

## Сведения о ходе выполнения проекта в 2023 году

### **«Спектроскопия атмосферных соединений с использованием терагерцовой спектроскопии высокого разрешения и искусственного интеллекта (SACHA: Spectroscopy of Atmospheric Compounds combining High-resolution terahertz & Artificial intelligence)»**

Руководитель проекта: Кистенев Юрий Владимирович, д-р физ.-мат. наук, профессор

Научные (научно-технические) результаты, полученные по направлению научного исследования за второй отчетный период

Получателем гранта:

1. Проведена Компьютерная симуляция спектров высокого разрешения смесей примесных газов в ТГц диапазоне, а также разработана база данных с графическим интерфейсом параметров спектральных линий молекулярных соединений в операционном диапазоне разработанного спектрометра.

2. Разработана и изготовлена измерительная ячейка.

3. Изготовлен экспериментальный образец ТГц спектрометра высокого разрешения.

4. Проведены исследовательские испытания экспериментального образца ТГц спектрометра высокого разрешения по разработанной программе и методике исследовательских испытаний.

5. Проведена на базе Получателя гранта интеркалибровка экспериментального образца ТГц спектрометра высокого разрешения с использованием ТГц спектрометра Иностранного партнера.

6. Проведен совместный с Иностраным партнером анализ эмиссии МГС около водной поверхности заболоченных территорий Западной Сибири с применением разработанного аппаратно-программного комплекса.

7. Проведен совместный анализ с Иностраным партнером промышленных выбросов около центра рекуперации энергии в Дюнkerке (проект TERAWASTE) с применением разработанного аппаратно-программного комплекса.

8. Разработаны рекомендации и предложения для дальнейшего использования результатов исследований в реальном секторе экономики РФ.

9. Подведены итоги этапа и подготовлена отчетная документация.

10. Подготовлено и опубликовано в научных журналах, индексируемых в базах данных "Scopus" и (или) Web of Science Core Collection, 8 статей.

11. По результатам реализации проекта, подготовлена и зарегистрирована в патентном ведомстве Российской Федерации заявка на получение патента на изобретение.

Получателем гранта за счет внебюджетных средств:

12. Реализовано материально-техническое обеспечение выполнения работ этапа.

13. Проведены маркетинговые исследования.

Иностраным партнером:

14. Проведен совместный анализ с Получателем гранта промышленных выбросов около центра рекуперации энергии в Дюнkerке (проект TERAWASTE).

15. Реализована доработка (в виде рекомендаций) российского ТГц спектрометра высокого разрешения, включая схему детектирования, абсорбционную ячейку и насосную установку.

16. Проведена подготовка исследований эмиссии МГС около водной поверхности заболоченных территорий Западной Сибири: выбор площадки и инструментов для отбора проб, оценка влияния параметров окружающей среды.

17. Проведен анализ данных, накопленных в результате измерений в России и Франции, с помощью созданной теоретической платформы, и подготовлены рекомендации по использованию разрабатываемого аппаратно-программного комплекса.

#### Основные научные результаты по проекту и перспективы их использования

В соответствии с выполнением плана-графика работ научного исследования разработаны и изготовлены два вида измерительных ячеек для исследования газовых проб: однопроходные ячейки с различным профилем сечения волновода, а также цилиндрическая многопроходная ячейка (рекомендация Иностранного партнера). Для каждой ячейки, реализована герметичная вакуумная система для проведения исследования газовых проб при пониженном давлении. Показано, что при продолжительном времени эксперимента, натекание газа из атмосферы внутрь ячейки не оказывает существенного влияния на концентрацию исследуемой газовой пробы. Дополнительно были исследованы амплитудно-частотные характеристики однопроходных ячеек, показано, что лучшим выбором в операционном спектральном диапазоне спектрометра является измерительная ячейка с волноводом прямоугольного сечения (15×30 мм).

Рассмотрены используемые модули расширения спектрального диапазона в более высокочастотную область (с 40 ГГц до 1.1 ТГц). На основании сравнения их технических характеристик, дано обоснование выбора системы преобразования и записи сигналов (осциллографов), поступающих с детекторов разработанного ЭО СВР.

Были исследованы пространственные характеристики пучков ТГц излучения, сформированных волноводом от 20 до 40 ГГц и умножительными модулями УМ406001, Ceуear 82401U. Так же было рассмотрено влияние фокусировки с помощью плосковыпуклой линзы и линзы аксикон на пространственную структуру этих пучков. Были рассмотрена пространственная структура пучков ТГц излучения после прохождения измерительной ячейки. Из полученных результатов можно сделать вывод, что для волновода от 20 до 40 ГГц и умножительного модуля УМ406001 фокусировка излучения линзой аксикон является оптимальным вариантом для применения в спектроскопических исследованиях. Для умножительного модуля Ceуear 82401U использование линз опционально, так как это усложняет эксперимент и не дает существенного положительного эффекта.

Рассмотрены три типа детекторов для регистрации ТГц волн в ЭО СВР: (оптоакустического детектора) ячейки Голея, детектора на основе пирозлектрического эффекта и детекторов на основе выпрямляющих полупроводниковых структур – диодов Шоттки. По сравнению с детекторами на основе диодов Шоттки, пиродетектор и ячейка Голея позволяют проводить детектирование в широком спектральном диапазоне, при этом их спектральный отклик практически не зависит от частоты. Однако, они обладают на несколько порядков меньшей скоростью отклика (десятки мс против нс у детекторов на основе диодов Шоттки).

Было проведено исследование фотоакустического детектора на основе кварцевого резонатора (рекомендация иностранного партнера). В рамках этого исследования была создана экспериментальная установка для исследования резонансной кривой кварцевого резонатора, измерена частота его резонанса и добротность; создана экспериментальная установка для исследования фотоакустического детектора на основе кварцевого резонатора; экспериментально исследованы линии поглощения водяного пара с центрами на частотах 23 и 325 ГГц, данные были сравнены с модельными расчетами с использованием базы HITRAN; показана эффективность дифференциальной демодуляции сигнала в увеличении полезного сигнала.

Было реализовано ПО для управления ЭО СВР, которое позволяет управлять работой спектрометра с использованием компьютера.

Проведены исследовательские испытания разработанного ЭО СВР, показано, что разработанный ЭО СВР соответствует всем требованиям, описанным в программе и методике исследовательских испытаний. Полученные результаты показывают, что значение предела детектирования ЭО СВР по коэффициенту поглощения соответствуют уровню  $3.9 \times 10^{-9}$  см<sup>-1</sup>. Также получена оценка динамического диапазона спектрометра, который меняется в зависимости от используемого множителя частоты в пределах от 38 дБ (умножитель Ceуear 82401V, диапазон от 750 до 1100 ГГц) до 89 дБ (умножитель MWave УМ406001, диапазон от 40 до 60 ГГц – рекомендация Иностранного партнера).

В результате совместной работы была проведена интеркалибровка ЭО СВР на базе Получателя гранта и ТГц спектрометра высокого разрешения Иностранного партнера. Найденные коэффициенты пересчета позволяют проводить распределенные измерения и совместный анализ экспериментальных данных российского и французского научных коллективов.

Совместно с Иностранным партнером был проведен анализ эмиссии МГС около водной поверхности заболоченных территорий Западной Сибири с отбором проб на двух участках (Иностранный партнер сформулировал рекомендации по выбору площадки и инструментов для отбора проб, дал оценку влияния параметров окружающей среды). Для получения спектров и обработки данных использовался разработанный аппаратно-программный комплекс.

Был проведен совместный анализ с Иностранным партнером промышленных выбросов около центра рекуперации энергии в Дюнкерке (проект TERAWASTE). В рамках данных работ была разработана модель сигнала для спектрометра высокого разрешения ТГц диапазона с частотной модуляцией, который используется французским научным коллективом для мониторинга промышленных выбросов при работе центра рекуперации энергии в Дюнкерке. При разработке указанной модели сигнала российским научным коллективом была обнаружена аппаратная зависимость, которая не учитывалась в расчетах при анализе методом относительной количественной оценки, используемой французским научным коллективом. Разработанная и обученная модель машинного обучения показала более точный результат при сравнении двух методов на модельных данных, что позволяет сделать вывод о возможности применения разработанной модели для анализа спектральных данных, полученных при исследовании выбросов промышленных выбросов в атмосфере.

По итогам выполненных работ даны рекомендации и предложения для дальнейшего использования результатов исследований в реальном секторе экономики РФ, включая рекомендации по разработке промышленных образцов источника перестраиваемого ТГц излучения, детектора ТГц излучения, измерительной ячейки, системы управления и регистрации, перспективным направлениям практических применений компактного ТГц спектрометра высокого разрешения.

По результатам реализации этапа опубликовано 8 статей в научных рецензируемых журналах, индексируемых в базах данных "Scopus" и (или) Web of Science Core Collection. Также по результатам выполнения проекта были сделано 6 докладов на международных конференциях.

Была подготовлена заявка на получение патента на изобретение, и проведена ее регистрация в патентном ведомстве Российской Федерации.

Реализовано материально-техническое обеспечение выполнения работ этапа.

Согласно календарному плану за счет внебюджетных средств были проведены маркетинговые исследования. Цель маркетинговых мероприятий заключалась в позиционировании терагерцовых спектрометров высокого разрешения для исследования малых газовых примесей в атмосфере.

Иностранном партнером за счет собственных средств был проведен совместный анализ с Получателем гранта индустриальных выбросов около центра рекуперации энергии в Дюнкерке (проект TERAWASTE). Перед изготовлением экспериментального образца ТГц спектрометра высокого разрешения, его оптическая схема, планируемая к реализации, была предоставлена Иностранному партнеру. На основе анализа оптической схемы спектрометра Иностранного партнер дал рекомендации по доработке оптической схемы и реализации спектрометра. Иностранный партнер дал рекомендации по подготовке исследований эмиссии МГС около водной поверхности заболоченных территорий Западной Сибири, включая выбор площадки и инструментов для отбора проб, оценку влияния параметров окружающей среды. Также был проведен совместный анализ данных, накопленных в результате измерений в России и Франции, с помощью созданной теоретической платформы, и подготовлены рекомендации по использованию разрабатываемого аппаратно-программного комплекса.

В рамках выполнения 2 этапа научного исследования были проведены дополнительные патентные исследования по теме: «Подавление эффекта Фабри-Перо в терагерцовом диапазоне спектра в измерительных газовых ячейках»

Были подведены итоги этапа и подготовлена отчетная документация. Таким образом, задачи, поставленные Заказчиком на данном этапе проекта, были выполнены. Полученные результаты позволят разрабатывать эффективные инструменты для контроля парниковых газов и индустриальных загрязнений в атмосфере. Научно-технический уровень разработки соответствует мировому.