

На правах рукописи

ШЕРИШОРИН Дмитрий Александрович

**МЕТОД И УСТРОЙСТВО КОНТРОЛЯ
ПРИСУТСТВИЯ ХИМИЧЕСКИХ ВЕЩЕСТВ И БИОЛОГИЧЕСКИХ ОБЪЕКТОВ В
РАСТВОРАХ ВЫСОКОЙ СТЕПЕНИ РАЗВЕДЕНИЯ**

05.11.13 – Приборы и методы контроля природной среды,
веществ, материалов и изделий

АВТОРЕФЕРАТ

диссертации на соискание ученой степени
кандидата технических наук

Тамбов 2004

Работа выполнена в Тамбовском государственном техническом университете на кафедрах «Материалы и технологии» и «Криминалистика и информатизация правовой деятельности»

Научный руководитель доктор технических наук, профессор
Чернышов Владимир Николаевич

Официальные оппоненты: доктор физико-математических наук,
профессор
Федоров Виктор Александрович

кандидат технических наук, доцент

Федюнин Павел Александрович

Ведущая организация

Всероссийский научно-исследовательский и проектно-технологический институт по использованию техники и нефтепродуктов в сельском хозяйстве (ВИИТиН), г. Тамбов

Защита диссертации состоится 27 декабря 2004 г. в ___ ч на заседании диссертационного совета Д 212.260.01 Тамбовского государственного технического университета по адресу: г. Тамбов, ул. Советская, 106, ТГТУ, большой зал.

Отзывы в двух экземплярах, скрепленные гербовой печатью, просим направлять по адресу: г. Тамбов, ул. Советская, 106, ТГТУ, ученому секретарю.

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке Тамбовского государственного технического университета.

Автореферат разослан ___ ноября 2004 г.

Ученый секретарь
диссертационного совета



А.А. Чуриков

Подписано к печати 24.11.2004
Гарнитура Times New Roman. Формат 60 × 84/16. Бумага офсетная.
Печать офсетная. Объем: 1,0 усл. печ. л.; 1,3 уч.-изд. л.
Тираж 100 экз. С. 819

Издательско-полиграфический центр ТГТУ
329000, Тамбов, Советская, 106, к. 14

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

Актуальность работы. Исследованию свойств растворов высокой степени разведения в настоящее время уделяется достаточно много внимания в различных областях (металлургия, микроэлектроника, медицина и др.) в связи с заметным изменением их свойств по сравнению с исходной средой.

Успехи ряда современных технологий высокого уровня в значительной степени связаны с использованием высокочистых материалов и технологических сред с примесями сверхмалых концентраций. Уровень примесей должен находиться за границей $10^{-12} \dots 10^{-28} \%$. Контроль таких концентраций затруднителен, поскольку известные способы химического анализа дают достоверные результаты до концентраций примерно $10^{-8} \%$, а наиболее чувствительный из методов спектроскопии – резонансно-ионизационный позволяет определять концентрации примесей до $10^{-17} \%$.

Следует отметить, что необходимость контроля концентрации может быть и неоправданной, поскольку существенное изменение свойств может быть связано не с концентрацией примесей, а со структурными изменениями среды, возникшими под воздействием примеси. Такие изменения в некоторых случаях могут сохраняться как при чрезвычайно малых концентрациях, так и в отсутствие самой примеси. Следует отметить, что вводимые или выводимые примеси в растворы высокой степени разведения инструментально могут и не обнаруживаться. Вместе с тем их влияние в последующем косвенно устанавливается по ряду признаков и оказывается существенным. Влияние структурных изменений должно учитываться ввиду различного функционирования биологических объектов, структурные изменения могут влиять на экологическую среду, менять техпроцессы. Следует рассматривать общие характеристики структуры, обуславливающие свойства раствора высокой степени разведения как целого объекта исследования.

Цель работы. Разработка нового метода обнаружения химических веществ и биологических объектов в растворах высокой степени разведения на основе контроля остаточных воздействий на исследуемую среду и их идентификации по взаимодействию с излучением, содержащим энергию с параметрическими спектрами определяемых химических веществ или биологических агентов.

Для достижения поставленной цели необходимо решение следующих задач:

- разработать физико-математическую модель среды, описывающую влияние растворяемого объекта на топологическую и энергетическую структуру растворов высокой степени разведения;
- создать физико-математическую модель, описывающую взаимодействие раствора высокой степени разведения с многопараметрическим электромагнитным потоком;
- разработать новый метод обнаружения и идентификации химических веществ и биологических агентов в растворах высокой степени разведения на основе созданных моделей;
- разработать устройство, реализующее предложенный метод обнаружения химических веществ и биологических объектов в растворах высокой степени разведения и экспериментальное подтверждение его работоспособности.

Предмет исследований. Методы и средства обнаружения и идентификации химических и биологических объектов в растворах высокой степени разведения по структурным изменениям среды. Результаты исследований могут найти применение при контроле и мониторинге окружающей среды, в технологиях химического синтеза высокочистых материалов, в нанотехнике, медицине и в различных других областях.

Методы и методики исследования. Результаты исследований, включенные в диссертацию, базируются на теоретических основах физики нелинейных сред, математическом моделировании, основах интегральных полупроводниковых технологий, физическом эксперименте, а также на экспериментальных исследованиях, проведенных на кафедре «Материалы и технологии» ТГТУ.

Научная новизна диссертационной работы заключается в разработке: физико-математической модели среды, описывающей влияние растворяемого объекта на топологическую и энергетическую структуру растворов высокой степени разведения; физико-математической модели, описывающей взаимодействие раствора высокой степени разведения с многопараметрическим электромагнитным потоком; нового метода обнаружения и идентификации химических веществ и биологических агентов в растворах высокой степени разведения на основе созданных моделей; устройства, реализующего предложенный метод обнаружения химических веществ и биологических объектов в растворах высокой степени разведения.

Практическая ценность работы заключается в том, что на основе проводимых исследований создан метод и устройство обнаружения и идентификации, позволяющие увеличить достоверность контроля свойств широкого класса химических веществ и биологических объектов в лабораторных и промышленных условиях. Показана возможность оперативного обнаружения остаточных воздействий на исследуемую среду со стороны химических веществ и биологических агентов и их идентификации.

Апробация работы. Основные научные и практические результаты исследований по теме диссертации докладывались на VI Международной научно-практической конференции (Пенза, 2003); VIII Международной научно-технической конференции «Проблемы машиностроения и технологии материалов на рубеже веков» (Пенза, 2003); III Международной конференции «Микромеханизмы пластичности, разрушения и сопутствующих явлений» (МРФР) (Тамбов, 2003); IV Международной конференции «Актуальные проблемы современной науки» (Самара, 2003); VI Международной научно-практической конференции «Экономика природопользования и природоохраны» (Пенза, 2003); V Международной теплофизической школе «Теплофизические измерения при контроле и управлении качеством» (Тамбов, 2004).

Публикации: по теме диссертации опубликовано 9 научных работ.

Структура работы. Диссертация состоит из введения, четырех глав и заключения, содержит 117 страниц, включая 11 рисунков, 4 таблицы, 88 наименований используемых источников и приложения.

СОДЕРЖАНИЕ ДИССЕРТАЦИИ

Во введении обоснована актуальность темы, сформированы цели и задачи работы. Раскрыты научная новизна и практическая ценность, приведены результаты апробации и реализации работы.

В первой главе приведен обзор и анализ существующих методов контроля и измерительных средств обнаружения и идентификации химических и биологических объектов в растворах высокой степени разведения.

Используемые химические методы анализа растворов химических веществ в большинстве случаев предполагают идентификацию химического вещества в растворе путем подбора соответствующих реактивов и проведение качественных реакций с последующим проведением химической реакции для определения количества идентифицированного вещества. Они как правило, требуют значительных временных затрат, сложны при осуществлении и позволяют определять концентрации в пределах 10^{-8} моля.

Распространены методы определения химического состава и строения вещества по их спектрам. Например, резонансно-ионизационная спектроскопия позволяет решать аналитические задачи определения концентрации в пределе 10^{-17} %. Однако, даже такая высокая чувствительность недостаточна при контроле растворов высокой степени разведения ($>10^{-17}$ %), поскольку физические свойства растворов в большей степени определяются не столько концентрацией химических веществ или биологических объектов, сколько структурными изменениями в среде, возникшими под их воздействием.

В результате проведенного анализа определены цели и задачи исследования:

- разработать физико-математическую модель среды, описывающую влияние растворяемого объекта на топологическую и энергетическую структуру растворов высокой степени разведения;
- создать физико-математическую модель, описывающую взаимодействие раствора высокой степени разведения с многопараметрическим электромагнитным потоком;
- разработать новый метод обнаружения и идентификации химических веществ и биологических агентов в растворах высокой степени разведения на основе созданных моделей;
- разработать устройство, реализующее предложенный метод обнаружения химических веществ и биологических объектов в растворах высокой степени разведения и экспериментальное подтверждение его работоспособности.

Во второй главе приведены результаты разработки физико-математической модели поведения примесей малых концентраций в жидких средах.

Предлагаемая модель предполагает рассмотрение энергетического и топологического состояния структуры окрестности примеси (растворяемого объекта или компонента, элемента и др.) в растворе как систему квантовых объектов, а также механизм формирования структурных изменений среды под воздействием растворяемого объекта.

Растворяемые объекты разнообразны по составу, структуре и взаимодействию с растворяющей средой. В данном случае для рассмотрения в качестве среды выбрана вода, а растворяемого объекта (или

примеси) – полупроводники, поскольку они наиболее изучены и удобны из-за известных энергетических взаимодействий на границе раздела. Исходная среда (вода) имеет собственную структуру, характеризующую наличием свободных молекул, случайных ассоциаций.

Для получения предварительных оценочных параметров исходную среду анализировали как квазистационарную систему из свободных молекул и случайных ассоциаций со временем жизни $10^{-5} \dots 10^{-8}$ с. Считали, что между ними существует энергетический барьер величиной более $E_t = kT$. В этом случае поверхность образования постоянно находится в возбужденном состоянии за счет постоянной бомбардировки свободными молекулами и имеет тенденцию к сокращению с последующим разрывом и в конечном итоге переходом молекул с поверхности в свободное состояние. Энергию связи возбужденных состояний принимали в пределах 20 ... 40 мэВ, ориентируясь на модель молекулярного кристалла. Искли такой размер D_1 образований, при котором их можно было рассматривать как квантовую яму (КЯ) размером W (рис. 1), имеющую разрешенные энергетические уровни, соответствующие энергии инфракрасного диапазона, в котором предположительно и находятся энергетические характеристики объекта, например, в уже существующих диагностических устройствах.

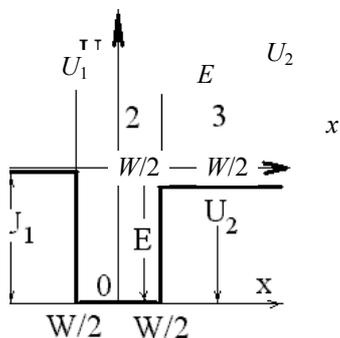


рис. 1 Геометрические параметры квантовой ямы

Геометрические параметры КЯ рассчитывали с привлечением уравнения Шредингера из соображений того, что атомные возбужденные состояния (экситоны, поляритоны и др.) и электроны играют существенную роль в устойчивости кластеров

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\psi'' + (U(x) - E)\psi = 0, \quad (1)$$

где \hbar – волновая постоянная Планка; m – масса частицы; E – полная энергия частицы; ψ – волновая функция; U – потенциальная энергия.

Расчет, в качестве примера, проводили для экспериментальных значений энергий возбужденных состояний, принятых в диапазоне от 20 до 140 мэВ для систем, образованных в исходной среде. Для каждой энергии E_1 , получали несколько значений величины образований. Результаты приведены в табл. 1.

Расчетные данные в таблице приведены для ограниченного дискретного ряда энергий рассматриваемого диапазона, и уже это показывает широчайшие возможности существования связанных состояний, более устойчивых в сравнении с тепловым фоном.

1 Расчетные значения ширины КЯ, W

E_1 , мэВ							
1							
2	174	82,	65,	57,	50,	40,	28,
3		121	100	86	79	74	60

Наиболее распространенным значением энергии в виде связанного состояния является величина 40 мэВ, полученная экспериментально. Для этой величины может быть выбрано значение ширины квантовой ямы порядка 40 нм, которое, по сути, минимизирует тепловые разрушения молекулярных структур среды. Расчет распределения энергетических уровней для ямы с такими параметрами дает ряд $E_j \rightarrow 40, 360, 640, 1000$ мэВ. Показано что, наличие устойчивых уровней в рассматриваемой среде можно установить при условии, когда энергия разрешенных квантовых уровней будет удовлетворять соотношению

$$W_n = \frac{\pi n - \left(\sqrt{\frac{E_n}{U_1}} + \sqrt{\frac{E_n}{U_2}} \right)}{\sqrt{\frac{2mE_1}{\hbar^2}}}, \quad (2)$$

E_1 – энергия на основном уровне; $U_{1,2}$ – потенциальная энергия барьеров; E_n – энергия на n основном уровне; $n = 1, 2, \dots$ – нумерует разрешенные состояния.

Учитывали, что выбранный растворимый объект – кремний монокристаллический n -типа с невысокой концентрацией основных носителей при контакте с выбранной средой (водой) будет образовывать инверсионный слой.

Энергетическую структуру в приграничной области для этого случая можно представить в виде треугольной ямы со стороны кремния. Если принимать дно такой ямы величиной, равной ширине запрещенной зоны, то топологическая глубина инверсионного слоя по расчетам будет находиться в пределах 20 ... 40 нм. Расчетный граничный размер примеси, при котором ее можно рассматривать как прямоугольную квантовую яму, приведен для кремния и некоторых других систем в табл. 2. За граничный размер примеси принимали величину, при которой устойчивыми оказывалось не менее трех энергетических уровней.

Область барьера примеси со средой рассматривали как контакт атома кремния и поляризованной молекулы воды, ориентированной кислородом относительно кремния. Это состояние на границе позволяет определить ее как высокий барьер шириной порядка 1 нм (размер порядка межатомного расстояния). Барьер можно рассматривать как связанное состояние на дне треугольной ямы со стороны кремния.

Предполагали влияние кремния на поверхностный слой воды размером в несколько молекулярных слоев весьма значительным. В этом случае, его (приповерхностный слой воды) можно рассматривать как аналогию твердого состояния воды со значительно измененной (в сравнении с объемом) структурой.

2 Параметры потенциальных ям с числом энергетических уровней

Материал	Параметры потенциальной ямы			Число энергетических уровней n
	U , эВ	E , эВ	W , нм	
Жидкость (лед)	1,8	40	40	6
Кремний $n-p-n$	0,9			3
Арсенид галлия $n-p-n$	1,6			6
SiO ₂ -Si-SiO ₂	11			15

В энергетическом отношении этот слой, по-видимому, правомерно рассматривать как треугольную яму такой же глубины, как и в кремнии (сшивка граничных условий), но с отрицательным зарядом (несимметричное состояние).

Последовательное уменьшение кремниевой частицы при определенном критическом размере приведет к преобразованию треугольной ямы в прямоугольную со сменой проводимости во всем объеме частицы (рис. 2, а) и далее к увеличению положительного заряда поверхности. Это приведет к более сильной поляризации поверхностного слоя воды с более определенной границей на внешней ее стороне. Такое состояние можно интерпретировать как отрицательно заряженную прямоугольную яму, заряд которой необходимо компенсировать за счет поляризации следующего слоя воды (рис. 2, б). При этом организуется барьер вода – вода с плавно уменьшающимся зарядом по оси x . В последующем этот объем может сформироваться в треугольную и далее в прямоугольную яму.

Таким образом, уменьшение частицы кремния приведет к формированию в направлении от примеси (по оси x) цепочки квантовых ям 1, 3, 5 и т.д., разделенных высоким барьером 2 {как состояние хемосорбции – Si-(OH)₂} и барьером 4 (как барьер между противоположно поляризованными областями).

При решении волнового уравнения такую последовательность рассматривали в виде антисимметричной задачи для областей 1, 3 (различные знаки) и симметричной в случае 1, 5 (одинаковые знаки). Качественное рассмотрение изменений волновой функции для низшего состояния предполагает наличие устойчивых уровней в области примеси 1 и области 5.

В отношении величины энергии это не будут одинаковые уровни, поскольку ширина ям здесь существенно отличается (в области 1 ширина значительно меньше). Если учесть, что дискретные уровни энергии частицы определяются соотношением

$$E_n = \frac{\hbar^2}{2m} \left[\frac{\pi}{W} \right]^2 n^2, \text{ эВ.} \quad (3)$$

В этом случае можно считать, что $E_n \sim n^2/W^2$. Соответственно в области 5 (рис. 2, б) величина энергии составит $0,25E_n$.

В последующем уменьшении диаметра растворяемой частицы примеси будет давать увеличение некомпенсированного внутренней структурой заряда. При этом поляризующее действие примеси на приграничный слой воды 3 будет увеличиваться и выразится в увеличении отрицательного заряда, что соответственно увеличит и энергию E_n в области 5. Одновременно, уменьшение примеси приводит к размытию рассчитанных разрешенных энергетических уровней, эти уровни вытесняются в сторону увеличения энергий и при достижении W размера, соизмеримого с шириной поверхностного слоя, часть уровней становятся общими между центральной и боковыми ямами. При достижении момента, когда квантованная энергия не может находиться в центральной яме, общие уровни, соответствующие примеси, остаются только в боковых ямах. Поскольку уровни в этой потенциальной

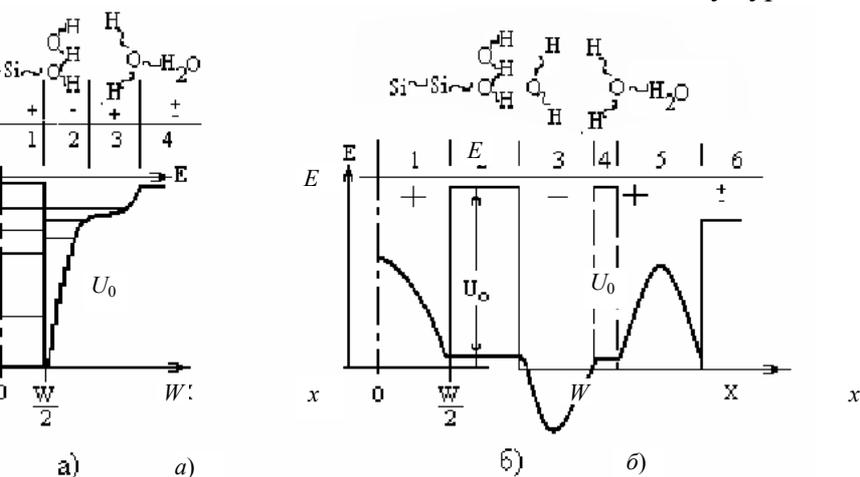


Рис. 2 Энергетические соотношения в окрестности растворяемой примеси:

а – критических размеров; *б* – закритических размеров

соответствуют энергетике растворяемого вещества, то и ширина полученной ямы будет близка к значению их ряда, полученного из решения уравнения Шредингера. Таким образом, достижение раствором состояния высокой степени разведения приводит к замене частицы химического вещества на возбужденные состояния среды, имеющие свойства, схожие с энергетическими характеристиками реального растворяемого вещества.

Кроме того, было принято, что спектр возбужденных состояний рассчитанных образований отражает определенные энергетические характеристики растворяемого объекта, достаточные для определения этого объекта при анализе такого спектра.

Соответственно можно констатировать фактический резонансный перенос набора дискретных энергий, отражающих структурное состояние примеси (в данном случае кремния), в квантовые ямы воды.

В третьей главе приведены модельные представления структурного состояния растворов высокой степени разведения, являющиеся теоретическим обоснованием метода обнаружения и идентификации растворяемого объекта. Показана последовательность практической реализации метода, приведены результаты экспериментальных исследований.

В приведенной выше физико-математической модели описания энергетического состояния растворов высокой степени разведения однозначно определяются системой КЯ, отражающих в наборе энергетических возбуждений волновые характеристики растворяемого объекта (примеси).

Основой предложенного метода является создание условий резонансного прохождения через КЯ тестируемого раствора эталонного электромагнитного когерентного потока с волновыми характеристиками, соответствующими идентифицируемой примеси (объекту). При этом эталонный электромагнитный (световой) поток выступает в качестве многопараметрического генератора, а тестируемый раствор как усилитель. Получение коэффициента прохождения, близкого к единице (или увеличение прозрачности раствора в сравнении с исходной средой), должно показывать наличие воздействия на среду со стороны примеси, соответствующей эталону.

Энергетическое состояние в окрестности примеси раствора высокой степени разведения в соответствии с принятой моделью схематически в виде системы КЯ (яма в яме) представлено схемой (рис. 3) для раствора меди в водном растворе.

По центру располагается область 4, ширину M которой можно принять 1 ... 2 нм и которую можно рассматривать как связанное состояние на базе примеси (в данном случае меди). Величину W отрицательной окружающей области 3 можно считать 3 ... 5 нм. Ширину L КЯ 2 определяли в нескольких десятках нанометров. Она, в свою очередь, граничит с треугольной ямой 1.

В соответствии со знаками в КЯ волновая функция для нижнего состояния в области 3 отрицательна (антисимметричная задача), а для слоя 2 – положительна (симметричная задача). Положительные значения волновой функции оказываются и для области 4, поскольку из-за малых размеров примеси нижние уровни выдавливаются в верхнюю яму 2. Таким образом, нижние и верхние уровни примеси и такие же уровни, созданные под воздействием примеси, сравниваются по диапазону энергии возбужденных состояний, но различаются по другим параметрам. Таким образом, волновые функции примеси фактически локализованы в модельной среде (в данном случае – воде).

Это действительно и для предельного случая, когда происходит замена примеси некоторым локализованным связанным состоянием, в котором роль положительной составляющей играет вакансия.

Качественная оценка волновой функции для области 4 показывает малую устойчивость нижнего состояния, что можно определять как диссоциативное состояние. Кроме того, особенностью является также малое время жизни возбужденных состояний из-за малой ширины ямы и, соответственно, малой эффективной массы частиц в этой области.

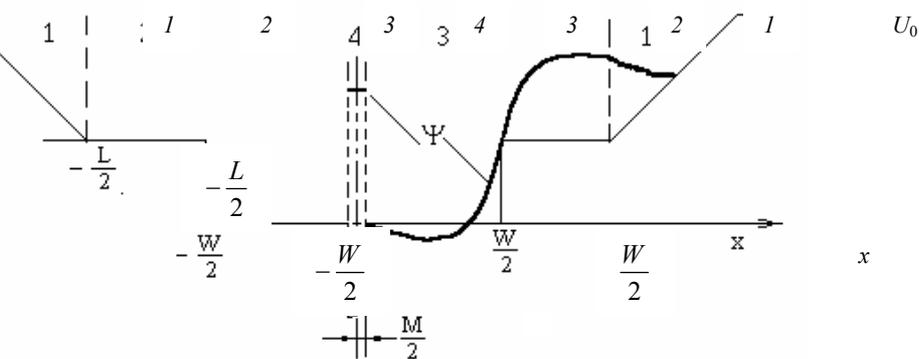


Рис. 3 Структурное состояние меди в растворе высокой степени разведения (вода); за нулевой уровень волновой функции принято дно квантовых ям

Аналогичные возбужденные состояния (уровни) в области 2 в отличие от области 4 будут иметь большее время жизни (больше эффективная масса частиц). По этой причине устойчивые уровни в этой области будут играть роль второй долины, заполняемой тунелированием и увеличивающей устойчивость верхних уровней примеси. В этих условиях легче создать инверсию заселенностей верхних уровней, а соответственно создать состояние, называемое эксимерами.

При этом коэффициент поглощения α может быть отрицательным в соотношении (закон линейного поглощения Бугера – Ламберта – Бэра)

$$I(x) = I_0 e^{-\alpha x},$$

где I_0 интенсивность при $x = 0$.

При воздействии монохроматическим электромагнитным потоком соотношение примет вид

$$I(\nu, x) = I(\nu, 0)e^{-\alpha(\nu)x},$$

$\alpha(\nu)$ зависящий от частоты коэффициент поглощения.

Для рассматриваемого случая при чрезвычайно малом количестве примеси создание подобной ситуации затруднительно, поэтому предложено одновременное воздействие многоволновым когерентным электромагнитным потоком с набором частот ν_m , близкими к примеси.

При воздействии многочастотным (многопараметрическим) электромагнитным потоком соотношение примет вид

$$I(\nu_m, x) = I(\nu_m, 0)e^{-\alpha(\nu_m)x};$$

$$\alpha(\nu_m) = [N_i - (g_i / g_k)N_k] \sigma(\nu_m),$$

N_i , N_k – плотности населенностей на энергетических уровнях E_i , E_k ; ν_m – частота перехода $E_i - E_k$; $\sigma(\nu_m)$ – сечение перехода ($E_i - E_k$) для ν_m ; g_i и g_k – статистические веса населенностей на нижнем и конкретном энергетических уровнях.

Таким образом, совокупность коэффициентов поглощения для каждой из ν_m определяет коэффициент поглощения спектра рассматриваемых частот примеси, причем при близких значениях энергетических уровней E_i , E_k с энергией возбуждающего спектра коэффициент поглощения всего спектра становится отрицательным и спектр усиливается по всем частотам.

Наиболее близкими свойствами обладает поток когерентного излучения, создаваемый в квантовых оптических генераторах с участием примеси, которая и является растворяемым компонентом раствора высокой степени разведения (в данном случае – медь), а соответственно, искомой в данной среде.

В квантовом генераторе, например на парах меди, усиливается наиболее широкий излучательный диапазон (в данном случае 630 нм с шириной полосы 4 ... 5 нм), другие моды (в частности 360 ... 370 нм) обладают меньшей интенсивностью (амплитудой), а начиная с 240 ... 260 нм становятся трудноопределяемыми инструментально. Следует считать, что эти моды соответствуют определенным устойчивым излучательным диапазонам меди, хотя и связаны с конструктивными особенностями и размерами рабочего тела оптического квантового генератора. Приведенная выше физико-математическая модель взаимодействия примеси со средой и внешним электромагнитным многопараметрическим потоком позволила предложить метод обнаружения и идентификации химических веществ и биологических объектов в растворах высокой степени разведения по структурным изменениям среды.

Предлагаемый метод осуществляется следующим образом.

Производят подготовку среды-носителя информации для исследуемого образца путем устранения в ней предыдущего случайного энергетического воздействия, например, или нагревом до температуры кипения, или дистиллированием, или воздействием излучения. В качестве жидкой среды-носителя информации может использоваться, например вода высокой очистки, спирт и др.

На основе среды-носителя готовят рабочий образец путем переноса энергетических характеристик с исследуемого объекта в среду-носитель. Например, помещением исследуемого объекта непосредственно в среду-носитель, или созданием раствора высокой степени разведения путем многократных разведений, или расположением исследуемого объекта в непосредственной близости со средой-носителем.

Создают поток когерентного излучения со спектральными характеристиками, отражающими определенный ряд устойчивых атомных или кластерных квантовых уровней тестируемого химического вещества или биологического агента, например, лазерный луч, возникающий в резонаторе с использованием паров конкретного объекта, например, медь, золото, как предполагаемого идентифицируемого объекта воздействия на исследуемую среду.

Поток когерентного излучения со спектральными характеристиками предполагаемого объекта воздействия пропускают через образец среды-носителя, не подвергавшейся энергетическому воздействию.

Регистрируют полосу поглощения спектра лазерного луча веществом-носителем, а в полосе поглощения определяют положение максимума интенсивности, пиковую интенсивность, полуширину полосы поглощения.

Поток когерентного излучения со спектральными характеристиками предполагаемого объекта воздействия пропускают через рабочий образец (раствор).

Регистрируют полосу поглощения рабочим образцом в пределах окрестности частот используемого источника.

В полосе поглощения рабочего образца определяют положение максимума интенсивности, пиковую интенсивность, полуширину полосы поглощения.

Сравнивают частотное положение пиковой интенсивности и ее величину, полуширину полосы поглощения образца без энергетического воздействия и рабочего образца (с энергетическим воздействием).

В случае одновременного увеличения пиковой интенсивности и уменьшения полуширины полосы поглощения в рабочем образце в сравнении со средой без энергетического воздействия фиксируют наличие структурных изменений на исследуемую среду (рабочий образец) со стороны определяемого химического вещества или биологического объекта.

Таким образом, можно считать, что в рассматриваемых средах формируются образования, связанные с примесью, которые несут информацию о примеси.

В четвертой главе приведены созданные методики и результаты экспериментов по проверке предлагаемого метода обнаружения и идентификации примеси в растворах высокой степени разведения, приведено описание разработанных устройств, проведена проверка достоверности модели.

Методика резонансного взаимодействия электромагнитного когерентного потока с кластерной структурой растворов высокой степени разведения разработана на базе устройства, блок-схема которого приведена на рис. 4.

Источником света служили лазеры 2 марки ЛЖИ-501 с растворами красителей родамина незамещенного ДКЭ (ТУ6-14-40-13.196-80), 6Ж ДКЭ (ТУ 6-14-40-13.99-76), СДКЭ (ТУ6-14-40-13.151-79), оксазина 17ДКЭ (ТУ 14-40-13.149-79); накачка осуществлялась лазером 1 ЛГИ-101 на парах меди. Исследования вели в диапазоне 530 ... 710 нм. Для контроля спектральных характеристик на выходе применяли устройство 3 спектрометра С-302 и гониометр 5 типа Г-5. Кроме того, в некоторых случаях источником света служила лампа холодного свечения с температурой 4800 К, отдельные спектральные линии выводились спектрометром. После делителя 4 на пути лучей устанавливали ампулы или кюветы с дистиллированной водой 8 и раствором высокой степени разведения 7, интенсивность проходящего света оценивалась диодными матрицами высокой степени разрешения 9, данные оцифровывались 10, суммировались и обрабатывались 11, результат выводился в виде графика на ПК 12.

Разработанная методика заключается в создании когерентного многопараметрического электромагнитного потока, использующего источники 1 или 2, выделении спектральных характеристик спектрометром 3, разделении полученного электромагнитного пучка на две составляющие делителем 4, пропускании через исследуемые среды 7, 8, интенсивность электромагнитных потоков на выходе измеряется фотоприемниками 9, воспринимается АЦП 10 и обрабатывается процессором 12.

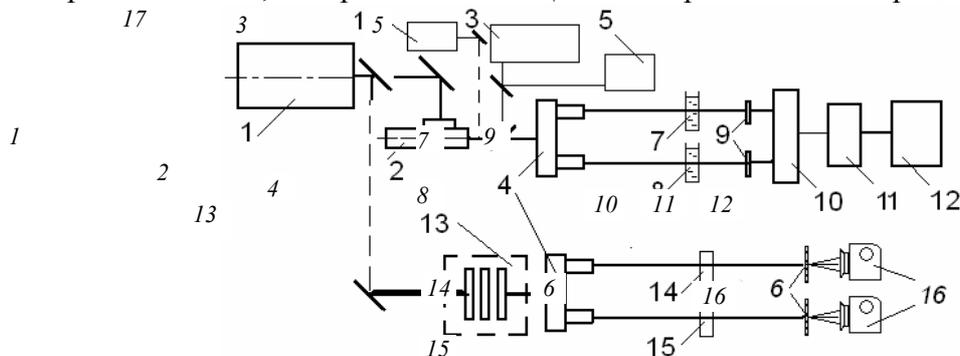


Рис. 4 Схема установки спектрального анализа:

1 – лазер накачки; 2 – лазер с переменной длиной волны; 3 – спектрометр;

4 – делитель; 5 – гониометр; 6 – дифракционная решетка; 7 – кювета с исследуемым раствором; 8 – кювета с дистиллированной водой; 9 – фотоприемники; 10 – АЦП; 11 – процессор; 12 – компьютер; 13 – система диафрагм; 14 – исследуемый кристалл; 15 – эталонный кристалл; 16 – фотокамера; 17 – ртутная лампа

Разработана аналогичная методика взаимодействия электромагнитного когерентного потока с твердыми растворами высокой степени разведения. Результат взаимодействия фиксируется в виде голографической картины, полученной на дифракционной решетке 6 при помощи цифровой матрицы, либо на фотоматериале.

Разработанные установка и методика использовались для экспериментальной проверки предложенного метода в отношении точности и достоверности.

Проводили идентификацию примеси в условиях создания искусственных помех.

Определяли энергетическое воздействие на среду искомого элемента в присутствии подобного воздействия со стороны других элементов. В этом случае водную среду подвергали двойной дистилляции в вакууме, размещали под защиту многослойного экрана, имеющего дисперсный пористый слой, и использовали как образец без энергетического воздействия (исходная среда). На основе исходной среды готовили раствор высокой степени разведения с применением трех химических элементов (медь, алюминий и никель) путем размещения в среде гранулы по две в каждой (вес гранулы – 0,4 г) и выдерживали их с периодическим встряхиванием в течение 24 часов. Снимали спектральную характеристику лазера ЛГИ 101 на парах меди с использованием механической развертки дифракционной решетки в спектрометре С-302, регистрировали интенсивность устройством, в котором в качестве датчиков использовали диодные матрицы высокого разрешения. Длину волны в максимуме интенсивности определяли в гониометре Г-5. Она составила 0,5782 мкм (5782 нм). Зависимость интенсивности от длины волны показана на рис. 5, а кривая 1.

Выделяли каждую из длин волн лазерного луча, пропускали через кювету с исходной средой (рис. 5, а кривая 2), с раствором высокой степени разведения никеля–алюминия (рис. 5, б), меди–алюминия (рис. 5, в), меди–никеля (рис. 5, г), регистрировали интенсивность; зависимость интенсивности от длины волны. Данные в графическом виде представлены на рис. 5.

В полосе поглощения определяли положение максимума интенсивности, пиковую интенсивность, полуширину полосы поглощения, смещение положения максимума на кривых для каждого из проведенных экспериментов. Сравнивали указанные характеристики, анализировали результаты. Как следует из рис. 5 положение максимума интенсивности сохраняется для всех случаев. Наибольшая полуширина полосы поглощения и наименьшая интенсивность в положении максимума соответствовали исходной среде и раствору высокой степени разведения никеля–алюминия. Полуширина спектральной линии лазерного луча и полуширина полосы поглощения для растворов высокой степени разведения меди–никеля и меди–алюминия оказываются близкими, интенсивность в положении максимума мало отличается. Таким образом, близость спектральной характеристики лазерного луча, полученного на парах меди, и спектральной характеристики в полосе поглощения раствора высокой степени разведения меди дает основание идентифицировать энергетическое воздействие меди на исследуемую среду даже в присутствии подобного воздействия со стороны других элементов.

Описанные исследования позволяют достоверно определять и идентифицировать энергетическое воздействие какого-либо химического элемента или биологического объекта на исследуемую среду как по отдельности, так и в присутствии

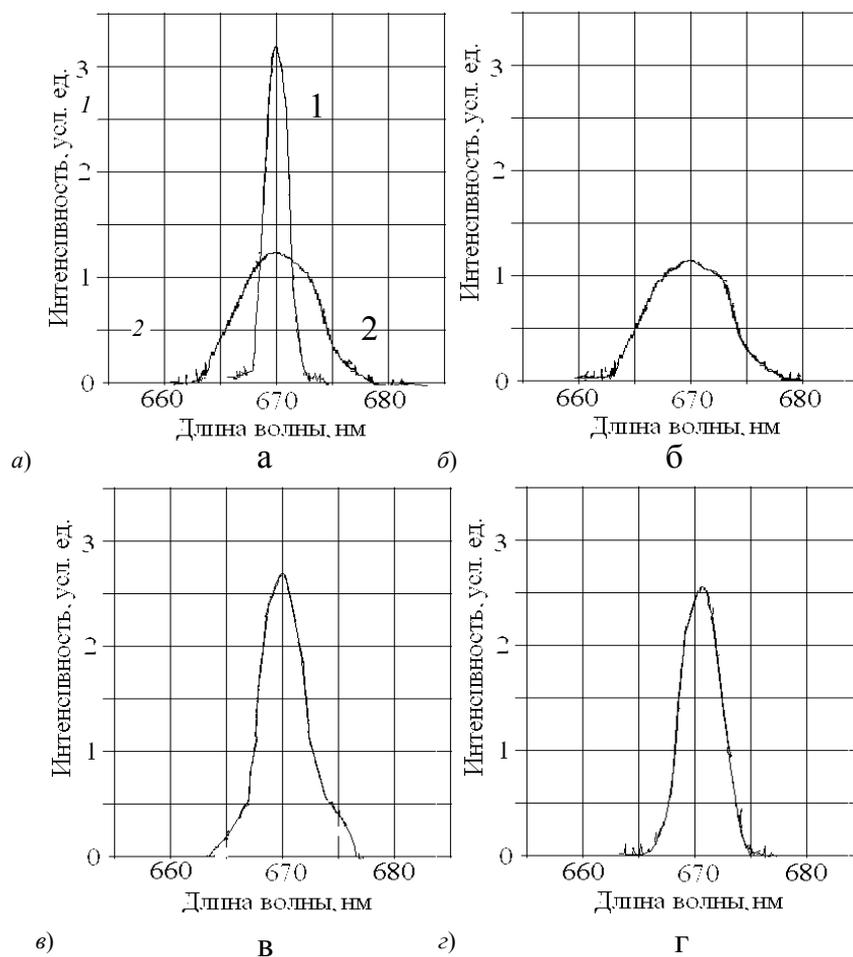
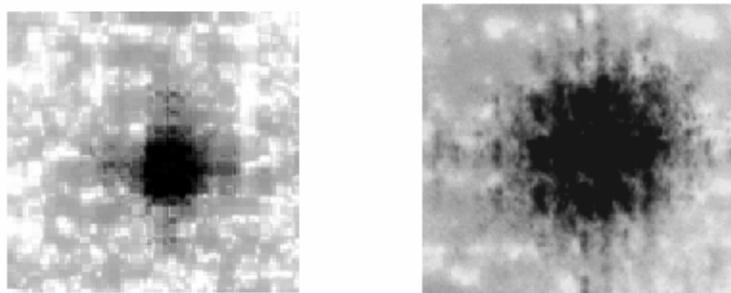


Рис. 5 Зависимость интенсивности от длины волны:

a: кривая 1 – зависимость интенсивности от длины волны источника излучения; кривая 2 – исходная среда; *б* – раствор высокой степени разведения Ni–Al; *в* – раствор высокой степени разведения Cu–Al; *г* – раствор высокой степени разведения Cu–Ni

обного воздействия со стороны других элементов. Это обеспечивается воздействием на вещество-носитель источника когерентного излучения со спектральной характеристикой, соответствующей определяемому идентифицируемому химическому веществу или биологическому агенту.

Кроме этого, способ позволяет обнаруживать и идентифицировать воздействие химических веществ и биологических объектов в твердых телах. Например, обнаруживали воздействие меди на кристаллы NaCl при пропускании лазерного



a)

б)

Рис. 6 Графическое изображение способа:

a – дистиллированная вода; *б* – раствор высокой степени разведения Cu

а от генератора на парах меди через кристалл с напыленными медными обкладками и дифракционную решетку. Анализ дифракционной картины позволяет определять воздействие химического вещества Си на кристалл NaCl (рис. 6).

Для количественной обработки полученных графических изображений разработана методика обработки с использованием фрактального анализа. Разработано программное обеспечение для автоматического расчета фрактальной размерности изображений. Для проверки исследовали кривую Коха с заранее известным показателем фрактальности. В результате получили коэффициент фрактальности равный 1,26. Погрешность расчета составила 1,6 %. Разработанную методику применяли для количественной оценки результатов, полученных с использованием фотоизображений для раствора высокой степени разведения меди. Получен коэффициент фрактальности для раствора высокой степени разведения меди, равный 1,48.

ОСНОВНЫЕ ВЫВОДЫ И РЕЗУЛЬТАТЫ

1 Проведенный литературный обзор выявил отсутствие методов и средств обнаружения и идентификации химических веществ и биологических объектов в растворах высокой степени разведения (10^{-12} ... 10^{-28} %).

2 Разработана физико-математическая модель среды, описывающая влияние растворяемого объекта на топологическую и энергетическую структуру растворов высокой степени разведения.

3 Разработана физико-математическая модель, описывающая взаимодействие раствора высокой степени разведения с многопараметрическим электромагнитным потоком.

4 На основе полученных моделей разработан новый метод, позволяющий оперативно и с высокой достоверностью обнаруживать и идентифицировать примесь с концентрацией растворов высокой степени разведения по структурным изменениям исследуемой среды. Разработанный метод позволяет существенно увеличить верхний предел (до 10^{-28} %) обнаружения примеси и ее идентификацию в растворах высокой степени разведения. Использование многопараметрического электромагнитного потока позволяет определять примесь в растворах с вероятностью 0,95 – 0,97.

5 Разработана методика исследования спектральных характеристик растворов высокой степени разведения.

6 Разработана методика резонансного взаимодействия электромагнитного когерентного потока с раствором высокой степени разведения.

7 Разработана методика резонансного взаимодействия электромагнитного когерентного потока с раствором высокой степени разведения с использованием графических фотоизображений.

8 Разработана методика обработки графических фотоизображений на основе фрактального анализа.

9 Результаты теоретического и экспериментальных исследований прошли испытания и рекомендованы к внедрению в службах экологического мониторинга, а также используются в лаборатории смазочных материалов ГНУ ВИИТиН, а также в учебном процессе ТГТУ.

ОСНОВНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ ДИССЕРТАЦИИ ОПУБЛИКОВАНЫ В СЛЕДУЮЩИХ РАБОТАХ

1 Структура и свойства растворов высокого разбавления / В.П. Шелохвостов, М.В. Макаrchук, Д.А. Шеришорин, В.Н. Чернышов // Вестник ТГУ. Т. 8. Вып. 4. 2003. С. 698 – 702.

2 Анализ влияния электрических полей на энергетические уровни гетероструктур / В.П. Шелохвостов, Д.А. Шеришорин, М.В. Макаrchук, В.Н. Чернышов // Повышение эффективности средств обработки информации на базе математического моделирования: материалы докл. VII Всероссийской науч.-техн. конф. Тамбов, 2004. С. 466 – 470.

3 Метод регистрации энергоинформационных характеристик полевых аналогов биологических объектов / А.И. Маслов, Д.А. Шеришорин, С.Н. Баршутин, В.П. Шелохвостов // Труды ТГТУ: сб. науч. ст. молод. учен. и студ. Вып. 12. Тамбов, 2002. С. 87 – 90.

4 Шеришорин, Д.А. Метод регистрации электрофизических параметров мембран, применяемых при контроле окружающей среды / Д.А. Шеришорин, М.В. Макаrchук, С.Н. Баршутин // Экономика природопользования и природоохраны: тр. VI Междунар. науч.-практ. конф. Пенза, 2003. С. 140 – 142.

5 Методы исследования энергетических уровней растворов высокой степени разведения / М.В. Макаrchук, Д.А. Шеришорин, С.Н. Баршутин, В.П. Шелохвостов // Проблемы машиностроения и технологии материалов на рубеже веков: тр. VIII Междунар. науч.-техн. конф. Пенза, 2003. С. 100 – 102.

6 Макаrchук, М.В. Влияние сверхмалых добавок на структуру и свойства материала / М.В. Макаrchук, Д.А. Шеришорин, В.П. Шелохвостов // Микромеханизмы пластичности, разрушения и сопутствующих явлений (MPFP): сб. тез. III Междунар. конф. Тамбов, 2003. С. 88 – 89.

7 Исследование энергетических параметров растворов высокой степени разведения / В.П. Шелохвостов, С.Н. Баршутин, М.В. Макаrchук, Д.А. Шеришорин // Актуальные проблемы современной науки: тр. IV Междунар. конф. Самара, 2003. С. 34 – 36.

8 Мониторинг химического состава и биологических объектов в жидких средах / Д.А. Шеришорин, М.В. Макаrchук, А.В. Закурко, В.П. Шелохвостов // Экономика природопользования и природоохраны: тр. VI Междунар. научн.-практ. конф. Пенза, 2003. С. 142 – 144.

9 Патент №2004117292 РФ на изобретение. Способ обнаружения и идентификации химических и биологических объектов в растворах высокой степени разведения по структурным изменениям среды / Д.А. Шеришорин, В.П. Шелохвостов, В.Н. Чернышов, М.В. Макаrchук, Р.В. Шелохвостов.