

МЕТОД РЕГИСТРАЦИИ И АНАЛИЗА СПЕКТРОВ, ПОЛУЧЕННЫХ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ИНФРАКРАСНОГО КВАНТОВО-КАСКАДНОГО ЛАЗЕРА

Д.А. Самсонов

А.С. Табалина

И.Л. Фуфурин

igfil@bmstu.ru; igfil@mail.ru

МГТУ им. Н.Э. Баумана, Москва, Российская Федерация

Аннотация

Предложен метод регистрации и анализа спектров пропускания веществ, полученных с использованием квантово-каскадного лазера. Описана экспериментальная установка для регистрации инфракрасных спектров пропускания веществ с использованием квантово-каскадного лазера. Приведены примеры полученных экспериментальных спектров пропускания нескольких тестовых веществ. Описан метод идентификации и восстановления концентраций веществ по экспериментальным данным. Приведена оценка погрешности восстановления концентраций нескольких тестовых веществ, а также сравнительная оценка полученных результатов с результатами другого метода спектрального количественного анализа. Показано, что в исследованном диапазоне концентраций разность расчетных значений концентраций не превышает 3σ . На основании проведенных исследований сделан вывод об эффективности предложенного метода регистрации и анализа инфракрасных спектров пропускания для решения задач дистанционной идентификации и восстановления концентраций различных веществ

Ключевые слова

Инфракрасная спектроскопия, лазерная инфракрасная спектроскопия, метод наименьших квадратов, квантово-каскадный лазер, идентификация, восстановление концентраций

Поступила в редакцию 04.07.2017

© МГТУ им. Н.Э. Баумана, 2018

Работа выполнена при поддержке РФФИ (грант № 16-29-09625)

Введение. Инфракрасная спектроскопия — один из наиболее распространенных методов исследования веществ, применяемых в различных областях науки и техники. Одной из важнейших задач спектроскопии является дистанционный качественный и количественный анализ веществ. Для решения такой задачи существуют известные методы, такие как фурье-спектроскопия [1–3], спектроскопия комбинационного рассеяния [4, 5], терагерцовая спектроскопия, а также совместные методы [6]. В последнее время развитие получила лазерная ИК-спектроскопия, что связано, в частности, с появлением перспективных источников излучения — квантово-каскадных лазеров (ККЛ) [7–9].

Современные ККЛ обеспечивают формирование излучения в широком диапазоне спектра с достаточно высокой плотностью излучения за время около 0,1 с. Применение ККЛ в качестве источников излучения в лазерной ИК-спектроскопии

позволяет дистанционно обнаруживать и идентифицировать незначительные количества вещества в воздушной среде и на поверхности.

В основе методики регистрации и анализа спектров лежит метод абсорбционной ИК-спектроскопии.

В настоящей работе представлен экспериментальный метод регистрации спектров веществ с использованием ККЛ и предложен метод обработки полученных экспериментальных данных.

Описание экспериментальной установки. Схема экспериментальной установки для регистрации ИК-спектров с помощью ККЛ для решения задачи качественного и количественного анализа веществ приведена на рис. 1.

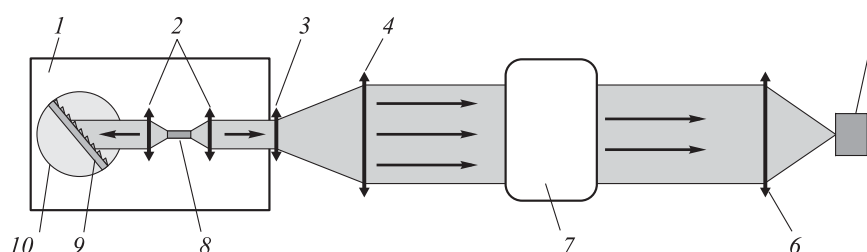


Рис. 1. Схема экспериментальной установки:

1 — излучающий блок ККЛ; 2 — коллиматоры; 3, 4 — объективы телескопа; 5 — кадмий-ртуть-теллуrowый (КРТ) фоточувствительный элемент; 6 — объектив фотоприемника; 7 — исследуемый образец; 8 — ККЛ-чип; 9 — дифракционная решетка; 10 — плоскость вращения

В качестве источника излучения в установке использован блок ККЛ, состоящий из четырех лазерных модулей, что обеспечивает спектральный диапазон излучения 5,4...12,8 мкм ($780...1850\text{ см}^{-1}$). Максимальная импульсная мощность излучения составляет 150 мВт при средней мощности 1...20 мВт. Квантово-каскадный лазер построен по конфигурации Литтрова [9]: ККЛ-чип включен во внешний резонатор, содержащий дифракционную решетку.

Для регистрации ИК-спектров пропускания тестовых веществ использован специализированный фотоприемный блок с кадмий-ртуть-теллуrowым (КРТ) фоточувствительным элементом с термоэлектрическим охлаждением. Наличие обратной связи обеспечивает синхронизацию работы фотоприемного блока с излучающим блоком ККЛ. Измерительная информация по каналу связи поступает на компьютер со специализированным программным обеспечением.

Выходной пучок лазера состоит из четырех лучей от лазерных модулей ККЛ. Телескоп позволяет расширить выходной пучок и тем самым уменьшить угловое расхождение этих лучей. Объектив собирает прошедшее через образец излучение на фотоприемник.

База данных. Для идентификации веществ по экспериментальным данным была предварительно создана база данных эталонных ИК-спектров веществ:

- паров аммиака, этанола, изопропанола, ацетона;
- полимеров: лавсана (полиэтилентерефталат), полиэтилена, полипропилена, полистирола.

Эталонные спектры для базы данных получены накоплением и усреднением данных по 100 экспериментам для каждого тестового вещества.

Примеры базовых ИК-спектров приведены на рис. 2.

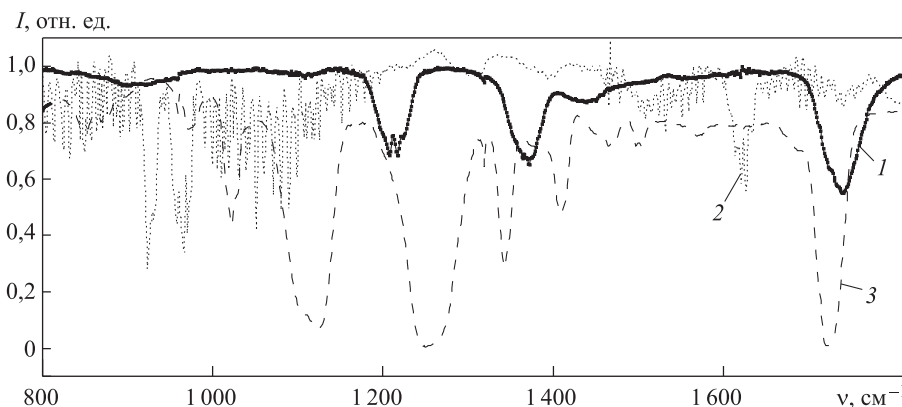


Рис. 2. Примеры базовых ИК-спектров ацетона (1), аммиака (2) и лавсана (3)

Далее с использованием созданной базы данных был разработан метод обработки экспериментальных данных на основе метода наименьших квадратов (МНК) в матричной форме [10, 11].

Метод решения задачи идентификации и восстановления концентраций веществ по экспериментальным спектрам. Идентификация и восстановление концентраций веществ по экспериментально полученным данным в первом приближении возможны с помощью МНК в матричной форме.

Для решения этой задачи представим нормированный спектр объекта как зависимость оптической толщины от волнового числа:

$$D(\nu) = -\ln\left(\frac{I(\nu)}{I_0(\nu)}\right),$$

где $I(\nu)$ — интенсивность прошедшего излучения; $I_0(\nu)$ — интенсивность падающего на исследуемый объект излучения; ν — волновое число.

Оптическая толщина безразмерная величина, но аддитивная по отношению к каждому компоненту объекта исследования. Поэтому для оптической толщины справедливо соотношение

$$\tilde{D}(\nu) = \sum_{i=1}^N D_i(\nu) = \sum_{i=1}^N \sigma_i(\nu) c_i l.$$

Здесь i — номер компонента; N — число компонентов; $\sigma_i(\nu)$ — сечение поглощения, зависящее от волнового числа ν ; l — толщина слоя поглощения.

При решении задачи строится матрица оптических толщин базовых спектров:

$$W_{N \times M} = (D_{ij}),$$

где M — число точек в спектре.

В результате задача идентификации и восстановления концентраций веществ сведена к решению уравнения вида

$$C = W^{-1}\tilde{D}, \quad (1)$$

где C — столбец концентраций (c_i); W^{-1} — матрица, квазиобратная матрице W ; \tilde{D} — экспериментальная оптическая толщина.

Как для чистых тестовых веществ, так и для их смесей, решение уравнения (1) даст столбец (c_i), в котором нет нулевых элементов, так как вследствие шума ни один экспериментальный спектр не совпадет с эталонным идеально. Поэтому при дальнейших исследованиях необходимо наложение дополнительных регуляризирующих условий или использование других методов спектрального анализа, чтобы отсечь элементы столбца (c_i), отвечающие шумовому компоненту экспериментального спектра.

Для уравнения (1) было предложено следующее регуляризирующее условие:

$$\begin{aligned} SNR &\geq r^*; \\ SNR &= \int_{v^* - \Delta v}^{v^* + \Delta v} \exp(-D(v)) dv / (\sigma_n \Delta v). \end{aligned} \quad (2)$$

Здесь SNR — отношение сигнал/шум в нормированном спектре $\tau(v)$; r^* — пороговое значение SNR ; Δv — полуширина окна усреднения; v^* — характерная длина волны в базовом спектре исследуемого вещества; σ_n — среднеквадратический шум в нормированном спектре.

В настоящей работе будем полагать SNR как отношение усредненного значения сигнала к усредненному значению шума на характерной длине волны. Значение r^* примем равным 5. Невыполнение условия (2) свидетельствует о высокой зашумленности экспериментального спектра и (или) о низкой концентрации вещества. В таком случае невозможно достоверно идентифицировать состав исследуемого объекта.

Для идентификации и восстановления концентрации вещества расчет концентрации (c_i) из уравнения (1) проводится несколько раз. По полученным данным определяется элемент базы, которому соответствует наибольшая концентрация. При выполнении условия (2) для данного элемента базы вещество полагается обнаруженным с рассчитанным значением концентрации. Затем соответствующий ему спектр из базы данных с поправкой на полученное значение концентрации удаляется из исследуемого экспериментального спектра согласно закону Бугера — Ламберта — Бера:

$$D(v) = D_s(v) - D_6(v)C/C_0,$$

где $D_s(v)$ — экспериментальный спектр смеси; $D_6(v)$ — спектр вещества из базы данных; C — расчетное значение концентрации; C_0 — концентрация вещества в спектре базы данных. После удаления спектра элемента из базы данных, вносящего наибольший вклад в исходный экспериментальный спектр, расчет концентраций повторяется.

В значительной степени чувствительность уравнения (1) к погрешностям в коэффициентах матрицы W и в правых частях уравнений определяет число обусловленности [12]

$$\text{cond}(W) = \|W\| \|W^{-1}\|,$$

где $\|W\| = \sqrt{\sum_{i,j} |a_{ij}|^2}$ — норма матрицы W .

Полагается [13], что для значения числа обусловленности более 1000 матрица плохо обусловлена; если $1 \leq \text{cond}(W) \leq 100$, то матрица считается хорошо обусловленной. Через значение числа обусловленности матрицы системы и погрешность измеряемых спектральных данных \tilde{D} можно выразить погрешность определения концентрации

$$\frac{\|\Delta C\|}{\|C\|} \leq \text{cond}(W) \frac{\|\Delta \tilde{D}\|}{\|\tilde{D}\|}. \quad (3)$$

Поскольку базовые спектры также получены экспериментально, существует погрешность задания коэффициентов матрицы W . В этом случае справедлива формула

$$\frac{\|\Delta C\|}{\|C + \Delta C\|} \leq \text{cond}(W) \frac{\|\Delta W\|}{\|W\|}, \quad (4)$$

где $\|\Delta W\|/\|W\|$ — погрешность исходных данных эталонных спектров. Соотношение (4) показывает, что чем больше число обусловленности, тем сильнее на решение влияет погрешность исходных данных. Таким образом, при восстановлении концентраций веществ возникает погрешность, которая будет тем больше, чем ниже обусловленность матрицы W .

Для созданной в настоящей работе базы данных ИК-спектров пропускания обусловленность матрицы системы составила значение $\text{cond}(W) = 33,77$, что соответствует критерию хорошей обусловленности матрицы.

Экспериментальные результаты и их анализ. В процессе экспериментальных исследований были зарегистрированы и проанализированы ИК-спектры паров тестовых веществ и полимеров, а также некоторых их смесей. Примеры полученных экспериментальных спектров приведены на рис. 3.

Для контроля получаемых результатов обработка данных проведена не только описанным методом, но и с помощью определения коэффициента корреляции Пирсона r [13, 14] экспериментального ($\tau_{\text{э}}$) и базового ($\tau_{\text{б}}$) спектров:

$$r = \frac{\sum_i (\tau_{\text{э}i} - \bar{\tau}_{\text{э}})(\tau_{\text{б}i} - \bar{\tau}_{\text{б}})}{\sqrt{\sum_i (\tau_{\text{э}i} - \bar{\tau}_{\text{э}})^2 (\tau_{\text{б}i} - \bar{\tau}_{\text{б}})^2}},$$

где $\bar{\tau}_{\text{э}}$, $\bar{\tau}_{\text{б}}$ — средние значения интенсивности ИК-спектров пропускания.

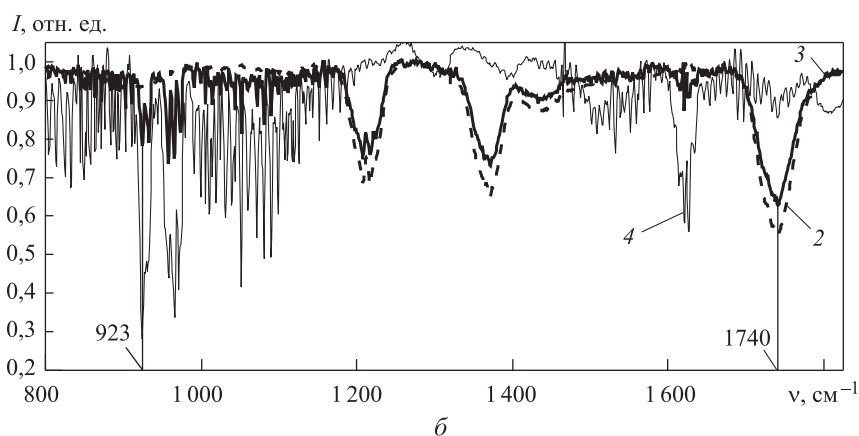
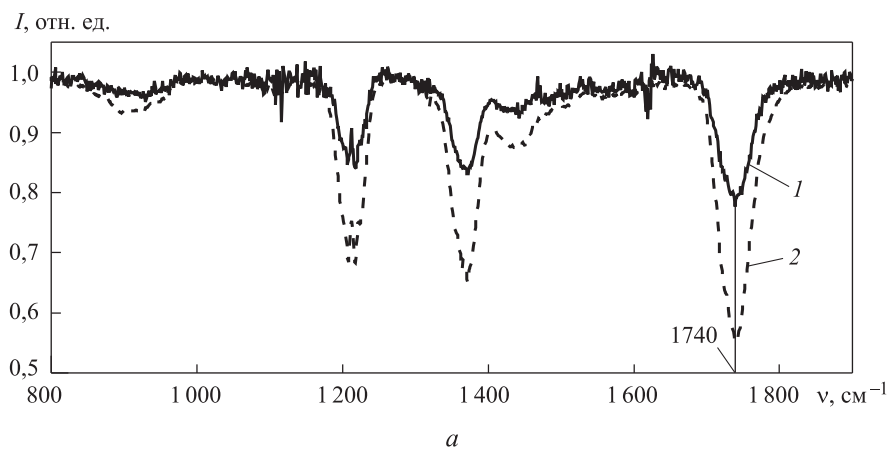


Рис. 3. ИК-спектры пропускания ацетона (а) и смеси паров ацетона с аммиаком (б):
 1 — экспериментальный спектр ацетона; 2 — спектр ацетона из базы данных; 3 — экспериментальный спектр смеси; 4 — спектр аммиака из базы данных

Расчетное значение концентрации ацетона в экспериментальном спектре $C = 64,07 \cdot 10^{-6}$ г/см³. Коэффициент корреляции со спектром базы данных $r = 0,969$. На характерной длине волны ацетона $\nu = 1740$ см⁻¹ отношение $SNR = 7,4$.

Результаты анализа экспериментального спектра смеси ацетона с аммиаком приведены в табл. 1.

Таблица 1

Результаты анализа экспериментального спектра смеси ацетона с аммиаком

Элемент базы спектров	Расчетное значение концентрации, 10^{-6} , г/см ³	Характерное волновое число ν , см ⁻¹	SNR на характерной длине волны	Достоверность обнаружения (согласно (2))
Ацетон	108,07	1740	12,25	Надежное
Этанол	0,64	—	0,01	Ложное
Аммиак	0,11	923	5,95	Надежное
Изопропанол	0,23	—	0,93	Ложное

Для рассматриваемого случая понадобилось проведение четырех серий расчетов основного компонента с последующим его удалением из экспериментального спектра, чтобы оценить состав смеси.

Для оценки точности восстановления концентрации по описанному методу был проведен эксперимент с тремя идентичными пленками полиэтилена. Сначала на трассу между блоком ККЛ и фотоприемником помещалась одна пленка толщиной 8 мкм и записывался ее спектр. Затем за ней помещалась вторая пленка такой же толщины, и регистрировался спектр уже двух пленок. Аналогично был записан спектр трех пленок.

При обработке полученных экспериментальных данных значения концентраций C (в данном эксперименте толщин пленок) должны составить $C_1 = C$, $C_2 = 2C$ и $C_3 = 3C$ соответственно.

Результаты количественного анализа и относительная погрешность расчетных значений концентраций приведены в табл. 2.

Таблица 2

Результаты количественного анализа и относительная погрешность расчетных значений концентраций (пленка полиэтилена)

Число пленок	Толщина пленки, мкм	Расчетное значение толщины пленки, мкм	Относительная погрешность восстановленной толщины δ , %	Оценка относительной погрешности расчетов (согласно (3))
1	8	7,870	1,62	1,69
2	16	13,251	17,18	1,27
3	24	20,233	15,67	1,13

В рамках анализа экспериментальных результатов было проведено сравнение значений восстановленных концентраций веществ, полученных предложенным методом, со значениями, определенными методом непосредственного абсорбционного спектрального анализа, расчетной формулой для которого является

$$C_m = \frac{D(\nu_0) \mu}{\sigma(\nu_0) l N_A}, \quad (5)$$

где C_m — массовая концентрация вещества, г/см³; ν_0 — опорное волновое число; μ — молярная масса вещества; $\sigma(\nu_0)$ — сечение поглощения; l — длина кюветы; N_A — число Авогадро.

Сечение поглощения для каждого вещества на опорной длине волны $\sigma(\nu_0)$ рассчитывалось на основе предварительных измерений спектров тестовых веществ в кювете, при контроле концентраций исследуемых веществ, обратным пересчетом по формуле (5).

Для ацетона и этанола проведен расчет концентраций по предложенному методу (C_2) и по формуле (5) (C_1), а также выполнен их сравнительный анализ. Зависимость $C_2(C_1)$ для этанола приведена на рис. 4.

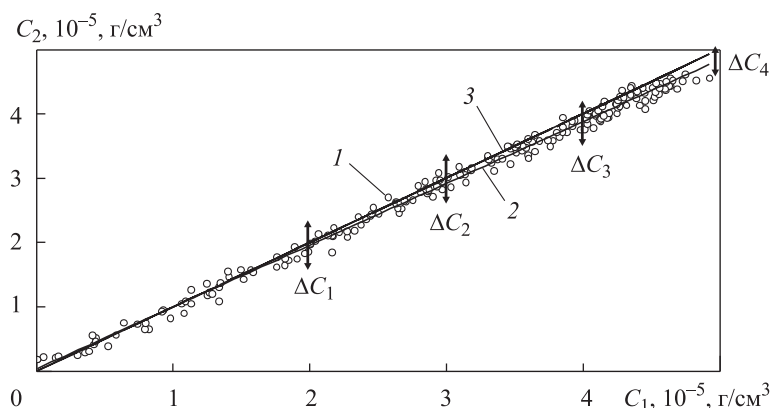


Рис. 4. Зависимость $C_2(C_1)$ для этанола (C_1, C_2 — концентрации, восстановленные согласно (5) и МНК в матричной форме):

1 — экспериментальные точки; 2 — реперная линия $C_1 = C_2$; 3 — линейная аппроксимация экспериментальных точек

Значения констант в выражении (5) для тестовых веществ:

– ацетон $\nu_0 = 1217 \text{ см}^{-1}$, $\mu = 58,080 \text{ г/моль}$, $l = 4,3 \text{ см}$;

– этанол $\nu_0 = 1065 \text{ см}^{-1}$, $\mu = 46,069 \text{ г/моль}$, $l = 4,3 \text{ см}$.

Среднеквадратичное отклонение экспериментальных точек от аппроксимирующей прямой для ацетона составило $\sigma = 0,101 \cdot 10^{-5} \text{ г/см}^3$, для этанола — $\sigma = 0,058 \cdot 10^{-5} \text{ г/см}^3$.

Разность расчетных значений концентраций C_1 и C_2 этанола при нескольких пробных значениях C_1 приведена ниже.

Разность расчетных значений концентраций C_1 и C_2 этанола

Пробное значение $C_1, 10^{-5}, \text{ г/см}^3$	2	3	4	5
ΔC	0,042	0,082	0,122	0,162

При концентрациях $C_1 \leq 2,39 \cdot 10^{-5} \text{ г/см}^3$ значения, рассчитанные по (5), попадают в доверительный интервал σ относительно результатов, полученных по предложенному методу анализа. С дальнейшим увеличением концентраций различия значений достигают 2σ . При $C_1 = (4...5) \cdot 10^{-5} \text{ г/см}^3$ наблюдается сильное поглощение падающего ИК-излучения. В этом случае концентрации, восстановленные согласно (5), попадают в доверительный интервал 3σ относительно результатов, рассчитанных по предложенному методу. Зависимость относительной погрешности расчета концентраций от C_1 приведена на рис. 5.

Наибольшая относительная погрешность δ восстановления концентраций наблюдается в диапазоне $C_1 < 1 \cdot 10^{-5} \text{ г/см}^3$, достигаемое максимальное значение $|\delta| = 8,68 \%$. При $C_1 > 1 \cdot 10^{-5} \text{ г/см}^3$ относительная погрешность возрастает с увеличением концентрации и достигает $3,23 \%$.

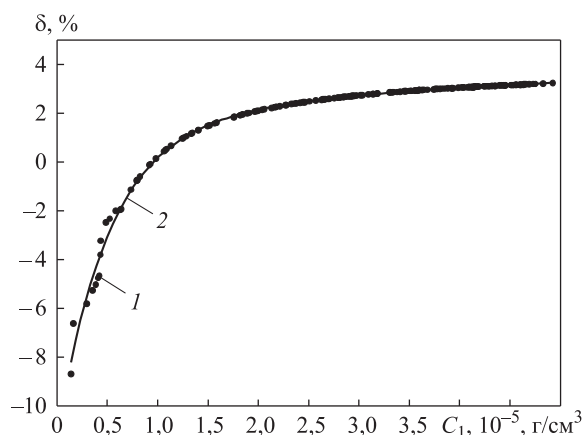


Рис. 5. Зависимость относительной погрешности расчета концентраций от C_1 :
 1 — расчетные значения относительной погрешности δ , %; 2 — линия аппроксимации расчетных значений относительной погрешности

Заключение. Предложен метод регистрации и анализа спектров пропускания веществ, полученных с использованием ККЛ. Метод регистрации спектров с помощью экспериментальной установки на основе ККЛ протестирован на нескольких низкомолекулярных веществах и полимерах. Метод анализа экспериментальных данных позволил идентифицировать и восстановить концентрации тестовых объектов как в случае чистых веществ, так и в случае их смесей.

Максимальная относительная погрешность расчета концентраций, полученная в эксперименте с пленками, составила 17,18 %.

На примере паров двух тестовых веществ (этанола и ацетона) был проведен сравнительный анализ предлагаемого метода анализа экспериментальных данных с методом непосредственного абсорбционного спектрального анализа. Показано, что в исследованном диапазоне концентраций разность значений, полученных указанными методами, не превышает 3σ . Наибольшая относительная погрешность восстановленных концентраций в данных экспериментах составила 8,68 %.

Следовательно, предлагаемый в работе метод регистрации и анализа экспериментальных спектров веществ, полученных с помощью ККЛ, может использоваться для идентификации и восстановления концентраций веществ дистанционными беспробоотборными методами.

ЛИТЕРАТУРА

1. Морозов А.Н., Светличный С.И. Основы фурье-спектрометрии. М.: Наука, 2014. 456 с.
2. Панорамный фурье-спектрометр ПХРДД-4 / И.С. Голяк, Ил.С. Голяк, А.О. Карфидов и др. // Приборы и техника эксперимента. 2014. № 6. С. 119–120.
3. Результаты экспериментальных исследований панорамного инфракрасного фурье-спектрометра / С.В. Башкин, А.Ю. Бойко, В.Н. Корниенко и др. // Вестник МГТУ им. Н.Э. Баумана. Сер. Естественные науки. 2016. № 2. С. 51–54.
 DOI: 10.18698/1812-3368-2016-2-51-64

4. *Identification of individual and few layers of WS₂ using Raman spectroscopy* / A. Berkdemir, H.R. Gutiérrez, A.R. Botello-Méndez, N. Perea-López, et al. // *Scientific Reports*. 2013. № 3. Art. 1755. DOI: 10.1038/srep01755
5. *Рамановский спектрометр на основе статического интерферометра Майкельсона* / Е.Б. Винтайкин, Н.С. Васильев, И.С. Голяк и др. // *Известия РАН. Энергетика*. 2016. № 6. С. 144–152.
6. *Thiol-thione tautomeric analysis, spectroscopic (FT-IR, Laser-Raman, NMR and UV-vis) properties and DFT computations of 5-(3-pyridyl)-4H-1,2,4-triazole-3-thiol molecule* / H. Gökce, N. Öztürk, Ü. Ceyla, Ye.B. Alpaslan, G. Alpaslan // *Spectrochimica Acta Part A: Molecular and Biomolecular Spectroscopy*. 2016. Vol. 163. P. 170–180. DOI: 10.1016/j.saa.2016.03.041
7. *External cavity-quantum cascade laser infrared spectroscopy for secondary structure analysis of proteins at low concentrations* / A. Schwaighofer, M.R. Alcaráz, C. Araman, H. Goicoechea, B. Lendl // *Scientific Reports*. 2016. No. 6. Art. 33556. DOI: 10.1038/srep33556
8. *Active and passive infrared spectroscopy for the detection of environmental threats* / E.R. Deutsch, P. Kotidis, N. Zhu, A.K. Goyal, et al. // *Proc. Advanced Environmental, Chemical, and Biological Sensing Technologies XI*. 2014. Vol. 9106. Art. 91060A. DOI: 10.1117/12.2058544
9. *Волков В.Г. Квантово-каскадные лазеры и их применение в системах обеспечения безопасности и связи* // *Системы управления, связи и безопасности*. 2016. № 1. С. 10–41.
10. *Козинцев В.И., Белов М.Л., Городничев В.А., Федоров Ю.В. Лазерный оптико-акустический анализ многокомпонентных газовых смесей*. М.: Изд-во МГТУ им. Н.Э. Баумана, 2003. 351 с.
11. *Канатников А.Н., Крищенко А.П. Линейная алгебра*. М.: Изд-во МГТУ им. Н.Э. Баумана, 2006. 387 с.
12. *Цей Р., Шумофон М.М. Число обусловленности матрицы как показатель устойчивости при решении прикладных задач* // *Труды ФОРА*. 2011. № 16. С. 61–67.
13. *Pearson K. Note on regression and inheritance in the case of two parents* // *Proc. Royal Society of London*. 1895. Vol. 58. P. 347–352. DOI: 10.1098/rspl.1895.0041
14. *Статистическая оценка вероятности правильного обнаружения веществ в ИК фурье-спектрометрии* / А.Н. Морозов, И.В. Кочкиков, А.В. Новгородская, А.А. Сологуб, И.Л. Фуфурин // *Компьютерная оптика*. 2015. Т. 39. № 4. С. 614–621. DOI: 10.18287/0134-2452-2015-39-4-614-621

Самсонов Дмитрий Артурович — студент кафедры «Физика» МГТУ им. Н.Э. Баумана (Российская Федерация, 105005, Москва, 2-я Бауманская ул., д. 5, стр. 1).

Табалина Анастасия Сергеевна — студентка кафедры «Физика» МГТУ им. Н.Э. Баумана (Российская Федерация, 105005, Москва, 2-я Бауманская ул., д. 5, стр. 1).

Фуфурин Игорь Леонидович — канд. физ.-мат. наук, доцент кафедры «Физика» МГТУ им. Н.Э. Баумана (Российская Федерация, 105005, Москва, 2-я Бауманская ул., д. 5, стр. 1).

Просьба сослаться на эту статью следующим образом:

Самсонов Д.А., Табалина А.С., Фуфурин И.Л. Метод регистрации и анализа спектров, полученных с использованием инфракрасного квантово-каскадного лазера // *Вестник МГТУ им. Н.Э. Баумана. Сер. Естественные науки*. 2018. № 4. С. 90–101. DOI: 10.18698/1812-3368-2018-4-90-101

METHOD OF REGISTRATION AND ANALYSIS OF SPECTRA OBTAINED BY INFRARED QUANTUM-CASCADE LASER

D.A. Samsonov

A.S. Tabalina

I.L. Fufurin

igfil@bmstu.ru; igfil@mail.ru

Bauman Moscow State Technical University, Moscow, Russian Federation

Abstract

The work introduces a method of registration and analysis of the transmission spectra obtained by Quantum Cascade Laser (QCL). We describe an experimental facility for registration of the IR transmission spectra using QCL and give examples of the obtained experimental spectra of test substances. We also deal with a method for identification and concentration of substances using experimental data. Furthermore, we estimate the error of concentration recovery of several test substances and compare the results obtained with the results of another method of spectral quantitative analysis. Results suggest that in the concentration range studied, the difference in the calculated values of concentrations does not exceed 3σ . Based on the studies carried out, a conclusion is made about the effectiveness of the proposed method of registering and analyzing the infrared transmission spectra for solving problems of remote identification and recovery of concentrations of various substances

Keywords

Infrared spectroscopy, laser infrared spectroscopy, least square method, quantum-cascade laser, identification, concentration recovery

Received 04.07.2017

© BMSTU, 2018

This work was supported by the Russian Foundation for Basic Research (grant no. 16-29-09625)

REFERENCES

- [1] Morozov A.N., Svetlichnyy S.I. *Osnovy fur'ye-spektroradiometrii* [Fundamentals of Fourier spectroscopy]. Moscow, Nauka Publ., 2014. 456 p.
- [2] Golyak I.S., Golyak I.S., Karfidov A.O., et al. Panoramic Fourier spectral radiometer PHRDD-4. *Pribory i tekhnika eksperimenta* [Instruments and Experimental Techniques], 2014, no. 6, pp. 119–120 (in Russ.).
- [3] Bashkin S.V., Boyko A.Yu., Kornienko V.N., et al. Experimental results of investigating panoramic Fourier transform infrared spectrometer. *Vestn. Mosk. Gos. Tekh. Univ. im. N.E. Baumana, Estestv. Nauki* [Herald of the Bauman Moscow State Tech. Univ., Nat. Sci.], 2016, no. 2, pp. 51–54 (in Russ.). DOI: 10.18698/1812-3368-2016-2-51-64
- [4] Berkdemir A., Gutiérrez H.R., Botello-Méndez A.R., Perea-López N., Elías A.L., Chen-Ing Chia, Wang B., Crespi V.H., Florentino L.-S., Charlier J.-C., Terrones H., Terrones M. Identification of individual and few layers of WS₂ using Raman spectroscopy. *Scientific Reports*, 2013, no. 3, art. 1755. DOI: 10.1038/srep01755

- [5] Vintaykin E.B., Vasil'yev N.S., Golyak I.S., et al. Raman Spectrometer Based on a Static Michelson Interferometer. *Izvestiya RAN. Energetika* [Proceedings of RAS. Power Engineering], 2016, no. 6, pp. 144–152 (in Russ.).
- [6] Gökce H., Öztürk N., Ceyla Ü., Alpaslan Ye.B., Alpaslan G. Thiol-thione tautomeric analysis, spectroscopic (FT-IR, Laser-Raman, NMR and UV-vis) properties and DFT computations of 5-(3-pyridyl)-4H-1,2,4-triazole-3-thiol molecule. *Spectrochimica Acta Part A: Molecular and Biomolecular Spectroscopy*, 2016, vol. 163, pp. 170–180. DOI: 10.1016/j.saa.2016.03.041
- [7] Schwaighofer A., Alcaráz M.R., Araman C., Goicoechea H., Lendl B. External cavity-quantum cascade laser infrared spectroscopy for secondary structure analysis of proteins at low concentrations. *Scientific Reports*, 2016, no. 6, art. 33556. DOI: 10.1038/srep33556
- [8] Deutsch E.R., Kotidis P., Zhu N., Goyal A.K., Ye J., Mazurenko A., Norman M., Zafiriou K., Baier M., Connors R. Active and passive infrared spectroscopy for the detection of environmental threats. *Proc. Advanced Environmental, Chemical, and Biological Sensing Technologies XI*, 2014, vol. 9106, art. 91060A. DOI: 10.1117/12.2058544
- [9] Volkov V.G. Quantum cascade lasers and their application in safety and communication systems. *Sistemy upravleniya, svyazi i bezopasnosti* [Systems of Control, Communication and Security], 2016, no. 1, pp. 10–41 (in Russ.).
- [10] Kozintsev V.I., Belov M.L., Gorodnichev V.A., Fedorov Yu.V. Lazernyy optiko-akusticheskiy analiz mnogokomponentnykh gazovykh smesey [Optoacoustic laser analysis of multi-component gas mixture]. Moscow, Bauman MSTU Publ., 2003. 351 p.
- [11] Kanatnikov A.N., Krishchenko A.P. Lineynaya algebra [Linear algebra]. Moscow, Bauman MSTU Publ., 2006. 387 p.
- [12] Tsey P., Shumofon M.M. Matrix condition number and as a stability characteristics in solving of applied problems. *Trudy FORA* [Works of the Adygheya Republic Physical Society], 2011, no. 16, pp. 61–67 (in Russ.).
- [13] Pearson K. Note on regression and inheritance in the case of two parents. *Proc. Royal Society of London*, 1895, vol. 58, pp. 347–352. DOI: 10.1098/rspl.1895.0041
- [14] Morozov A.N., Kochikov I.V., Novgorodskaya A.V., Sologub A.A., Fufurin I.L. Statistical estimation of the probability of the correct substance detection in FTIR spectroscopy. *Komp'yuternaya optika* [Computer Optics], 2015, vol. 39, no. 4, pp. 614–621 (in Russ.). DOI: 10.18287/0134-2452-2015-39-4-614-621

Samsonov D.A. — student, Department of Physics, Bauman Moscow State Technical University (2-ya Baumanskaya ul. 5, str. 1, Moscow, 105005 Russian Federation).

Tabalina A.S. — student, Department of Physics, Bauman Moscow State Technical University (2-ya Baumanskaya ul. 5, str. 1, Moscow, 105005 Russian Federation).

Fufurin I.L. — Cand. Sc. (Phys.-Math.), Assoc. Professor, Department of Physics, Bauman Moscow State Technical University (2-ya Baumanskaya ul. 5, str. 1, Moscow, 105005 Russian Federation).

Please cite this article in English as:

Samsonov D.A., Tabalina A.S., Fufurin I.L. Method of Registration and Analysis of Spectra Obtained by Infrared Quantum-Cascade Laser. *Vestn. Mosk. Gos. Tekh. Univ. im. N.E. Bauman, Estestv. Nauki* [Herald of the Bauman Moscow State Tech. Univ., Nat. Sci.], 2018, no. 4, pp. 90–101 (in Russ.). DOI: 10.18698/1812-3368-2018-4-90-101