необходимо иметь в виду, что с прикладной точки зрения всегда будет особо актуальна задача обнаружения и идентификации нитросоединений, поскольку для многих из них требуется повышенный контроль. Взаимодействие терагерцового излучения с азотосодержащими органическими соединениями сопряжено с физическими процессами, представляющими интерес для исследований с помощью ТГц спектроскопии и визуализации (радиовидения). Нитросоединения в твёрдом состоянии имеют в ТГц области частот большое количество характеристических полос поглощения [14, 15], наличие которых обусловлено главным образом межмолекулярными связями. Конденсаты этих веществ часто представляют собой порошки или плёнки, а размеры их частиц (неоднородностей) в некоторых случаях могут достигать сотен микрон [16], что оказывается сопоставимо с длинами ТГц волн и, следовательно, приводит к возникновению рассеяния Ми [17] в терагерцовом диапазоне.

Несмотря на то, что полосы поглощения азотосодержащих органических соединений в ТГц области спектра во многом хорошо известны [14, 15], а обсуждение рассеяния Ми для таких сред в твёрдом состоянии можно найти в некоторых работах [16, 18-22], тем не менее, взаимодействие ТГц излучения с этими веществами остаётся до конца не изученным. Продолжают быть актуальными ТГц исследования конденсатов нитросоединений различной дисперсности с учётом рассеяния Ми и оптических свойств поверхностей, на которых они могут располагаться. В том числе, нуждается в изучении возможность детектирования малых концентраций таких веществ в виде отдельных микрокристаллов.

Важно, что здесь естественным образом появляется потребность в разработке и использовании ТГц методик, имеющих перспективу практического применения в режиме реального времени и дистанционно, а также вне лабораторных условий. Активное развитие в настоящий момент технологии терагерцовых видеокамер делает их применение очень привлекательным наряду с другими существующими методиками визуализации, поскольку естественным образом позволяет регистрировать ТГц изображения исследуемых объектов с частотой десятки и более кадров в секунду [23]. При этом некоторые устройства указанного типа чувствительны в диапазоне частот от десятых долей до единиц ТГц и более, что делает целесообразным их использование не только с узкополосными, но и с широкополосными ТГц источниками [24]. Следовательно, терагерцовые видеокамеры могут быть пригодными не только

для визуализации, но и для решения задач ТГц спектроскопии, где их применение открывает большие перспективы для обнаружения и идентификации веществ в режиме реального времени.

Таким образом, в настоящее время исследования конденсатов нитросоединений методами ТГц спектроскопии и радиовидения оказываются актуальными и представляют значительную практическую ценность.

Цель работы

Целью настоящей диссертационной работы является определение и анализ спектральных свойств и возможностей на их основе детектирования конденсатов нитросоединений методами ТГц спектроскопии и радиовидения.

Основными задачами диссертационной работы являются

1. Разработка экспериментальных методик и создание установки терагерцового радиовидения со спектральным разрешением на основе фотопроводящей антенны, возбуждаемой фемтосекундными лазерными импульсами, лавинно-пролетного диода и микроболометрической ТГц видеокамеры для исследования конденсатов нитросоединений.
2. Определение возможности исследования и детектирования отдельных микрокристаллов нитросоединений (гексогена (RDX) и пентрита (PETN)) с помощью ТГц радиовидения в режиме реального времени.
3. Определение и анализ ТГц спектров пропускания и отражения образцов гексогена (RDX) различной дисперсности с учётом рассеяния и оптических свойств подложек с помощью ТГц радиовидения со спектральным разрешением.
4. Выявление возможности спектральной идентификации гексогена (RDX) с помощью ТГц источника на основе лавинно-пролетного диода в диапазоне его гармоник 0,58-1,45 ТГц.

Научная новизна

1. Создана установка ТГц радиовидения в диапазоне 0,3-3 ТГц со спектральным разрешением на основе фотопроводящей антенны, лавинно-пролетного диода и микроболометрической ТГц видеокамеры, в которой спектральное разрешение обеспечивается с помощью ТГц Фурье-спектрометра на основе интерферометра Майкельсона, позволяющего работать с источниками как импульсного, так и непрерывного ТГц излучения, а также с помощью полосовых ТГц фильтров.
2. Экспериментально выявлено, что идентификация гексогена (RDX) может осуществляться по его ТГц спектру пропускания, полученному с помощью ТГц источника на основе лавинно-пролетного диода.
3. На основе экспериментальных результатов и расчетов с использованием теории Ми продемонстрировано, что в области максимума полосы поглощения RDX (0,8 ТГц) контраст ТГц изображений отдельных микрокристаллов гексогена и пентрита с размерами ~600-300 мкм оказывается сравним, несмотря на то, что коэффициенты поглощения этих веществ отличаются на порядок, а для частиц с размерами менее 300 мкм разница в контрасте растёт с уменьшением размера микрокристаллов.
4. На основе экспериментальных результатов и расчетов с использованием теории Ми показано, что для порошков гексогена с размером микрокристаллов ≤ 100 мкм в ТГц спектре экстинкции (пропускания) выраженно проявляются полосы поглощения этого нитросоединения в области частот 0,8-1,55 ТГц, а в случае размера микрокристаллов ~450 мкм проявление полос уже отсутствует за счёт сильного влияния рассеяния на форму ТГц спектра.
5. Экспериментально продемонстрировано, что в случае сильноотражающих в ТГц диапазоне подложек (коэффициент отражения $>99\%$) для оптически тонких плёнок и порошковых слоёв гексогена (RDX) с размером неоднородностей (частиц) ≤ 100 мкм в ТГц спектре отражения присутствует локальный минимум в области полосы поглощения гексогена 0,8

ТГц за счёт двойного прохождения зондирующего ТГц пучка через слой RDX и поглощения в этом слое. В случае слабоотражающих в ТГц диапазоне подложек (коэффициент отражения ~4%) для оптически тонких плёнок гексогена (RDX) с размером неоднородностей ≤ 50 мкм в ТГц спектрах отражения существует проявление аномальной дисперсии для плоской границы воздух/образец в виде локального максимума в области полосы поглощения гексогена 0,8 ТГц, а для оптически тонких порошковых слоёв RDX с размером микрокристаллов ~100 мкм спектральные особенности на частоте 0,8 ТГц уже отсутствуют.

Практическая значимость работы

1. Разработанные в рамках диссертационной работы экспериментальные методики и созданная установка терагерцового радиовидения в диапазоне 0,3-3 ТГц со спектральным разрешением могут быть использованы для исследования ТГц спектров пропускания и отражения широкого класса веществ в конденсированном состоянии (в том числе скрытых за преградами из различных диэлектрических материалов).
2. Результаты работы могут применяться при создании установок ТГц радиовидения, предназначенных для детектирования в режиме реального времени отдельных микрокристаллов нитросоединений и других веществ (в том числе скрытых за преградами из различных диэлектрических материалов).
3. Полученные результаты исследований ТГц спектров пропускания и отражения образцов гексогена (RDX) могут быть использованы при разработке терагерцовых систем безопасности, предназначенных для обнаружения и идентификации конденсатов нитросоединений с различной дисперсностью как на сильно-, так и на слабоотражающих в ТГц диапазоне поверхностях.
4. Экспериментально показанная возможность спектральной идентификации гексогена (RDX) с использованием ТГц источника на основе лавинно-пролетного диода может быть реализована при создании портативных (носимых) ТГц систем безопасности. Использование мощных лавинно-пролетных диодов позволит в перспективе значительно упростить конструкцию систем спектральной идентификации опасных веществ в ТГц диапазоне и повысить дальность обнаружения объектов.

Теоретическая значимость работы

1. Полученные в работе результаты математического моделирования на основе теории рассеяния Ми позволили объяснить различие контраста ТГц изображений отдельных частиц гексогена (RDX) и пентрита (PETN) за счёт определения сложной зависимости сечения экстинкции таких частиц от их размера.
2. Проведение расчётов с использованием теории Ми позволило оценить влияние процесса рассеяния на форму регистрируемых ТГц спектров экстинкции (пропускания) порошков гексогена (RDX) различной дисперсности.
3. Математическое моделирование на основе метода матриц переноса позволило продемонстрировать, что в случае слабоотражающих в ТГц диапазоне подложек (коэффициент отражения ~4%) для оптически тонких плёнок гексогена (RDX) с размером неоднородностей ≤ 50 мкм в ТГц спектрах отражения существует проявление аномальной дисперсии для плоской границы воздух/образец в виде локального максимума в области полосы поглощения гексогена 0,8 ТГц.

Основные положения, выносимые на защиту

1. Разработаны экспериментальные методики и создана установка терагерцового радиовидения в диапазоне 0,3-3 ТГц со спектральным разрешением на основе фотопроводящей антенны, возбуждаемой фемтосекундными лазерными импульсами, лавинно-пролетного диода и микроболометрической ТГц видеокамеры для исследования конденсатов нитросоединений.
2. Экспериментально продемонстрировано, что для отдельных микрокристаллов гексогена (RDX) и пентрита (PETN) с размерами ~600-300 мкм в области максимума полосы

поглощения RDX (0,8 ТГц) контраст ТГц изображений – сравним, несмотря на то, что коэффициенты поглощения этих веществ отличаются на порядок, а для частиц с размерами менее 300 мкм разница в контрасте растёт с уменьшением размера микрокристаллов. Результаты математического моделирования на основе теории рассеяния Ми показали, что такой эффект обусловлен сложной зависимостью сечения экстинкции исследуемых микрочастиц от их размера.

3. На основе экспериментальных результатов и математического моделирования с помощью теории рассеяния Ми установлено, что для порошков гексогена (RDX) с размером микрокристаллов ≤ 100 мкм в ТГц спектре экстинкции (пропускания) выраженно проявляются полосы поглощения гексогена в области частот 0,8-1,55 ТГц, а в случае размера микрокристаллов ~ 450 мкм проявление полос – уже отсутствует, а сам спектр обусловлен, в основном, значительным эффектом рассеяния.
4. Экспериментально показано, что в случае сильноотражающих в ТГц диапазоне подложек (коэффициент отражения $>99\%$) для оптически тонких плёнок гексогена (RDX) с размером неоднородностей ≤ 50 мкм и оптически тонких порошковых слоёв гексогена (RDX) с размером микрокристаллов ~ 100 мкм в ТГц спектре отражения присутствует локальный минимум в области полосы поглощения гексогена 0,8 ТГц за счёт эффекта двойного прохождения зондирующего ТГц пучка через слой RDX и поглощения в этом слое. По мере уменьшения коэффициента отражения подложки до $\sim 4\%$ указанный эффект становится всё менее выраженным, а регистрируемый ТГц спектр отражения становится обусловлен главным образом отражением от границы воздух/образец.
5. Экспериментально показано, что в случае слабоотражающих в ТГц диапазоне подложек (коэффициент отражения $\sim 4\%$) для оптически тонких плёнок гексогена (RDX) с размером неоднородностей ≤ 50 мкм в ТГц спектрах отражения существует проявление аномальной дисперсии для плоской границы воздух/образец в виде локального максимума в области полосы поглощения гексогена 0,8 ТГц. При этом для оптически тонких порошковых слоёв RDX с размером микрокристаллов ~ 100 мкм спектральные особенности на частоте 0,8 ТГц уже отсутствуют, поскольку границу воздух/образец уже нельзя считать плоской.
6. Экспериментально продемонстрирована возможность спектральной идентификации гексогена (RDX) с использованием ТГц источника на основе лавинно-пролетного диода за счёт наличия в частотном диапазоне его гармоник (0,58-1,45 ТГц) характеристической полосы поглощения гексогена в области 0,8 ТГц.

Апробация работы

Основные результаты работы прошли апробацию на следующих конференциях: VI Международная конференция по фотонике и информационной оптике (Россия, Москва, 2017 г.); VI Международный Симпозиум по когерентному оптическому излучению полупроводниковых соединений и структур КОИПСС-17 (Россия, Москва, 2017 г.); 9-я Международная Научно-практическая конференция по физике и технологии наногетероструктурной СВЧ электроники «Мокеровские чтения» (Россия, Москва, 2018 г.); Международная научная конференция «SPIE Security + Defence 2018» (Германия, Берлин, 2018 г.); Международная научная конференция «SPIE Security + Defence 2019» (Франция, Страсбург, 2019 г.); IX Международная конференция по фотонике и информационной оптике (Россия, Москва, 2020 г.); Международная научная конференция «SPIE Security + Defence 2020» (Онлайн-формат, 2020 г.); X Международная конференция по фотонике и информационной оптике (Россия, Москва, 2021 г.); Международная научная конференция «SPIE Security + Defence 2021» (Онлайн-формат, 2021 г.); XI Международная конференция по фотонике и информационной оптике (Россия, Москва, 2022 г.); Международная научная конференция «SPIE Security + Defence 2022» (Германия, Берлин, 2022 г.); 5-я Конференция с международным участием «Терагерцовое и микроволновое излучение: генерация, детектирование и приложения» (ТЕРА-2023) (Россия, Москва, 2023 г.); XIII Международная конференция по фотонике и информационной оптике (Россия, Москва, 2024 г.);

Личный вклад автора

Все результаты, представленные в работе, получены автором лично либо при его непосредственном участии, а именно: разработана и создана установка терагерцового радиовидения со спектральным разрешением; на основе ТГц радиовидения со спектральным разрешением созданы экспериментальные методики для детектирования отдельных частиц (микрокристаллов) нитросоединений в режиме реального времени, а также для изучения процесса рассеяния и исследования ТГц спектров пропускания и отражения конденсатов нитросоединений различной дисперсности (слои порошков и плёнки); проведено экспериментальное изучение ТГц изображений отдельных микрокристаллов нитросоединений, выполнен анализ полученных результатов и сформулированы выводы; проведено экспериментальное исследование ТГц спектров пропускания и отражения слоёв порошков и плёнок RDX различной дисперсности с учётом рассеяния и оптических свойств подложек, выполнен анализ полученных результатов и сформулированы выводы; проведено экспериментальное исследование возможности идентификации нитросоединений с помощью ТГц источника на основе лавинно-пролетного диода, выполнен анализ полученных результатов и сформулированы выводы; проведено математическое моделирование на основе метода матриц переноса для изучения спектральных свойств конденсатов нитросоединений в ТГц диапазоне (проявление аномальной дисперсии в виде спектральных особенностей); проведено математическое моделирование на основе теории Ми для исследования рассеяния ТГц излучения конденсатами нитросоединений.

Публикации

По теме диссертации опубликовано 8 работ в рецензируемых научных журналах, в том числе 1 статья в журналах и изданиях, включенных в перечень ВАК Министерства науки и высшего образования Российской Федерации, 2 статьи в журналах, входящих в базы данных Web of Science и Scopus, 5 статей в отдельных выпусках международных журналов, входящих в базу данных Scopus; 1 патент Российской Федерации на полезную модель. Список публикаций приведен в конце автореферата.

Объем и структура диссертации

Диссертация состоит из введения, пяти глав, заключения и основных выводов, благодарностей, списка литературы. Объем диссертации составляет 140 страниц, включая 60 рисунков. Список цитируемой литературы содержит 142 наименования.

ОСНОВНОЕ СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

Во введении обоснована актуальность темы диссертации и сформулирована цель работы. Обсуждаются научная новизна, практическая и теоретическая значимость; приведены сведения об апробации работы, публикациях автора по теме исследования.

В первой главе приведён обзор литературы, посвящённый описанию основных физических процессов при взаимодействии терагерцового излучения с веществом. Значительное внимание уделяется молекулярным конденсированным средам, а также анализу актуального состояния ТГц спектроскопии и визуализации. Обзор разделен на три части. В первом разделе обсуждается взаимодействие ТГц излучения с веществом в газообразном и конденсированном состоянии. Во втором разделе рассматриваются методики ТГц визуализации со спектральным разрешением. В третьем разделе приводятся результаты спектральных исследований различных азотосодержащих органических соединений в ТГц диапазоне. По результатам обзора сформулированы цель и задачи работы.

Вторая глава (“Экспериментальная установка и методики. Методы математического моделирования. Исследуемые образцы”) посвящена описанию экспериментальных методик и установки, разработанных для решения поставленных задач, а также рассмотрению методов математического моделирования и исследуемых образцов, использованных в работе. В разделе 2.1 второй главы представлена разработанная и созданная установка ТГц радиовидения со спектральным разрешением (рисунок 1).

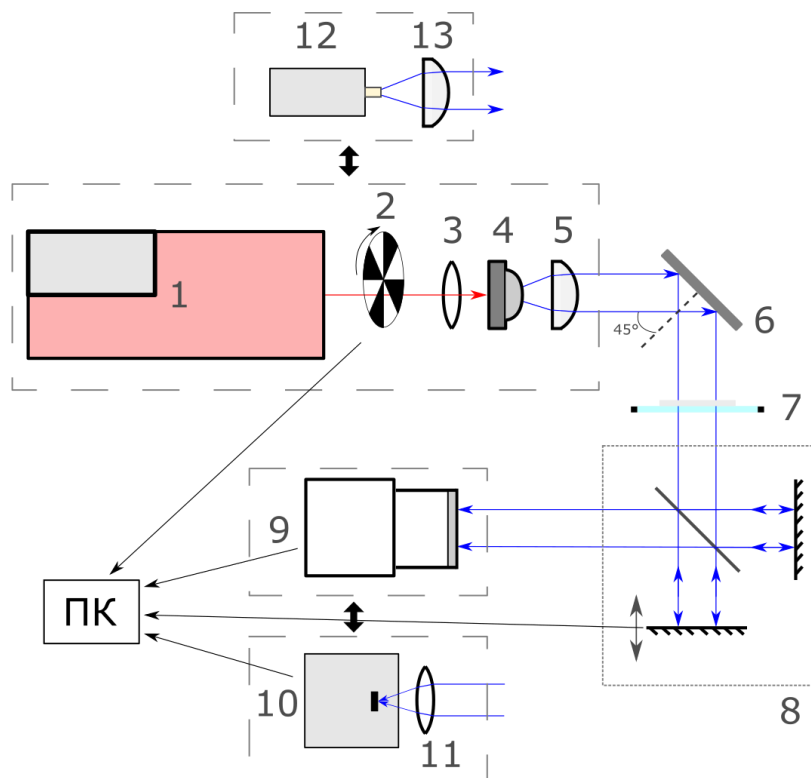


Рисунок 1. Оптическая схема установки терагерцового радиовидения со спектральным разрешением. 1 – фемтосекундный лазер, 2 – оптомеханический модулятор (при использовании пироэлектрического детектора), 3 – фокусирующая линза для лазерного излучения, 4 – фотопроводящая антенна, 5, 13 – коллимирующая ТГц линза, 6 – исследуемый образец (при регистрации ТГц спектров отражения) или плоское металлическое зеркало (при регистрации ТГц спектров пропускания), 7 – исследуемый образец (при регистрации ТГц спектров пропускания), 8 – интерферометр Майкельсона, 9 – микроболометрическая ТГц видеокамера с объективом и ИК фильтром, 10 – пироэлектрический

детектор, 11 – ТГц линза, 12 – ТГц источник на основе лавинно-пролетного диода, ПК – персональный компьютер.

В качестве источника широкополосного ТГц излучения (0,3-3 ТГц) со средней мощностью ≥ 100 мкВт использовалась фотопроводящая антенна iPCA-21-05-1000-800-x (Bator GmbH). ТГц излучение антенны имело практически линейную поляризацию [25]. Постоянное напряжение на ней составляло 15 В. Для воздействия на антенну и получения ТГц импульсов применялось сфокусированное излучение фемтосекундного титан-сапфирового лазера TiF-100ST-F12-M (Avesta Project Ltd.) со средней мощностью излучения $W_{cp} = 2,3$ Вт и длиной волны $\lambda = 800$ нм. Длительность одного лазерного импульса составляла $\tau = 60$ фс, частота следования импульсов f

= 80 МГц. При использовании установки параметры лазерного излучения контролировались с помощью измерителя мощности 3A-P-FS-12 (Ophir) и спектрометра USB4000 (Ocean Optics).

Помимо фотопроводящей антенны в работе также использовался ТГц источник на основе лавинно-пролетного диода (ООО «МВЭЙВ») с основной рабочей частотой 0,29 ТГц и номинальной средней мощностью 20 мВт (рисунок 1, позиция 12). При этом лазер (рисунок 1, позиция 1), оптомеханический модулятор (рисунок 1, позиция 2), линза для лазерного излучения (рисунок 1, позиция 3) и фотопроводящая антенна (рисунок 1, позиция 4) исключались из оптической схемы установки и заменялись на указанный источник с ослабителем ТГц излучения.

В качестве детектора излучения в установке использовалась ТГц видеокамера Microcam-384I-THz (INO) на основе микроболометрической матрицы размером 384x288 пикселей с межцентровым расстоянием пикселей 35 мкм (рисунок 1, позиция 9). Максимальная частота следования кадров видеокамеры составляла 50 Гц с возможностью усреднения результатов измерения в каждом пикселе по нескольким последовательным кадрам. Видеокамера была оборудована светосильным объективом 44/0.7 (Tydex, LLC) и фильтром для подавления фоновой инфракрасной (ИК) засветки. В работе также использовались объективы на основе просветленной плоско-выпуклой линзы из высокоомного кремния диаметром 76,2 мм с фокусным расстоянием 25 мм (Tydex, LLC) и на основе плоско-выпуклой линзы из полиметилпентена (TPX) диаметром 50 мм с фокусным расстоянием 65 мм (Bator GmbH).

Дополнительно при работе с установкой использовался пирозлектрический ТГц детектор на основе LiTaO_3 (рисунок 1, позиция 10), который устанавливался вместо микроболометрической ТГц видеокамеры. Регистрируемое терагерцовое излучение фокусировалось на указанном пирозлектрическом детекторе с помощью тефлоновой ТГц линзы. При этом для лазерного излучения использовался оптомеханический модулятор (рисунок 1, позиция 2).

Далее все представленные в автореферате ТГц изображения и ТГц спектры получены с использованием ТГц видеокамеры.

Спектральное разрешение обеспечивалось за счёт ТГц Фурье-спектрометра ФТ-Скан (Avesta Project Ltd.) на основе интерферометра Майкельсона (рисунок 1, позиция 8), позволяющего исследовать ТГц спектры в диапазоне от 0,1 до 3 ТГц, а также использовать в установке как непрерывные, так и импульсные терагерцовые источники. При необходимости, чтобы избежать поглощения ТГц излучения парами воды в воздухе, измерения проводились в атмосфере азота.

Спектральное разрешение могло обеспечиваться в установке не только с помощью ТГц Фурье-спектрометра, но и с помощью полосовых ТГц фильтров BP-600B, BP-800B, BP-1000B, BP-1300B и BP-1600B (SLT Sensor- und Lasertechnik).

ТГц видеокамера (или пирозлектрический детектор и оптомеханический модулятор), а также Фурье-спектрометр подключались к персональному компьютеру со специально разработанным программным обеспечением (ПО) для управления установкой в процессе регистрации ТГц изображений со спектральным разрешением (или ТГц спектров в случае использования пирозлектрического детектора). Взаимодействие ПО с устройствами происходило через библиотеки из наборов SDK (Software Development Kit), поставляемые вместе с оборудованием. При необходимости в процессе записи интерферограммы с целью уменьшения влияния шумов на неё для каждого дискретного положения подвижного зеркала интерферометра Майкельсона значения сигнала в каждом пикселе микроболометрической матрицы усреднялись по нескольким последовательным кадрам. Получение спектральной информации выполнялось с помощью обратного Фурье-преобразования интерферограммы для каждого пикселя матрицы ТГц видеокамеры. При этом программное обеспечение позволяло строить ТГц изображение в частотном диапазоне, задаваемом пользователем.

Раздел 2.2 второй главы посвящен экспериментальной методике для исследования рассеяния ТГц излучения конденсатами нитросоединений. Для этого использовалась созданная установка ТГц радиовидения со спектральным разрешением (рисунок 2).

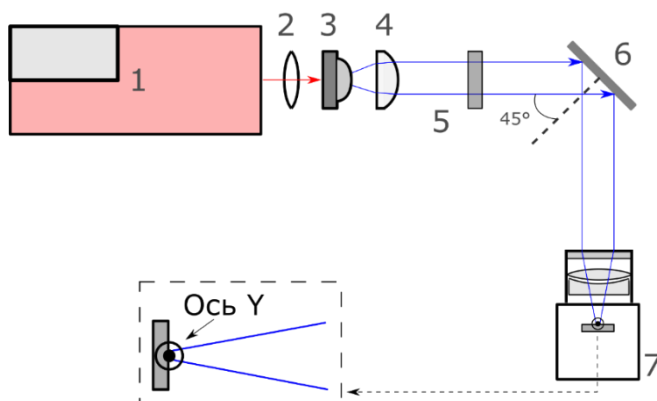


Рисунок 2. Оптическая схема для исследования рассеяния ТГц излучения. 1 – фемтосекундный лазер, 2 – фокусирующая линза для лазерного излучения, 3 – фотопроводящая антенна, 4 – коллимирующая ТГц линза, 5 – полосовой ТГц фильтр, 6 – исследуемый образец или плоское металлическое зеркало, 7 – микроболометрическая ТГц видеокамера с объективом и ИК фильтром.

При исследовании рассеяния ТГц излучения в требуемом спектральном диапазоне непосредственно после фотопроводящей антенны устанавливались полосовые ТГц фильтры ВР-600В, ВР-800В, ВР-1000В, ВР-1300В и ВР-1600В (SLT Sensor- und Lasertechnik) с максимумами пропускания на частотах 0,6, 0,8, 1, 1,3, 1,6 ТГц и шириной полосы пропускания 0,12, 0,16, 0,2, 0,26, 0,32 ТГц (по уровню 1/2 максимума пропускания - FWHM), соответственно. При этом из оптической схемы установки терагерцового радиовидения со спектральным разрешением (рисунок 1) исключался интерферометр Майкельсона. За счёт этого отраженное и частично рассеянное от исследуемого образца излучение направлялось непосредственно в объектив ТГц видеокамеры.

Для исследования рассеяния ТГц излучения образцами нитросоединений было измерено распределение интенсивности ТГц излучения в фокальной плоскости объектива ТГц видеокамеры. В случае наличия рассеяния происходило увеличение расходимости зондирующего ТГц пучка после его взаимодействия с исследуемым образцом. Это приводило к уширению пятна фокусировки ТГц излучения на микроболометрической матрице видеокамеры.

В разделе 2.3 второй главы описана экспериментальная методика для изучения отдельных микрокристаллов нитросоединений с помощью ТГц визуализации в режиме реального времени. Для этого использовалась оптическая схема установки ТГц радиовидения со спектральным разрешением, показанная на рисунке 3.

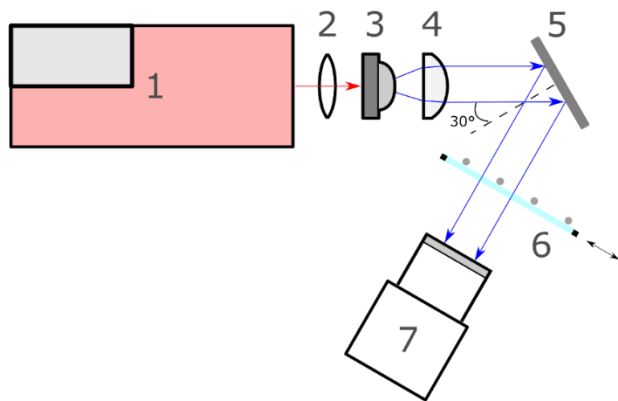


Рисунок 3. Оптическая схема для исследования ТГц изображений отдельных микрокристаллов нитросоединений в режиме реального времени. 1 – фемтосекундный лазер, 2 – фокусирующая линза для лазерного излучения, 3 – фотопроводящая антенна, 4 – коллимирующая ТГц линза, 5 – плоское металлическое зеркало (в случае оптической схемы “на пропускание”) или исследуемый образец с подложкой в виде плоского металлического зеркала (в случае оптической схемы “на отражение”), 6 –

исследуемый образец с подложкой в виде натянутой полиэтиленовой пленки (в случае оптической схемы “на пропускание”), 7 – микроболометрическая ТГц видеокамера с объективом и ИК фильтром.

При регистрации терагерцовых изображений отдельных частиц нитросоединений использовались как оптическая схема “на пропускание”, так и оптическая схема “на отражение”. В первом случае (“на пропускание”) ТГц пучок падал на плоское металлическое зеркало (позиция 5, рисунок 3) и после отражения от него направлялся на образец с прозрачной подложкой (позиция 6, рисунок 3). Во втором случае (“на отражение”) исследуемый образец на плоском металлическом зеркале устанавливался в позицию 5 (рисунок 3) вместо позиции 6 (рисунок 3). В обоих указанных случаях область ТГц засветки на поверхности образцов имела диаметр около

2,5 см и полностью просматривалась ТГц видеокамерой, а её объектив был настроен на максимальную резкость регистрируемых ТГц изображений. В ходе эксперимента учитывалось предварительно записанное ТГц изображение чистой подложки, которое затем использовалось для нормировки каждого ТГц изображения частицы для повышения контрастности. При переходе от первого случая ко второму ТГц видеокамера устанавливалась так, чтобы расстояние между образцом и объективом не менялось. Скорость регистрации ТГц изображений с учётом их математической обработки составляла 5 кадров в секунду.

В разделе 2.4 второй главы обсуждаются используемые в работе методы матриц переноса и теории Ми для математического моделирования ТГц спектров изучаемых образцов и исследования рассеяния ТГц излучения отдельными частицами нитросоединений, соответственно.

В разделе 2.5 второй главы описаны использованные в работе исследуемые образцы конденсатов нитросоединений.

Все нитросоединения, использованные в настоящей работе, были изготовлены в РХТУ им. Д.И. Менделеева и предназначены для сертификации аналитического оборудования согласно регламентам, действующим в Российской Федерации.

В работе исследовались образцы 1,3,5-тринитро-1,3,5-триазадициклогексана (гексоген, RDX) с различной дисперсностью и поверхностными концентрациями в виде плёнки, высаженной из раствора в ацетоне, и в виде слоя порошка. При этом также изучались отдельные частицы (микрорекристаллы). Поверхностная концентрация плёнок RDX составляла до ~ 10 мг/см², характерный размер неоднородностей ≤ 50 мкм. Поверхностная концентрация порошковых образцов RDX составляла до ~ 50 мг/см². При этом характерный размер частиц (микрорекристаллов) составлял ~ 800 - 100 мкм (в том числе в случае образцов в виде отдельных микрорекристаллов RDX).

Помимо гексогена в работе исследовались образцы 2,4,6-тринитрометилбензола (тротил, TNT) в виде слоёв, высаженных из ацетона, с поверхностной концентрацией ~ 10 мг/см², а также образцы пентаэритрита тетранитрата (пентрит, PETN) в виде отдельных частиц (микрорекристаллов) с размером ~ 600 - 150 мкм.

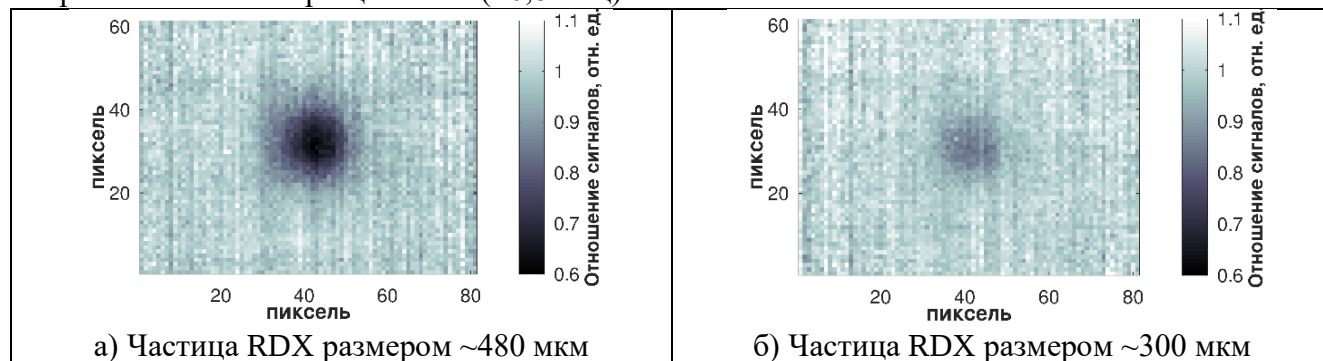
После изготовления образцы нитросоединений оставлялись на 1 сутки в комнатных условиях для того, чтобы минимизировать остаточное количество растворителя.

Дисперсность нитросоединений во всех изготовленных образцах контролировалась с помощью оптического цифрового микроскопа Bresser LCD 50x–2000x.

Третья глава (“Исследование отдельных микрорекристаллов нитросоединений”) посвящена изучению оптических характеристик отдельных микрорекристаллов (частиц) нитросоединений с помощью ТГц визуализации в режиме реального времени.

В разделах 3.1 и 3.2 третьей главы приводятся экспериментальные результаты исследований ТГц изображений отдельных микрорекристаллов RDX размером ~ 480 - 130 мкм и PETN размером ~ 600 - 150 мкм, соответственно.

На рисунках 4 а)-г) представлены полученные ТГц изображения отдельных частиц RDX размером ~ 480 - 130 мкм (оптическая схема “на пропускание” из раздела 2.3 второй главы – показана выше на рисунке 3). Необходимо отметить, что при этом максимум интенсивности излучения фотопроводящей антенны совпадает с максимумом полосы поглощения макроскопических образцов RDX ($\sim 0,8$ ТГц).



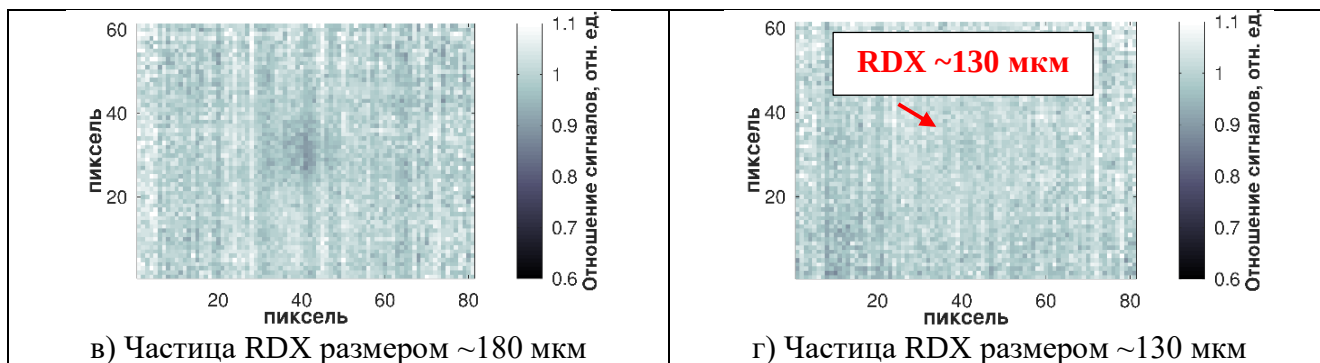


Рисунок 4. ТГц изображения отдельных частиц RDX размером: а) ~480 мкм; б) ~300 мкм; в) ~180 мкм; г) ~130 мкм; (оптическая схема “на пропускание” из раздела 2.3 второй главы – показана выше на рисунке 3).

Видно, что частицы RDX размером ~480-180 мкм отчётливо наблюдаются на ТГц изображениях. При этом частица RDX размером ~130 мкм оказывается уже практически не различима визуально. Применение медианного фильтра позволяет уменьшить влияние шумов на ТГц изображение частицы RDX размером ~130 мкм и тем самым добиться её визуального обнаружения (рисунок 5).

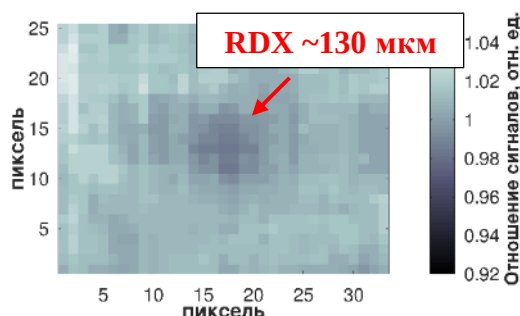
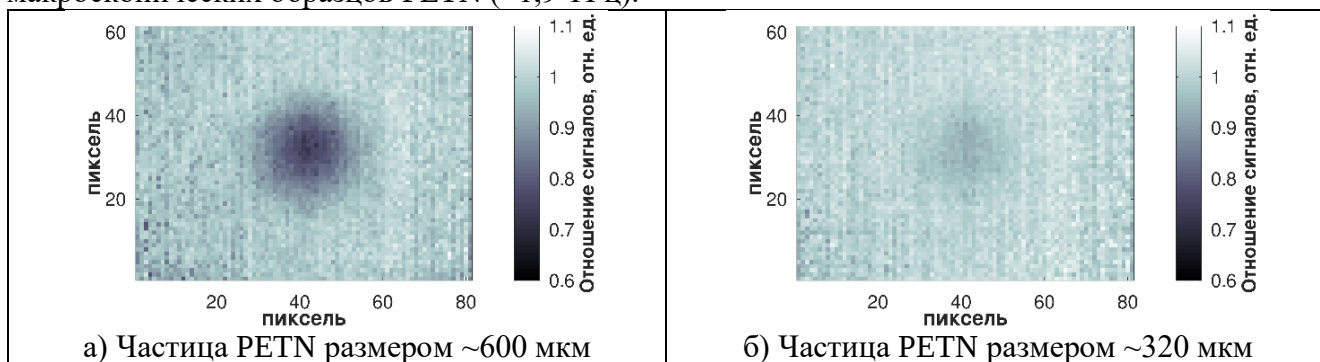


Рисунок 5. ТГц изображение частицы RDX размером ~130 мкм после применения медианного фильтра 5x5 (оптическая схема “на пропускание” из раздела 2.3 второй главы – показана выше на рисунке 3).

Таким образом, метод ТГц радиовидения позволяет регистрировать в режиме реального времени ТГц изображения отдельных частиц нитросоединений. При этом удаётся обнаруживать частицы RDX размером до ~130 мкм (массой ~1 мкг), включительно.

На рисунках 6 а)-г) показаны полученные ТГц изображения отдельных частиц PETN размером ~600-150 мкм (оптическая схема “на пропускание” из раздела 2.3 второй главы – показана выше на рисунке 3). Необходимо отметить, что при этом взаимодействие ТГц излучения с веществом частиц носит нерезонансный характер, поскольку максимум излучения фотопроводящей антенны (~0,8 ТГц) располагается вдали от максимума полосы поглощения макроскопических образцов PETN (~1,9 ТГц).



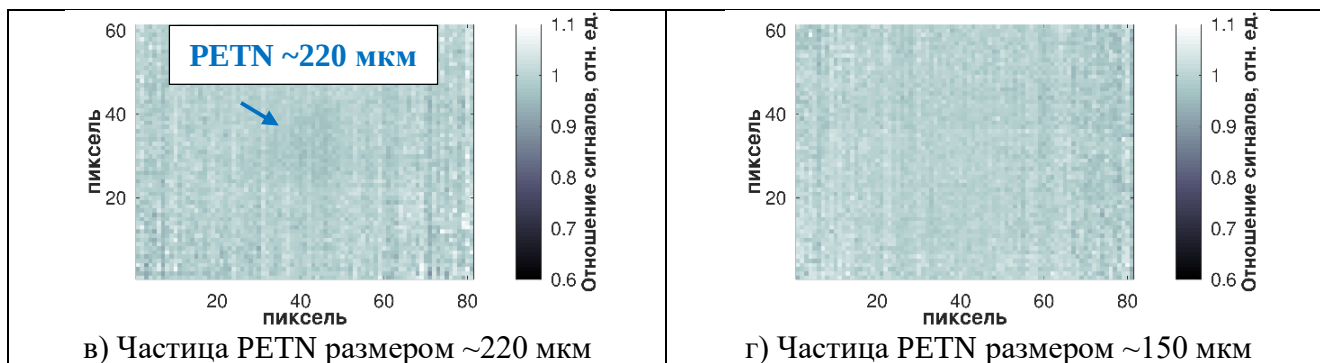
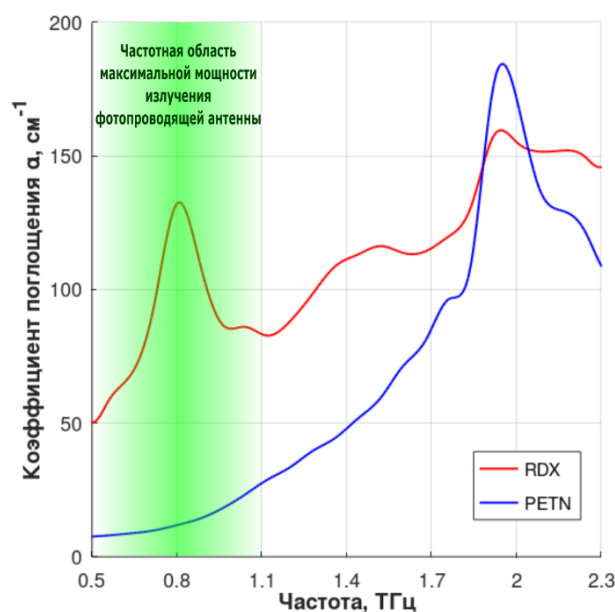


Рисунок 6. ТГц изображения отдельных частиц PETN размером: а) ~ 600 мкм, б) ~ 320 мкм, в) ~ 220 мкм, г) ~ 150 мкм; (оптическая схема “на пропускание” из раздела 2.3 второй главы – показана выше на рисунке 3).

В случае PETN обнаруживаются частицы размером ~ 600 – 320 мкм, однако для размера ~ 220 мкм ТГц изображение уже имеет слабый контраст. Частица PETN ещё меньшего размера – 150 мкм, вообще не наблюдаются визуально даже после применения медианного фильтра и полезный сигнал не отличим от шума.

Таким образом, метод ТГц радиовидения позволяет обнаруживать в режиме реального времени отдельные частицы PETN размером до ~ 220 мкм (массой ~ 10 мкг), включительно, что превышает минимальный размер обнаруживаемой частицы RDX (~ 130 мкм).



Раздел 3.3 третьей главы посвящен изучению поглощения и рассеяния ТГц излучения отдельными микрокристаллами нитросоединений с помощью методов математического моделирования на основе теории Ми, а также исследованию влияния этих процессов на контраст ТГц изображений таких частиц.

Полученные экспериментальные результаты по регистрации ТГц изображений отдельных частиц нитросоединений с размерами порядка длины волны (рисунки 4 и 6) сильно отличаются от известных ТГц изображений макроскопических образцов (например, [26]). На рисунке 7 показаны ТГц спектры поглощения для макроскопических образцов RDX и PETN.

Рисунок 7. ТГц спектры поглощения RDX и PETN.

Имеет место хорошее совпадение этих спектров с известными из литературы [27]. Видно (рисунк 7), что для гексогена и пентрита характерно наличие интенсивных полос поглощения в терагерцовом диапазоне.

Для использованной в эксперименте оптической схемы (рисунк 3) ТГц спектр излучения фотопроводящей антенны имеет наибольшую мощность в диапазоне частот $0,5$ – $1,1$ ТГц (по уровню $1/2$ максимума) с максимумом мощности на частоте $0,8$ ТГц. Указанный диапазон практически полностью совпадает с интенсивной характеристической полосой поглощения гексогена, где значение коэффициента поглощения RDX составляет по крайней мере десятки см^{-1} и достигает на частоте $0,8$ ТГц максимальной величины – более 100 см^{-1} . Важно, что обсуждаемая частотная область приходится только на край характеристической полосы PETN, у которой максимум поглощения находится в районе $\sim 1,9$ ТГц. В результате, в диапазоне $0,5$ – $1,1$ ТГц коэффициент поглощения пентрита оказывается многократно меньше, чем у гексогена, что

даёт возможность обеспечить спектральную селективность детектирования этих нитросоединений при использовании фотопроводящей антенны.

Действительно, при детектировании макроскопических образцов одним из основных факторов, влияющих на контраст изображения, является спектральная зависимость коэффициента поглощения. Во множестве случаев указанный фактор оказывается главным: поскольку для 0,8 ТГц коэффициенты поглощения гексогена и пентрита отличаются практически на порядок, то и контраст их изображений будет отличаться практически на порядок. Однако для малых частиц размером ~300-600 мкм контраст ТГц изображений для RDX и PETN сравним и начинает заметно различаться только для частиц размером меньше ~300 мкм. Таким образом, оказывается, что спектральная селективность для частиц размером ~300-600 мкм не проявляется, но при этом возникает для размеров меньше 300 мкм.

Для исследования сложной зависимости контраста ТГц изображений частиц нитросоединений от их размера и спектральных свойств (поглощения и рассеяния) проводились расчёты сечений рассеяния σ_{sca} , поглощения σ_{abs} и экстинкции σ_{ext} , а также индикатрис рассеяния на основе теории рассеяния Ми для однородных сферических частиц.

Хорошего соответствия результатов математического моделирования и эксперимента позволяет добиться учёт индикатрисы рассеяния и апертуры ТГц видеокамеры при расчёте сечения экстинкции исследуемых частиц. На рисунке 8 показана зависимость $\frac{\sigma_{ext RDX}}{\sigma_{ext PETN}}$ для отношения сечения экстинкции частицы гексогена $\sigma_{ext RDX}$ и частицы пентрита $\sigma_{ext PETN}$ от их размера d .

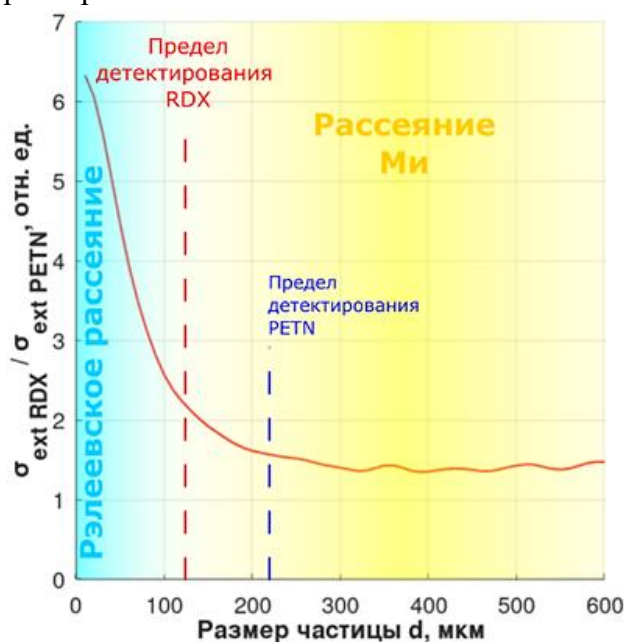


Рисунок 8. Зависимость отношения сечения экстинкции частицы гексогена $\sigma_{ext RDX}$ и частицы пентрита $\sigma_{ext PETN}$ от их размера d (с учётом их индикатрис рассеяния и апертуры ТГц видеокамеры).

Видно (рисунок 8), что для $d \geq 300$ мкм, где преобладает рассеяние Ми, сечения экстинкции частицы RDX ($\sigma_{ext RDX}$) и частицы PETN ($\sigma_{ext PETN}$) почти равны. Это и объясняет практически одинаковый контраст зарегистрированных ТГц изображений. Однако по результатам расчётов уже начиная с размера $d \sim 130$ мкм (предел детектирования RDX) значение $\sigma_{ext RDX}$ начинает превышать $\sigma_{ext PETN}$ в 2 раза. При этом по мере дальнейшего уменьшения d , где начинает проявляться Рэлеевское рассеяние и процесс поглощения преобладает над процессом

рассеяния, отношение $\sigma_{ext RDX} / \sigma_{ext PETN}$ становится ещё больше. В результате, частицы RDX имеют меньший предел детектирования (~130 мкм) по сравнению с частицами PETN (~220 мкм).

Четвёртая глава (“ТГц спектры пропускания и отражения конденсатов RDX различной дисперсности”) посвящена исследованию ТГц спектров пропускания и отражения конденсатов гексогена различной дисперсности с учётом рассеяния с помощью ТГц визуализации и спектроскопии. При этом основное внимание уделялось изучению спектров в диапазоне интенсивной полосы поглощения RDX ~0,8 ТГц.

В разделе 4.1 четвёртой главы представлены результаты исследования ТГц спектров пропускания порошков RDX с размером микрокристаллов $d \leq 450$ мкм и плёнок RDX с размером неоднородностей ≤ 50 мкм. Рассеяние Ми может оказывать сильное влияние на регистрируемые ТГц спектры, если характерный размер частиц вещества d в исследуемом образце оказывается сравним с длиной ТГц волны. Этот эффект отчётливо проявляется в случае порошков гексогена. На рисунке 9 для частоты интенсивной полосы поглощения RDX ~0,8 ТГц показан график

рассчитанной зависимости отношения сечения рассеяния $\sigma_{sca\ RDX}$ и сечения поглощения $\sigma_{abs\ RDX}$ частицы RDX от её размера d .

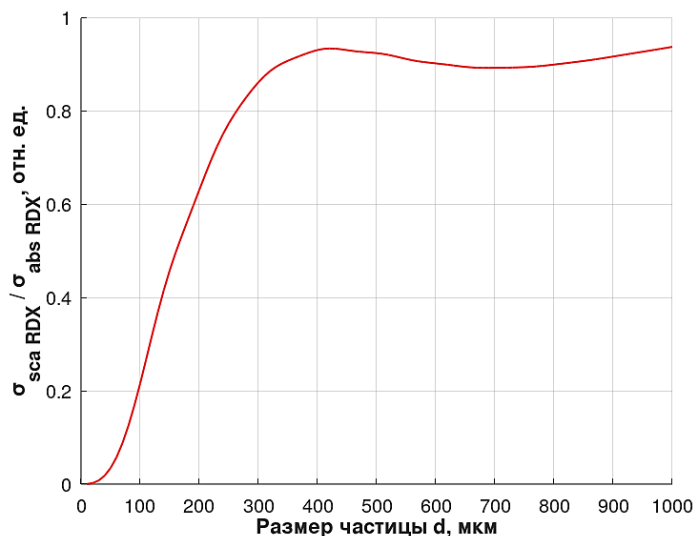


Рисунок 9. График зависимости отношения сечения рассеяния $\sigma_{sca\ RDX}$ и сечения поглощения $\sigma_{abs\ RDX}$ частицы RDX от её размера d (на частоте 0,8 ТГц).

Согласно рисунку 9 даже в случае однократного рассеяния, уже начиная с размера частицы $d \sim 300$ мкм и более сечения рассеяния и поглощения частицы гексогена оказываются практически одинаковыми, что может приводить к значительному влиянию процесса рассеяния на регистрируемые ТГц спектры пропускания и отражения.

На рисунке 10 представлены графики экспериментально полученных зависимостей коэффициента экстинкции от частоты для образцов RDX в виде порошков с характерным размером частиц (микрористаллов) $d \sim 100$ мкм и $d \sim 450$ мкм (применялась оптическая схема “на пропускание”).

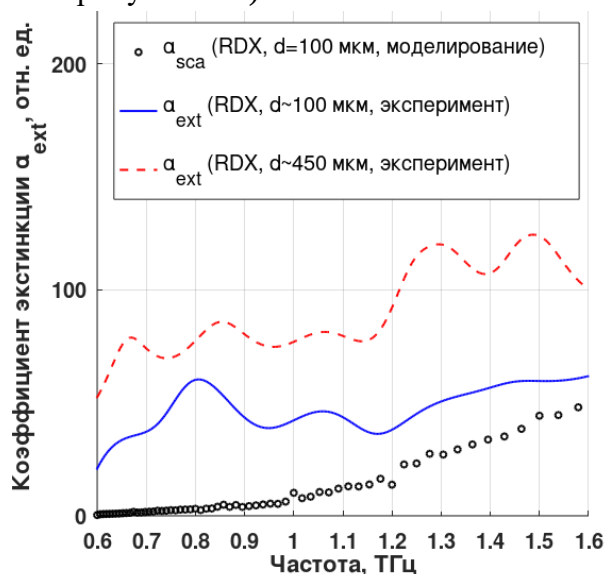


Рисунок 10. Графики зависимостей коэффициента экстинкции от частоты для образцов RDX в виде порошков с характерным размером микрористаллов $d \sim 100$ мкм и $d \sim 450$ мкм.

Для оценки влияния рассеяния на полученные ТГц спектры с учётом апертуры регистрирующей системы выполнены численные расчеты коэффициента рассеяния α_{sca} согласно теории Ми. При этом учитывалось влияние индикатрисы рассеяния для излучения в диапазоне 0,6–1,6 ТГц. В модели рассматривался порошковый образец RDX с частицами диаметром $d=100$ мкм. Из рисунка 10 видно, что в диапазоне от 0,6 ТГц до 1,1 ТГц значение коэффициента рассеяния, полученного на основе численных

расчётов, мало по сравнению с экспериментальным коэффициентом экстинкции образца RDX с размером частиц $d \sim 100$ мкм.

Таким образом, в оптической схеме “на пропускание” для порошков гексогена с размером частиц (микрористаллов) $d \sim 100$ мкм несмотря на рассеяние экспериментально наблюдаются спектральные пики в области 0,8-1,55 ТГц (наблюдаемые также и для однородных макроскопических образцов RDX [28]), которые могут использоваться для идентификации этого нитросоединения.

Следует отметить, что в случае плёнок RDX с размером неоднородностей ≤ 50 мкм на их ТГц спектрах пропускания также отчётливо наблюдается проявление полос поглощения гексогена в диапазоне 0,8-1,55 ТГц (рисунок 18).

В спектре для RDX с размером частиц (микрористаллов) $d \sim 450$ мкм не наблюдается даже самый интенсивный пик на частоте 0,8 ТГц (рисунок 10). При этом численные расчеты (рисунок 9) показывают, что процессы рассеяния и поглощения в этом случае оказываются сопоставимы. Таким образом, можно сделать вывод о том, что пропускание образцов гексогена,

состоящего из частиц с размером $d \sim 450$ мкм обусловлено уже в основном эффектом сильного рассеяния и его зависимостью от длины волны излучения.

Раздел 4.2 четвёртой главы посвящен исследованию рассеяния ТГц излучения плёнками RDX с размером неоднородностей $d \leq 50$ мкм и порошковыми образцами RDX с размером микрокристаллов $d \sim 100$ мкм с использованием оптической схемы из раздела 2.2 второй главы – показана выше на рисунке 2. Результаты измерений приведены на рисунке 11.

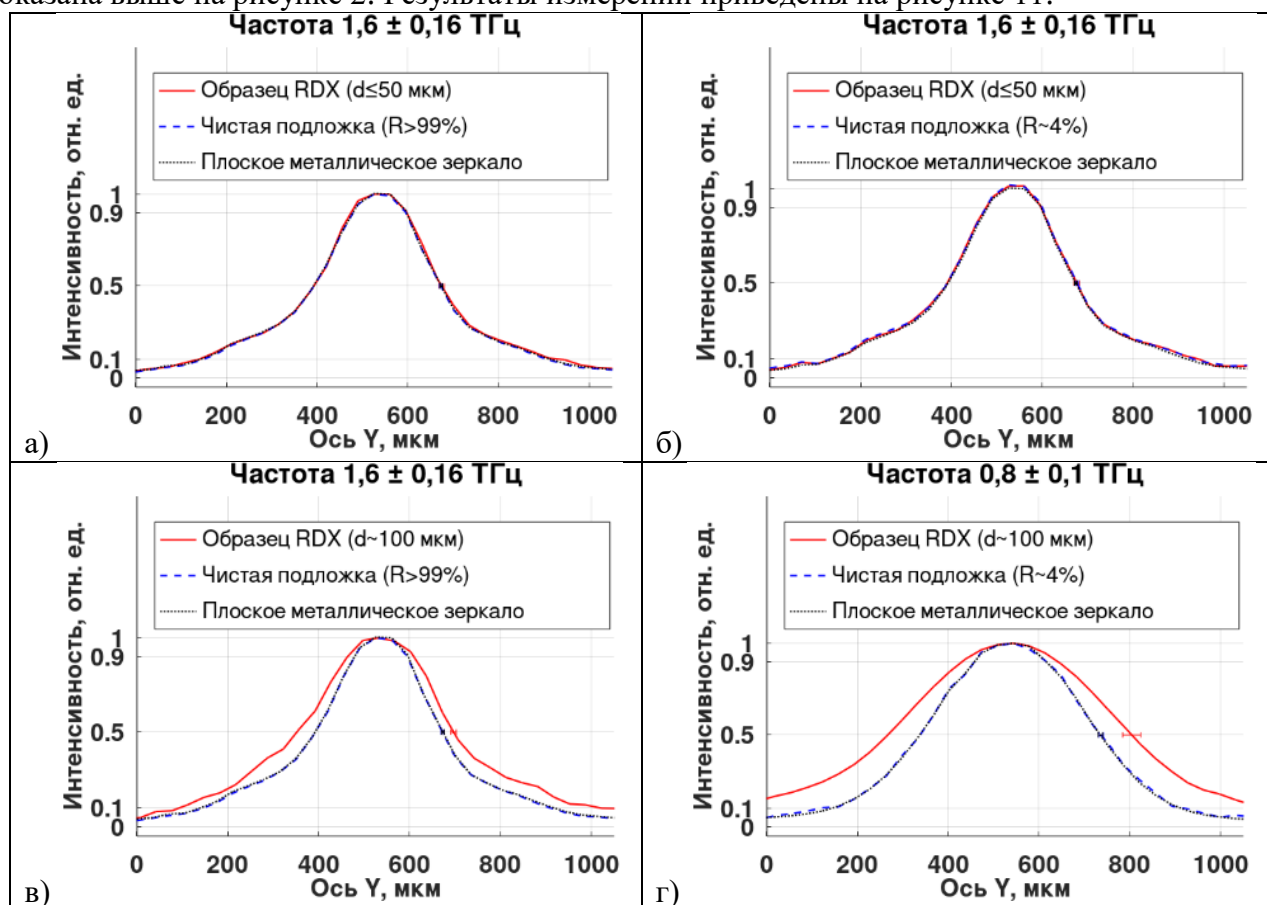


Рисунок 11. Профиль распределения интенсивности ТГц излучения в фокальной плоскости объектива ТГц видеокамеры для образца RDX: а) плёнка с размером неоднородностей $d \leq 50$ мкм (6 мг/см^2), сильноотражающая подложка ($R > 99\%$), частота $1,6 \pm 0,16$ ТГц; б) плёнка с размером неоднородностей $d \leq 50$ мкм (6 мг/см^2), слабоотражающая подложка ($R \sim 4\%$), частота $1,6 \pm 0,16$ ТГц; в) порошок с размером микрокристаллов $d \sim 100$ мкм (50 мг/см^2), сильноотражающая подложка ($R > 99\%$), частота $1,6 \pm 0,16$ ТГц; г) порошок с размером микрокристаллов $d \sim 100$ мкм (50 мг/см^2), слабоотражающая подложка ($R \sim 4\%$), частота $0,8 \pm 0,1$ ТГц; (каждый график нормирован на свое максимальное значение).

Ширина пятна фокусировки в фокальной плоскости объектива для чистой подложки и для образцов RDX в виде плёнки с размером неоднородностей $d \leq 50$ мкм (6 мг/см^2) совпадает с точностью до ошибки эксперимента. Это наблюдается как для сильноотражающей ($R > 99\%$), так и для слабоотражающей подложки ($R \sim 4\%$) во всем диапазоне используемых частот ТГц излучения вплоть до $1,6 \pm 0,16$ ТГц (рисунок 11 а) и б)). Аналогичная ситуация наблюдается также и для таких образцов с меньшей поверхностной концентрацией RDX: $0,75$, $1,5$ и 3 мг/см^2 . Полученный результат свидетельствует об отсутствии заметного рассеяния для образцов RDX в виде плёнок с размером неоднородностей $d \leq 50$ мкм во всем исследуемом спектральном диапазоне.

При исследовании образцов RDX в виде порошка с размером частиц $d \sim 100$ мкм (50 мг/см^2) наблюдается иная ситуация. Для указанных образцов на сильноотражающей подложке ($R > 99\%$) размер фокального пятна, по сравнению со случаем отражения от чистой подложки увеличивается, начиная с частоты $1,6 \pm 0,16$ ТГц (рисунок 11 в)). Эта разница статистически

регистрируется и превышает 20%. Для образцов этого же типа на слабоотражающей подложке ($R \sim 4\%$) уширение начинает наблюдаться еще раньше – уже на частоте $0,8 \pm 0,08$ ТГц регистрируется уширение фокального пятна более чем на 30% (рисунок 11 г)).

Влияние подложки оказывается существенным при малой толщине образцов RDX в виде плёнок с размером неоднородностей $d \leq 50$ мкм и образцов RDX в виде порошка с размером частиц $d \sim 100$ мкм (т.е. в случае оптически тонких образцов), поскольку требуется учет отражения на границе раздела образец/подложка. Для слабоотражающей подложки доля отраженного от неё излучения по сравнению с долей рассеянного излучения от границы воздух/образец – мала. В случае подложки с высоким коэффициентом отражения, наоборот, относительно мала доля рассеянного излучения от границы воздух/образец, и значит уширение оказывается меньше, чем в первом случае.

Таким образом, если для плёнок RDX с размером неоднородностей $d \leq 50$ мкм рассеянное излучение не наблюдается во всем спектральном диапазоне ($\leq 1,6$ ТГц) и для всех поверхностных концентраций (≤ 6 мг/см²), то для порошковых образцов RDX с размером частиц $d \sim 100$ мкм рассеяние проявляется при анализе распределения интенсивности отраженного ТГц пучка (для частот $\geq 0,8$ ТГц в случае слабоотражающей подложки и для частоты 1,6 ТГц в случае сильноотражающей подложки).

В разделах 4.3 и 4.4 четвёртой главы обсуждаются ТГц спектры отражения порошковых образцов RDX с размером микрокристаллов $d \sim 100$ мкм и плёнок RDX с размером неоднородностей $d \leq 50$ мкм в области полосы поглощения гексогена $\sim 0,8$ ТГц, соответственно.

Результаты исследования ТГц спектров отражения оптически тонких образцов RDX в виде порошка с размером микрокристаллов $d \sim 100$ мкм (50 мг/см²) приведены на рисунке 12 (применялась оптическая схема из раздела 2.1 второй главы – показана выше на рисунке 1).

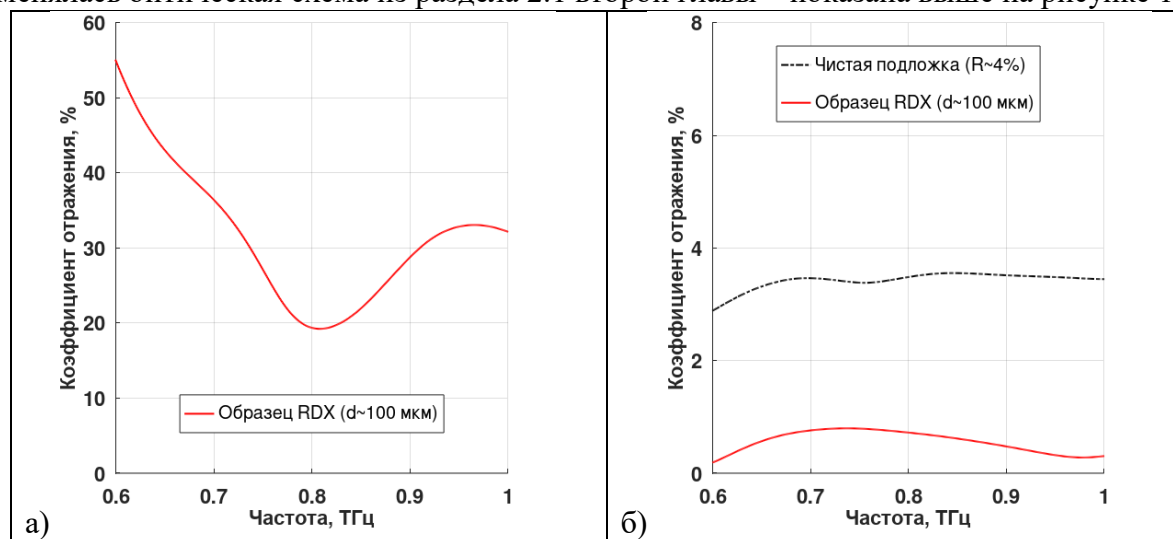


Рисунок 12. ТГц спектр отражения образца RDX в виде порошка с размером микрокристаллов $d \sim 100$ мкм (50 мг/см²) на: а) сильноотражающей подложке ($R > 99\%$) и б) слабоотражающей подложке ($R \sim 4\%$).

Характер ТГц спектров отражения образцов гексогена сильно зависит от коэффициента отражения подложек, на которых они располагаются.

Видно, что для такого образца на сильноотражающей подложке ($R > 99\%$) в спектре отражения наблюдается локальный минимум вблизи характеристической полосы поглощения RDX в области 0,8 ТГц (рисунок 12 а)) из-за двойного прохождения ТГц излучения через слой вещества и поглощения в нём. Действительно, как уже было показано ранее (рисунок 10) при прохождении излучения через порошок гексогена с характерным размером частиц $d \sim 100$ мкм его ТГц спектр экстинкции имеет локальный максимум в области 0,8 ТГц, а рассеяние не приводит к существенной деформации спектров поглощения.

При использовании слабоотражающей подложки ($R \sim 4\%$), в отличие от сильноотражающей ($R > 99\%$), локальный минимум в ТГц спектре отражения на частоте $\sim 0,8$ ТГц

(рисунок 12 б)) – отсутствует. При этом также отсутствует и локальный максимум, обусловленный проявлением аномальной дисперсии, поскольку для такого образца наличие рассеяния наблюдается уже на частоте $\sim 0,8$ ТГц (рисунок 11 г)) и, следовательно, для образцов RDX с размером микрокристаллов $d \sim 100$ мкм границу воздух/образец нельзя считать плоской. Одновременно с этим эффект двойного прохождения ТГц излучения через образец проявляется слабо за счёт использования слабоотражающей подложки. В результате в ТГц спектре отражения на частоте $\sim 0,8$ ТГц особенности не наблюдаются (рисунок 12 б)).

Похожий результат с таким же образцом RDX ($d \sim 100$ мкм) наблюдается и для подложки с коэффициентом отражения $\sim 10\%$ (рисунок 13).

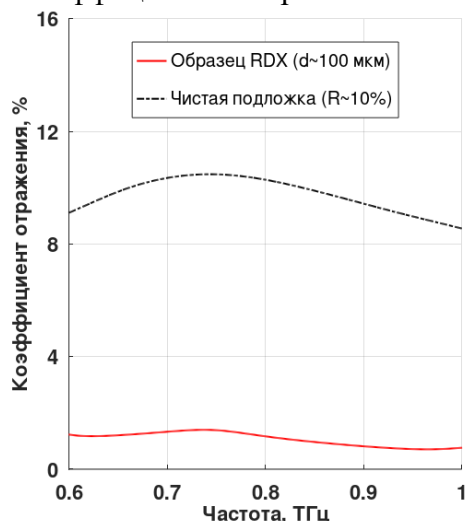


Рисунок 13. ТГц спектр отражения образца RDX в виде порошка с размером микрокристаллов $d \sim 100$ мкм на подложке с коэффициентом отражения $R \sim 10\%$.

Видно, что в области частоты $\sim 0,8$ ТГц не наблюдаются выраженные спектральные особенности и отсутствует эффект двойного прохождения через слой вещества.

Как показали результаты экспериментов, проведенных с помощью оптической схемы из раздела 2.1 второй главы (показана выше на рисунке 1), взаимодействие ТГц излучения с оптически тонкими образцами RDX в виде плёнок с размером неоднородностей $d \leq 50$ мкм проявляется на ТГц спектрах отражения по-разному в зависимости от величины коэффициента отражения границы

образец/подложка.

Для сильноотражающей подложки ($R > 99\%$) в спектре наблюдается локальный минимум в частотной области полосы поглощения RDX 0,8 ТГц (рисунок 14).

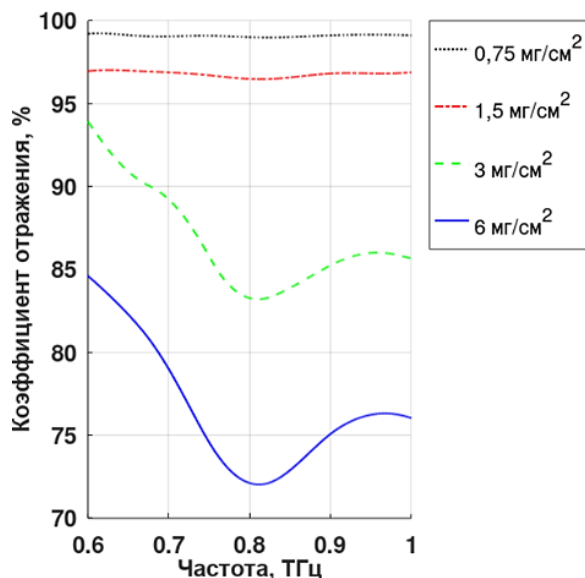


Рисунок 14. ТГц спектры отражения образцов RDX в виде плёнок с размером неоднородностей $d \leq 50$ мкм на сильноотражающей подложке ($R > 99\%$) при различных поверхностных концентрациях.

При этом величина локального минимума увеличивается с ростом поверхностной концентрации RDX. Как и в случае, показанном выше на рисунке 12 а) для образцов RDX с размером частиц $d \sim 100$ мкм, наблюдаемая форма спектра связана с тем, что основной вклад в сигнал отражения вносит подложка, выполняя таким образом роль зеркала, на котором располагается слабоотражающий, но поглощающий ТГц излучение объект. Излучение проходя через слой RDX в образцах, отражаясь от границы

образец/подложка и повторно проходя через этот слой испытывает поглощение на частоте $\sim 0,8$ ТГц. В результате, собственно, и формируется локальный минимум, амплитуда которого определяется поверхностной концентрацией.

Для случая слабоотражающей подложки ($R \sim 4\%$), в отличие от сильноотражающей, в спектре отражения наблюдается локальный максимум вблизи частоты 0,8 ТГц (рисунок 15).

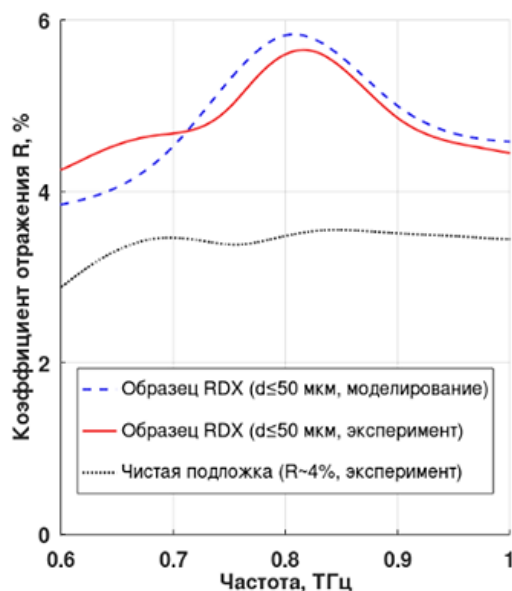
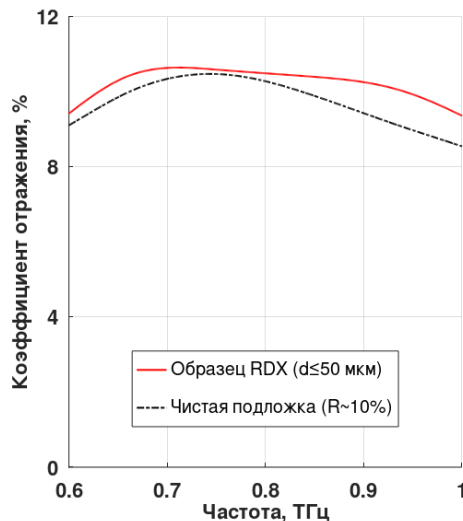


Рисунок 15. ТГц спектр отражения образца RDX в виде плёнки с размером неоднородностей $d \leq 50$ мкм ($1,5 \text{ мг/см}^2$) на слабоотражающей подложке ($R \sim 4\%$).

В этом случае спектр формируется в первую очередь как результат отражения от границы воздух/образец, т.к. отражение от границы образец/подложка мало. Причем, в полосе поглощения в области частоты 0,8 ТГц действительная часть показателя преломления RDX имеет аномальную зависимость от частоты (аномальная дисперсия) [29]. В результате этого и наблюдается локальный максимум отражения для плоской границы воздух/образец. Результаты математического моделирования спектра отражения в системе воздух/образец/подложка, выполненного с помощью метода матриц переноса, подтвердили наблюдаемый

эффект как качественно, так и количественно. Для наблюдения эффекта аномальной дисперсии тонких плёнок важно слабое отражение на границе образец/подложка и отсутствие значительного рассеяния на неоднородностях (рисунок 11 а), б)) т.е. наличие плоской границы раздела воздух/образец.

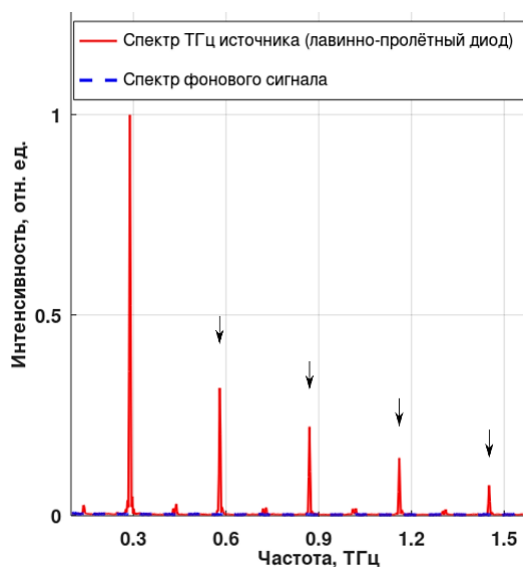


На рисунке 16 показан ТГц спектр отражения образца RDX в виде плёнки с размером неоднородностей $d \leq 50$ мкм ($1,5 \text{ мг/см}^2$) на подложке с коэффициентом отражения $\sim 10\%$.

Рисунок 16. ТГц спектр отражения образца RDX в виде плёнки с размером неоднородностей $d \leq 50$ мкм ($1,5 \text{ мг/см}^2$) на подложке с коэффициентом отражения $R \sim 10\%$.

В случае подложки с коэффициентом отражения $\sim 10\%$ в области частоты 0,8 ТГц в спектре отражения не наблюдается ни локальный максимум, характерный для проявления аномальной дисперсии, ни выраженный локальный минимум, характерный для двойного прохождения через слой RDX, поскольку в этом случае два указанных эффекта оказываются сопоставимы.

Пятая глава (“Спектральная идентификация нитросоединений с помощью ТГц источника на основе лавинно-пролётного диода”) посвящена экспериментальному исследованию



возможности идентификации нитросоединений с помощью ТГц источника на основе лавинно-пролетного диода с основной рабочей частотой 0,29 ТГц.

В разделе 5.1 пятой главы показаны результаты исследования спектра излучения ТГц источника на основе лавинно-пролетного диода.

На рисунке 17 показаны полученные спектры излучения ТГц источника на основе лавинно-пролетного диода и фонового сигнала (применялась оптическая схема из раздела 2.1 второй главы – показана выше на рисунке 1).

Рисунок 17. Спектр излучения ТГц источника на основе лавинно-пролетного диода и фонового сигнала (без учёта спектральной чувствительности ТГц видеокамеры).

Регистрация спектров проводилась при максимальном спектральном разрешении для используемой в работе экспериментальной установки. Амплитуды сигналов определяются в том числе спектральной чувствительностью видеокамеры, которая растет с ростом частоты ТГц излучения. Ширина каждой линии на рисунке 17 составляет около 5 ГГц (полная ширина на уровне половины высоты, FWHM). Полученные результаты показывают, что в спектре излучения ТГц источника помимо линии на основной рабочей частоте 0,29 ТГц также присутствуют линии гармоник в области 0,58-1,45 ТГц, причём амплитуда каждой из них многократно превышает амплитуду фонового сигнала (выделены стрелками на рисунке 17). Необходимо отметить, что эта область гармоник совпадает с диапазоном ~0,8-1,5 ТГц, где находятся сразу несколько известных полос поглощения RDX.

В разделе 5.2 пятой главы представлены ТГц спектры пропускания нитросоединений, полученные с помощью ТГц источника на основе лавинно-пролетного диода.

На рисунке 18 показаны спектры пропускания плёнки RDX с поверхностной концентрацией 10 мг/см², полученные с использованием ТГц источника на основе лавинно-пролетного диода (красные точки, рисунок 18) и с использованием фотопроводящей антенны (чёрные точки, рисунок 18) (применялась оптическая схема из раздела 2.1 второй главы – показана выше на рисунке 1).

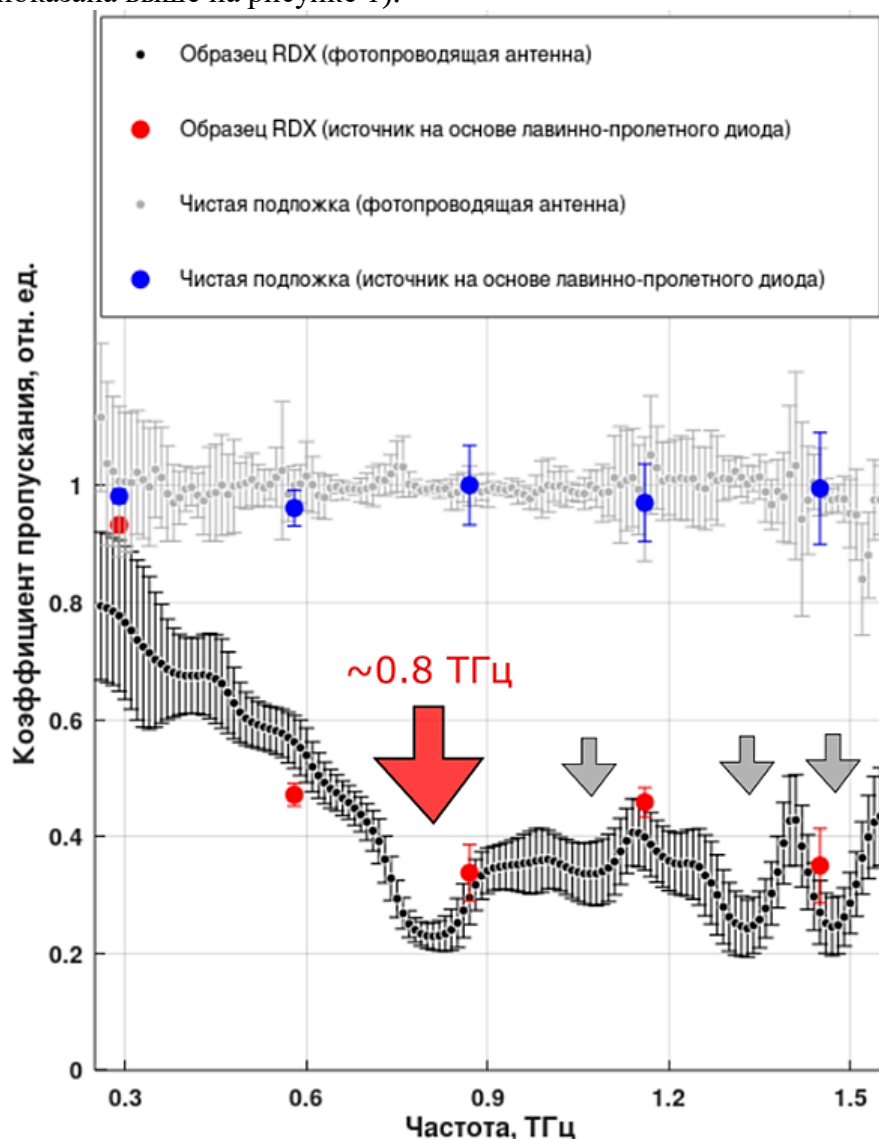


Рисунок 18. ТГц спектры пропускания образца RDX, полученные с использованием ТГц источника на основе лавинно-пролетного диода и с использованием фотопроводящей антенны (доверительная вероятность 0,99).

Согласно результатам, ТГц спектр пропускания образца RDX, полученный с помощью фотопроводящей антенны, содержит несколько локальных минимумов, обусловленных характеристическими полосами поглощения RDX (выделены стрелками на рисунке 18), что хорошо согласуется с известными спектрами гексогена. Важно, что не только в случае фотопроводящей антенны, но и в случае источника на основе лавинно-пролетного диода, ТГц спектр пропускания RDX содержит

особенность в виде локального минимума в области интенсивной полосы поглощения ~0,8 ТГц (относительно значений коэффициента пропускания на частотах гармоник 0,58 и 1,16 ТГц). При этом оба зарегистрированных ТГц спектра имеют хорошее соответствие с учётом погрешности измерений во всём исследуемом диапазоне.

ОСНОВНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ РАБОТЫ

1. Разработаны экспериментальные методики и создана установка терагерцового радиовидения в диапазоне 0,3-3 ТГц со спектральным разрешением на основе фотопроводящей антенны, возбуждаемой фемтосекундными лазерными импульсами, лавинно-пролетного диода и микроболометрической ТГц видеокамеры для исследования конденсатов нитросоединений.
2. Экспериментально продемонстрировано, что для отдельных микрокристаллов гексогена (RDX) и пентрита (PETN) с размерами ~600-300 мкм в области максимума полосы поглощения RDX (0,8 ТГц) контраст ТГц изображений – сравним, несмотря на то, что коэффициенты поглощения этих веществ отличаются на порядок, а для частиц с размерами менее 300 мкм разница в контрасте растёт с уменьшением размера микрокристаллов. Результаты математического моделирования на основе теории рассеяния Ми показали, что такой эффект обусловлен сложной зависимостью сечения экстинкции исследуемых микрочастиц от их размера.
3. На основе экспериментальных результатов и математического моделирования с помощью теории рассеяния Ми установлено, что для порошков гексогена (RDX) с размером микрокристаллов ≤ 100 мкм в ТГц спектре экстинкции (пропускания) выраженно проявляются полосы поглощения гексогена в области частот 0,8-1,55 ТГц, а в случае размера микрокристаллов ~450 мкм проявление полос – уже отсутствует, а сам спектр обусловлен, в основном, значительным эффектом рассеяния.
4. Экспериментально показано, что в случае сильноотражающих в ТГц диапазоне подложек (коэффициент отражения $>99\%$) для оптически тонких плёнок гексогена (RDX) с размером неоднородностей ≤ 50 мкм и оптически тонких порошковых слоёв гексогена (RDX) с размером микрокристаллов ~100 мкм в ТГц спектре отражения присутствует локальный минимум в области полосы поглощения гексогена 0,8 ТГц за счёт эффекта двойного прохождения зондирующего ТГц пучка через слой RDX и поглощения в этом слое. По мере уменьшения коэффициента отражения подложки до ~4% указанный эффект становится всё менее выраженным, а регистрируемый ТГц спектр отражения становится обусловлен главным образом отражением от границы воздух/образец.
5. Экспериментально показано, что в случае слабоотражающих в ТГц диапазоне подложек (коэффициент отражения ~4%) для оптически тонких плёнок гексогена (RDX) с размером неоднородностей ≤ 50 мкм в ТГц спектрах отражения существует проявление аномальной дисперсии для плоской границы воздух/образец в виде локального максимума в области полосы поглощения гексогена 0,8 ТГц. При этом для оптически тонких порошковых слоёв RDX с размером микрокристаллов ~100 мкм спектральные особенности на частоте 0,8 ТГц уже отсутствуют, поскольку границу воздух/образец уже нельзя считать плоской.
6. Экспериментально продемонстрирована возможность спектральной идентификации гексогена (RDX) с использованием ТГц источника на основе лавинно-пролетного диода за счёт наличия в частотном диапазоне его гармоник (0,58-1,45 ТГц) характеристической полосы поглощения гексогена в области 0,8 ТГц.

ПУБЛИКАЦИИ АВТОРА ПО ТЕМЕ ДИССЕРТАЦИИ

Научные статьи в журналах и изданиях, включенных в перечень ВАК Министерства науки и высшего образования Российской Федерации:

1. **Плеханов А.А.**, Акмалов А.Э., Котковский Г.Е., Кузищин Ю.А., Мартынов И.Л., Осипов Е.В., Чистяков А.А. Спектральная идентификация нитросоединений с использованием терагерцового источника на основе лавинно-пролетного диода // Письма в ЖТФ. – 2024. – том 50. выпуск – 7. – стр. 35-38. (DOI: 10.61011/PJTF.2024.07.57468.19738) (ВАК K1)

Научные статьи в журналах, входящих в базы данных Web of Science и Scopus:

2. **Plekhanov A.A.**, Akmalov A.E., Kotkovskii G.E., Kuzishchin Yu.A., Martynov I.L., Osipov E.V., Chistyakov A.A. Real-time detection of single microcrystals of nitro compounds by terahertz

imaging // Optical Engineering. – 2024. – Vol. 63. – №. 8. – P. 084104-1 - 084104-13. (<https://doi.org/10.1117/1.OE.63.8.084104>) (Scopus Q3)

3. **Plekhanov A.A.**, Akmalov A.E., Kotkovskii G.E., Kozlovskii K.I., Kuzishchin Yu.A., Martynov I.L., Maksimov E.M., Osipov E.V., Chistyakov A.A. Study of terahertz reflection spectra of optically thin RDX samples by terahertz imaging with spectral resolution //Optical Engineering. – 2023. – Vol. 62. – №. 3. – P. 034109-1 - 034109-13. (<https://doi.org/10.1117/1.OE.62.3.034109>) (Scopus Q3)

Научные статьи в отдельных выпусках международных журналов, входящих в базу данных Scopus:

4. Akmalov A.E., Aksenov E.A., Kotkovskii G.E., Kozlovskii K.I., Maksimov E.M., **Plekhanov A.A.**, Chistyakov A.A. Spectral identification of traces of explosives in reflected terahertz radiation // Proc. SPIE 11166, Counterterrorism, Crime Fighting, Forensics, and Surveillance Technologies III. – SPIE, 2019. – Vol. 11166. – P. 52-57. (<https://doi.org/10.1117/12.2532325>) (Scopus; без квартиля)
5. Akmalov A.E., Aksenov E.A., Kozlovskii K.I., Kotkovskii G.E., Luchinin V.V., Maximov E.M., Mityagin Yu.A., **Plekhanov A.A.**, Chistyakov A.A. Registration and spectral identification of THz images in reflected or transmitted light // Proc. SPIE 10800, Millimetre Wave and Terahertz Sensors and Technology XI. – SPIE, 2018. – Vol. 10800. – P. 109-115. (<https://doi.org/10.1117/12.2325385>) (Scopus; без квартиля)
6. Akmalov A.E., Kotkovskii G.E., Kozlovskii K.I., Maksimov E.M., **Plekhanov A.A.**, Chistyakov A.A. THz imaging with spectral resolution for identification of traces of explosives // Proc. SPIE 11542, Counterterrorism, Crime Fighting, Forensics, and Surveillance Technologies IV. – SPIE, 2020. – Vol. 11542. – P. 145-150. (<https://doi.org/10.1117/12.2573795>) (Scopus; без квартиля)
7. Akmalov A.E., Kotkovskii G.E., Kozlovskii K.I., Maksimov E.M., Martynov I.L., Osipov E.V., **Plekhanov A.A.**, Kuzishchin Yu.A., Chistyakov A.A. Detection of trace mm-and sub-mm particles of organic substances using THz imaging with spectral resolution // Proc. SPIE 11869, Counterterrorism, Crime Fighting, Forensics, and Surveillance Technologies V. – SPIE, 2021. – Vol. 11869. – P. 24-28. (<https://doi.org/10.1117/12.2599920>) (Scopus; без квартиля)
8. Akmalov A.E., Kotkovskii G.E., Kozlovskii K.I., Maksimov E.M., Martynov I.L., Osipov E.V., **Plekhanov A.A.**, Kuzishchin Yu.A., Chistyakov A.A. Detection of objects hidden behind various barriers using the THz radiovision method // Proc. SPIE 12275, Counterterrorism, Crime Fighting, Forensics, and Surveillance Technologies VI. – SPIE, 2022. – Vol. 12275. – P. 128-132. (<https://doi.org/10.1117/12.2636168>) (Scopus; без квартиля)

Патенты:

9. Патент на полезную модель RU 206 438 U1. Чистяков А.А., Котковский Г.Е., Мартынов И.Л., Козловский К.И., Кузищин Ю.А., Максимов Е.М., Акмалов А.Э., Осипов Е.В., Пашкевич А.А., **Плекханов А.А.** Устройство для формирования изображений в терагерцовой области спектра, 13.09.2021 Бюл. № 26.

ЦИТИРУЕМАЯ ЛИТЕРАТУРА

1. Pavlidis D. (ed.). Fundamentals of terahertz devices and applications. – Wiley, 2021. – P. 1-4.
2. Zhang X. C. et al. Introduction to THz wave photonics. – New York: Springer, 2010. – P. 246.
3. Zang X. et al. Metasurfaces for manipulating terahertz waves //Light: Advanced Manufacturing. – 2021. – Vol. 2. – №. 2. – P. 148-172.
4. He J. et al. Recent progress and applications of terahertz metamaterials //Journal of Physics D: Applied Physics. – 2021. – Vol. 55. – №. 12. – P. 123002.
5. Li S. et al. A tunable terahertz photonic crystal narrow-band filter //IEEE Photonics Technology Letters. – 2015. – Vol. 27. – №. 7. – P. 752-754.
6. Kaeek M. et al. Strong coupling in a self-coupled terahertz photonic crystal //ACS Photonics. – 2021. – Vol. 8. – №. 7. – P. 1881-1888.

7. Peiponen, Kai-Erik, Axel Zeitler, and Makoto Kuwata-Gonokami, eds. Terahertz spectroscopy and imaging. Springer, 2012. – P. 641.
8. Tao Y. H., Fitzgerald A. J., Wallace V. P. Non-contact, non-destructive testing in various industrial sectors with terahertz technology //Sensors. – 2020. – Vol. 20. – №. 3. – P. 712.
9. Shirkavand A. et al. A review on terahertz non-destructive applications for wound and diabetic foot screening //Optical and Quantum Electronics. – 2022. – Vol. 54. – №. 8. – P. 467.
10. Yan Z. et al. THz medical imaging: from in vitro to in vivo //Trends in Biotechnology. – 2022. – Vol. 40. – №. 7. – P. 816-830.
11. Gezimati M., Singh G. Terahertz imaging and sensing for healthcare: current status and future perspectives //IEEE Access. – 2023. – Vol. 11. – P. 18590-18619.
12. Tzydynzhapov G. et al. New real-time sub-terahertz security body scanner //Journal of Infrared, Millimeter, and Terahertz Waves. – 2020. – Vol. 41. – P. 632-641.
13. Kasjoo S. R. et al. A brief overview of detectors used for terahertz imaging systems //AIP conference proceedings. – AIP Publishing, 2020. – Vol. 2203. – №. 1. – P. 020020.
14. Trofimov V. A., Varentsova S. A. A possible way for the detection and identification of dangerous substances in ternary mixtures using THz pulsed spectroscopy //Sensors. – 2019. – Vol. 19. – №. 10. – P. 2365.
15. Leahy-Hoppa M. R. et al. Wideband terahertz spectroscopy of explosives //Chemical Physics Letters. – 2007. – Vol. 434. – №. 4-6. – P. 227-230.
16. Wilkinson J., Caulder S. M., Portieri A. Manufacturing process effects on the terahertz spectra of RDX //Terahertz for Military and Security Applications VI. – SPIE, 2008. – Vol. 6949. – P. 24-30.
17. Garet F. et al. Evidence of Mie scattering at terahertz frequencies in powder materials //Applied Physics Letters. – 2014. – Vol. 105. – №. 3. – P. 031106.
18. Du Y. et al. Absorption spectrum studies on the RDX crystals with different granularity in terahertz frequency range //Journal of Electronic Science and Technology. – 2014. – Vol. 12. – №. 2. – P. 150-155.
19. Kidavu A. V. S. et al. Scattering Analysis of Explosive Materials Mixed in Teflon Matrix in THz Regime //2019 Workshop on Recent Advances in Photonics (WRAP). – IEEE, 2019. – P. 1-3.
20. Zurk L. M. et al. Electromagnetic scattering calculations for terahertz sensing //Terahertz and Gigahertz Electronics and Photonics VI. – SPIE, 2007. – Vol. 6472. – P. 50-58.
21. Palka N., Szala M. Transmission and reflection terahertz spectroscopy of insensitive melt-cast high-explosive materials //Journal of Infrared, Millimeter, and Terahertz Waves. – 2016. – Vol. 37. – P. 977-992.
22. Trofimov V. A. et al. High effective THz-TDS method for the detection and identification of substances in real conditions //Micro-and Nanotechnology Sensors, Systems, and Applications VIII. – SPIE, 2016. – Vol. 9836. – P. 516-535.
23. Guerboukha H., Nallappan K., Skorobogatiy M. Toward real-time terahertz imaging //Advances in Optics and Photonics. – 2018. – Vol. 10. – №. 4. – P. 843-938.
24. Rogalski A. Progress in performance development of room temperature direct terahertz detectors //Journal of Infrared, Millimeter, and Terahertz Waves. – 2022. – Vol. 43. – №. 9. – P. 709-727.
25. Berry C. W., Jarrahi M. Broadband terahertz polarizing beam splitter on a polymer substrate //Journal of Infrared, Millimeter, and Terahertz Waves. – 2012. – Vol. 33. – P. 127-130.
26. Liu J. et al. Identification of high explosive RDX using terahertz imaging and spectral fingerprints //Journal of Physics: Conference Series. – IOP Publishing, 2016. – Vol. 680. – №. 1. – P. 012030.
27. Baker C. et al. Detection of concealed explosives at a distance using terahertz technology //Proceedings of the IEEE. – 2007. – Vol. 95. – №. 8. – P. 1559-1565.
28. Chen J. et al. Absorption coefficients of selected explosives and related compounds in the range of 0.1–2.8 THz //Optics express. – 2007. – Vol. 15. – №. 19. – P. 12060-12067.
29. Choi K. et al. Reflection terahertz time-domain spectroscopy of RDX and HMX explosives //Journal of Applied Physics. – 2014. – Vol. 115. – №. 2. – P. 023105.