

DOI: <https://doi.org/10.30898/1684-1719.2025.11.45>

УДК: 537.86.029 543.42

СПЕКТРОМЕТР ВЫСОКОГО РАЗРЕШЕНИЯ ДИАПАЗОНА 75-110 ГГц ДЛЯ ИССЛЕДОВАНИЯ МНОГОКОМПОНЕНТНЫХ ГАЗОВЫХ СМЕСЕЙ

В.Л. Вакс¹, В.А. Анфертьев¹, Е.Г. Домрачева¹, С.И. Приползин¹,
М.Б. Черняева^{1,2}, А.А. Яблоков¹, А.С. Черняева¹

¹Институт физики микроструктур Российской академии наук
603950, г. Нижний Новгород, ГСП-105

²Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского
603022, Нижний Новгород, пр. Гагарина, 23

Статья поступила в редакцию 21 октября 2025 г.

Аннотация. Использование измерений в нескольких диапазонах приводит к повышению достоверности определения веществ в составах многокомпонентных газовых смесей различного происхождения (детектирование вещества в нескольких диапазонах достоверно подтверждает наличие его в исследуемой смеси), что актуально для различных приложений, в том числе актуальных для медицинской диагностики и контроля лечения метаболитов-маркеров заболеваний и патологий. Кроме того, появляется возможность детектирования веществ в более удобном для измерений диапазоне. Целью работы является разработка и реализация нестационарного газового спектрометра диапазона 75-110 ГГц с фазовой манипуляцией воздействующего на газ излучения. Концепция спектрометра основана на использовании коммерчески доступных приборов и узлов. Тестовые измерения проведены на примере ацетонитрила, имеющего сильные линии поглощения в рабочем диапазоне спектрометра. Разработанный и реализованный спектрометр дополняет спектроскопический комплекс, включающий в себя газовые спектрометры высокого разрешения

на основе эффекта быстрого свипирования частоты и фазовой манипуляции воздействующего на газ излучения диапазонов частот 18-26 ГГц, 118-175 ГГц, а также вблизи 2 ТГц и 3,78 ТГц. Кроме того, помимо разработанного программного обеспечения для проведения измерений и обработки полученных результатов, написана программа, позволяющая проводить идентификацию экспериментально измеренных линий поглощения с использованием спектроскопических баз данных свободного доступа.

Ключевые слова: спектрометр высокого разрешения, субтерагерцовый диапазон частот, устройства полупроводниковой электроники, многокомпонентная газовая смесь, спектр поглощения.

Финансирование: Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда (проект 24-19-00623, <https://rscf.en/project/24-19-00623/>).

Автор для переписки: Домрачева Елена Георгиевна, elena@ipmras.ru

Введение

Газовая спектроскопия, использующая вращательные молекулярные переходы, развивается на протяжении нескольких десятилетий, осваивая диапазоны, начиная с единиц и десятков гигагерц, субтерагерцовый (субТГц) и терагерцовый (ТГц). Потребности приложений (фундаментальная спектроскопия, астрономия, медицина, экология, системы безопасности и др.) [например, 1], где, в частности, может использоваться спектроскопический подход для исследования состава многокомпонентных газовых смесей различного происхождения, выдвигают высокие требования, прежде всего, к источникам излучения, обеспечивающим высокостабильный сигнал и его перестройку в достаточно широком диапазоне, а также к приемным системам, обеспечивающим высокую чувствительность спектрометра.

В мире спектроскопические измерения исторически наиболее активно проводились в диапазоне частот порядка единиц ÷ десятков ГГц. В последнее время активно развивается спектроскопия и ее применения в приложениях в низкочастотной части ТГц диапазона [например, 2,3]. Созданы базы данных

свободного доступа, например, Jet Propulsion Laboratory NASA [4] и Кельнского университета [5], содержащие спектроскопические данные для большого количества молекул, преимущественно легких и средних, которые постоянно пополняются. Современные технологии и разработки научных групп демонстрируют создание и усовершенствование газовых спектрометров как в субТГц, так и в ТГц частотном диапазоне, необходимость проведения широкодиапазонных исследований или необходимость выбора диапазона для детектирования конкретного вещества заставляют разрабатывать линейки спектрометров, перекрывающих в совокупности максимально широкий частотный диапазон. Однако линеек спектрометров, перекрывающих области частот от десятков ГГц, до субТГц и ТГц диапазонов, до настоящего времени в литературе практически не представлено.

В ИФМ РАН развивается подход на основе нестационарной газовой спектроскопии субТГц и ТГц частотных диапазонов, и был разработан и реализован спектроскопический комплекс, включающий в себя газовые спектрометры высокого разрешения на основе эффекта быстрого свипирования частоты и фазовой манипуляции воздействующего на газ излучения следующих диапазонов: 18-26 ГГц, 118-178 ГГц, а также в районе 2 и 3,78 ТГц [6,7]. В частности, подход на основе методов нестационарной газовой спектроскопии субтерагерцового и терагерцового диапазона является одним из наиболее перспективных для применения в медико-биологических приложениях, где требуется исследование многокомпонентных газовых смесей (газовых составляющих организма, паров и продуктом терморазложения биологических жидкостей и тканей) с целью выявления метаболитов, специфичных для патологических состояний. [8]. Однако необходимость проведения широкодиапазонных измерений требует дополнения этого комплекса спектрометрами других диапазонов.

В частотном диапазоне вблизи 100 ГГц разрабатываются полупроводниковые спектрометры, однако серийного производства до настоящего времени не начато. Одним из разрабатываемых в мире подходов к генерации излучения вблизи 100 ГГц

для применения во вращательной спектроскопии, в частности, является использование технологий комплементарный металл-оксид-полупроводник (КМОП – технологии). Здесь работы ведутся в нескольких направлениях: генерация сигналов на максимально возможных частотах (с последующим умножением частоты для перехода в еще более высокочастотный диапазон); увеличение диапазона настройки при минимизации фазового шума; увеличение выходной мощности. Одним из наиболее широкополосных генераторов этого диапазона, реализованных с использованием данного подхода, был генератор, работающий в диапазоне 85-127 ГГц. Был продемонстрирован источник излучения, использующий систему автоподстройки частоты (ФАПЧ) с дробным коэффициентом деления, которая генерирует сигналы с частотной манипуляцией в диапазоне от 85 до 127 ГГц (диапазон перестройки 39 %), с шагом настройки ~570 Гц и временем установления ~10 мкс, обеспечивающий выходную мощность сигналов более 5 мВт [9,10]. Реализован импульсный эхоспектрометр Балле-Флайгера с Фурье преобразованием, чипы приёмопередатчика которого выполнены на основе КМОП-технологии, со встроенными смесителями, синтезаторами и усилителями, охватывающими диапазон частот 95-105 ГГц [11]. В спектрометре используется подход на основе детектирования переизлученного молекулами сигнала (эхо через несколько микросекунд), причем исследуемый газ помещен в резонатор для увеличения длины пути взаимодействия излучения с веществом. Для тестирования спектрометра использовалась закись азота (N_2O), имеющая вращательный переход на частоте 100,4917 ГГц. В компактном спектрометре с рабочим диапазоном 90-102 ГГц, использующем традиционные методы импульсного преобразования Фурье, электроника источника и гетеродинного приемника были изготовлены по технологии КМОП. Он был разработан группой, объединяющей сотрудников Лаборатории реактивного движения, Калифорнийского технологического института (*Jet Propulsion Laboratory, California Institute of Technology*) (США) и Калифорнийского университета в Лос-Анджелесе (*University of California at Los Angeles*), (США) [12] и протестирован на обнаружение таких

газов, как OCS, CH₃CN, CH₃OH, N₂O in situ. Представленный обзор показывает, что диапазон вблизи 100 ГГц представляет интерес для спектроскопических групп мирового уровня, специализирующихся на вращательной спектроскопии. Кроме того, развитие техники умножения частоты опорного генератора приводит к возможностям использования этого подхода для широкодиапазонных измерений. Например, спектрометр, состоящий из радиочастотного синтезатора, сигнал которого подается на цепочки твердотельных умножителей от Radiometer Physics GmbH (RPG) или Virginia Diode Inc. (VDI), охватывающие диапазон 75-950 ГГц использовался для проведения измерений спектров 1-цианоадамантиана и 1-изоцианоадамантиана в диапазоне 75-220 ГГц [12]. Однако отечественных разработок для спектрометров данного диапазона в литературе найти не удалось. Целью работы является разработка и реализация спектрометра диапазона 75-110 ГГц, дополняющего спектроскопический комплекс, включающий в себя газовые спектрометры высокого разрешения на основе эффекта быстрого свипирования частоты и фазовой манипуляции воздействующего на газ излучения следующих диапазонов: 18-26 ГГц, 118-175 ГГц, а также в районе 2 и 3-4 ТГц. Использование измерений в нескольких диапазонах, в том числе с использованием нового спектрометра диапазона 75-110 ГГц, приводит к повышению достоверности определения метаболитов-маркеров (детектирование вещества в нескольких диапазонах), возможности детектирования веществ в более удобном для измерений диапазоне. Кроме того, помимо разработанного программного обеспечения для проведения измерений и обработки полученных результатов, написана программа, позволяющая проводить идентификацию экспериментально измеренных линий поглощения с использованием баз данных от JPL [4] и CDMS [5].

1. Концепция спектрометра высокого разрешения диапазона частот 75-110 ГГц

В ИФМ РАН разработана линейка спектрометров высокого разрешения с фазовой манипуляцией воздействующего на газ излучения, а также с быстрым свипированием частоты, работающих в диапазоне 118-175 ГГц, где источником излучения является лампа обратной волны (ЛОВ), являющаяся одним из немногих уникальных для спектроскопии источников излучения, позволяющим осуществлять перестройку в широком диапазоне. Недостатком таких приборов является ограниченный срок службы ЛОВ, а также неудобство работы с ними (высокое напряжение, сильные наводки при включении, уход параметров и необходимость перекалибровки со временем, сложности в регулировки мощности). Кроме того, реализован спектрометр диапазона 18-26 ГГц на основе коммерческого источника излучения, а также лабораторные макеты спектрометров на основе квантовых каскадных лазеров, работающих в диапазонах вблизи 2 ТГц и 3,78 ТГц. Для дополнения этой линейки спектрометров разработан спектрометр диапазона 75-110 ГГц.

Разработанный спектрометр имеет источник излучения, основанный на использовании коммерчески доступных приборов и узлов. А именно сигнал диапазона 75-110 ГГц получается путем умножения частоты сигнала низкочастотного опорного синтезатора. Недостатком такого решения являются повышенные требования к спектру опорного синтезатора и умножителю.

1.1. Возможные реализации спектрометра высокого разрешения диапазона частот 75-110 ГГц

В соответствии с концепцией спектрометра высокого разрешения диапазона 75-110 ГГц были разработаны несколько блок-схем источника излучения на основе устройств полупроводниковой электроники.

Возможный вариант спектрометра может быть выполнен на основе источника излучения, в который входят опорный синтезатор, фазовращатель, усилитель мощности и активный умножитель частоты. Примером задающего синтезатора частоты может быть выпускаемый серийно синтезатор СПС-20

фирмы «Спектран» (Россия), работающий в диапазоне частоты до 20 ГГц. Фазовращатель и усилитель мощности расположены на схеме между выходом опорного синтезатора и входом активного умножителя. Фазовращатель предназначен для осуществления режима фазовой манипуляции на выходе умножителя. Примером фазовращателя может быть прибор на микросхеме НМС932LP4Е фирмы Analog Devices (США). Он работает в диапазоне 12-18 ГГц и имеет широкую полосу частот управления фазой до 75 МГц. Это означает, что переходный процесс переключения фазы займет менее 15 нс, что существенно меньше сотен наносекунд в системе ФАПЧ. Усиление мощности будет необходимо для компенсации потерь в фазовращателе и достижения необходимого уровня входного сигнала для умножителя частоты. Активный умножитель частоты ШУ6-75110-13 был выбран производства фирмы MWave с диапазоном входных частот 12.5-18.3 ГГц.

Альтернативная блок-схема источника излучения может быть выполнена с использованием сумматора частот и фазовращателя на выбранную частоту вместе с синтезаторами частот 10 ГГц и 2,5-8,3 ГГц и широкополосного фазовращателя. В результате с выхода сумматора частот и усилителя выходит сигнал 12,5-18,3 ГГц, который поступает на вход активного умножителя частоты. Таким образом, на выходе получается сигнал, перестраиваемый по частоте в требуемых пределах, с фиксированным переключением фазы во всем диапазоне.

Третьим вариантом может быть использование коммерческого генератора сигналов Agilent Technologies E8257D, работающего в диапазоне 250 кГц-50 ГГц с функцией задаваемой фазовой манипуляции (ФМ) сигнала вместо блока низкочастотного опорного сигнала.

1.2. Реализация спектрометра диапазона частот 75-110 ГГц

Блок-схема и фотография спектрометра диапазона частот 75-110 ГГц представлены на рис. 1, 2 соответственно.

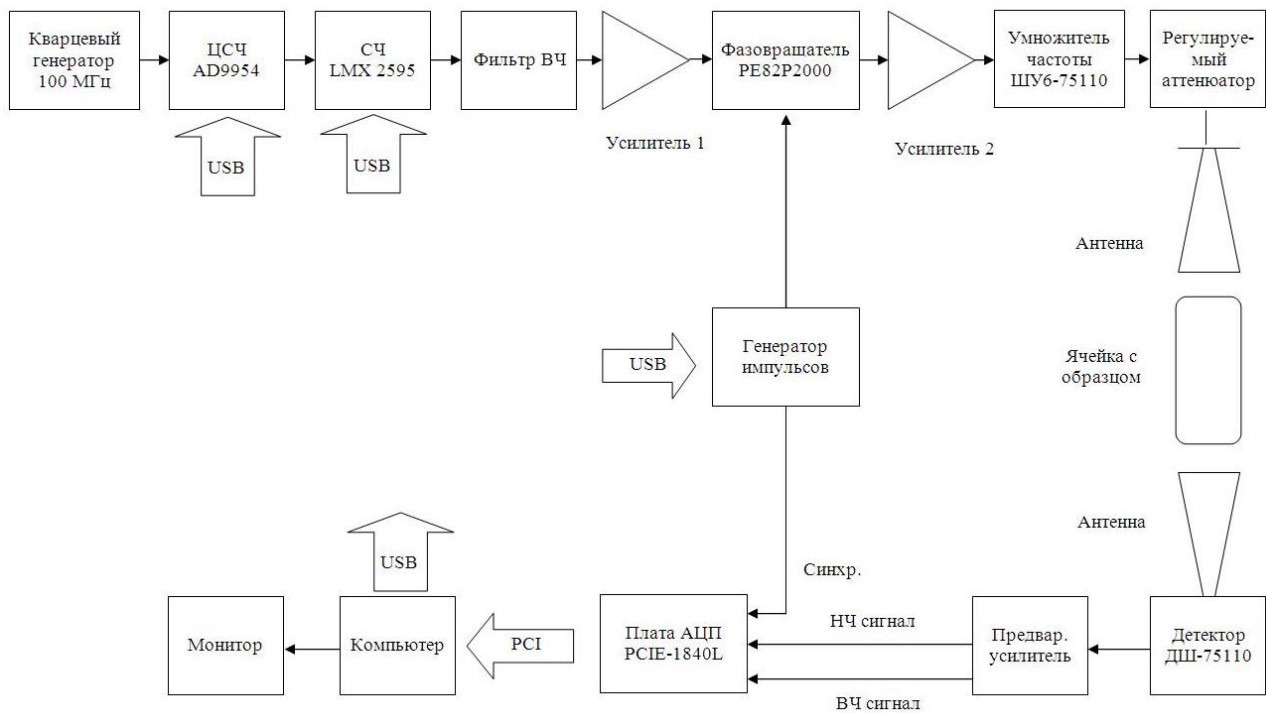


Рис. 1. Блок-схема спектрометра диапазона частот 75-110 ГГц.

Схема спектрометра была разработана таким образом, чтобы обеспечить высокую чувствительность и точность измерений. Для этого необходимы высокая стабильность частоты и чистый спектр излучения передающей части спектрометра. При этом минимальный шаг перестройки частоты должен быть равен 10 кГц во всем диапазоне частот 75-110 ГГц. Для этого была разработана схема двойного синтеза частоты с использованием цифрового синтезатора частоты (ЦСЧ), который формирует мелкую сетку частот, и синтезатора частоты (СЧ) на основе системы ФАПЧ с дробным коэффициентом передачи, который формирует крупную сетку частот.



Рис. 2. Фотография спектрометра диапазона частот 75-110 ГГц.

Далее этот сигнал проходит через фильтр верхних частот (ВЧ), имеющий полосу пропускания выше 11 ГГц, чтобы отсечь ненужные субгармоники. Два усилителя усиливают сигнал до уровня, требуемого для правильной работы умножителя частоты на 6. Фазовращатель необходим для фазовой манипуляции излучения. Изменение фазы зависит от амплитуды импульсов, поданных на вход управления фазовращателя от генератора импульсов. Период повторения импульсов и их амплитуда управляется в генераторе импульсов от компьютера через шину USB. Требуемое скачкообразное изменение фазы на выходе фазовращателя равно 30° , что после умножения на 6 в умножителе частоты становится равным 180° . Это и есть фазовая манипуляция сигнала излучения спектрометра, обеспечивающая наиболее эффективное взаимодействие излучения с линиями поглощения газа в ячейке с исследуемым образцом.

Выходное излучение передающей части спектрометра обладает следующими характеристиками:

- Диапазон частот 75-110 ГГц,
- Минимальный шаг перестройки частоты 10 кГц,
- Стабильность частоты не хуже 10^{-8} ,
- Паразитные спектральные составляющие не более -60 дБн
- Фазовая манипуляция во всем диапазоне частот $180^\circ \pm 5^\circ$.

На выходе источника излучения устанавливается регулируемый аттенуатор для выбора необходимого уровня мощности излучения и рупорная антенна для подачи этого излучения на ячейку с исследуемым образцом.

1.3. Характеризация узлов источника излучения

Тестовые измерения разработанных узлов описываемого варианта спектрометра проводились на макете с источником излучения диапазона частот 75-110 ГГц, в котором используется коммерческий генератор сигналов Agilent Technologies E8257D, работающий в диапазоне 250 кГц-50 ГГц с функцией задаваемой фазовой манипуляции (ФМ) сигнала, активный умножитель ШУ6-75110-13 с диапазоном входных частот 12.5-18.3 ГГц, входной вентиль (фарадеевский изолятор) производства фирмы MWave, управляющий компьютер.

Генератор по программе с управляющего компьютера проходит по частоте требуемый диапазон с установленной ФМ. Сигнал с генератора поступает на активный умножитель частоты, дающий на выходе излучение от 75 до 110 ГГц, с требуемой периодической ФМ (от 0 до π) на каждой из частот. Входной вентиль гасит отраженное от нагрузки (измерительная ячейка с выходным рупором) излучение, идущее обратно в источник, что повышает чувствительность прибора. В отличие от систем на ЛОВ, это необходимо для стабильной работы источника-умножителя. Также это улучшает коэффициент стоячей волны (КСВ) в тракте измерительной ячейки, что положительно сказывается на чувствительности готового прибора (уменьшает интерференцию). Прямые

потери составляют порядка 1,5 дБ, при максимальном значении 2 дБ в худшей точке.

Активный умножитель частоты ШУ6-75110-13 имеет диапазон входных частот 12.5-18.3 ГГц с типичной входной мощностью (для достижения номинальной выходной) 0...5 дБм. Частотный диапазон выходного излучения составляет 75-110 ГГц с типичной мощностью 13 дБм (20 мВт). В начальной частотной точке 75 ГГц мощность 15 дБм (30 мВт), худшая по мощности точка 105 ГГц, 15 мВт. В высокочастотной части диапазона (110 ГГц) значение мощности близко к типичному, что означает, что во всем частотном диапазоне мощности с запасом достаточно для проведения измерений. Подавление побочных спектральных составляющих ($\times 5$, $\times 7$) лучше -40 дБ от основной. Требуемое значение входной мощности умножителя достаточно низкое относительно максимальной мощности задающего генератора Agilent Technologies E8257D (15-20 дБм).

1.4. Приемный блоки и блок цифровой обработки данных спектрометра

Приемная часть схемы спектрометра разработана для приема сигнала, переизлученного линией поглощения в результате воздействия излучения с фазовой манипуляцией на частоте линии поглощения. При этом происходит цифровая обработка принятого сигнала, его накопление для уменьшения уровня шумов и помех, а также применяются программные методы обработки принятого сигнала для обеспечения чувствительности, точности измерений амплитуды, запись результатов в память компьютера и вывод результатов на монитор.

Приемная часть состоит из детектора, работающего в диапазоне частот 75-110 ГГц, предварительного усилителя, работающего в двух частотных полосах – нижних частот (НЧ) и ВЧ. Сигнал НЧ несет информацию о падающей на детектор мощности, а ВЧ сигнал – об амплитуде отклика от линии поглощения. Эти два сигнала и сигнал синхронизации от генератора импульсов поступает на три входа платы АЦП, где происходит синхронный захват сигналов от усилителя

и их аналого-цифровое преобразование. В плате АЦП есть быстродействующая память с большим объемом записи. В память записывается большое количество (вплоть до 1 млн) разовых значений принятых сигналов. Весь этот накопленный массив данных потом передается в компьютер для дальнейшей обработки программными методами, специально разработанными для данного вида спектрометров.

В управляющей программе, кроме установки частоты излучения, можно выбрать количество усреднений, параметры фильтрации и аппроксимации принятого сигнала, зависящие от того, какую чувствительность необходимо получить в результате проведения измерений. Чувствительность спектрометра напрямую зависит от времени накопления сигнала. Но это время не может быть длительным для некоторых веществ, которые могут быстро разлагаться за время измерения. Поэтому нужен некий оптимум соотношения времени измерений и чувствительности, определяемый опытным путем.

2. Программное обеспечение спектроскопического эксперимента

Для линейки спектрометров высокого разрешения с фазовой манипуляцией воздействующего на газ излучения, работающих в диапазоне 118-175 ГГц разработано программное обеспечение, позволяющее автоматизировать проведение спектроскопических измерений. Аналогичный подход применяется в спектрометре, представленном в данной работе.

Для обработки полученных спектров и идентификации веществ по спектрам было разработано отдельное программное обеспечение.

Исследование спектров многокомпонентных смесей неминуемо требует быстрого соотнесения замеченных линий поглощения с веществами. Среди многих каталогов спектральных линий были выбраны для работы каталоги от JPL [4] и CDMS [5], поскольку они представлены в одинаковом формате и в сумме описывают много больше веществ, чем другие каталоги. Поиск по ним доступен через сайт [5], предоставляющий гибкие возможности поиска. Этот портал работает общедоступно, но не очень стабильно и не быстро.

Чтобы не полагаться на работу портала, был реализован его аналог в виде локального приложения. Были загружены с сайтов JPL и CDMS файлы каталогов для представленных веществ, список которых доступен на портале. Сейчас это немногим больше 1500 молекул, радикалов и ионов. Каталог в несжатом виде занимает меньше 1 гигабайта дискового пространства; для сокращения времени чтения с диска каталог обычно сжат.

Информация о спектральных линиях представлена в виде текстовых строк, где различные параметры занимают конкретное число символов. Такой способ хранения данных обеспечивает компактность, но труден для восприятия пользователем. Для составления каталогов веществ, не представленных в коллекциях JPL и CDMS, удобно использовать наглядные форматы. Здесь был выбран JSON за его простоту и непритязательность к форматированию. Разработанная программа позволяет считывать данные из документов JSON, в том числе сжатых в архив, в которых каждое значение имеет имя непосредственно перед самим значением, и потому не требует считывать положение курсора, как для оригинальных данных.

В программе реализованы скачивание каталогов с сайтов JPL и CDMS, поиск по скачанным данным и просмотр информации о веществах. Вся работа, кроме получения каталогов, производится локально. Компенсацией за практически мгновенный поиск является относительно большой объем использования оперативной памяти.

Наши наработки по реализации локального поиска в каталогах спектральных линий опубликованы в виде пакета Python [13]. Это позволяет быстро устанавливать его на различные операционные системы, включая отечественные и мобильные. Воплощённые функции фильтрации данных каталога можно использовать для включения его в другие приложения. Например, реализован графический интерфейс на базе набора библиотек Qt [14] и также опубликован в виде пакета Python [15].

Пример интерфейса реализованной программы приведен на рисунке 3.

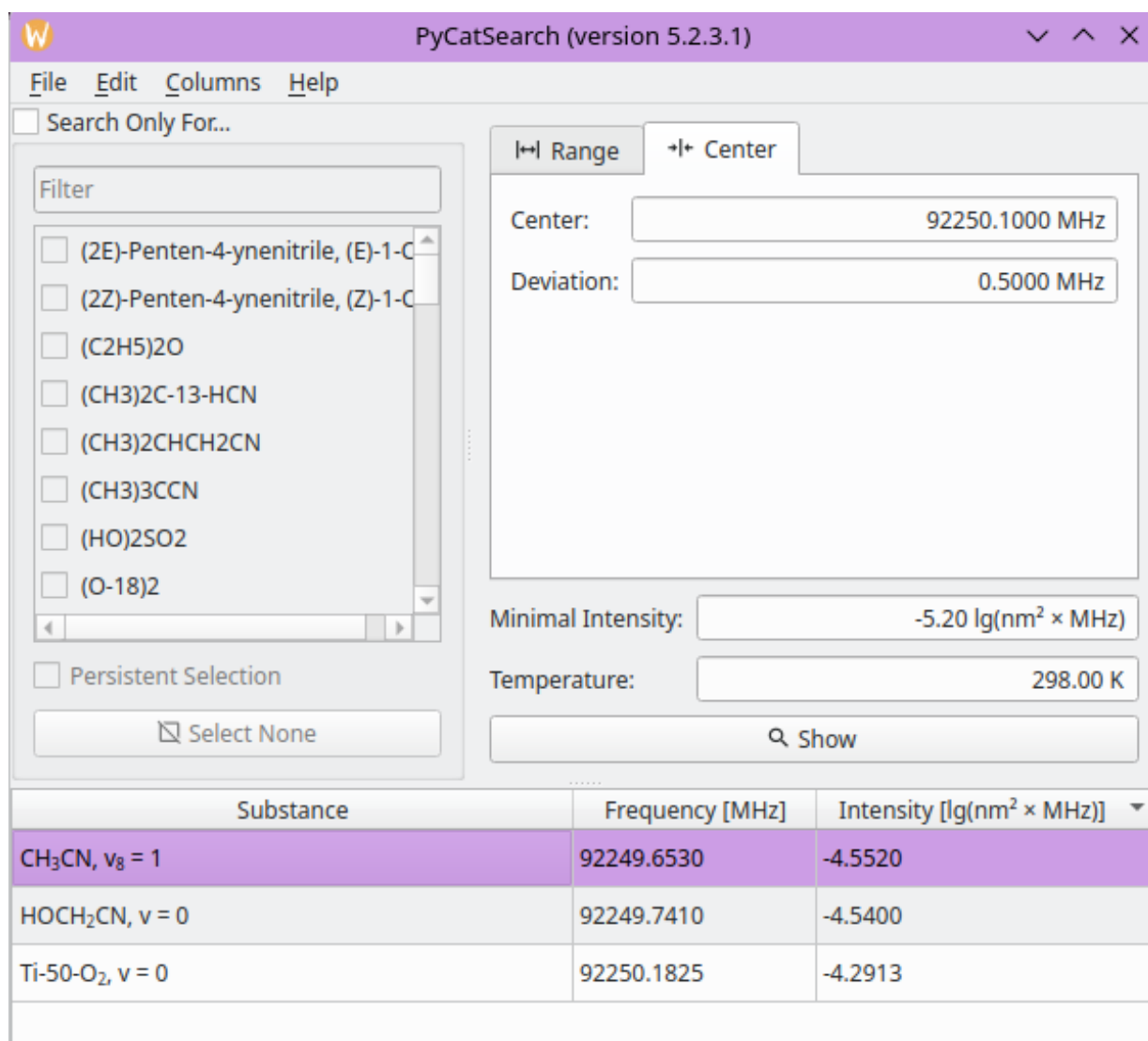


Рис. 3. Интерфейс реализованной программы с определением по каталогам линии ацетонитрила на частоте 92,249653 ГГц.

3. Результаты тестовых измерений с использованием спектрометра высокого разрешения диапазона частот 75-110 ГГц

С использованием разработанного и реализованного спектрометра были проведены тестовые измерения спектра поглощения на примере химически чистого ацетонитрила (CH₃CN), линии поглощения которого, включая изотопологи, в основном и в возбужденных колебательных состояниях присутствуют в диапазоне частот 75-110 ГГц на уровне $\lg I = -3 \div -5$, где I – интегральная интенсивность в $\text{nm}^2 \times \text{МГц}$.

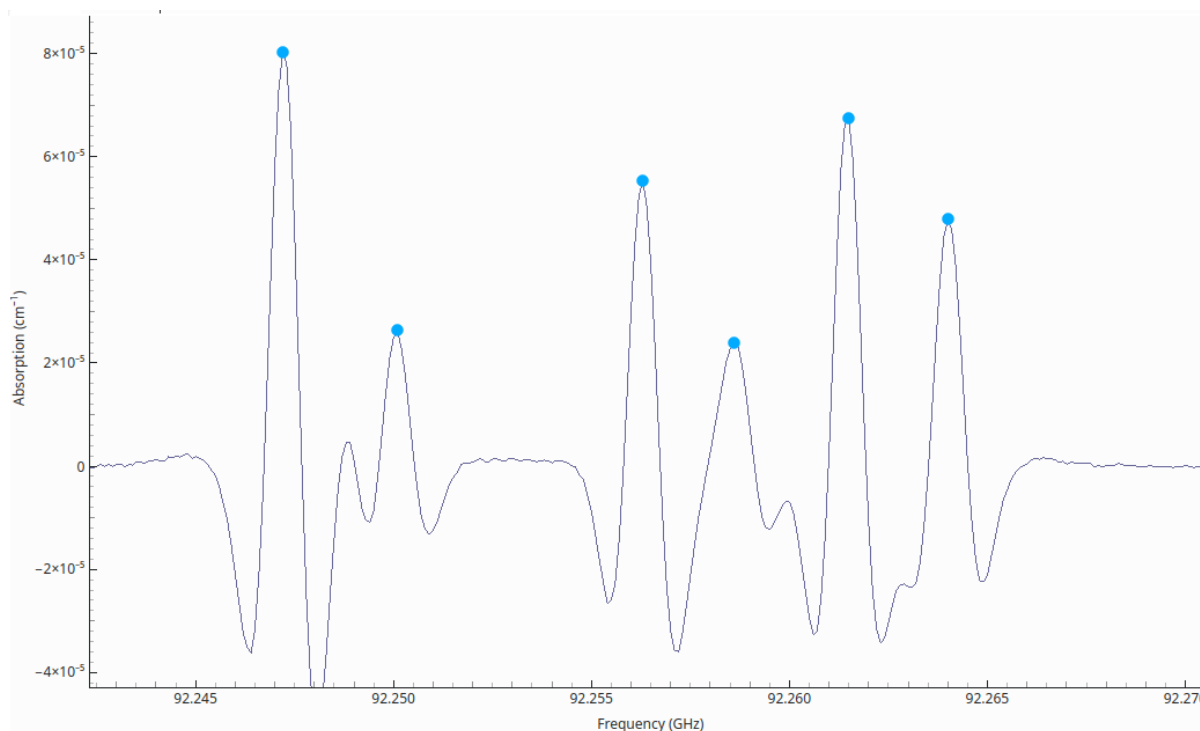


Рис. 4. Запись участка спектра с линиями ацетонитрила (CH_3CN), полученного с использованием спектрометра диапазона частот 75-110 ГГц.

Пример участка спектра с линиями ацетонитрила (CH_3CN), графическое представление которого получено с использованием разработанного программного обеспечения, представлен на рис. 4. Здесь зарегистрированы линии CH_3CN , в колебательном состоянии $\nu_8 = 1$, данные по которым представлены в таблице 1. Здесь $f_{\text{эксп}}$ – зарегистрированные экспериментально частоты и $f_{\text{кат}}$ [5] – частота и $I_{\text{кат}}$ – интегральная интенсивность из базы данных свободного доступа [5], квантовые числа J'', K_{-1}'', K_1'' – верхнего и J', K_{-1}', K_1' – нижнего энергетических уровней).

Таблица 1. Спектроскопические данные линий поглощения CH_3CN .

$f_{\text{эксп}}$, МГц	$f_{\text{кат}}$, МГц [5]	$\lg I_{\text{кат}}$, [I] = нм ² *МГц [5]	$J'', K_{-1}'', K_1'' \leftarrow J', K_{-1}', K_1'$
92247,2	92247,24	-4,1755	5 2 2 \leftarrow 4-2 2 5-2 2 \leftarrow 4 2 2
92250,1	92249.6530	-4.552	5 4 3 \leftarrow 4-4 3 5-4 3 \leftarrow 4 4 3
92256,3	92256,288	-4,0672	5 1 2 \leftarrow 4 1 2
92258,6	92258,412	-4,2489	5 3 3 \leftarrow 4 3 3
92261,5	92261,44	-4,0198	5 0 2 \leftarrow 4 0 2
92264,0	92263,992	-4,0983	5 2 3 \leftarrow 4 2 3

Чувствительность спектрометра по коэффициенту поглощения составляет $1 \times 10^{-8} \text{ см}^{-1}$. Это позволяет регистрировать линии поглощения изотопологов ацетонитрила, присутствующих в чистом ацетонитриле. Одна из линий, зарегистрированных на уровне шумов – линия изотополога ацетонитрила ($\text{CH}_3^{13}\text{CN}$) в колебательном состоянии $\nu_8 = 1$ с центральной частотой $f_{\text{кат}} = 92298,7844 \text{ МГц}$ ($f_{\text{эксп}} = 92298,7 \text{ МГц}$), с измеренным коэффициентом поглощения на уровне $\alpha_{\text{эксп}} = 10^{-6,0207} \text{ см}^{-1} = 9,5 \times 10^{-7} \text{ см}^{-1}$ ($\lg I_{\text{кат}} = -3,8372$) представлена на рис. 5.

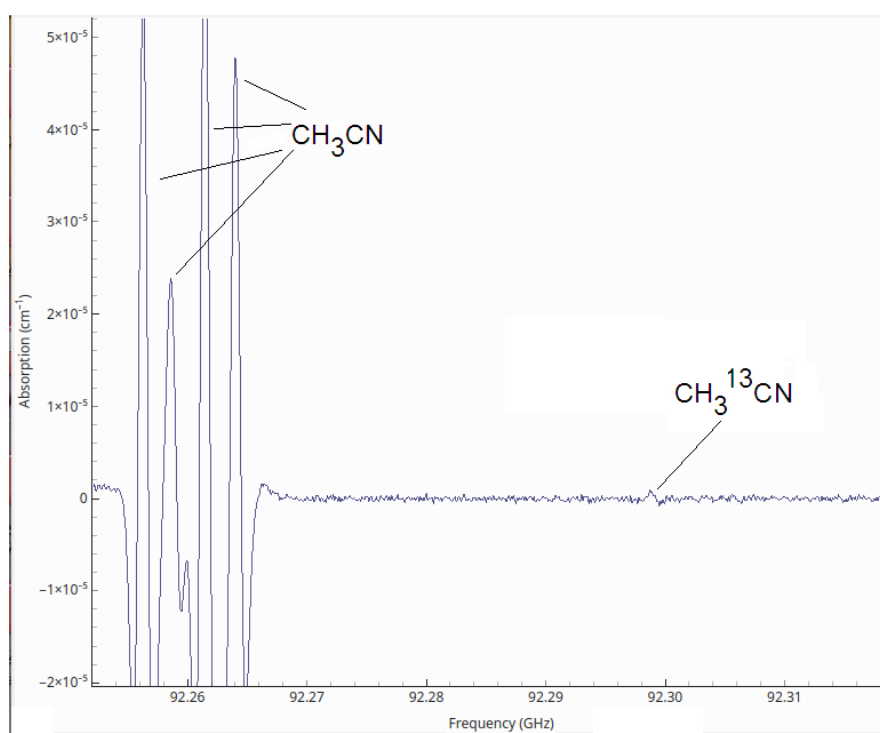


Рис. 5. Линия изотополога ацетонитрила ($\text{CH}_3^{13}\text{CN}$) в колебательном состоянии $\nu_8 = 1$.

Проведенные тестовые измерения демонстрируют перспективность использования разработанного спектрометра для исследования многокомпонентных газовых смесей различного происхождения.

Заключение

В работе представлена концепция газового спектрометра высокого разрешения на основе фазовой манипуляции воздействующего на газ излучения диапазона частот 75-110 ГГц для исследования многокомпонентных газовых смесей различного происхождения, включая медико-биологические образцы.

Разработано несколько возможных вариантов реализации источника излучения такого спектрометра. Описан выбранный для данного спектрометра оптимальный вариант источника излучения на основе полупроводниковой электроники, который обладает достаточными для проведения спектроскопических измерений характеристиками. Реализован лабораторный макет спектрометра диапазона 75-110 ГГц.

Представлены подходы к автоматизации управления спектрометра с фазовой манипуляцией воздействующего на газ излучения, позволяющие обеспечить перестройку и установку частоты с высокой точностью. Кроме того, подробно описано разработанное программное обеспечение для просмотра спектроскопических данных и выделения линий поглощения, а также для идентификации зарегистрированных линий с помощью спектроскопических баз данных свободного доступа.

Проведены тестовые измерения на примере ацетонитрила, линии поглощения которого лежат в рабочем диапазоне спектрометра.

В дальнейшем планируется проведение работ по повышению чувствительности за счет оптимизации источника излучения и уменьшения шумов.

Представленный спектрометр дополняет линейку нестационарных спектрометров и позволяет расширить частотный диапазон, используемый для широкодиапазонных измерений. В перспективе это позволит получить данные о веществах, линии которых лежат в рабочем диапазоне разработанного спектрометра.

Финансирование: Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда (проект 24-19-00623, <https://rscf.en/project/24-19-00623/>).

Литература

1. Cuisset A. et al. Terahertz rotational spectroscopy of greenhouse gases using long interaction path-lengths //Applied Sciences. – 2021. – Т. 11. – №. 3. – С. 1229. <https://doi.org/10.3390/app11031229>

2. Rothbart N., Glück A., Hübers H. W. Terahertz gas spectroscopy applied to medicine and metrology //IEEE Transactions on Terahertz Science and Technology. – 2024. – Т. 14. – №. 5. – С. 613. <https://doi.org/10.1109/TTHZ.2024.3430107>
3. Elmaleh C. et al. THz cavity ring-down quantitative gas phase spectroscopy //Talanta. – 2023. – Т. 253. – С. 124097. <https://doi.org/10.1016/j.talanta.2022.124097>
4. JPL Catalog search form. <https://spec.jpl.nasa.gov/ftp/pub/catalog/catform.html>
5. Cologne Database for Molecular Spectroscopy. <https://cdms.astro.uni-koeln.de/cdms/portal/queryForm>
6. Вакс В.Л. и др. Спектроскопия высокого разрешения терагерцевого частотного диапазона для аналитических приложений //Успехи физических наук. – 2020. – Т. 190. – №. 7. – С. 765-776. <https://doi.org/10.3367/UFNr.2019.07.038613>
7. Вакс В.Л. и др. О возможности продвижении метода нестационарной газовой спектроскопии, реализованного путем быстрого свипирования частоты, вверх по ТГц диапазону //Известия высших учебных заведений. Радиофизика. – 2022. – Т. 65. – №. 10. – С. 835-852. https://doi.org/10.52452/00213462_2022_65_10_835
8. Вакс В.Л. и др. Терагерцовая спектроскопия высокого разрешения для анализа многокомпонентных газовых смесей различного происхождения. //Глава коллективной монографии «Терагерцовая фотоника» (к 300-летию Российской академии наук (РАН)) М.: Издательство РАН. - 2023. - Т. 1. - С. 576. ISBN 978-5-907645-40-0
9. Sharma N. et al. 85-to-127 GHz CMOS transmitter for rotational spectroscopy // Proceedings of the IEEE 2014 Custom Integrated Circuits Conference. - 2014. - P. 1. ISBN: 978-1-4799-3286-3 <https://doi.org/10.1109/CICC.2014.6946140>
10. Zhang J. et al. 85-to-127 GHz CMOS signal generation using a quadrature VCO with passive coupling and broadband harmonic combining for rotational spectroscopy //IEEE Journal of Solid-State Circuits. – 2015. – Т. 50. – №. 6. – С. 1361-1371. <https://doi.org/10.1109/JSSC.2015.2416312>

11. Tang A. et al. 95–105 GHz 352 mW all-silicon cavity-coupled pulsed echo rotational spectroscopy system in 65 nm CMOS //IEEE Transactions on Terahertz Science and Technology. – 2017. – Т. 7. – №. 3. – С. 244-249. <https://doi.org/10.1109/TTHZ.2017.2692041>
12. Chitarra O. et al. Rotational and vibrational spectroscopy of 1-cyanoadamantane and 1-isocyanoadamantane //Journal of Molecular Spectroscopy. – 2021. – Т. 378. – С. 111468. <https://doi.org/10.1016/j.jms.2021.111468>hal-03228610
13. pycatsearch PyPi. <https://pypi.org/project/pycatsearch/>
14. QT | Tools for Each Stage of Software Development Lifecycle. <https://www.qt.io/>
15. pycatsearch-qt PyPi. <https://pypi.org/project/pycatsearch-qt/>

Для цитирования:

Вакс В.Л., Анфертьев В.А., Домрачева Е.Г., Приползин С.И., Черняева М.Б., Яблоков А.А., Черняева А.С. Спектрометр высокого разрешения диапазона 75-110 ГГц для исследования многокомпонентных газовых смесей. // Журнал радиоэлектроники. – 2025. – №. 11. – <https://doi.org/10.30898/1684-1719.2025.11.45>