ИНСТИТУТ ПРОБЛЕМ ЛАЗЕРНЫХ И ИНФОРМАЦИОННЫХ ТЕХНОЛОГИЙ РОССИЙСКОЙ АКАДЕМИИ НАУК

Сравнение диагностических возможностей различных лазеров в спектроскопическом газоанализе многокомпонентных смесей

К 30-летию ИПЛИТ РАН
"Вступление" к материалу

Сравнение диагностических возможностей различных лазеров в спектроскопическом газоанализе многокомпонентных смесей

С.В. Иванов

Загрязнение воздуха многочисленными веществами вызывает в современном мире все возрастающее беспокойство. Сейчас практически все локальные источники загрязнений (промышленность, транспорт, коммунальное хозяйство) дают вклад в явления регионального и глобального масштаба. Достаточно упомянуть вредное действие загрязнений на человека (токсическое, канцерогенное, мутагенное, тератогенное, аллергенное), токсическое действие на микрофлору почвы и растения, разрушающее действие на здания, памятники архитектуры и искусства, снижение прозрачности атмосферы и видимости, потока солнечной радиации, освещенности жилищ, увеличение влажности воздуха, количества туманов. Антропогенные загрязнения являются одной из причин разрушения атмосферного озона, образования фотохимического смога, выпадения кислотных дождей, вырождения лесов, изменения климата. В последние десятилетия на загрязнение атмосферы все более влияет авиационный транспорт (разрушение озонового слоя, образование перистых облаков, формирование специфического климата в зоне крупных аэропортов).

Для успешного применения экономических и других мер, направленных на уменьшение вредных выбросов, необходимо сначала научиться точно контролировать уровень загрязнений и надежно идентифицировать их источник. С этой целью следует непрерывно определять содержание в воздухе нескольких ключевых загрязняющих веществ, т.е. осуществлять их пространственно-временной количественный мониторинг. Отметим, что в реальности часто приходится иметь дело с невозможностью прямого отбора проб воздуха с последующим анализом в лаборатории. В этой связи становятся особенно актуальными приборы дистанционного зондирования. В настоящее время все возрастающий интерес вызывают методы количественного газоанализа многокомпонентных смесей с помощью лазеров. Напомним, что большинство молекулярных газовых лазеров обладают развитым дискретным спектром очень узких линий генерации при достаточной интенсивности и стабильности излучения, что является безусловным их преимуществом в дистанционном спектроскопическом мониторинге. Возникает естественный вопрос – какой из лазеров является наилучшим и по каким параметрам ? Ведь молекул, на которых осуществлена лазерная генерация, насчитываются сейчас уже десятки ! Чтобы ответить на этот вопрос, нужно определиться с условиями такого "соревнования" лазеров. Очевидными критериями являются: чувствительность и селективность детектирования конкретного вещества, ширина спектрального диапазона генерации, общее число лазерных линий, число аналитических линий, типичный коэффициент поглощения в атмосфере и др.

Исследования, проведенные по данной теме в ИПЛИТ РАН, по объему и детальности не имеют аналогов ни в России, ни за рубежом. В то же время следует отметить, что критерии чувствительности и селективности детектирования были изначально разработаны за рубежом. Также за рубежом (Швейцария, Цюрих, ETH, группа М. Зигриста) были проведены и первые количественные оценки этих параметров для отдельных линий генерации CO_2 лазера применительно к оптико-акустическому детектированию ряда

веществ. Данная тематика разрабатывалась в ОПЛТ ИПЛИТ РАН (С.В. Иванов) совместно с сотрудниками Центрального аэрогидродинамического института им. проф. Н.Е. Жуковского (О.Г. Бузыкин) и Физического института им. П.Н. Лебедева РАН (А.А.Ионин, А.А. Котков, А.Ю. Козлов, Л.В. Селезнев, Д.В. Синицын).

Методы количественного спектроскопического детектирования многокомпонентных загрязняющих веществ вызывают все возрастающий интерес в мире.

Основные достижения сотрудников Института в этой области:

- **Разработаны алгоритмы и компьютерная программа *ANLINES*, предназначенные для оптимизации выбора аналитических лазерных частот, пригодных для спектроскопического газоанализа смесей.**
- **Определены аналитические частоты для обнаружения примесей H_2O, CO_2, N_2O, CO, NO, SO_2, NO_2, NH_3, HNO_3, OH, H_2CO, HCN, H_2O_2, H_2S, HO_2, C_2H_4, C_2H_2, NO^+ с помощью спектроскопической базы данных высокого разрешения HITRAN и C_6H_6, C_7H_8, *p*- C_8H_{10}, C_3H_4O с помощью атласа спектров низкого разрешения.**
- **Для ряда молекулярных ИК лазеров вычислены и сопоставлены количественные параметры, характеризующие чувствительность и селективность детектирования конкретного газа: минимально обнаружимая концентрация, парциальная чувствительность, парциальная селективность, перекрестная чувствительность.**
- **проведено сравнение детектирующих возможностей CO_2 и CO лазеров при ИК диагностики газов, содержащихся в выхлопе самолетного двигателя.**
- **Продемонстрировано, что широкодиапазонный CO лазер (одновременная генерация на фундаментальных (ΔV=1, λ=4,9-7,5 мкм) и обертонных (ΔV=2, λ=2,5-4,2 мкм) переходах) имеет уникальные возможности в количественном спектроскопическом газоанализе многокомпонентных смесей.**

Работы по теме опубликованы в ведущих отечественных и зарубежных научных изданиях, а также докладывались на международных конференциях.

Антропогенное загрязнение атмосферы многочисленными газообразными и аэрозольными веществами вызывает в обществе все возрастающее беспокойство. Сейчас практически все локальные

Для решения указанной проблемы в качестве необходимой меры требуется мониторинг многочисленных загрязнений воздуха. В этой связи имеется спрос на все более чувствительные и селективные

источники загрязнений (промышленность, транспорт, коммунальное хозяйство) дают вклад в явления регионального и глобального масштаба.

Действие вредных соединений на человека и животных:

◆ токсическое
◆ канцерогенное (вызывают злокачественные новообразования)
◆ мутагенное (влияют на наследственность)
◆ тератогенное (вызывают уродства у рождающихся детей)
◆ аллергенное (позднее возникают общие заболевания либо болезни кожи)

Влияние загрязнений на окружающую среду:

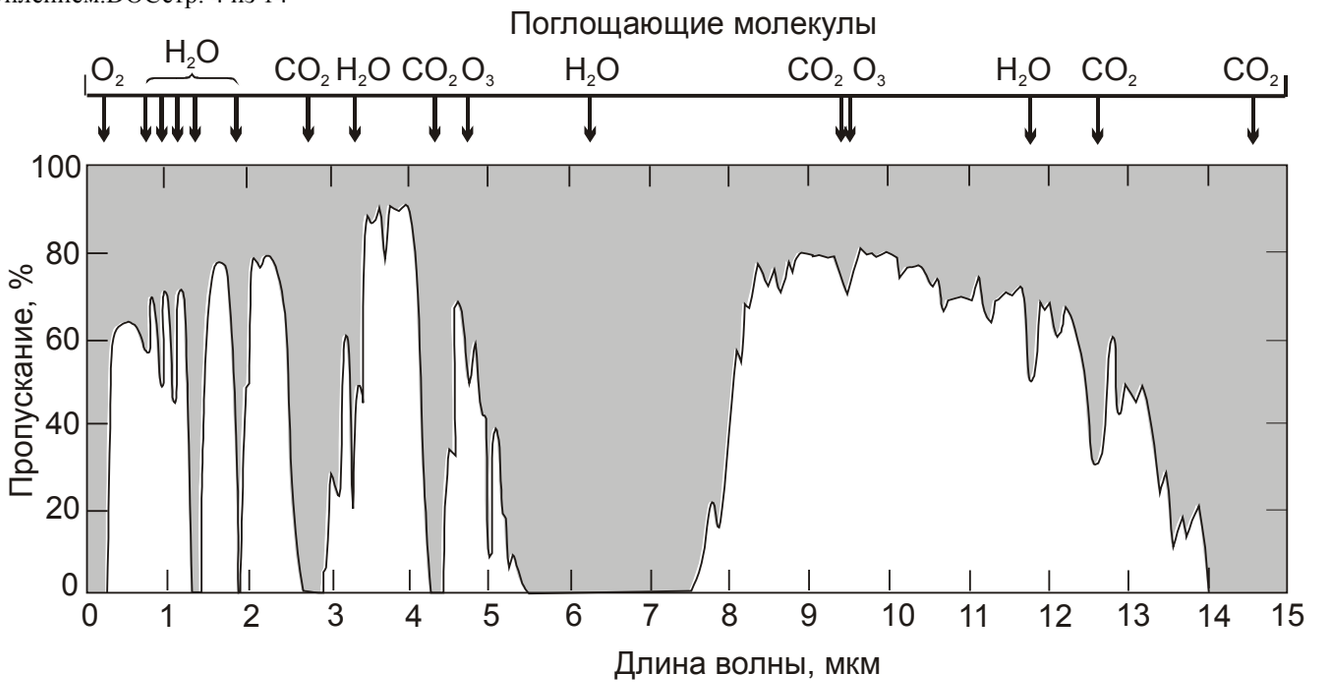
◆ токсическое действие на микрофлору почвы и растения (особо вредны стабильные соединения)
◆ вредное действие на здания, памятники архитектуры и искусства
◆ снижение прозрачности атмосферы и видимости, потока солнечной радиации, освещенности жилищ
◆ увеличение влажности воздуха, количества туманов
◆ влияние на фотохимические реакции в воздухе, образование фотооксидантов
◆ разрушительное влияние авиатранспорта на озоновый слой и образование перистых облаков

приборы, позволяющие проводить дистанционное зондирование. По этой причине в настоящее время возрастающий интерес вызывают методы **количественного** газоанализа многокомпонентных смесей с применением лазеров. Наиболее широко используемые из них базируются **на процессах поглощения,** обладающих наиболее высокими сечениями среди прочих процессов.

Аналитические возможности конкретного лазерного устройства определяются следующими факторами:

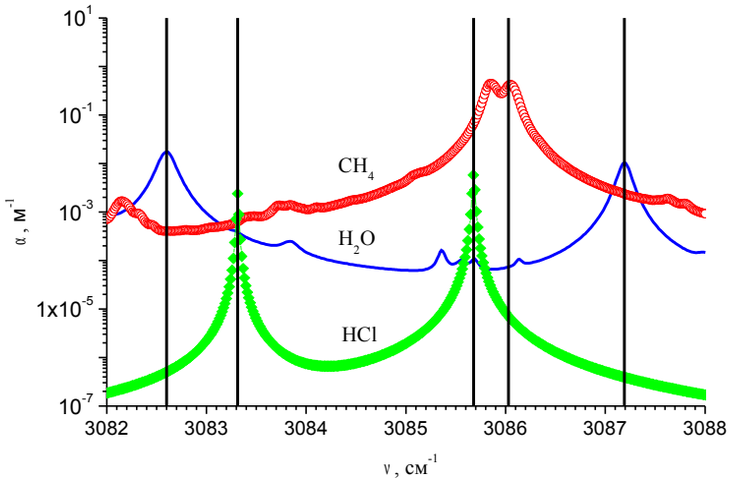
- числом линий излучения, диапазоном перестройки частоты и типом перестройки (непрерывная/дискретная)
- спектральной шириной лазерных линий,
- интенсивностью и стабильности излучения,
- количеством потенциально обнаружимых веществ (числом резонансов лазерных частот с линиями поглощения смеси)
- степенью перекрытия спектральных линий компонент смеси в районе аналитической лазерной линии,
- ослаблением зондирующего излучения в атмосфере

Большинство молекулярных газовых лазеров обладают развитым дискретным спектром очень узких линий генерации при достаточной интенсивности и стабильности излучения, что является их безусловным преимуществом при дистанционном спектроскопическом детектировании.



Прозрачность атмосферы в диапазоне 0.25-15 мкм, измеренная с низким разрешением (Р. Межерис). Горизонтальная трасса длиной L=1828 м на уровне моря. Основные окна прозрачности соответствуют 8-14 мкм и 3-5 мкм.

◆ Выбор лазерных частот (аналитических частот), используемых при многокомпонентном детектировании, решающим образом влияет на точность извлекаемых концентраций.



Спектр поглощения газов H_2O, CH_4, HCl в воздухе (1атм, 300 К). Указаны возможные аналитические линии. L=10 м.

Важная проблема в спектроскопическом газоанализе – взаимное наложение линий поглощения детектируемых газов и мешающих веществ.

◆ Наложение линий различных компонент резко снижает точность определения их концентраций, особенно если малые концентрации измеряются на фоне больших.

<u>Стратегия выбора аналитических линий для лазерного газоанализа многокомпонетных смесей</u>:

◆ попадание в окна (микроокна) прозрачности атмосферы

◆ резонанс лазерных линий с линиями (полосами) поглощения детектируемых компонент

◆ минимизация взаимных перекрытий линий разных веществ

◆ Степень перекрытия линий разных газов можно количественно описать и на основе этого алгоритмизировать стратегию выбора частот зондирования.

Чувствительность и селективность в спектроскопическом газоанализе

Пусть исследуемая смесь состоит из n поглощающих излучение компонент, а зондирование проводится на m различных лазерных линиях. Для монохроматических линий (частот) излучения по закону Бугера-Ламберта-Бера вводятся коэффициенты поглощения, которые связаны с концентрациями компонент смеси системой линейных алгебраических уравнений $\hat{\alpha} = \hat{\sigma} \cdot \hat{c}$. Здесь $\hat{\sigma}$ - матрица сечений поглощения размерности $m \times n$, $\hat{\alpha}$ - вектор – столбец измеренных коэффициентов поглощения, $\hat{c}$ - вектор – столбец неизвестных концентраций газов, которые могут быть найдены при $m \geq n$, например, с помощью метода наименьших квадратов. Чувствительность обнаружения вещества *j* смеси связана с величиной сечения поглощения и обычно определяется **минимально обнаружимой концентрацией** c_j^{min}

$$c_j^{min} = (1/N) \cdot \min_i(\alpha^{min} / \sigma_{ij}),$$

где α^{min} - наименьший регистрируемый коэффициент поглощения, определяемый методом измерения и используемой аппаратурой, σ_{ij} - сечение поглощения вещества *j* на лазерном переходе *i, N* – полная концентрация молекул смеси. Величины c_j^{min} являются точной мерой минимально обнаружимой концентрации только в условиях, свободных от интерференции компонент, т. е., когда спектры других веществ смеси не перекрываются со спектром газа *j* на лазерной частоте *i* (в идеале это соответствует случаю, когда газ *j* является единственным поглотителем в смеси). Также используются величины парциальных чувствительностей S_j

$$S_j = \left(\sum_{i=1}^{m} \sigma_{ij}^2 \right)^{1/2}, \; i = 1, 2, \ldots, m; \; j = 1, 2, \ldots, n$$

Парциальная чувствительность S_j является мерой суммарного поглощения вещества *j* смеси всеми лазерными линиями.

Если спектры компонент перекрываются, вводятся параметры **парциальной селективности**:

$$\Gamma_j = \left\{ S_j^2 \left[\left(\hat{\sigma}^t \hat{\sigma} \right)^{-1} \right]_{jj} \right\}^{-1/2}$$

Знаки "*t*" и "*-1*" означают соответственно транспонированную и обратную матрицу. Парциальная селективность $0 \leq \Gamma_j \leq 1$ есть нормированная мера влияния остальных $n-1$ компонент смеси на детектирование вещества *j* . Случай $\Gamma_j = 1$ означает полную селективность (присутствие других компонент не влияет на ошибку вычисленной концентрации c_j). Если же $\Gamma_j = 0$, то количественное определение c_j невозможно из-за сингулярности матрицы $\hat{\sigma}^t \hat{\sigma}$. При определении концентрации c_j вещества *j* на соответствующей лазерной частоте возможное влияние вещества *k* учитывается с помощью взаимной, или **перекрестной чувствительности**

$$Q_{jk} = \sigma_{jk} / \sigma_{jj}.$$

Данное соотношение подразумевает существование подходящей лазерной частоты для определения каждого вещества *j* смеси (т.е. с достаточно большим значением σ_{jj}). Неопределенность Δc_j измеряемой концентрации c_j увеличивается из-за ошибки Δc_k определения концентрации вещества *k* следующим образом:

$$\Delta c_j \geq Q_{jk} \Delta c_k.$$

Ясно, что для повышения точности газоанализа надо выбирать такие лазерные частоты, на которых значения перекрестных чувствительностей Q_{jk} $(j \neq k)$ малы.

Комбинированной оценкой одновременно чувствительности и селективности является величина $S_t = \left[det\left(\hat{\sigma}^t \hat{\sigma} \right) \right]^{1/2}$.

Компьютерная программа ANLINES

Разработанная компьютерная программа *ANLINES* (analytical lines - аналитические линии) предназначена для оптимизации выбора аналитических лазерных частот, пригодных для спектроскопического газоанализа различных смесей. Ее основная особенность - расчет параметров, количественно характеризующих чувствительность и селективность детектирования газов заданным набором лазерных линий.

Основные характеристики *ANLINES*:

- программа позволяет работать с монохроматическими частотами излучения различных спектральных диапазонов: лазера на CO_2 в области 9-11 мкм (включая основную изотопную конфигурацию молекулы и три ее изотопные модификации), $^{12}C^{16}O$ лазера в области основных (ΔV=1, λ=4,9-7,5 мкм, 726 переходов от 2364.93 до 4034.06 см$^{-1}$) и обертонных (ΔV=2, λ=2,5-4,2 мкм, 726 переходов от 2364.93 до 4034.06 см$^{-1}$) переходов, $H^{19}F$ (58 переходов от 2749.49 до 3708.78 см$^{-1}$) и $D^{19}F$ (63 переходов от 2392.43 до 3154.18 см$^{-1}$) лазеров в области основных переходов, а также лазеров на $^{14}N_2{}^{16}O$ (128 переходов от 905.75 до 966.6 см$^{-1}$) и $^{14}NH_3$ (165 переходов от 24.7 до 1594.33 см$^{-1}$);

- анализируемая смесь может быть сформирована из любого количества газов, имеющих спектры высокого разрешения, и веществ, имеющих спектры низкого разрешения. Настоящая версия программы работает со спектрами высокого разрешения газов, содержащихся в базе данных HITRAN: H_2O, CO_2, O_3, N_2O, CO, CH_4, O_2, NO, SO_2, NO_2, NH_3, HNO_3, OH, HF, HCl, HBr, HI, ClO, OCS, H_2CO, HOCl, N_2, HCN, CH_3Cl, H_2O_2, C_2H_2, C_2H_6, PH_3, COF_2, SF_6, H_2S, HCOOH, HO_2, O, $ClONO_2$, NO^+, HOBr, C_2H_4, а также со спектрами низкого разрешения бензола C_6H_6, толуола C_7H_8, *p*- ксилола C_8H_{10} и акролеина C_3H_4O;

- сечения и коэффициенты линейного поглощения монохроматического излучения могут рассчитываться для произвольного давления и температуры смеси (P< 1-2 атм, T< 600 K). Дополнительно вычисляются коэффициенты поглощения на заданной высоте 0-120 км в земной атмосфере для шести стандартных сезонно-широтных моделей. В расчетах учитывается континуальное поглощение для H_2O, N_2 и O_2 по модели CKD;

- выбор аналитических лазерных линий проводится с использованием критерия превышения сечения поглощения данного газа над заданной пороговой величиной и/или "резонансности" поглощения (для спектров с высоким разрешением). В последнем случае расстройка лазерной частоты с центром молекулярной линии не должна превышать полуширины линии;

- для набора отобранных аналитических лазерных линий рассчитываются количественные параметры, характеризующие чувствительность и селективность детектирования конкретного газа: минимально обнаружимая концентрация c_j^{min}, парциальная чувствительность S_j и парциальная селективность Γ_j, перекрестная чувствительность Q_{jk}.

- программа *ANLINES* позволяет компоновать оптимальный набор лазерных аналитических линий путем процедуры максимизации комбинированного параметра S_t, обеспечивая компромисс между чувствительностью и селективностью при определении концентраций газов.

Сравнительный анализ возможностей различных лазеров при спектроскопическом детектировании смесей

Расчеты выполнялись с помощью программа *ANLINES*. Целью моделирования было сопоставление количественных параметров чувствительности, селективности и поглощения в атмосфере многочастотного излучения различных ИК молекулярных лазеров при их использовании в спектроскопическом газоанализе смесей.

Детектирование загрязняющих веществ в атмосфере с помощью обертонных CO лазеров и HF/DF лазеров

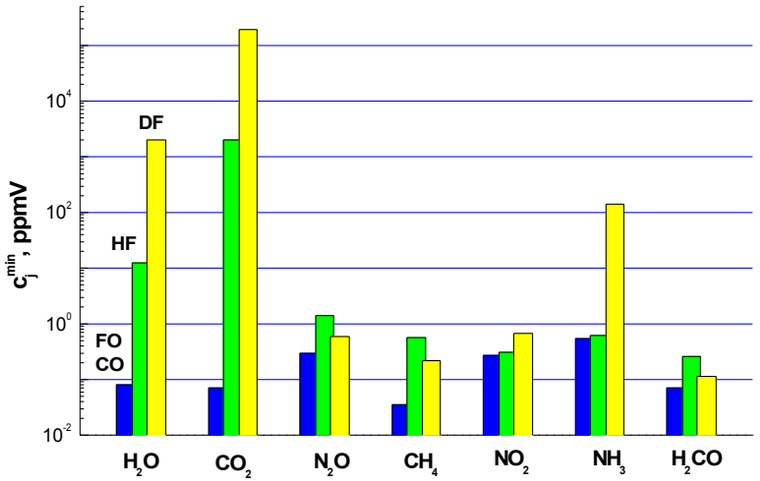
Лазер на первом колебательном обертоне молекулы CO (обертонный CO лазер – FOCO (first overtone CO)) является эффективным источником когерентного ИК излучения в широкой спектральной области λ=2,5-4,2 мкм. Область излучения обертонного CO лазера перекрывается 1) с окном прозрачности атмосферы 3-5 мкм и 2) полосами поглощения многочисленных естественных и загрязняющих компонент атмосферы. Это делает обертонные CO лазеры перспективными устройствами в спектроскопическом газоанализе. Они способны конкурировать с химическими лазерам на молекулах HF и DF и перестраиваемыми генераторам разностной частоты, работающими в том же спектральном диапазоне.

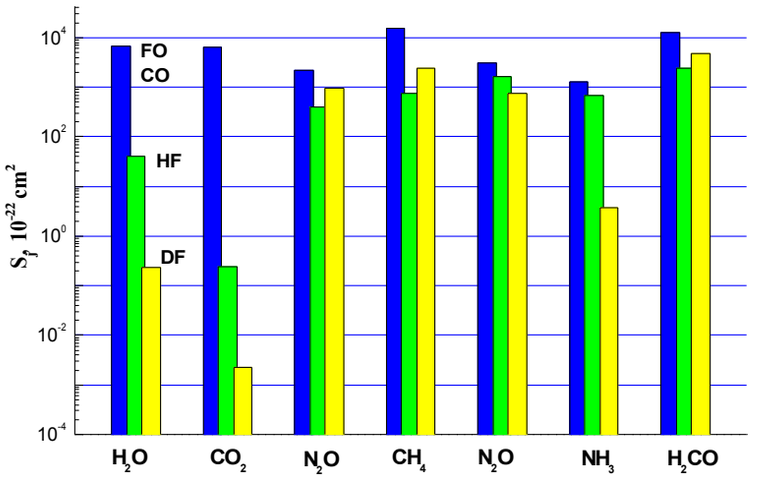
Расчеты выполнялись для смеси 7 газов H_2O, CO_2, N_2O, CH_4, NO_2, NH_3, H_2CO, обладающих спектрами высокого разрешения. На рисунках, приведенных ниже, показаны результаты вычислений параметров чувствительности и селективности детектирования указанных газов с помощью FOCO, HF и DF лазеров. Аналитические линии лазеров выбирались с использованием следующего критерия: 1) почти точный резонанс лазерной частоты с молекулярной линией поглощения (в пределах полуширины линии поглощения); 2) вклад выбранной линии в сечение поглощения детектируемого газа больше 10^{-21} см^2. С использованием данного критерия было отобрано 214 линий обертонного CO лазера, 16 линий HF и 16 линий DF лазеров. Эти три набора аналитических частот затем исследовались на чувствительность и селективность при диагностике указанной смеси. Минимально обнаружимые концентрации вычислялись при умеренной величине наименьшего регистрируемого коэффициента поглощения $\alpha^{min} = 10^{-6}$ см$^{-1}$.

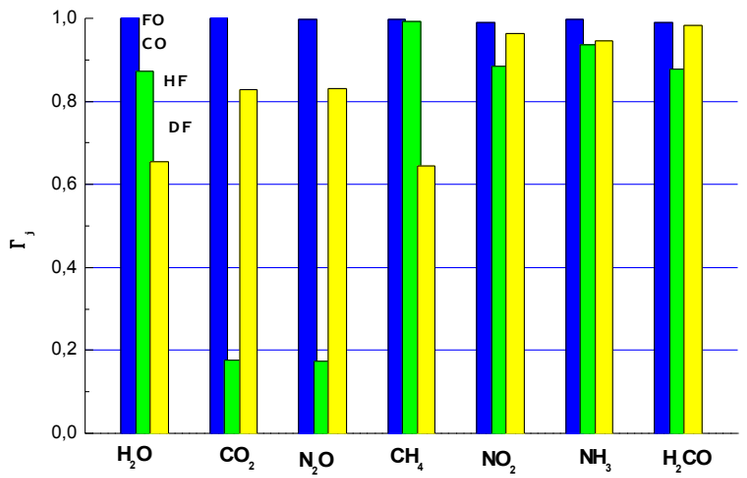
Из рисунков видно, что параметры чувствительности являются довольно хорошими для обертонного CO лазера: значения c_j^{min} для всех газов смеси оказываются меньше 1 ppmV. В случае HF/DF лазеров величины c_j^{min} заметно больше (особенно при обнаружении H_2O, CO_2, CH_4 и NH_3). Частоты, на которых достигнуты c_j^{min}, имеют наибольшие сечения поглощения среди рассматриваемого набора аналитических линий. Эти частоты наиболее "чувствительны" к обнаружению данной вещества. Также видно, что парциальные чувствительности S_j коррелируют с c_j^{min}.

Все парциальные селективности Γ_j близки к единице только для аналитических линий обертонного CO лазера. HF лазер непригоден для обнаружения CO_2 и N_2O. Лазер на DF недостаточно хорош для диагностики H_2O и CH_4. Обычно считается, что селективность детектирования данного вещества j неудовлетворительна, если $\Gamma_j \leq 0{,}3$. В этом случае газоанализ становится невозможным, т.к. неопределенности искомых концентраций больше, чем их значения. Параметр S_t, являющийся комбинированной мерой чувствительности и селективности детектирования концентраций компонент смеси с использованием конкретного набора лазерных частот, принимал в рассматриваемых случаях следующие значения: для FOCO - $7\cdot10^{-129}$ см^{2n}, для HF - 10^{-139} см^{2n}, для DF - $8\cdot10^{-145}$ см^{2n} (в данном случае n=7 – число компонент смеси). Это подтверждает, что полученный набор аналитических линий обертонного CO лазера является наилучшим, а набор линий DF лазера - наихудшим.

Для наиболее "чувствительных" линий обертонного CO лазера все $Q_{j \neq k} < 1$. Это означает отсутствие заметных взаимных влияний компонент смеси при определении их концентраций. С другой стороны, лазерные линии HF, являющиеся наиболее "чувствительными" при обнаружении H_2O, N_2O и NH_3 , будут испытывать сильное влияние от возможного присутствия CO_2 в смеси. Лазерные частоты DF, которые являются наиболее чувствительными в диагностике N_2O, CH_4 и NH_3 , также будут испытывать сильное влияние CO_2, а также H_2O (в случае детектирования CH_4).

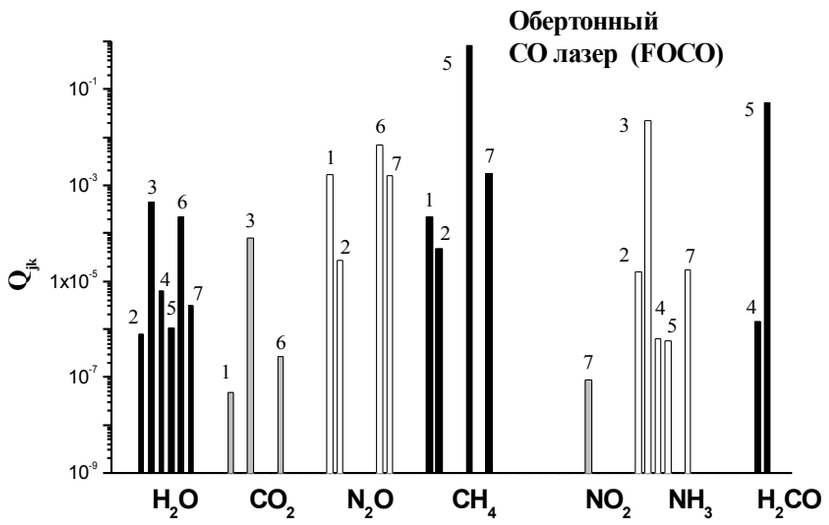


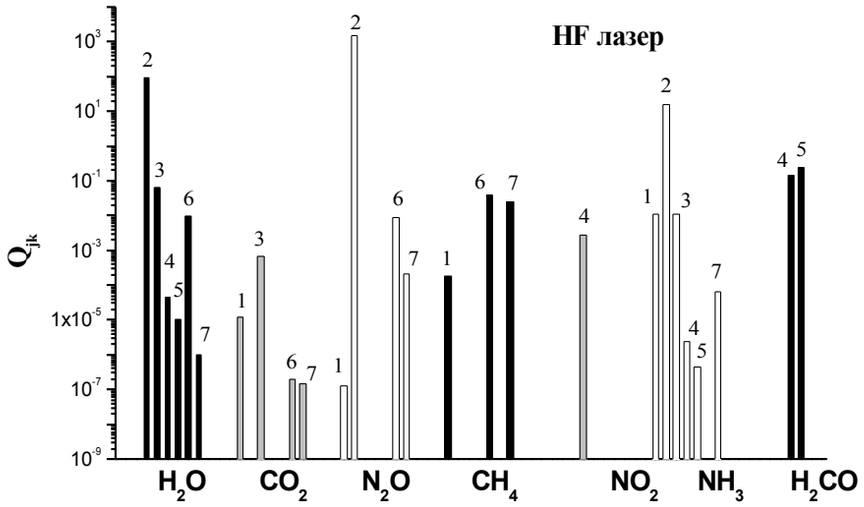


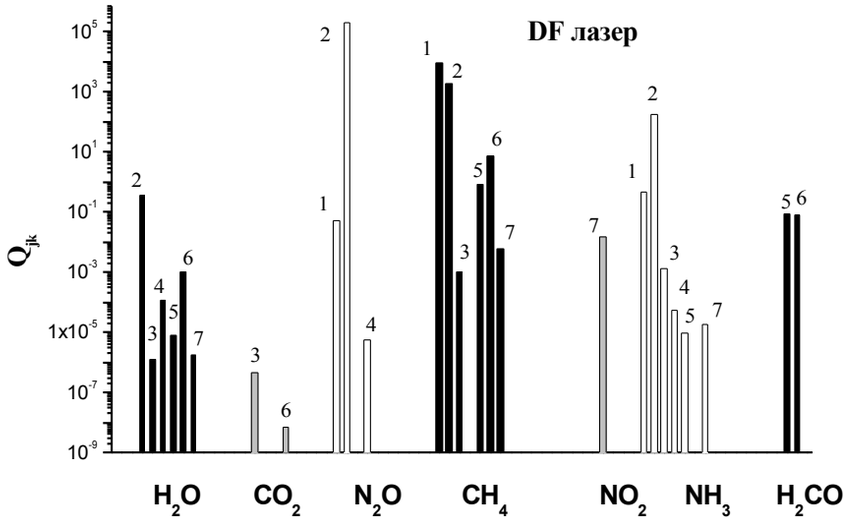


Сравнительный анализ возможностей FOCO, HF и DF лазеров при газоанализе семикомпонентной смеси H_2O, CO_2, N_2O, CH_4, NO_2, NH_3, H_2CO.

Минимально обнаружимые концентрации газов c_j^{min} (при $\alpha^{min} = 10^{-6}$ см$^{-1}$), парциальные чувствительности S_j и парциальные селективности Γ_j. P = 1 атм, T=300 K.







Перекрестные чувствительности $Q_{j\neq k}$ для наиболее "чувствительных" (т.е. на которых достигаются наименьшие значения c_j^{min}) частот FOCO, HF и DF лазеров при обнаружении газов, указанных по оси абсцисс.

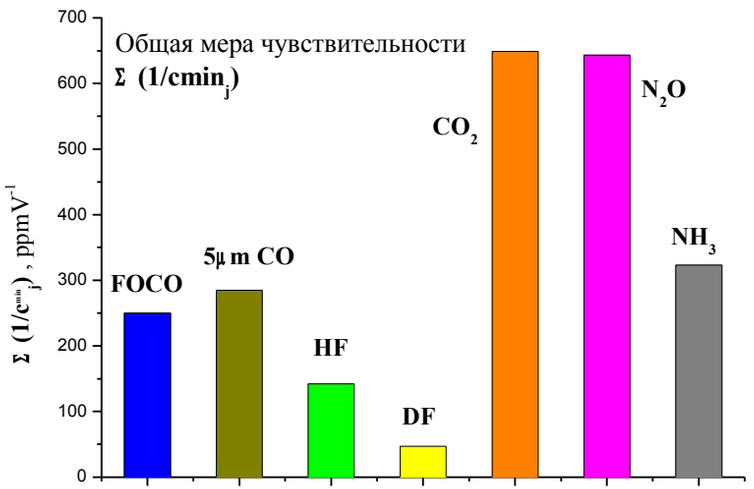
P=1 атм, T = 300 K.

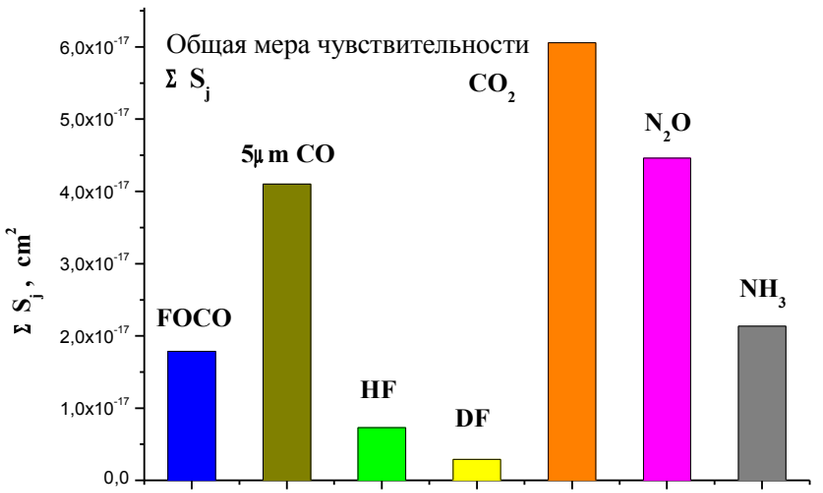
Мешающие газы помечены номерами:

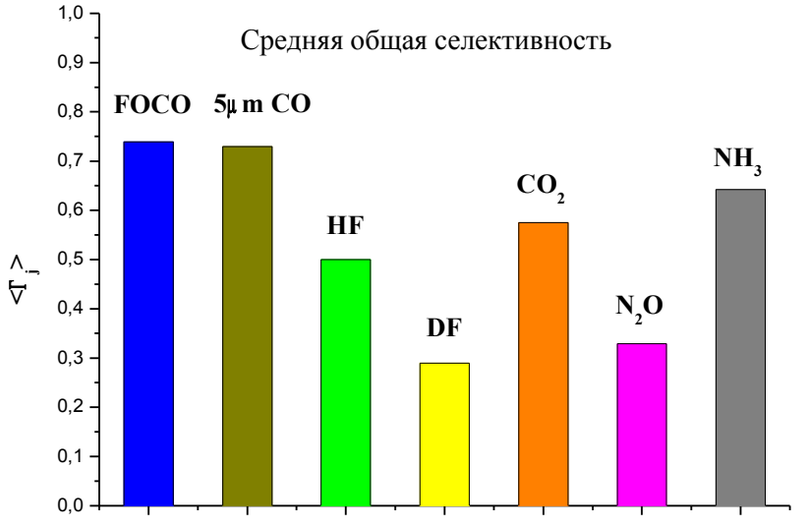
1 - H_2O ,
2 - CO_2 ,
3 - N_2O,
4 - CH_4 ,
5 - NO_2 ,
6 - NH_3 ,
7 - H_2CO

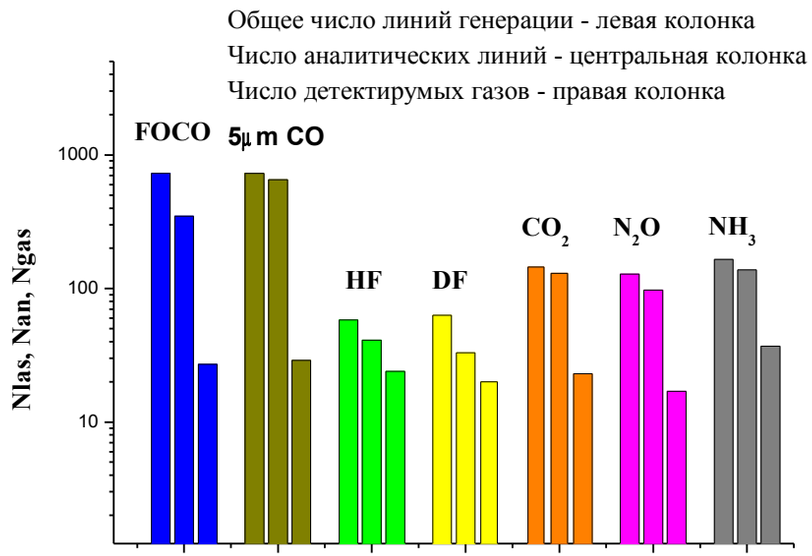
Глобальный сравнительный анализ диагностических возможностей лазеров на CO, HF, DF, CO_2, N_2O и NH_3

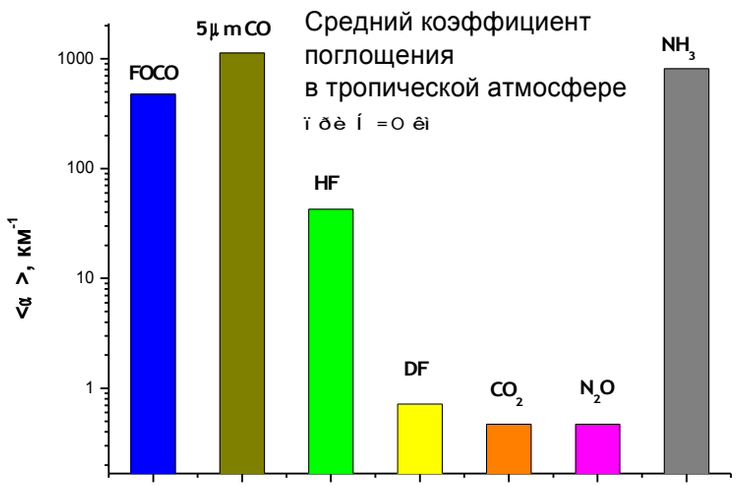
Ниже приводятся итоговые результаты моделирования количественных параметров чувствительности, селективности и поглощения в атмосфере излучения лазеров на CO, HF, DF, CO_2, N_2O и NH_3 при газоанализе смесей с большим числом компонент (38 газов).











Итоговые результаты сравнения диагностических возможностей лазеров на молекулах CO, HF, DF, CO_2, N_2O и NH_3 при газоанализе многокомпонентных смесей. $\alpha^{min} = 10^{-6}$ см$^{-1}$.

Расчеты выполнены для смеси из 38 газов (35 газов HITRAN + 3 летучих органических соединения (ЛОС)). P=1 атм, T=300 K.

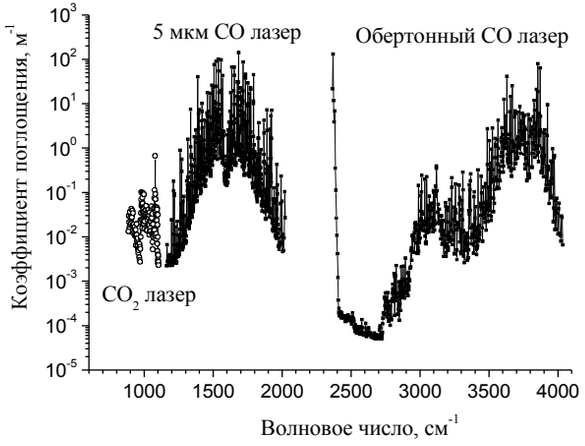
Газы HITRAN:
H_2O, CO_2, O_3, N_2O, CO, CH_4, O_2, NO, SO_2, NO_2, NH_3, HNO_3, OH, HF, HCl, HBr, HI, ClO, OCS, H_2CO, HOCl, N_2, HCN, CH_3Cl, H_2O_2, C_2H_2, C_2H_6, PH_3, COF_2, SF_6, H_2S, HCOOH, HO_2, O, $ClONO_2$
Три ЛОС, имеющие спектры низкого разрешения:
бензол C_6H_6, толуол C_7H_8 , *p*-ксилол C_8H_{10}.

Детектирование выхлопных газов двигателя с помощью CO_2 лазеров и широкодиапазонных CO лазеров

Ниже отдельно оцениваются и сравниваются детектирующие возможности хорошо известных CO_2 лазеров и новых перспективных широкодиапазонных (ШД) CO лазеров при ИК абсорбционной диагностике различных газов, содержащихся в выхлопе самолетного двигателя. В ШД CO лазерах происходит одновременная генерация на фундаментальных (ΔV=1, λ=4,9-7,5 мкм) и на обертонных (ΔV=2, λ=2,5-4,2 мкм) колебательно-вращательных переходах, что значительно расширяет спектральный диапазон и детектирующие возможности.

Определены аналитические частоты для обнаружения H_2O, CO_2, N_2O, CO, NO, SO_2, NO_2, NH_3, HNO_3, OH, H_2CO, HCN, H_2O_2, H_2S, HO_2, C_2H_4, C_2H_2, NO^+, C_6H_6, C_7H_8, p-C_8H_{10}, C_3H_4O с помощью спектроскопической базы данных высокого разрешения HITRAN-2000 и библиотеки спектров низкого разрешения. Проведено сравнение параметров чувствительности, селективности и коэффициентов поглощения аналитических частот CO_2 и ШД CO лазеров в типичных условиях выхлопа самолетного двигателя.

Были выполнены расчеты коэффициентов поглощения в среде выхлопа двигателя на частотах излучения CO_2 лазера и широкодиапазонного CO лазера. Отметим, что основной вклад в поглощение в данной спектральной области обусловлен H_2O и CO_2. Многие лазерные частоты CO имеют очень низкое поглощение во влажном загрязненном воздухе (значительно ниже, чем имеют лазерные частоты CO_2). Некоторые другие частоты CO, наоборот, обладают очень большим поглощением. Данное обстоятельство является преимуществом ШД CO лазеров, делающее их многофункциональными устройствами. Они могут применяться не только для мониторинга загрязнений в окнах прозрачности атмосферы, но также и для обнаружения очень малых концентраций водяного пара и углекислого газа.



Поглощение на частотах излучения CO_2 и CO лазеров в атмосфере. Условия выхлопной струи самолета при P=1 атм и T=300 K. Содержание газов – типичное.

Приведенная Таблица суммирует сравнение детектирующих возможностей ШД CO и CO_2 лазеров. Видно, что практически для всех газов параметры чувствительности (c_j^{min} и S_j) (так же как и парциальная селективность Γ_j), являются наилучшими для ШД CO лазера. Расчеты показали, что CO_2 лазер обладает лучшими характеристиками при детектировании лишь NH_3, C_2H_4, O_3, ClO, HCOOH (три последних газа с плохой селективностью).

Таблица. Сравнение потенциальных возможностей широкодиапазонного (ШД) CO и CO_2 лазеров при спектроскопическом детектировании смеси из 42 газов (38 газов, содержащихся в базе данных HITRAN-2000, плюс 4 летучих органических соединения).

Параметр	**ШД CO лазер**	**CO_2 лазер**
Спектральный диапазон, $см^{-1}$	1162.42- 4034.06	886.38- 1104.35
Общее число лазерных линий	1452	145
Число аналитических линий	1452	145
Число детектируемых газов	38	25
Молекулы, которые невозможно обнаружить (среди рассмотренных в типичных условиях)	SF_6, O, $ClONO_2$, HOBr	CO, O_2, NO, HF, HCL, HBR, HJ, H_2CO, HOCl, N_2, HCN, CH_3Cl, SF_6, O, $ClONO_2$, NO^+, HOBr
Общая мера чувствительности $\sum_j 1/c_j^{min}$, 1/ppmV	565.1	168.1
Общая мера чувствительности $\sum_j S_j$, $см^2$	$5.95\cdot10^{-17}$	$1.22\cdot10^{-17}$
Усредненная селективность $\langle \Gamma_j \rangle$	0.783	0.529
Минимальный, средний и максимальный коэффициент поглощения в среде выхлопа двигателя, $м^{-1}$	$5\cdot10^{-5}$ 2.029 141.182	$2.3\cdot10^{-3}$ 0.032 0.669

Полученные результаты показывают, что все параметры, по которым проводилось сравнение между двумя лазерами, являются наилучшими для широкодиапазонного CO лазера.

ОСНОВНОЙ ВЫВОД

◆ **Широкодиапазонный CO лазер (одновременная генерация на фундаментальных (ΔV=1, λ=4,9-7,5 мкм) и обертонных (ΔV=2, λ=2,5-4,2 мкм) переходах) имеет уникальные возможности при количественном детектировании концентраций газов в многокомпонентных смесях.**

Основные публикации по теме презентации

1. O.G. Buzykin, A.A. Ionin, S.V. Ivanov, A.A. Kotkov, L.V. Seleznev, A.V. Shustov. *Resonant absorption of first-overtone CO laser radiation by atmospheric water vapor and pollutants*// Laser and Particle Beams, 2000, V. 18, P. 697-713.
2. О.Г. Бузыкин, С.В. Иванов, А.А. Ионин, А.А. Котков, Л.В. Селезнев. *Линейное и нелинейное поглощение излучения обертонного CO лазера в атмосфере*// Оптика атмосферы и океана, 2001, Т. 14, No 5, С. 400-407.
3. O.G. Buzykin, A.A. Ionin, S.V. Ivanov, A.A. Kotkov, L.V. Seleznev. *Quantitative spectroscopic atmospheric pollution diagnostics using first-overtone CO laser radiation*// Proc. SPIE, 2002, V. 4644, P. 193-200. (ILLA 2001 20- 26 June 2001, Suzdal, Russia).
4. О.Г. Бузыкин, С.В. Иванов, А.А. Ионин, А.А. Котков, Л.В. Селезнев. *Количественная спектроскопическая диагностика загрязнений атмосферы с помощью излучения CO-лазера на первом обертоне*// Известия РАН. Сер. Физическая, 2002, Т. 66, No 7, С. 962– 967.
5. S.V. Ivanov, A.A. Ionin, A.A. Kotkov, A.Yu. Kozlov, L.V. Seleznev, O.G. Buzykin. *Detection capabilities of different molecular lasers in infrared spectroscopic diagnostics of multicomponent gas mixtures*// Proc. SPIE, 2003, V. 5149, P. 161-168. IQEC/LAT 2002 (22- 27 June 2002,Moscow, Russia).
6. С.В.Иванов, А.А.Ионин, А.А. Котков, А.Ю. Козлов, Л.В. Селезнев, Д.В. Синицын, О.Г. Бузыкин. *Детектирование выхлопных газов двигателя с помощью CO_2- и CO-лазеров*// Химическая физика, 2004, Т. 23, № 8, С. 62-70.
7. O.G. Buzykin, S.V. Ivanov, A.A.Ionin, A.A. Kotkov, A.Yu. Kozlov. *Spectroscopic Detection of Sulfur Oxides in the Aircraft Wake*// J. Russian Laser Research, 2005, V. 26, No. 5, P. 402-426.
8. S.V. Ivanov. *Spectroscopic detection of aircraft wake gases*// Physics of Wave Phenomena, 2007, V. 15, No. 1, P. 57-65.

Сведения об авторе:
Иванов Сергей Викторович
serg.ivanov.home@mail.ru