

ОПРЕДЕЛЕНИЕ ЧУВСТВИТЕЛЬНОСТИ МЕТОДА НАРУШЕННОГО ПОЛНОГО ВНУТРЕННЕГО ОТРАЖЕНИЯ ПРИМЕНИТЕЛЬНО К ЗАДАЧЕ ОБНАРУЖЕНИЯ МАЛЫХ КОЛИЧЕСТВ ВЕЩЕСТВ НА ПРЕДМЕТАХ

© 2010 г. С. Ю. Страхов*,**, канд. физ.-мат. наук; Е. В. Перхина**

* Балтийский государственный технический университет “Военмех” им. Д.Ф. Устинова, Санкт-Петербург

** НПП “Лазерные системы”, Санкт-Петербург

E-mail: Strahov_s@mail.ru

Рассмотрена методика оценки чувствительности метода нарушенного полного внутреннего отражения применительно к задаче обнаружения малых количеств веществ на предметах. Проведена экспериментальная апробация методики на приборе для обнаружения следовых количеств взрывчатых веществ.

Ключевые слова: нарушенное полное внутреннее отражение, взрывчатые вещества.

Коды OCIS: 300.6340, 300.1030.

Поступила в редакцию 09.11.2009.

Введение

Детектирование малых количеств веществ на поверхностях различных предметов является актуальной задачей для ряда практических приложений, в частности – для обнаружения следов взрывчатых, наркотических и иных опасных веществ. Наряду с химическими, электрохимическими, биосенсорными и иными технологиями [1] для решения этой задачи могут применяться и оптические методы, в частности – основанные на абсорбционной спектроскопии нарушенного полного внутреннего отражения (НПВО) [2–5].

Важным моментом в этом случае являются разработка достоверной методики оценки чувствительности метода НПВО, ее экспериментальная апробация и оптимизация основных параметров устройств, работающих на ее основе. Объектом для моделирования является детектор, использующий спектроскопию НПВО для диагностики следов взрывчатых веществ (или других веществ) совместно с дифракционным спектральным анализатором.

Теоретические основы метода НПВО

Принципиальная схема, поясняющая метод НПВО, показана на рис. 1.

Нарушение полного внутреннего отражения заключается в том, что при оптическом контак-

те двух сред (I и II) в результате проникновения падающей волны E_0 из среды I в среду II происходит частичное поглощение света на длине волны λ , соответствующей спектру поглощения среды II. На практике в качестве среды II может быть предмет, проверяемый на наличие на нем какого-либо вещества, например палец человека, обложка документа или пробная салфетка со следами взрывчатых веществ (ВВ) [2, 3].

Глубина проникновения излучения в образец d_p представляется как глубина, на которой амплитуда волны ослабляется в e раз, и описывается выражением

$$d_p = \frac{\lambda}{2\pi n_1 \sqrt{\sin^2 \delta - (n_2/n_1)^2}}, \quad (1)$$

где δ – угол падения излучения на границу раздела сред I и II (должен превосходить критический угол); n_1 , n_2 – показатели преломления среды I и среды II соответственно.

Физические основы метода НПВО применительно к задаче обнаружения малого количества вещества на поверхности предмета детально описаны в [4].

Основными характеристиками спектра НПВО, как любого спектра поглощения, являются число полос поглощения в спектре, их положение, определяемое волновым числом (или длиной волны), ширина и форма полос, величина поглощения. Эти характеристики определяются

природой поглощающего вещества, а также зависят от агрегатного состояния вещества, температуры, давления и др.

В случае многократного НПВО от угла падения также зависит число отражений, что влияет на оптическую плотность – чем больше угол падения, тем меньше число отражений и оптическая плотность.

Другим фактором, влияющим на качество НПВО-спектров, является эффективность контакта среды I (призмы) со средой II (образцом). Поскольку интенсивность затухающей волны быстро падает по мере удаления от отражающей поверхности, расстояние между образцом и поверхностью призмы должно быть минимальным. Это, как уже указывалось, легко реализуется для жидкостей, если они смачивают поверхность НПВО-призмы. Для твердых образцов необходимо использовать давление, прижимающее образец к грани призмы.

Методика оценки чувствительности метода НПВО применительно к схеме с дифракционным спектральным анализатором

Рассмотрим схему использования метода НПВО в приборе с дифракционным спектральным анализатором (рис. 1).

Излучение от источника 4, отразившись от оптического элемента 3, параллельным пучком падает на призму НПВО 1, в контакте с которой находится предмет 2 со следами детектируемых

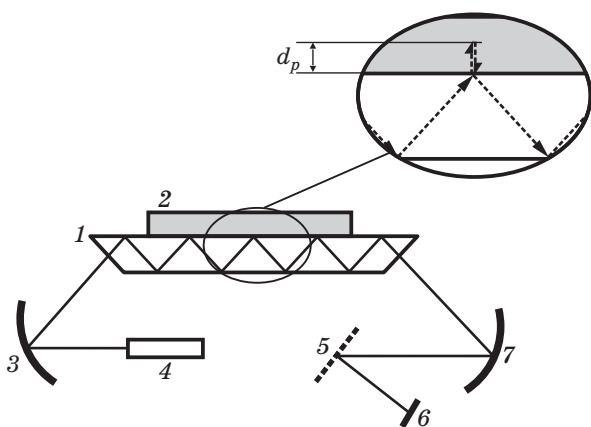


Рис. 1. Схема использования метода НПВО с дифракционным спектральным анализатором. 1 – призма НПВО, 2 – предмет со следами вещества, 3 и 7 – формирующая оптика, 4 – источник излучения, 5 – дифракционная решетка, 6 – приемник излучения, d_p – глубина проникновения излучения в образец.

веществ. После многократных отражений в призме 1 излучение попадает на оптический элемент 7, который направляет его на дифракционную решетку 5. Затем разложенное по спектральным компонентам излучение попадает на матричный многоэлементный приемник 6. При работе в диапазоне 6–12 мкм в качестве источника излучения (4) обычно используется глобар, а в качестве приемника (6) – пироэлектрическая матрица. Такая схема является компактной альтернативой фурье-спектрометру с приставкой НПВО [3, 4].

Методы абсорбционной (поглощательной) спектроскопии, в том числе и метод НПВО, используют явление поглощения света веществом согласно закону Бугера–Ламберта–Бера. Если мощность пучка, вошедшего в слой вещества толщиной L , равна I_0 , то, согласно закону Бугера–Ламберта–Бера, мощность пучка при выходе из слоя составит

$$I = I_0 e^{-k(\lambda)CL}. \quad (2)$$

Здесь $k(\lambda)$ – удельный показатель поглощения, величина $k(\lambda)$ – параметр, зависящий от природы вещества и длины волны λ проходящего излучения; C – концентрация веществ.

Применительно к прибору, проводящему спектроскопический анализ, под чувствительностью понимается та минимально детектируемая масса вещества, которую еще способен распознать прибор с учетом своих технических характеристик.

Среди факторов, оказывающих влияние на чувствительность прибора, можно выделить следующие:

- параметры источника излучения (вид источника, мощность, диапазон длин волн);
- параметры контактной призмы НПВО (коэффициент преломления, толщина, угол падения излучения источника на призму);
- эффективность контакта призмы с образцом,
- коэффициент преломления вещества,
- параметры приемника излучения (чувствительность, шумы).

Принципом методики определения чувствительности прибора является учет всех вышеперечисленных факторов применительно к теории метода НПВО и теории поглощения излучения в веществе [4].

Чувствительность прибора ограничивается максимальной мощностью излучения, попадающего на приемник после прохождения призмы НПВО с образцом, а также минимальным изме-

нением мощности, которое может зарегистрировать приемник с учетом шумов.

Для оценки мощности излучения, приходящего на один чувствительный элемент (пиксел) приемной матрицы, необходимо учитывать следующие факторы:

- спектральный диапазон излучения, детектируемого приемником;
- геометрическую эффективность системы, т. е. то количество излучения, которое попадает на приемник после прохождения формирующей оптики;
- поглощение излучения на оптической трассе прибора, не связанное с поглощением в детектируемом веществе.

Зависимость мощности излучения, приходящейся на один пиксел, от вышеперечисленных факторов можно выразить соотношением

$$P_p = \frac{P_{\text{глобара}} \Omega_{\text{геом}} \beta}{n}, \quad (3)$$

где P_p – мощность, приходящаяся на один пиксел приемника (без учета поглощения в исследуемом веществе); $P_{\text{глобара}}$ – мощность источника в выбранном спектральном диапазоне, $\Omega_{\text{геом}}$ – геометрическая эффективность, β – коэффициент пропускания излучения через призму НПВО, n – количество пикселей приемника.

В первом приближении спектральное распределение излучения любого источника, в том числе и глобара, можно принять за распределение излучения абсолютно черного тела (АЧТ) с коэффициентом излучения ε . Соотношение, определяющее интенсивность излучения АЧТ с единицы площади его поверхности в определенном спектральном интервале $[\lambda_1, \lambda_2]$, имеет вид [6]

$$I = \int_{\lambda_1}^{\lambda_2} \frac{2\pi h c^2}{\lambda^5 (\exp(hc/\lambda k_B T) - 1)} d\lambda, \quad (4)$$

где $h = 6,626 \times 10^{-34}$ Дж с – постоянная Планка, $c = 3 \times 10^8$ м/с – скорость света в вакууме, λ – длина волны, $k_B = 1,38 \times 10^{-23}$ Дж/К – константа Больцмана, T – температура излучающего тела.

Интегрирование выражения (4) возможно только численными методами (метод трапеций, прямоугольников и др.), однако для подобного расчета необходимо применение специальных программных пакетов типа MathCad или Matlab. Также для расчета интенсивности излучения $I_{\text{глобара}}$ возможно использование метода, представленного в [7].

Если учесть, что площадь излучающей поверхности глобара составляет S , то суммарная мощность излучения источника в выбранном диапазоне длин волн определяется как

$$P_{\text{глобара}} = I_{\text{глобара}} S. \quad (5)$$

Коэффициент геометрической эффективности в первом приближении может быть определен соотношением

$$\Omega \approx \frac{\left(\frac{S_a}{r^2}\right) S_T}{2\pi S_a} = \frac{S_T}{2\pi r^2}, \quad (6)$$

где S_a – площадь сечения светового пучка, сформированного оптическим элементом (ОЭ) 3 (см. рис. 1), r – расстояние от глобара до ОЭ 3, S_T – площадь приемного торца призмы НПВО (на который падает излучение, сформированное ОЭ 3).

Представленное соотношение предполагает, что поверхность глобара абсолютно диффузная и свет распространяется в полусферу 2π .

При подстановке коэффициента пропускания излучения через призму НПВО β необходимо учитывать количество проходов излучения через призму.

С учетом (5), (6) соотношение (3) может быть записано как

$$P_p = \frac{I_{\text{глобара}} S S_T \beta}{2\pi n r^2}. \quad (7)$$

Способность обнаруживать слабый сигнал (или его изменение) определяется порогом чувствительности приемника излучения P_{\min} или мощностью, эквивалентной шуму NEP (Noise Equivalent Power).

Согласно закону Бугера–Ламберта–Бера (2) можно записать

$$P' = (P_p - P_{\min}) = P_p e^{-k(\lambda)CL}, \quad (8)$$

где P' – мощность излучения, регистрируемая при поглощении части излучения в веществе; $L = d_p$ – глубина проникновения излучения в образец, C – концентрация исследуемого поглощаемого вещества, $k(\lambda)$ – удельный показатель поглощения.

При однократном отражении от границы раздела длина пути излучения в веществе $L = 2d_p$ (1). Для N отражений она будет в N раз больше, т. е. минимальная обнаруживаемая масса уменьшится в N раз. Число отражений можно увеличить, уменьшив толщину призмы НПВО. Однако необходимо помнить, что с увеличением проходов излучения через призму возрастает поглощение излучения кристаллом призмы.

Используя выражение (8), можно оценить минимальную массу ВВ (минимальную концентрацию), которую можно распознать на поверхности элемента НПВО, –

$$C = -\frac{\ln\left(\left[(P_p - P_{\min})/P_p\right]\right)}{2d_p k N}. \quad (9)$$

В реальном случае все зависит от того, какая часть вещества, оставшегося на предмете, приводимом в контакт с призмой, окажется в зоне оптического контакта. Кроме того, необходимо учитывать, что с изменением давления пальца на призму (разная сила прижатия) меняется распределение ВВ по поверхности пальца. При более сильном прижатии при том же количестве ВВ на пальце распределение вещества более равномерное и соответствующий спектр становится более выраженным.

Зная геометрические параметры призмы и коэффициент поглощения детектируемого вещества, из соотношения (9) можно определять чувствительность метода НПВО и проводить структурно-параметрическую оптимизацию прибора.

Апробация методики обнаружения ВВ на предметах на примере прибора “X-Tracer”

Предлагаемая методика была экспериментально апробирована на приборе “X-Tracer”. Этот прибор был разработан в НПП “Лазерные системы” (Санкт-Петербург) с участием специалистов кафедры лазерной техники Балтийского государственного технического университета “Военмех” им. Д.Ф. Устинова. Основное назначение прибора – обнаружение следов ВВ на различных поверхностях [8].

В таблице представлены основные характеристики прибора, необходимые для расчета чувствительности. В качестве примера рассмотрим обнаружение малого количества тринитротолуола (ТНТ) на пальце человека при контакте с призмой НПВО на частоте $\nu = 1353 \text{ см}^{-1}$.

По формулам (4)–(7) можно рассчитать

$$P_p = 3,3 \times 10^{-7} \text{ Вт}.$$

Полагаем, что при отношении сигнал/шум $(с/ш) = 1$

$$P_{\min} = NEP = 2,2 \times 10^{-9} \text{ Вт}.$$

Тогда из соотношения (1) при $n_1 = 2,42$ (ZnSe), $n_2 = 1,2$ (для смеси ТНТ, кожи, жира,

влаги и воздуха) и $\delta = 45^\circ$ можно определить $d_p = 9,65 \times 10^{-5} \text{ см} \approx 1 \text{ мкм}$.

Для призмы при заданных характеристиках полное количество проходов (отражений от границы раздела) составляет около 11. Однако, с учетом того, что площадь соприкосновения предмета (например пальца) и призмы составляет $S_k = 3\text{--}4 \text{ см}^2$, учитываемое число проходов излучения можно принять равным $N = 3$.

Примем значение удельного коэффициента поглощения для тротила $k(\lambda) = 10^7 \text{ см}^2/\text{моль}$ [9], что соответствует $4,4 \times 10^4 \text{ см}^2/\text{г}$.

Тогда из соотношения (9) можно определить минимально обнаруживаемую концентрацию (для $с/ш = 1$) $C_{\min} = 0,049 \text{ мг/см}^3$, а минимально детектируемая масса тротила будет составлять $m_{\min} = C_{\min} d_p S_k \approx 15 \text{ нг}$.

Значение минимально детектируемой массы увеличивается с ростом заданного отношения $с/ш$. Необходимый для надежного детектирования уровень $с/ш$, определяющий чувствительность прибора, зависит от возможностей используемого программного обеспечения.

На приборе “X-Tracer” были проведены эксперименты по обнаружению ТНТ, нанесенного на призму в виде раствора при известной его концентрации. При варьировании концентрации раствора и площади поверхности призмы, на которую был нанесен раствор, были получены данные, по которым можно судить о предельной чувствительности прибора к конкретному типу ВВ. Полученные экспериментальные данные со-

Основные технические характеристики прибора X-Tracer

Источник излучения – глобар	
Мощность излучения	20 Вт
Температура излучающей поверхности	$T_{\text{глоб}} = 1473 \text{ К}$
Площадь излучающей поверхности	$S_{\text{глоб}} = 8,67 \text{ см}^2$
Используемый спектральный диапазон	6–8 мкм
Призма НПВО	
Материал	Zn Se
Габаритные размеры	90×20×4 мм
Потери в призме (на 10 мм)	$\beta = 30 \%$
Угол падения на границу раздела	$\delta = 45^\circ$
Пирозлектрический приемник	
Количество чувствительных элементов (пикселей)	$m = 128$
P_{\min}	2,2 нВт

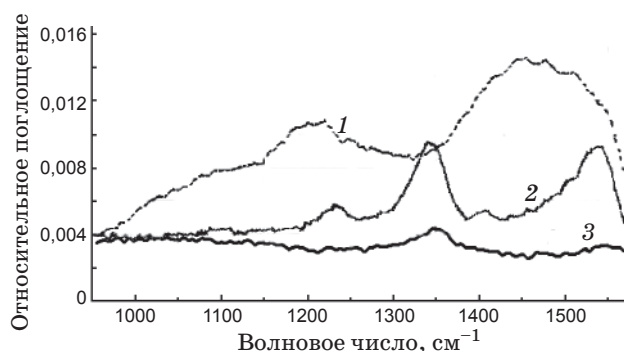


Рис. 2. Примеры спектров тротила, полученных методом НПВО. 1 – спектр чистого пальца, 2 – спектр раствора ТНТ с поверхностной концентрацией 1,4 мкг/см², 3 – спектр следов ТНТ на пальце.

впадали с данными численного моделирования по предложенной методике с точностью 40% в интервале $c/\mu = 3-30$.

В качестве примера на рис. 2 представлены спектры раствора ТНТ (поверхностная концентрация ТНТ на призме после испарения растворителя 1,4 мкг/см²), чистого пальца и следов ТНТ на пальце, образованных после единичного слабого касания пальцем тротила и последующего вытирания пальца салфеткой. Как видно из представленных кривых, такие следы тротила на пальце оставляют слабый спектральный след. Погрешности измерений таких следов определялись по вероятности пропуска (необнаружения) прибором следов ВВ на “испачканных” пальцах и по вероятности ложных срабатываний на “чистых” пальцах. В частности, проведенные эксперименты показали, что вероятность пропуска слабых следов тротила на пальце, полученных указанным выше способом, составляет 5%, вероятность ложных срабатываний – порядка 3%. Вероятности определялись путем многократных измерений чистых пальцев и пальцев со следами ВВ. Размер выборки составлял 200 измерений. Понятно, что указанные погрешности зависят от количества и типа ВВ, а также от особенностей их носителя (палец, предмет, пробная салфетка и т. д.).

Выводы

Предложена методика для расчета чувствительности метода НПВО в приборе с дифракци-

онным спектральным анализатором, на основе которой можно осуществлять расчеты и структурно-параметрическую оптимизацию такого рода приборов.

Методика апробирована на приборе для обнаружения следов ВВ на предметах. Путем изменения таких характеристик устройства, как параметры призмы, выбор приемника излучения, усовершенствование программного обеспечения возможно повышение чувствительности прибора, а следовательно, и точности его работы.

ЛИТЕРАТУРА

1. Committee on the Review of Existing and Potential Standoff Explosives Detection Techniques, National Research Council. Existing and Potential Standoff Explosive Detection Techniques // National Academies Press, Washington DC, 2004.
2. Bertseva E.V., Savin A.V. Explosives trace detection in the process of biometrical fingerprint identification for access control // Proc. SPIE. 2007. V. 6594. P. 65940F.
3. Boreysho A.S., Bertseva E.V., Korepanov V.S., Morosov A.V., Savin A.V., Strakhov S.Y. Detection of explosives traces on documents by attenuated total reflection method // Proc. SPIE. 2007. V. 6733. P. 6733 1W.
4. Харрик Н. Спектроскопия внутреннего отражения. М.: Мир, 1970. 325 с.
5. Страхов С.Ю. Перспективы развития оптических средств обнаружения следовых количеств взрывчатых веществ // Спец. техника. 2009. № 1. С. 2–9.
6. Планк М. Теория теплового излучения. Пер. с нем. Л.–М., УРСС, 2006. 208 с.
7. Ишанин Г.Г., Мальцева Н.К., Мусяков В.Л. Источники и приемники излучения. Пособие по решению задач. СПб.: СПбГУ ИТМО, 2006. 85 с.
8. Бореишо А.А., Страхов С.Ю., Романов А.Ю., Морозов А.В., Коновалов К.А. Прибор для обнаружения следов взрывчатых веществ на поверхностях предметов с использованием инфракрасной спектроскопии нарушенного полного внутреннего отражения // Труды IV Международной научно-практической конференции “Технические средства противодействия террористическим и криминальным взрывам”. 2008. Т. 1.
9. Janni J., Gilbert B.D., Field R.W., Steinfeld J.I. Infrared absorption of explosive molecule vapors // Spect. Acta A. 1997. V. 53. P. 1375–1381.