

УДК 535.36

ОСОБЕННОСТИ ИДЕНТИФИКАЦИИ МНОГОКОМПОНЕНТНЫХ ВЕЩЕСТВ МЕТОДОМ СПЕКТРОСКОПИИ КОМБИНАЦИОННОГО РАССЕЯНИЯ СВЕТА

Тюрикова Е.П. (Университет ИТМО)

Научный руководитель – кандидат технических наук Кустикова М.А.
(Университет ИТМО)

Введение. Разработка современных высокоточных систем идентификации состава веществ является одним из аспектов работы в области экологического мониторинга. В качестве перспективных методов выявления точных данных о конкретных компонентах исследуемых образцов выступают спектральные методы, в частности метод спектроскопии комбинационного рассеяния света [1]. Однако, в случае исследования хладагентов, необходимо обеспечивать стабильные условия эксперимента по определению спектральных характеристик. Ввиду быстрого перехода состава в газовое состояние при комнатной температуре [2], наблюдаются сложности в определении спектральных характеристик и идентификации состава.

Целью работы является проведение теоретических и экспериментальных исследований по анализу многокомпонентных хладагентов методом спектроскопии комбинационного рассеяния света.

Основная часть. Теоретические исследования включали в себя моделирование спектров хладагентов при помощи программ Gaussian и GaussView. Были смоделированы спектры для хладагентов R-134a и R-22.

Экспериментальные исследования проводились с помощью следующих приборов и систем: OPTEC 785-N, Thermo Scientific Nicolet 6700 FT-IR 1064 nm и Horiba LabRAM HR 532 nm. Данные системы позволяли генерировать лазерное излучение на разных длинах волн и разной мощности. Для проведения эксперимента использовалась кварцевая кювета, погружаемая в азот для предотвращения испарения хладагентов. Измерения проводились в течение 10 с. По итогам экспериментов получился набор данных для хладагентов R-134a и R-22.

Для определения характеристических полос, позволяющих идентифицировать состав многокомпонентных веществ, была выполнена обработка экспериментальных данных с помощью корреляционного анализа. Были также рассчитаны коэффициенты схожести спектров, полученных при помощи трех установок. Результаты эксперимента позволили выявить характеристические полосы, свидетельствующие о составе хладагентов. Итоговые данные были сравнены с теоретическими. По итогу был сделан вывод о достоверности экспериментальных и теоретических данных.

Выводы. Были проведены теоретические и экспериментальные исследования состава хладагентов методом спектроскопии комбинационного рассеяния света. Были получены расчетные спектры по средствам моделирования состава молекул. Были проведены экспериментальные исследования на установках с длинами волны 532 нм, 785 нм и 1064 нм. При помощи корреляционного коэффициента и коэффициента схожести были получены характеристические полосы для определения состава многокомпонентных веществ.

Предполагается использование подхода моделирования и поиска характеристических полос для создания библиотеки спектров и внедрении в цифровой анализатор хладагентов.

Работа выполнена при поддержке НИРМА №620159 «Разработка и исследование принципов построения цифрового анализатора фреонов».

Список использованных источников:

1. Britz-Grell, Anette & Saumer, Monika & Tarasov, Alexey. (2021). Challenges and Opportunities of Tip-Enhanced Raman Spectroscopy in Liquids. The Journal of Physical Chemistry C. XXXX. 10.1021/acs.jpcc.1c05353.

2. White, R.E. (2022). Condensation of Refrigerant Vapors—Apparatus and Film Coefficients for Freon-12. *Trans. ASME*. 70. 689-693. 10.1115/1.4017818.