

**МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ**  
**Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение**  
**высшего профессионального образования**  
**«КУБАНСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ»**  
**(ФГБОУ ВПО «КубГУ»)**

**Физико-технический факультет**

**Кафедра оптоэлектроники**

**КУРСОВАЯ РАБОТА**

**ИССЛЕДОВАНИЕ СПЕКТРАЛЬНЫХ ХАРАКТЕРИСТИК**  
**БИОЛОГИЧЕСКИХ ОБЪЕКТОВ В ТЕРАГЕРЦОВОМ ДИАПАЗОНЕ**

Работу выполнила \_\_\_\_\_ Юрова Наталия Алексеевна

Курс 4

Специальность 210401 – Физика и техника оптической связи

Научный руководитель

канд. физ.-мат. наук, доцент \_\_\_\_\_ Е. В. Строганова

Нормоконтролёр инженер \_\_\_\_\_ И. А. Прохорова

Краснодар 2014

## РЕФЕРАТ

Курсовая работа 32 с., 10 рис., 27 использованных источников.

### ТЕРАГЕРЦОВОЕ ИЗЛУЧЕНИЕ, СПЕКТРАЛЬНЫЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ, СТРУКТУРНЫЙ АНАЛИЗ, БИОЛОГИЧЕСКИЕ ОБЪЕКТЫ

Объектом разработки данной курсовой работы является методика проведения экспериментов с жидкими и биологическими объектами в терагерцовой области частот.

Целями работы являются: нахождение эмпирическим путем оптимальных условий для измерения спектральных характеристик биологических и жидких объектов в терагерцовом диапазоне, анализ возможности проведения структурного анализа на примере белковых структур, содержащихся в сухом молоке, качественная оценка возможности создания системы распознавания опасных жидких взрывчатых веществ, основанной на свойствах ТГц волн.

В качестве основного оборудования использовался терагерцовый спектрограф Tera K15.

В результате выполнения курсовой работы были определены: основные свойства ТГц излучения и возможности его применения; выявлены факторы, влияющие на качество измерений; определены параметры проведения эксперимента для получения наиболее точных результатов; получены данные для структурного анализа сложных биологических систем; определена возможность внедрения спектральных данных объектов, имеющих отклик в ТГц диапазоне, в системы досмотрового оборудования.

## СОДЕРЖАНИЕ

Введение.....	4
1 Исследование областей применения терагерцового излучения.....	6
1.1 Особенности ТГц излучения.....	6
1.2 Применение ТГц диапазона в биологических исследованиях.....	7
1.3 Использование ТГц излучения в системах визуализации и неразрушающего контроля.....	9
1.4 Применение ТГц излучения в системах безопасности.....	10
2 Разработка методики проведения измерений спектральных характеристик биологических объектов .....	15
2.1 Получение спектральных характеристик биологических объектов.....	15
2.2 Подбор оптимальных условий проведения эксперимента.....	18
2.3 Структурный анализ белковых соединений.....	21
3 Анализ возможности создания системы распознавания опасных взрывчатых веществ.....	24
3.1 Измерение спектральных характеристик жидких объектов.....	25
3.2 Получение данных для систем распознавания.....	26
3.3 Определение принципа работы системы.....	27
Заключение.....	28
Список использованных источников.....	30

## ВВЕДЕНИЕ

Терагерцовый диапазон электромагнитного излучения занимает промежуточное значение между оптическим и радиодиапазоном, в пределах от 300 ГГц до 10 ТГц.

В последние годы большой интерес приобретают исследования, направленные на изучение явлений взаимодействия ТГц излучения с веществом. Результаты подобных исследований открывают новые научные перспективы и находят широкое применение в военной и гражданской промышленности [1]. Примером может служить использование ТГц сканеров в системах безопасности аэропортов. В отличие от рентгеновских сканеров они не представляют угрозу для биологических тканей.

Отклик объектов (сред) в терагерцовом диапазоне излучения может использоваться в целях их идентификации [2]. Однако для ряда веществ эта задача является затруднительной, примером могут служить керамические предметы. Одним из решений для получения четкого очертания предмета и его идентификации становится переход сканирующего поля в диапазон с меньшей длиной волны терагерцового излучения. Спектральный анализ в этой области позволяет получить информацию о строении и составе молекулярной системы [3]. В этом диапазоне лежат частоты собственных колебательно-вращательных переходов в биологических структурах [4]. Малость энергии терагерцовых квантов и связанный с этим неионизирующий характер терагерцового излучения открывает широкие возможности для его использования в биологии и медицине [5].

Представленный проект посвящен исследованию свойств терагерцового излучения и использованию его в различных приложениях науки и техники. Также изучаются спектральные характеристики различного рода объектов в указанном диапазоне.

В настоящей работе поставлены следующие цели:

- Разработать методику проведения измерений биологических объектов в терагерцовом диапазоне;
- Проанализировать возможность проведения структурного анализа на примере белковых структур, содержащихся в сухом молоке;
- Проанализировать возможность создания системы распознавания опасных жидких взрывчатых веществ, основанной на свойствах ТГц волн.

И для их достижения поставлены задачи:

- Провести измерения различных образцов биологических объектов при различных внешних условиях;
- Проанализировать полученные результаты с целью определения оптимальных условий проведения экспериментов;
- Получить спектральные характеристики жидких объектов либо их компонентов в ТГц диапазоне;
- Исследовать полученные данные: определить центральные частоты, характеризующие резонансное поглощение либо отражение;
- Сделать соответствующие выводы.

В процессе исследования применялись методы:

- Теоретического исследования:
  - теоретический анализ литературы для обоснования теоретических и практических направлений исследования;
  - систематизация, обобщение.
- Эксперимент:
  - измерение спектральных характеристик биологических и жидких объектов;
  - определение оптимальных условий для получения спектральных данных.
- Математические и статистические методы:
  - анализ получаемых спектральных данных и их аппроксимация математическими функциями.
  -

# 1 Исследование областей применения терагерцового излучения

## 1.1 Особенности ТГц излучения

Терагерцовый диапазон - это дальний инфракрасный диапазон, на шкале частот находится между миллиметровым диапазоном и средним инфракрасным диапазоном, он простирается примерно от 0,1 ТГц до 20 ТГц, или в терминах обратных сантиметров от  $3 \text{ см}^{-1}$  до  $600 \text{ см}^{-1}$ . Частота 1ТГц эквивалентна  $33,3 \text{ см}^{-1}$  или в энергетических единицах 4мэВ.

Под названием импульсное терагерцовое излучение в настоящее время обычно подразумевают импульсное излучение с длительностью импульса порядка пикосекунды и непрерывным спектром в терагерцовом диапазоне. Спектроскопия в терагерцовом диапазоне интересна тем, что в этом диапазоне лежат линии поглощения как простых, так и сложных молекул, соответствующие вращательным колебаниям молекулы, межмолекулярному взаимодействию и колебаниям молекулярных комплексов, образующихся в результате межмолекулярного взаимодействия за счет водородных связей.

Спектры сложных биологических молекул в этом диапазоне содержат линии, соответствующие вращательным, так называемым торсионным колебаниям, дальнедействующим взаимодействиям (без связей) между функциональными группами молекулы, а также взаимодействиям между атомными группами, связанными через слабые водородные связи. При этом положение и форма линий, их интенсивность сильно зависят от конформации молекулы, от внешней среды, в которой она находится. В настоящее время широко применяются различные методы терагерцовой спектроскопии.

Особенностью терагерцовой спектроскопии по сравнению другими методами спектроскопии в дальнем ИК диапазоне является то, что при измерениях непосредственно прописывается зависимость поля  $E$  от времени, что позволяет осуществлять время-разрешенную спектроскопию [6]. Методы

терагерцовой спектроскопии появились относительно недавно, поэтому представляет интерес исследование спектров биологических молекул.

Терагерцовое излучение представляет собой импульсное когерентное излучение со следующими средними параметрами: длительность импульса - порядка 2 пикосекунд, спектр излучения - сплошной в диапазоне 0,1 ТГц - 3 ТГц или  $3 \text{ см}^{-1} - 100 \text{ см}^{-1}$ , пиковая мощность излучения - 1Вт.

За последнее время достигнуты определенные успехи в генерации и детектировании импульсного терагерцового излучения. В результате чего на данный момент существуют генераторы терагерцового излучения с длительностью около сотни фемтосекунд и шириной спектра до 40 ТГц и с эффективностью преобразования энергии  $10^{-6}$  и приемники этого излучения с отношением сигнал-шум до  $10^5$ .

## **1.2 Применение ТГц диапазона в биологических исследованиях**

Техника терагерцовой спектроскопии применима для спектроскопии жидкостей, газов и особенно для исследования биологических тканей [7,8], поскольку в этом диапазоне вода имеет множество сильных линий поглощения [9]. При этом толщина исследуемых образцов определяется поглощением в них терагерцового излучения. Таким образом, можно эффективно исследовать биологические образцы толщиной несколько сантиметров. В терагерцовом диапазоне лежат линии поглощения, соответствующие вращательным переходам и дальнедействующим взаимодействиям атомных групп в одной молекуле, что актуально для биологических молекул [10]. Большинство линий в спектрах таких сложных биологических молекул, как дезоксирибонуклеиновая кислота (ДНК), определяется дальнедействующим взаимодействием [11]. В частности, эти моды связаны с колебаниями спирали и движениями друг относительно друга двух спиралей при растяжении водородных связей. Такие колебания очень чувствительны к составу и топологии ДНК, то есть форма и динамика

таких низкочастотных спектров несет информацию о функционировании молекулы. В конечном счете, анализ таких спектров может дать информацию о трехмерной структуре ДНК, эластичности спиралей и процессах, связанных передачей генетической информации, когда во взаимодействие вовлечены жестко связанные субгруппы, которые связаны между собой более слабыми связями, включая слабые водородные связи.

При понижении температуры линии поглощения становятся немного уже и сдвигаются в высокочастотную часть спектра. Изучение таких спектров совместно с результатами численного моделирования методом молекулярной динамики для разных производных сложной молекулы, для одной и той же молекулы в различных конформациях позволяет приписать линии колебаниям и вращениям определенных групп атомов. Это дает возможность выделения и возбуждения отдельных мод при соответствующих конформационных изменениях.

Методы терагерцовой спектроскопии применимы не только в научных биологических исследованиях. Они могут быть применимы и в медицинских целях на практике. В [12] рассмотрена возможность диагностики различных видов рака кожи — плоскоклеточного рака, эпителиоидноклеточной меланомы, инфильтрирующей карциномы — с помощью терагерцовой спектроскопии. Показано, что изображающая система, построенная на основе сканирующего терагерцового спектрометра, позволяет определить полную область поражения кожи раком, найти все зоны поражения, включая не обнаруживаемые визуально или с помощью существующих систем диагностики. Обзор существующих аппаратных методов исследования заболеваний кожи, а также результаты экспериментальных исследований показали перспективность разработки новых терагерцовых систем диагностики заболеваний эпителиальных тканей. А в [13] рассмотрена возможность использования терагерцовой спектроскопии во временной области для ранней неинвазивной диагностики кариозного поражения эмали человеческого зуба. В результате проводимых в работе экспериментальных

исследований определена качественная взаимосвязь между терагерцовыми оптическими характеристиками эмали и концентрацией содержащихся в ней минеральных веществ, что свидетельствует о возможности создания нового метода ранней неинвазивной диагностики кариозного поражения зуба человека с помощью терагерцовой спектроскопии.

### **1.3 Использование ТГц излучения в системах визуализации и неразрушающего контроля**

Терагерцовое излучение обладает рядом преимуществ, которые обуславливают возрастающий интерес к исследованиям в этом направлении. Одним из основных является возможность проникновения ТГц волн сквозь некоторые материалы: одежду, бумагу, картон, дерево, кирпичную кладку, пластик и керамику. Атмосфера Земли является сильным поглотителем вследствие наличия паров воды, имеющих фундаментальные полосы поглощения в этой области. Однако на расстоянии до 10 м возможна разработка систем беспроводной связи или систем визуализации.

Преимуществом терагерцового излучения также является наличие в этом диапазоне т.н. «отпечатков пальцев» [14] различных веществ, в т.ч. биологического происхождения. Таким термином можно назвать те спектральные данные о поглощении или отражении, которые присущи только определенному объекту. Методами терагерцовой спектроскопии эти данные могут получены и проанализированы. Неионизирующий характер излучения позволяет говорить о перспективах его использования в целях визуализации в биологических и медицинских исследованиях [12,13].

Системы визуализации, основанные на свойствах ТГц, волн могут быть использованы в различных отраслях науки и техники. Примером может служить система обнаружение примесей в продуктах фармацевтической промышленности. Производство лекарственных препаратов является сложным контролируемым процессом. Если конечный продукт не соответствует

стандарту, установленному регулируемыми органами, то вся партия уничтожается. Этот факт стимулирует фармацевтическую промышленность внедрять в производство системы анализа качества выпускаемой продукции. Терагерцовое излучение позволяет получить информацию о химической и физической структуре в режиме реального времени в неразрушающем виде [15]. Система, основанная на свойствах ТГц волн, позволяет определить структуру и свойства тестируемого образца: биодоступность, технологичность, качество очистки, стабильность, скорость растворения, растворимость и другие характеристики препарата.

#### **1.4 Применение ТГц излучения в системах безопасности**

Требования к системам досмотра год от года становятся все строже. Если ранее было достаточно оснастить пункт пропуска металлодетекторами и рентгенотелевизионной техникой для досмотра личных вещей, то сейчас, как правило, необходимо обеспечить обнаружение всех видов угроз и, желательно, идентификацию подозрительных предметов.

Расширилась и сфера применения досмотрового оборудования. Сейчас оно используется не только на контрольно-пропускных пунктах объектов особой важности, но и для обеспечения безопасности транспортной инфраструктуры, массовых мероприятий, организации доступа в офисные здания. Одно из слабых мест в системах безопасности пунктов пропуска – персональный досмотр. Используемые в настоящее время досмотровые установки, как правило, имеют низкую пропускную способность, большое количество ложных тревог и низкое разрешение. Стоимость систем персонального досмотра достаточно высока и ни одна из подобных систем пока не способна решить все задачи, стоящие перед службой безопасности. Только совместная работа нескольких досмотровых комплексов, использующих различные физические принципы, позволяет в какой-то мере обеспечить приемлемое качество персонального досмотра.

Для нужд служб безопасности необходимы новые технологии досмотра, требующие минимальных навыков от эксплуатирующего персонала, безопасные для человека и обеспечивающие быстрый и качественный досмотр. Современное досмотровое оборудование должно позволять своевременно обнаруживать потенциально опасные предметы, идентифицировать их химический состав. В некоторых случаях необходимо иметь возможность проводить обнаружение и идентификацию дистанционно, на расстояниях до 50 метров. Желательно также, чтобы стоимость оборудования не была чрезмерно высокой.

Ведущие разработчики досмотрового оборудования активно ищут новые технологии и используют самые современные научные достижения. Одна из последних тенденций – повышенное внимание к терагерцовому излучению. Терагерцовое электромагнитное излучение имеет ряд интересных свойств:

- Все окружающие нас предметы в той или иной степени излучают терагерцовые волны.
- В отличие от применяемого в тепловизионной технике инфракрасного излучения, терагерцовые волны хорошо проходят через ткани, картон, некоторые виды пластика. Керамика и металлы отражают это излучение, жидкости хорошо поглощают его. Это позволяет хорошо различать различные потенциально опасные объекты на изображении.
- Большинство предметов, запрещенных к проносу, имеют специфические спектры поглощения в терагерцовом диапазоне. Использование терагерцовой спектроскопии позволяет дистанционно идентифицировать взрывчатку и наркотики, что является большим плюсом, так как не всегда можно идентифицировать их другими методами.
- Пространственное разрешение терагерцовых систем может быть существенно выше, чем в системах, использующих миллиметровое излучение (около 0.3 мм на частоте 1 ТГц).
- Терагерцовое излучение безопасно для человека.

В силу своих специфических свойств, терагерцовые волны могут использоваться как для персонального досмотра, так и для досмотра личных вещей [16].

Терагерцовые комплексы персонального досмотра могут использовать как собственное излучение человека, так и активную подсветку (рис. 1). По этому принципу они подразделяются на пассивные и активные.

Собственное излучение человека в терагерцовом диапазоне крайне мало. Излучение тела человека близко к излучению абсолютно черного тела, имеющего температуру 310 К, при этом максимум излучаемой энергии приходится на длину волны 9,4 мкм. На терагерцовый диапазон приходится излучаемая мощность порядка тысячных долей ватта, которая рассеивается в пространстве во всех направлениях. В результате до детектора доходит очень малая часть излученной телом энергии, что предъявляет очень высокие требования к чувствительности. Также нужно учитывать, что как температурный контраст между собственным излучением тела и излучением скрытых под одеждой предметов очень мал, так что детекторы, используемые для пассивного детектирования, должны обнаруживать минимальную разницу температур. Наиболее чувствительные детекторы, которые можно использовать для пассивных систем терагерцового радиовидения, хотя и обеспечивают хорошее качество изображения, требуют охлаждения до температур жидкого гелия, что сильно ограничивает их применение. К тому же существуют технические сложности создания линеек и матриц охлаждаемых детекторов.

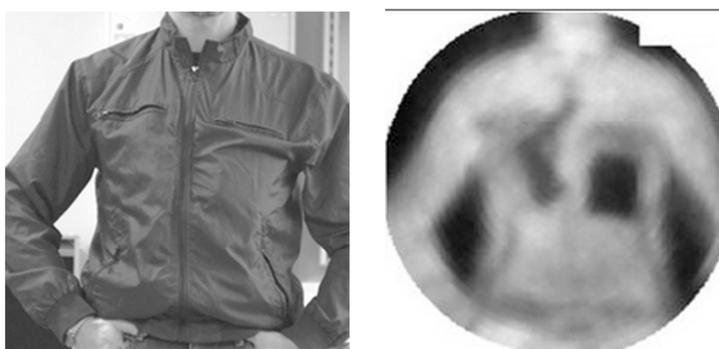


Рисунок 1 – Демонстрация работы терагерцовой системы визуализации:  
а) реальное изображение; б) терагерцовое изображение

Менее чувствительные детекторы, которые не требуют для работы охлаждения до криогенных температур, используются чаще. Досмотровые комплексы, использующие подобные детекторы, выпускаются серийно. Хотя пространственное разрешение подобных систем не велико и качество изображения достаточно невысокое, на такие системы, тем не менее, есть спрос.

Активные системы, использующие подсветку, могут использоваться как для создания изображения, так и для терагерцовой спектроскопии. Требования к чувствительности детекторов для таких систем существенно ниже. Важную роль играет выбор частоты, на которой осуществляется подсветка. Чем выше частота, тем менее прозрачна ткань и другие материалы. Фактически на частотах выше 600 ГГц проникающая способность излучения серьезно снижается, в то время как для терагерцовой спектроскопии интересны именно частоты выше 1 ТГц. Таким образом, совмещение радиовидения со спектроскопией является достаточно сложной задачей. Но эта задача вполне решается. Прототипы систем, в которых одновременно формируется изображение объекта и осуществляется спектроскопия, уже существуют. Разрабатываются также комплексы, с помощью которых будет возможно обнаруживать частицы взрывчатых веществ, находящихся на поверхности либо в воздухе, если вещество имеет достаточно высокую упругость паров.

Хотя терагерцовые системы досмотра являются очень перспективными, их широкому распространению мешает ряд технических проблем, которые необходимо преодолеть.

Основная проблема, мешающая внедрению – это доступность источников излучения и детекторов. В диапазоне до 100 ГГц источники излучения и высококачественные детекторы выпускаются серийно и сейчас досмотровые комплексы на их основе успешно конкурируют с рентгеновскими системами обратного рассеяния по качеству изображения и стоимости. Более высокочастотные источники, которые позволяют осуществлять спектроскопию материалов (некоторые интересующие службы безопасности материалы имеют

спектры поглощения на частотах до 10 ТГц), пока еще достаточно дороги. Есть основания полагать, что в ближайшее время промышленность начнет выпускать подобные источники крупными сериями, в результате чего их стоимость существенно снизится и спектрометры на их базе будут коммерчески доступны.

Также в ближайшее время ожидается появление недорогих матриц детекторов терагерцового диапазона, подобных тепловизионным неохлаждаемым матрицам. Серьезных научных исследований в данном направлении не требуется – необходимо только внедрить существующие разработки. Несколько европейских и американских исследовательских групп ведут работу в этом направлении. Появление матриц, несомненно, сделает системы терагерцового радиовидения более доступными [17].

## **2 Разработка методики проведения измерений спектральных характеристик биологических объектов**

Отклик объектов (сред) в терагерцовом диапазоне излучения может использоваться в целях их идентификации. Однако для ряда веществ эта задача является затруднительной, примером могут служить керамические предметы. Одним из решений для получения четкого очертания предмета и его идентификации становится переход сканирующего поля в диапазон с меньшей длиной волны терагерцового излучения. Спектральный анализ в этой области позволяет получить информацию о строении и составе молекулярной системы. В этом диапазоне лежат частоты собственных колебательно-вращательных переходов в биологических структурах. Малость энергии терагерцовых квантов и связанный с этим неионизирующий характер терагерцового излучения открывает широкие возможности для его использования в биологии и медицине.

### **2.1 Получение спектральных характеристик биологических объектов**

В качестве образца для исследования колебательных спектров белков было выбрано сухое молоко [18]. Белки— это высокомолекулярные соединения, состоящие из L — аминокислот, которые связаны между собой характерной для белков пептидной связью. В молоке обнаружена целая система белков, среди которых выделяют две главные группы казеины и сывороточные белки.

Инструментом в исследовании являлся терагерцовый спектрометр Tera K15. В основе его работы лежит принцип когерентного детектирования импульсов терагерцового излучения, прошедшего или отраженного от исследуемого образца, и последующей их обработки математическими методами, основанными на моделировании теоретических спектров и их подгонки к экспериментальным методом наименьших квадратов.

Ультракороткий лазерный импульс расщепляется на импульс накачки и зондирующий импульс, которые используются, соответственно, для генерации и детектирования терагерцовых импульсов. Зондирующий лазерный импульс взаимодействует с определенным участком терагерцового импульса в детекторе. Терагерцовое поле регистрируется как функция временной задержки зондирующего импульса. Преобразование Фурье от волновой формы позволяет получить спектр терагерцового сигнала [19]. Спектральный диапазон Tera K15 составляет около 4 ТГц, динамический диапазон – более 70 дБ, диапазон сканирования – 300 пс. Система позволяет получить спектры показателя преломления, спектры поглощения и форму импульса лазерного сигнала, прошедшего образец [20].

На рисунке 2 представлена схема проведения эксперимента [21].

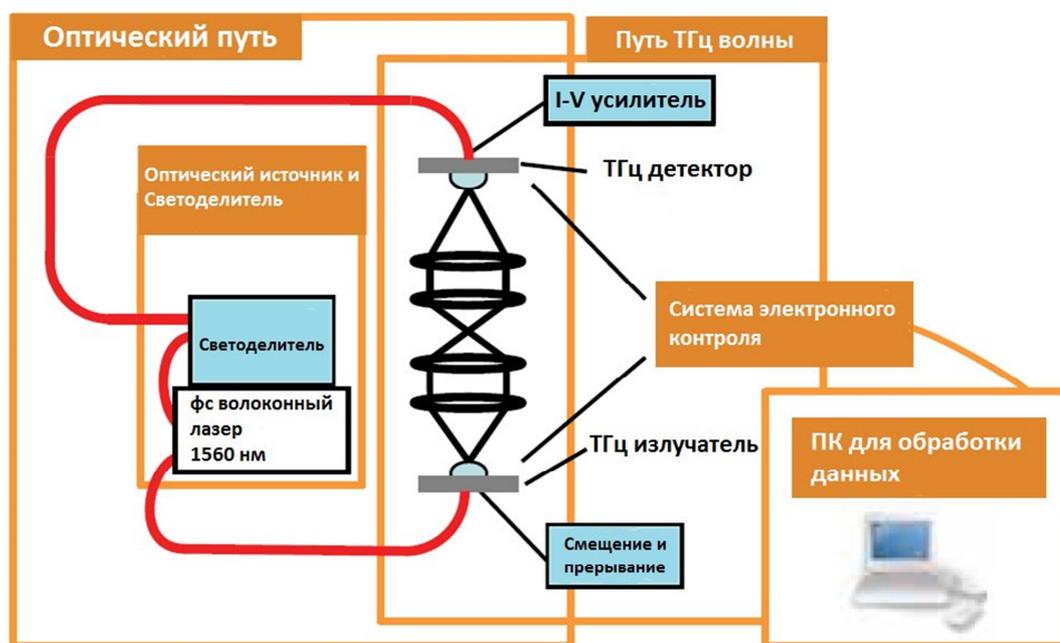


Рисунок 2 – Схема проведения эксперимента

В ходе экспериментов, проводимых при нормальных условиях, нами были получены спектры показателя преломления и поглощения сухого молока (рис. 3, рис. 4) [22]. Время накопления сигнала составляло 30 мс.

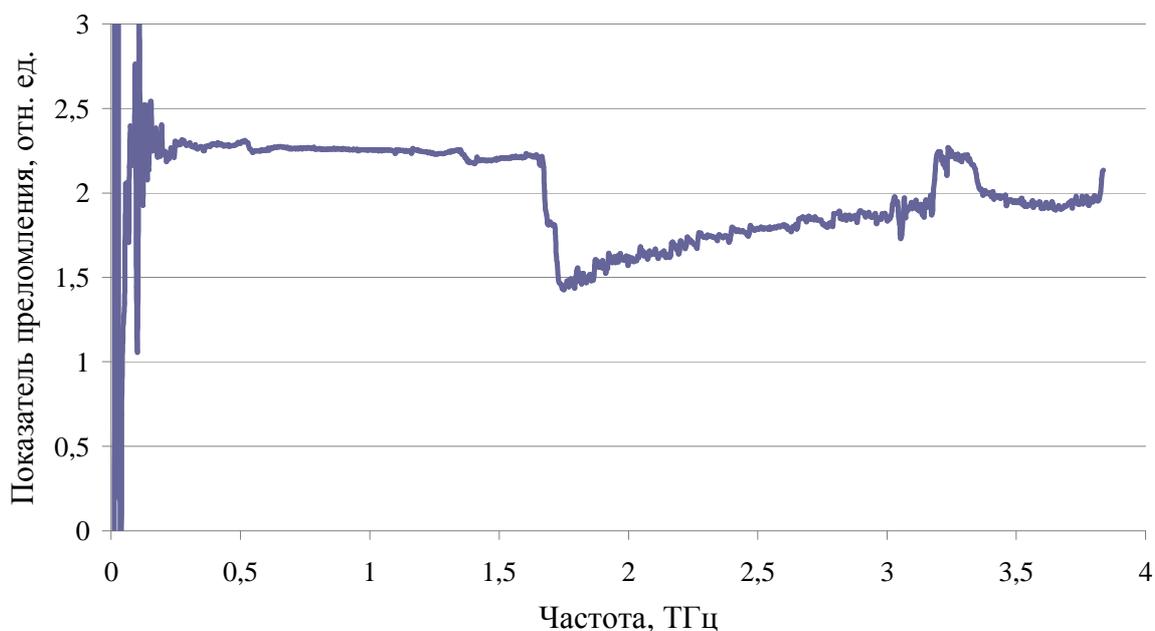


Рисунок 3 – Спектр показателя преломления сухого молока при нормальных условиях

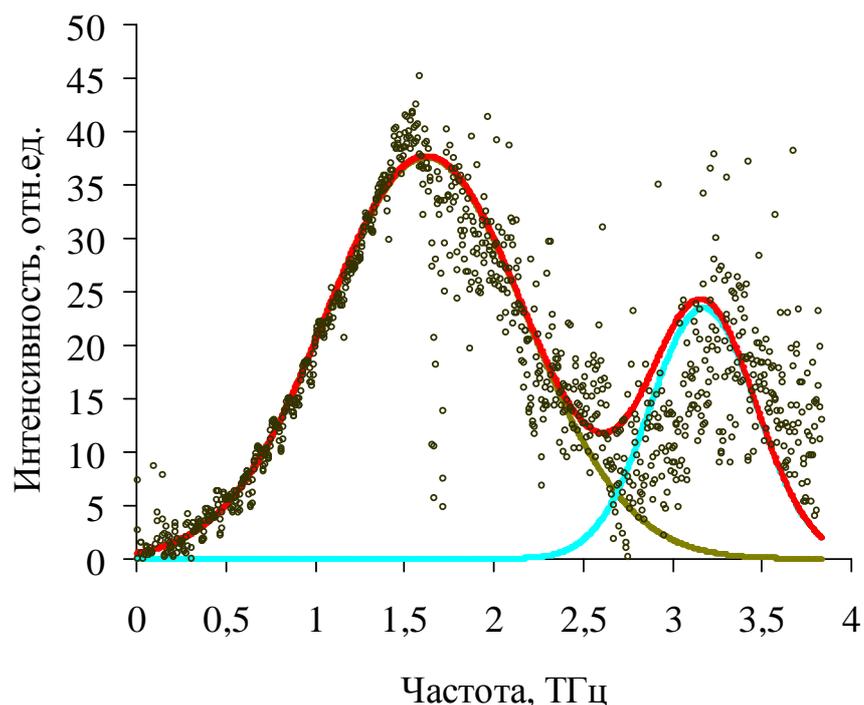


Рисунок 4 – Спектр поглощения сухого молока при нормальных условиях

Как видно из полученных графиков нормальные условия проведения эксперимента не позволили выявить какие-либо отклики и резонансные явления в исследуемом образце. Спектр показателя поглощения можно считать верным только до 1,5 ТГц, поскольку затем на него накладываются шумы. Спектр поглощения, представленный выше, складывается из двух широких

полос, обусловленных поглощением ОН групп, не имеет каких-либо особенностей в виде узких характерных для высокоэнергетических связей спектральных линий. Таким образом, не получив необходимых результатов, мы поставили задачу определить оптимальные условия проведения эксперимента.

## 2.2 Подбор оптимальных условий проведения эксперимента

Получение спектральных характеристик биологических объектов не является элементарной задачей. Существует ряд факторов, ограничивающих развитие данного направления. Одним из них является высокое поглощение молекулами воды, существенно ослабляющее терагерцовый сигнал при его распространении в воздухе. Поэтому нами была предложена методика, позволяющая провести эффективный эксперимент и получить спектральные характеристики с малым уровнем помех [23].

Было предложено осуществлять продувку рабочего объема инертным газом, в частности, аргоном. Проводя эксперименты при различных условиях, нами был получен ряд спектров показателя преломления образца. На рисунке 5 представлены спектры показателя преломления при различных временах продувки аргоном.

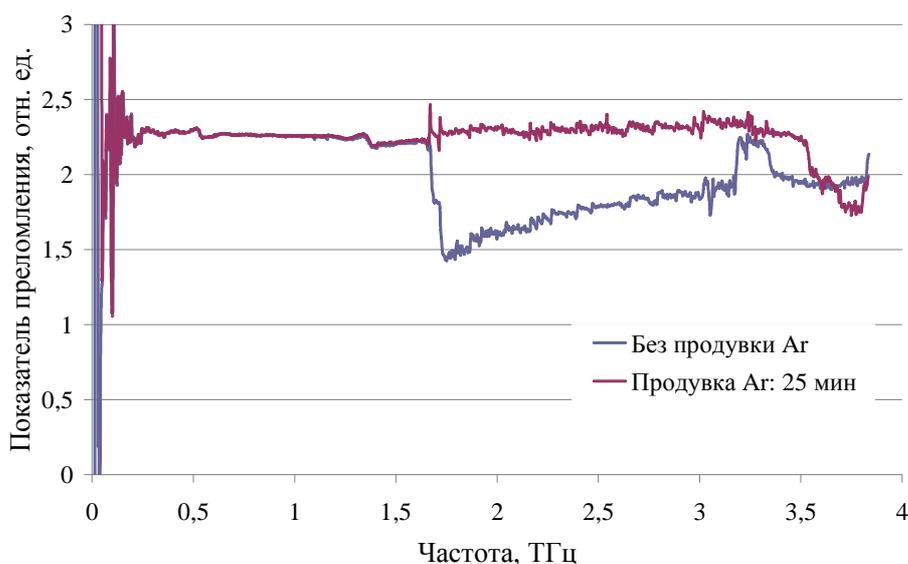


Рисунок 5 – Спектры показателей преломления образца при наличии и отсутствии продувки спектрометра аргоном

Из анализа полученных данных можно сделать вывод, что продувка рабочей области аргоном позволяет увеличить диапазон исследований до 3,5 ТГц.

Поскольку излучатели имеют довольно низкую эффективность преобразования энергии оптического импульса волоконного фемтосекундного лазера в энергию терагерцовой волны, было предложено варьировать время накопления сигнала в каждой точке. Результаты экспериментов представлены на рисунке 6. Видно, что чем больше время накопления сигнала, тем большие частоты могут быть охвачены при проведении экспериментов.

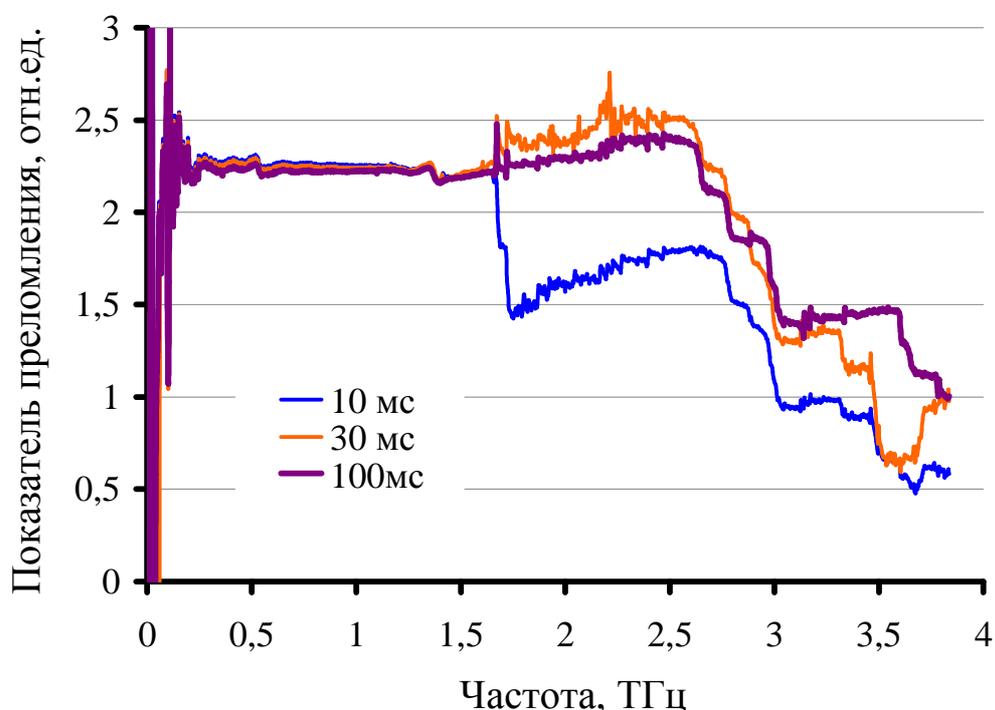


Рисунок 6 – Спектры показателей преломления при различном времени накопления сигнала

После определения оптимальных условий проведения эксперимента, мы приступили к исследованию образцов. На рисунке 7 представлен вид опорного фемтосекундного импульса и его изменение при прохождении через исследуемый объект.

Изменение импульса является подтверждением отклика исследуемого образца на воздействия терагерцового излучения.

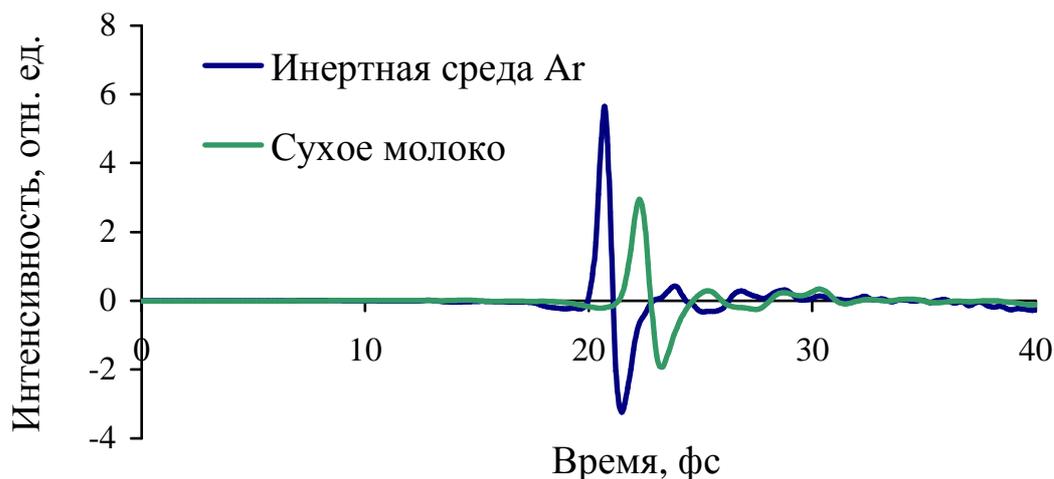


Рисунок 7 – Спектры показателей преломления при различном времени накопления сигнала

На следующем этапе нами были проведены исследования спектров поглощения образцов сухого молока при различных условиях. На рисунке 4 приведен спектр поглощения, полученный без продувки спектрографа инертным газом. Спектр представляет собой суперпозицию широких полос без каких-либо особенностей в виде узких характерных для высокоэнергетических связей спектральных линий.

На рисунке 8 приведен спектр поглощения, полученный при оптимальных условиях исследований, а именно, при продувке объема спектрографа инертным газом и увеличенным временем накопления.

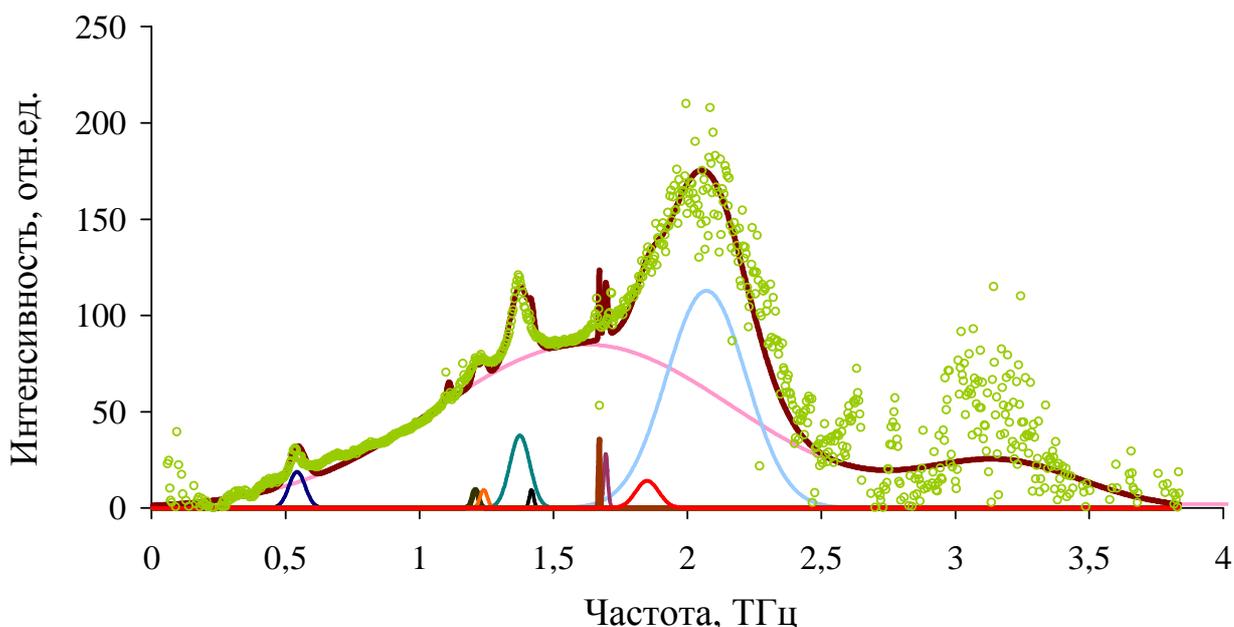


Рисунок 8 – Разложение спектра поглощения молока при продувке Ar на элементарные компоненты

При оптимальных условиях проведения исследований поглощения образцов в терагерцовом диапазоне стало возможным выделить на фоне широких полос водородных связей узкие полосы высокоэнергетических кислородных связей, отмеченных сплошными стрелками на рисунке 4 (б). Узкие линии идентифицируются нами как кислородные связи C-O, H-O, N-O.

### 2.3 Структурный анализ белковых соединений

В следующем нашем эксперименте была продемонстрирована возможность использования терагерцового излучения в качестве инструмента структурного анализа биологических объектов, в частности, сухого молока.

Так нами были проведены измерения спектральных характеристик сухого молока. С целью получения спектров, позволяющих дать большую информацию о составе исследуемой структуры, эмпирическим путем были найдены оптимальные условия проведения эксперимента. Для измерения спектров поглощения и показателя преломления было увеличено время накопления сигнала в каждой точке, а в качестве реперной среды использован

инертный газ аргон. Затем полученный спектр показателя поглощения был разложен на компоненты. После чего удалось выделить на фоне широких полос водородных связей узкие полосы высокоэнергетических кислородных связей отдельных компонентов.

С целью идентификации полученных полос были измерены спектральные характеристики белка, входящего в состав сухого молока, казеина. В качестве объекта мы использовали сухой образец. После ряда измерений был получен оптимальный спектр показателя поглощения. Время продувки аргоном составило 42 минуты, время накопления сигнала в каждой точке – 10 мс. Разложив спектральные данные на компоненты, мы смогли сравнить полосы, наблюдаемые в образце казеина, с полосами, полученными в опыте с сухим молоком.

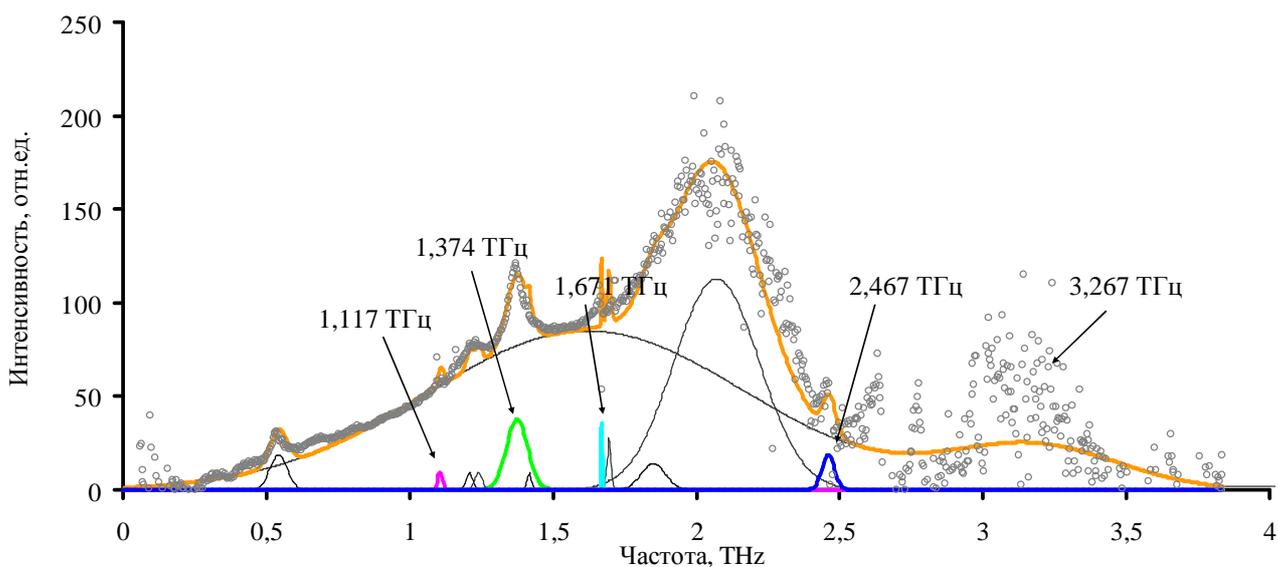


Рисунок 9 – Разложение спектра поглощения молока при продувке Ar на элементарные компоненты

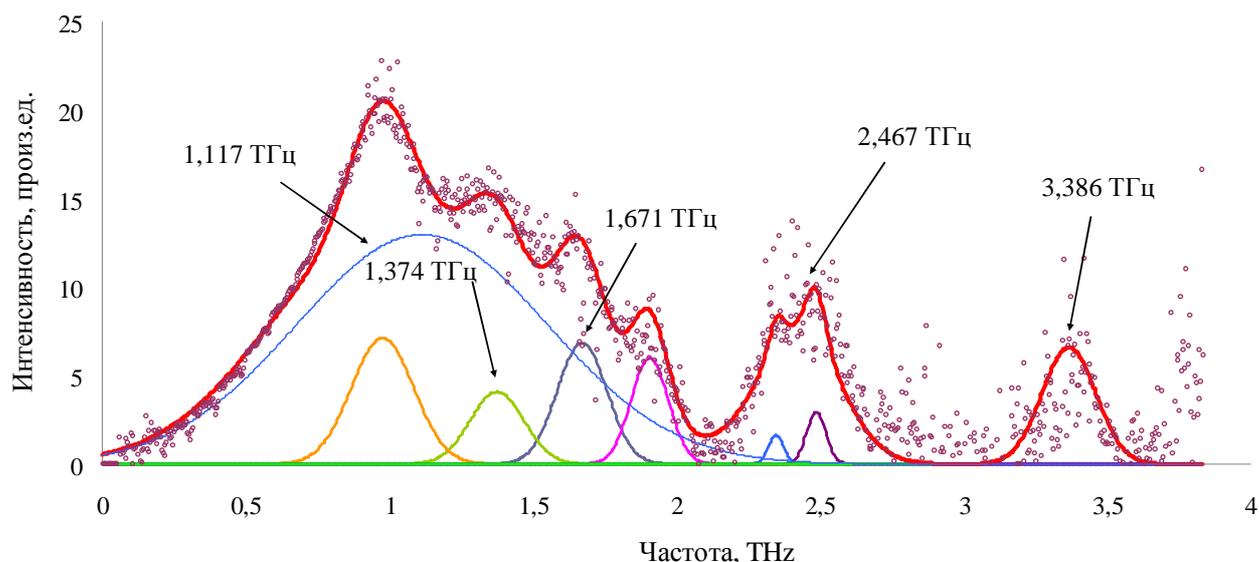


Рисунок 10 – Разложение спектра поглощения казеина при продувке Ar на элементарные компоненты

На рисунках 9, 10 показаны спектры поглощения сухого молока и казеина. Стрелками отмечены полосы, наблюдаемые в обоих образцах. Максимумы интенсивности соответствуют следующим значениям: 1,117 ТГц, 1,671 ТГц, 1,374 ТГц. Также совпадают полосы вблизи 2,467 ТГц и в области от 3 до 3,5 ТГц.

Однако при этом в казеине наблюдались полосы, которые не были обнаружены в сухом молоке. Значения соответствующих максимумов: 0,975 ТГц, 1,91 ТГц. Предполагается, что указанные полосы соответствуют поглощению сывороточных белков, что планируется проверить в последующих исследованиях.

Таким образом, зная спектральные данные отдельных составляющих, можно проводить структурный анализ сложных белковых объектов.

### **3 Анализ возможности создания системы распознавания опасных взрывчатых веществ**

Как уже отмечалось, ТГц излучение имеет низкую энергию фотонов (0,04 – 0,004 эВ) и не способно вызывать деструкцию и ионизацию вещества. При этом ТГц волны способны проникать сквозь некоторые материалы, непрозрачные для видимого и ИК – излучения. В области от 0,1 до 10 ТГц лежат собственные частоты колебательно-вращательных переходов в молекулах воды и биологических молекулах. Эти характеристики открывают перспективы использования ТГц излучения в целях визуализации, построения сложных 3-D моделей и неразрушающего контроля различного рода объектов. Анализ резонансных явлений позволяет идентифицировать объект, определить его компонентный состав.

Свойства ТГц волн обуславливают возможность их применения в инспекционно-досмотровых комплексах. Использование терагерцовой спектроскопии позволяет дистанционно идентифицировать опасные и запрещенные вещества, в том числе т.н. «жидкие бомбы» [24]. Существующие системы досмотра, оснащенные металлодетекторами и рентгенотелевизионной техникой, не позволяют обеспечить их обнаружение. Для предотвращения проникновения на борт подобного взрывчатого вещества применяется запрет на провоз любого вида жидкости в ручной клади [25]. Такие меры приводят к негативным последствиям для пассажиров: использование лекарственных препаратов и детского питания во время полета становится невозможным.

Таким образом, возникает необходимость в системах сканирования, позволяющих быстро и эффективно отличать безопасные вещества от скрытых и замаскированных опасных жидкостей. А разработка таких систем является чрезвычайно актуальной повседневной задачей.

Сегодня в ТГц диапазоне ведется множество исследований, направленных на изучение свойств и структуры различных материалов. Зная спектры опасных взрывчатых веществ или их водных растворов, можно

инициализировать их внутри транспортируемого контейнера. Ведь известно, что пластмасса и полимеры, из которых изготавливаются емкости, прозрачны в ТГц диапазоне.

Учитывая все выше сказанное, мы решили попытаться проанализировать возможность создания системы сканирования, использующей указанный диапазон для определения безопасности жидких веществ.

### 3.1 Измерение спектральных характеристик жидких объектов

Провести опыты по измерению спектральных характеристик опасных веществ не представлялось возможным. Поэтому нами были проведены исследования безопасных веществ.

Опыты проводились с использованием терагерцового спектрографа Teга К15. Измерены спектральные данные образца «Pepsi» и сухого молока, являющегося основным компонентом, входящим в состав детских молочных смесей.

При измерении спектральных характеристик «Pepsi» использовался образец в бутылке и в пластиковой кювете.

Для образца «Pepsi» получен спектр отражения (рис. 11). Узкие линии представляют собой характерные данные о явлениях резонансного отражения.

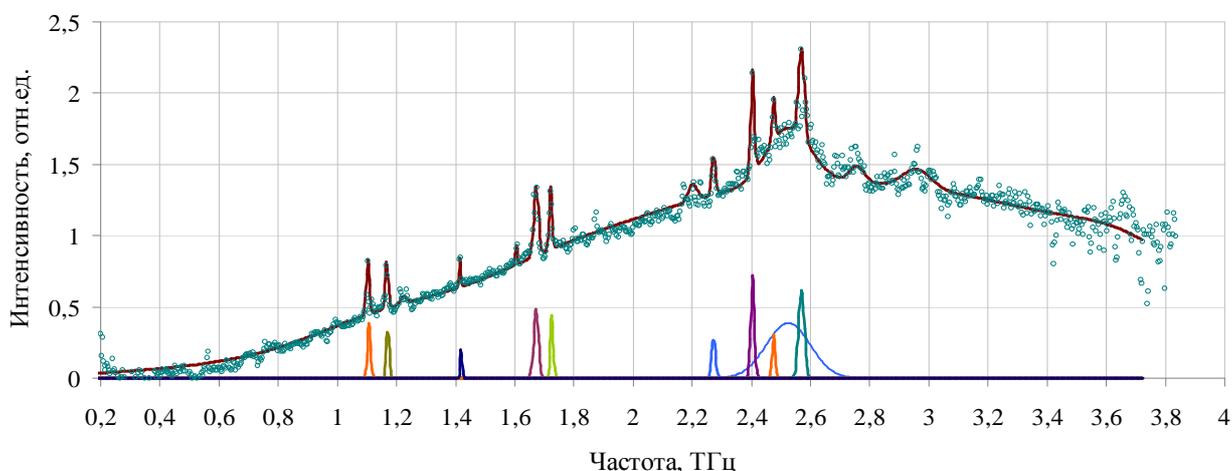


Рисунок 10 – Зависимость значения отражения от частоты для образца «Pepsi»

Для образца сухого молока была получена зависимость значения поглощения от частоты (рис. 8). Спектр представляет собой суперпозицию широких полос водородных связей и узких полос, характерных для высокоэнергетических кислородных связей.

Методика проведения экспериментов, показанная ранее, способствовала получению наиболее точных данных. И, как известно, в области измерений от 1 до 5 ТГц лежат фундаментальные частоты поглощения воды. Поэтому интенсивность отдельных полос крайне мала по сравнению с опорным сигналом. Поэтому следует отметить, что интерес представляет проведение эксперимента не на пропускание, а на отражение. Однако полученные нами данные вполне удовлетворяют целям анализа резонансных явлений в образце.

### 3.2 Получение данных для систем распознавания

Проанализировав спектральные данные, мы получили информацию о значениях центральной частоты и ширины линий, характеризующих резонансные явления в спектре того или иного образца.

Таблица 1 – Спектральные данные об образцах «Pepsi» и сухого молока

Образец "Pepsi"												
Центральная частота $\nu_0$ , ТГц	1,1035	1,1667	1,4148	1,6722	1,7216	2,2725	2,4045	2,4756	2,5247	2,5694	2,757	2,9593
Ширина линии $\Delta\nu$ , ТГц	0,0132	0,0125	0,0071	0,0189	0,012	0,0156	0,0142	0,0124	0,1753	0,0232	0,0597	0,1132
Образец сухого молока												
Центральная частота $\nu_0$ , ТГц	0,5432	1,11	1,2088	1,2398	1,3748	1,4183	1,6211	1,6711	1,6957	1,85	2,071	3,1732
Ширина линии $\Delta\nu$ , ТГц	0,0714	0,02	0,0266	0,0314	0,0877	0,0187	1,3177	0,0053	0,0171	0,1	0,3505	0,7

Анализ отдельных линий и их ширины производился с помощью средств MS Excel. Изначально использовался набор значений показателя поглощения, полученный эмпирическим путем. Затем производилась аппроксимация набором линий, имеющих форму Гаусса [26]:

$$q(\nu) = \frac{1}{\Delta\nu_T \sqrt{\pi}} \exp \left[ - \left( \frac{\nu - \nu_0}{\Delta\nu_T} \right)^2 \right],$$

где  $q(\nu)$  – спектральная зависимость;

$\Delta\nu_T = \frac{\nu_0 u_0}{c}$  – спектральная ширина;

$u_0 = \sqrt{2kT/m}$  – средняя тепловая скорость;

$\nu_0$  – центральная частота.

Подбирая значения центральной частоты, интенсивности и ширины линий производилось построение аппроксимирующей функции. В результате чего удалось получить информацию, представленную в таблице.

### 3.3 Определение принципа работы системы

При наличии сведений о центральных частотах поглощения либо отражения, становится возможным создание базы данных, содержащей в себе «терагерцовые портреты» различных безопасных веществ. Эта информация может быть внедрена в инспекционно-досмотровые комплексы. Такие системы могли бы работать по принципу опасно-безопасно. Пусть при сканировании объекта фиксируются частоты либо набор частот, сведения о которых в базе не представлены, тогда такой объект система опознает как опасный. Если же детектируется набор полос, соответствующий веществу, данные о котором сохранены в памяти устройства, и спектральные данные совпадают – объект безопасен.

Т.е. полученные в нашем эксперименте данные могли бы быть внедрены уже сейчас. В нашем случае был представлен «портрет» «Pepsi» и сухого молока. А в общем случае создание подобной базы открывает широкие перспективы и в других отраслях человеческой деятельности [27]. Это могут быть системы неразрушающего контроля качества продукции, системы определения состава сложных соединений и т.д.

## ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В ходе работы было проведено исследование свойств терагерцового излучения и возможностей его использования в различных приложениях науки и техники.

Техника терагерцовой спектроскопии применима для спектроскопии жидкостей, газов и особенно для исследования биологических тканей, поскольку в этом диапазоне вода имеет множество сильных линий поглощения. Неионизирующий характер излучения и малая интенсивность терагерцовых квантов делают диапазон привлекательным в биологических и медицинских исследованиях.

Еще одним положительным свойством является возможность проникновения ТГц волн сквозь некоторые материалы: одежду, бумагу, картон, дерево, кирпичную кладку, пластик и керамику. А наличие т.н. «отпечатков пальцев» у веществ в ТГц диапазоне позволяет говорить о перспективности использования излучения в целях визуализации и неразрушающего контроля. Терагерцовое излучение позволяет получить информацию о химической и физической структуре в режиме реального времени в неразрушающем виде. Система, основанная на свойствах ТГц волн, позволяет определить структуру и свойства тестируемого образца.

Указанные выше свойства, а также безопасность ТГц излучения для человека открывают возможность применения ТГц в системах безопасности. Существующие системы досмотра перестают удовлетворять растущим требованиям к качеству работы и безопасности для человека. Поэтому использование и внедрение ТГц в эту область деятельности является перспективной и актуальной задачей.

В ходе работы была разработана методика проведения измерений биологических объектов в терагерцовом диапазоне. С этой целью были проведены измерения различных образцов биологических объектов при различных внешних условиях. Полученные результаты были

проанализированы и определены оптимальные условия проведения экспериментов. Для измерения спектров поглощения и показателя преломления предложено увеличить время накопления сигнала в каждой точке, а в качестве реперной среды использовать инертный газ.

Была продемонстрирована возможность ТГц структурного анализа сложных биологических соединений на примере сухого молока и казеина. Используя разработанную методику проведения эксперимента, получены данные о спектре поглощения сухого молока и казеина. Впоследствии производилось сравнение полос в сухом молоке и казеине, входящем в состав молока. Анализ позволил выявить совпадение линий. Однако в сухом молоке, как и предполагалось, остались не совпавшие линии. Они должны соответствовать сывороточным белкам, этот факт будет проверен в дальнейшей работе.

Проанализирована возможность создания системы распознавания опасных жидких взрывчатых веществ, основанной на свойствах ТГц волн. Были получены спектры поглощения безопасного жидкого вещества «Pepsi» и сухого молока, являющегося основным компонентом детских молочных смесей. Получены данные о центральных частотах и ширине линий в спектрах поглощения исследуемых образцов. Эта информация может быть внедрена в инспекционно-досмотровые комплексы. Такие системы могли бы работать по принципу опасно-безопасно: если при сканировании объекта фиксируются частоты, сведения о которых в базе не представлены, такой объект опасен. Если же спектральные данные совпадают – объект безопасен.

## СПИСОК ИСПОЛЬЗОВАННЫХ ИСТОЧНИКОВ

- 1 Беспалов В. Г. Сверхширокополосное импульсное излучение в терагерцовой области спектра: получение и применение / В. Г. Беспалов // Оптический журнал. - 2006. - Т.73. - № 11. - С. 28-37.
- 2 Brucherseifer M. Label-free probing of the binding state of DNA by time-domain terahertz sensing / M. Brucherseifer, M. Nagel, P. H. Bolivar et al. // Applied Physics Letters. - 2000. - Vol. 77. - I. 24. - P. 4049-4051.
- 3 Беспалов В. Г. Терагерцовая спектроскопия и тераграфия / В. Г. Беспалов // Проблемы когерентной и нелинейной оптики: Сборник статей. - 2006. - С. 63–80.
- 4 Stryer L. Biochemistry 4th ed. / L. Stryer. - N. Y.: Freeman, 1995. – 328 p.
- 5 Parrott E. Terahertz spectroscopy: Its future role in medical diagnoses / E. Parrott, Y. Sun, E. Pherson // Journal of Molecular Structure. - 2011. - Vol. 1006. - P. 66–76.
- 6 Aston D. H. Coherent time-domain far-infrared spectroscopy / D. H. Aston, K. P. Cheung // Journal of the Optical Society of America. - 1985. - Vol. 2. – P. 606-608.
- 7 Jin S.J. Characterization of  $\alpha$ -hydroquinone and  $\beta$ -hydroquinone clathrates by THz time-domain spectroscopy / S. J. Jin, T. Jeon, Y. Lee // Chemical Physics Letters. – 2009. – Vol. 468. – P. 37-41.
- 8 Crompton D. THz Spectroscopic Studies of Biomolecules / D.Crompton, A.J. Vickers // 13th Biennial Baltic Electronics Conference. – 2012. – P. 13-20.
- 9 Robert J. Terahertz Spectroscopic Analysis of Peptides and Proteins / J. Robert. G. Andrea // Journal of Infrared, Millimeter and Terahertz Waves. – 2012. – Vol. 33. - I. 10. - P. 973-988.
- 10 Naoto N. Direct evidence of inter-molecular vibrations by THz spectroscopy / N. Naoto, K. Ryoichi, F. Ryoichi // Chemical Physics Letters. – 2005. – Vol. 413. – P. 495-500.

- 11 Globus T. R. Submillimetr-wave Fourier transform spectroscopy / T. R. Globus, D. L. Woolard, A. C. Samuels // J. of Appl. Phys. – 2002. - Vol. 91. - P. 6105.
- 12 Зайцев К. И. Экспериментальное исследование возможности диагностики рака кожи с помощью терагерцовой спектроскопии / К. И. Зайцев, В. Е. Карасик, Е. В. Новицкая и др. // Вестник МГТУ им. Н.Э. Баумана. Сер. «Приборостроение». - 2012. - №1. - С. 20-32.
- 13 Володарская С. И. Экспериментальное обоснование возможности ранней диагностики кариозного поражения эмали зуба с помощью терагерцовой спектроскопии / С. И. Володарская, К. И. Зайцев, В. Е. Карасик и др. // Вестник МГТУ им. Н.Э. Баумана. Сер. «Приборостроение». - 2013. - №2. - С. 33-47.
- 14 Ashish Y. P. Terahertz technology and its applications / Y. P. Ashish, D. S. Deepak, B. E. Kiran et al. // Drug invention today. – 2013. - Vol. 5. - P. 157-163.
- 15 Hussain W. H. Process control perspective for process analytical technology: integration of chemical engineering practice into semiconductor and pharmaceutical industries / W. H. Hussain, A. M. Khan // Chem. Eng. Commun. - 2007. - Vol. 194. - P. 760-779.
- 16 Терагерцовое излучение: использование в системах досмотра [Электронный ресурс] // ЗАО "КОМПАНИЯ БЕЗОПАСНОСТЬ". – (Рус.). - URL: <http://www.bezopasnost.ru/about/articles/detail/253/1465/> [15 марта 2014].
- 17 Царев М. В. Генерация и регистрация терагерцового излучения ультракороткими лазерными импульсами: [Учебно-методическое пособие] / М. В. Царев. – Нижний Новгород, 2011. – 175 с.
- 18 Hirotaka N. Inspection of Milk Components by Terahertz Attenuated Total / N. Hirotaka, O. Yuichi, S. Keiichiro // System Integration - International Symposium. – 2011. – P. 192-196.
- 19 Zhang X. Introduction to THz Wave Photonics / X. Zhang, X. Jingzhou – Springer, 2010. – 248 p.
- 20 Sakai K. Terahertz optoelectronics / K. Sakai. – Springer, 2005. - 402 p.

- 21 Скрьль А. С. Методика работы на терагерцовом спектрографе Tera K15: [Электронное учебно-методическое пособие] / А. С. Скрьль. - Нижний Новгород, 2012. – 42 с.
- 22 Строганова Е. В. Исследование спектральных характеристик белков молока в терагерцовом диапазоне / Е. В. Строганова, В. В. Галуцкий, Н. А. Юрова // III Всероссийская конференция по фотонике и информационной оптике: сборник научных трудов. - М. - 2013. - С. 261-262.
- 23 Юрова Н. А. Методика проведения измерений спектральных характеристик биологических объектов в терагерцовом диапазоне / Н. А. Юрова, В. В. Галуцкий, Е. В. Строганова // ВНКСФ – 20. - Ижевск. - 2014. - С. 340-341.
- 24 Detecting Hazardous Fluids [Electronic source] // Menlo Systems. - (Engl.). - URL: <http://www.menlosystems.com/stories/application-notes/view/2183> [April 13, 2014].
- 25 Росавиация запрещает пассажирам самолетов провозить жидкости в ручной клади [Электронный ресурс] // ИТАР-ТАСС. – (Рус.). - URL: <http://itar-tass.com/obschestvo/875613> [15 марта 2014].
- 26 Карлов Н. В. Лекции по квантовой электронике / Н.В. Карлов. – М.: Наука, 1988. – 336 с.
- 27 Jianyuan Q. The Detection of Agricultural Products and Food Using Terahertz Spectroscopy: a Review / Q. Jianyuan, I. Yibiny, X. Lijuan // Applied Spectroscopy Reviews. – 2013. - Vol. 48. – P. 439–457.