

УДК: 51-73

Исследование возможности обнаружения следов опасных веществ на основе детекции паров

О. Б. Кудряшова^a, А. Б. Ворожцов^b, Ю. М. Михайлов^c

Национальный исследовательский Томский государственный университет,
Россия, 634050, г. Томск, пр. Ленина, д. 36

E-mail: ^a olgakudr@inbox.ru, ^b abv@mail.tomsknet.ru, ^c yummm@icp.ac.ru

*Получено 25.04.2025, после доработки – 10.05.2025.
Принято к публикации 27.05.2025.*

В статье исследуется возможность обнаружения следов опасных веществ (взрывчатых и наркотических) на основе детекции их паров в воздухе. Актуальность работы обусловлена задачами противодействия террористическим угрозам и наркотрафику, где критически важно определять даже следовые количества веществ. Основное внимание уделено математическому моделированию испарения тонкого слоя вещества с поверхности, основанному на молекулярно-кинетической теории. Предложена универсальная модель, учитывающая физико-химические свойства веществ, температуру окружающей среды, адгезию к поверхности и начальную массу слоя. На основе уравнений Герца – Кнудсена – Ленгмюра и Клаузиуса – Клапейрона получены аналитические выражения для времени полного испарения, предельной массы паров и динамики процесса. Выявлен безразмерный параметр γ , определяющий предельные условия испарения. Показано, что адгезия вещества (коэффициент α) влияет на скорость испарения, но не на конечную массу паров. Проведены расчеты для шести модельных веществ (TNT, RDX, PETN, амфетамин, кокаин, героин) с широким диапазоном свойств. Установлено, что при комнатной температуре и поверхностной концентрации 100 нг/см^2 большинство веществ испаряются полностью, за исключением RDX, который остается на поверхности на 84 %. Время испарения варьируется от долей секунды (амфетамин) до нескольких часов (героин). Для веществ с низкой летучестью определена максимальная масса, способная испариться при заданных условиях. Новизна работы заключается в разработке универсальной модели, применимой для широкого класса опасных веществ, и в выявлении ключевых параметров, определяющих процесс испарения. Полученные результаты позволяют оценить пределы обнаружения следов веществ методами, основанными на регистрации паров, и могут быть использованы при проектировании систем безопасности.

Ключевые слова: тонкий слой, испарение, опасные вещества, масса паров, поверхностная концентрация, математическая модель

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования РФ (соглашение № 075-15-2024-557 от 25.04.2024).

UDC: 51-73

Study of the possibility of detecting traces of hazardous substances based on vapor detection

O. B. Kudryashova^a, A. B. Vorozhtsov^b, Yu. M. Mikhailov^c

National Research Tomsk State University,
36 Lenin ave., Tomsk, 634050, Russia

E-mail: ^a olgakudr@inbox.ru, ^b abv@mail.tomsknet.ru, ^c yummm@icp.ac.ru

Received 25.04.2025, after completion — 10.05.2025.

Accepted for publication 27.05.2025.

The article investigates the possibility of detecting traces of hazardous substances (explosives and narcotics) based on the detection of their vapors in the air. The relevance of the study stems from the need to counter terrorist threats and drug trafficking, where identifying even trace amounts of substances is critical. The focus is on mathematical modeling of the evaporation of a thin substance layer from a surface, based on molecular kinetic theory. A universal model is proposed, accounting for the physicochemical properties of substances, ambient temperature, adhesion to the surface, and the initial mass of the layer. Using the Hertz–Knudsen–Langmuir and Clausius–Clapeyron equations, analytical expressions are derived for the complete evaporation time, maximum vapor mass, and process dynamics. A dimensionless parameter, γ , is identified, determining the limiting conditions for evaporation. It is shown that substance adhesion (coefficient α) affects the evaporation rate but not the final vapor mass. Calculations were performed for six model substances (TNT, RDX, PETN, amphetamine, cocaine, heroin) with a wide range of properties. At room temperature and a surface concentration of 100 ng/cm², most substances evaporate completely, except for RDX, which remains on the surface at 84 %. Evaporation times range from fractions of a second (amphetamine) to several hours (heroin). For low-volatility substances, the maximum mass capable of evaporating under given conditions is determined. The novelty of the work lies in the development of a universal model applicable to a broad class of hazardous substances and in identifying key parameters governing the evaporation process. The results enable the estimation of detection limits for trace substances using vapor-based methods and can be applied in the design of security systems.

Keywords: thin layer, evaporation, hazardous substances, vapor mass, surface concentration, mathematical model

Citation: *Computer Research and Modeling*, 2025, vol. 17, no. 3, pp. 451–463 (Russian).

The research was carried out with the financial support of the Ministry of Science and Higher Education of the Russian Federation (Agreement No. 075-15-2024-557 dated 25.04.2024).

Введение

Дистанционное детектирование следов опасных (взрывчатых и наркотических) веществ на поверхности и в воздухе особенно актуально в условиях имеющейся в настоящее время повышенной террористической опасности, увеличения наркотрафика. Современные методы, основанные на регистрации паров веществ, обладают высокой чувствительностью и селективностью и соответствуют поставленной задаче детекции следов веществ [Карапузиков и др., 2010; Saxena, Shukla, 2023; Khan et al., 2024; Greenbaum et al., 2004; Kim et al., 2024; Тивилёва и др., 2024; Maji et al., 2023; Hawley, 2020]. Однако эти методы имеют ограничения, которые необходимо понимать при проектировании систем обеспечения безопасности жизнедеятельности. Прежде всего нужно ответить на вопрос: какие вещества, в каких количествах при заданных условиях может определить данный метод? Через какое время после возникновения отпечатка (следа) могут быть зарегистрированы пары вещества?

Можно рассмотреть два крайних случая: чрезвычайно летучее вещество, которое мгновенно испаряется и рассеивается в воздухе, создавая недостаточную для регистрации концентрацию молекул, и трудноиспаряемое вещество, которое не образует достаточного количества паров для их обнаружения. При этом для следов взрывчатых и для многих наркотических веществ характерно относительно низкое давление паров, то есть минимальная концентрация молекул в воздухе, доступных для обнаружения [Gruznov et al., 2004; Moore, 2004]. Между этими двумя крайностями существует множество веществ, пары которых обнаружить возможно, но при определенных условиях. Чтобы определить эти условия, применяется математическое моделирование.

Дистанционное детектирование следовых количеств веществ в газовой фазе затруднено в силу чрезвычайно низкого давления паров множества известных веществ при комнатной температуре. Например, равновесное давление паров при температуре 25 °С для TNT (тринитротолуол) составляет $\sim 1,7 \cdot 10^{-3}$ Па, а для RDX (гексоген) — около $4 \cdot 10^{-6}$ Па [Moore, 2004]. Давление паров кокаина и героина составляет $2,5 \cdot 10^{-5}$ Па и $6,7 \cdot 10^{-7}$ Па соответственно [Ferraz-Caetano et al., 2024].

Математическое моделирование играет ключевую роль в понимании проблем детекции паров опасных веществ, таких как токсичные газы и наркотические вещества. Эти модели помогают предсказать концентрацию паров в воздухе, их распространение и взаимодействие с детекторами, что критично для обеспечения безопасности в промышленных, военных и гражданских условиях. В последние годы (2023–2025) опубликовано несколько важных статей, касающихся этой темы.

Статья [Haunes, 2016] фокусируется на предсказании стандартной теплоты испарения летучих органических соединений (ЛОС), которые являются опасными веществами. Исследование использует модель машинного обучения (Random Forest regression) для анализа базы данных из 2410 молекул, включая 223 ЛОС. Модель достигает высокой точности с средней абсолютной ошибкой 3,02 кДж/моль и учитывает такие параметры, как поляризуемость ЛОС и электрохимические свойства. Теплота испарения является важнейшим параметром для оценки количества вещества, которое может перейти в паровую фазу, что напрямую влияет на детекцию.

Работа [Willis et al., 2013] посвящена моделированию переноса массы в паровой фазе для химических боевых агентов (например, иприта) и их имитаторов. Используется модель адвекции–диффузии для предсказания концентраций паров на основе испарения капель с учетом таких параметров, как давление паров и константа Генри. Моделирование позволяет учитывать сложные физические процессы. Это исследование важно для корреляции имитаторов с реальными агентами, что упрощает тестирование детекторов.

В авторских работах [Кудряшова и др., 2022; Kudryashova, Titov, 2022] предложена математическая модель испарения тонкой пленки взрывчатого вещества с поверхности. Сделаны

расчеты и проведено сравнение с экспериментом для тонкой пленки ТНТ и гексогена. Цель данной работы — развитие математической модели для оценок времени испарения и предельной поверхностной концентрации широкого класса опасных субстанций, включая наркотические вещества. Это позволит сделать вывод о возможности обнаружения следовых количеств данных веществ с помощью методов, основанных на регистрации паров.

1. Математическое описание испарения тонкого слоя вещества с поверхности

Модель испарения тонких слоев, в приложении для следов ВВ, приведена в работе [Кудряшова и др., 2022] и развита в работе [Kudryashova, Titov, 2022] для возможности учета влияния свойств поверхности.

Допущения

1. Рассматривается тонкий слой вещества с толщиной 10^{-9} – 10^{-5} м. При этом толщина слоя h_f много меньше его характерного размера (приведенного радиуса, $\sqrt{S_f}$, где площадь слоя S_f находится в диапазоне 10^{-5} – 10^{-2} м²).
2. Неоднородностью слоя пренебрегаем. Это допустимо, если характерный размер неоднородностей (например, кристаллов) много меньше $\sqrt{S_f}$.
3. Слой может состоять из твердого вещества или из жидкости. Для жидкости пренебрегаем краевыми и капиллярными эффектами. Это допустимо для относительно хорошо смачиваемых поверхностей — когда возможно рассматривать именно плоский тонкий слой вещества, а не каплю (выполняется допущение 1).
4. Мы пренебрегаем возможными процессами деградации (химического разложения) вещества, а рассматриваем только испарение.
5. Температура поверхности, слоя вещества и окружающего воздуха одинакова и равна T_a . Эта температура ниже температуры испарения (сублимации) вещества.
6. В результате испарения уменьшается толщина слоя, а не его площадь. Молекулы испаряются одинаково со всей площади слоя. Таким образом, задача решается в одномерной постановке.
7. Адгезия пленки к поверхности учитывается через некоторый коэффициент α в модели Герца – Кнудсена – Ленгмюра и не рассматривается как отдельная подзадача.

При рассмотрении следа (отпечатка) вещества на поверхности принято использовать понятие «поверхностная концентрация», то есть отношение массы вещества к площади поверхности, по которой эта масса распределена [Карапузиков и др., 2010; Тивилёва и др., 2024]. Хотя в системе СИ стандартной единицей измерения поверхностной концентрации является килограмм на квадратный метр (кг/м²), для практических целей, при работе с микроскопическими количествами, применяются более удобные дольные единицы, такие как нанogramмы на квадратный сантиметр (нг/см²). На практике разработчики систем обнаружения следов опасных веществ на основе регистрации их паров задают вопрос, при какой поверхностной концентрации следов конкретного вещества в определенных условиях пары этого вещества могут быть обнаружены. В предлагаемой математической модели будет рассматриваться изменение массы вещества m_f в течение времени в результате испарения. По мере уменьшения массы вещества в тонком слое

на поверхности, соответственно, увеличивается масса паров в воздухе, которые и могут быть обнаружены каким-либо способом. Связь массы вещества с его поверхностной концентрацией C_s следующая: $C_s = \frac{m_f}{S_f}$. При этом одна и та же масса вещества может быть распределена по поверхности разной площади, и поверхностная концентрация будет разная. В расчетах мы рассматриваем поверхностную концентрацию от 100 нг/см² и выше.

Молекулярно-кинетическая теория предлагает выражение для массовой скорости испарения вещества (уравнение Герца – Кнудсена [Persad, Ward, 2016]) в виде

$$\frac{dm_f}{dt} = -\alpha S_f (p_s(T_a) - p_e) \sqrt{\frac{M}{2\pi RT_a}}, \quad (1)$$

где $\alpha \leq 1$ – коэффициент испарения, m_f – масса вещества, M – молекулярный вес вещества пленки, T_a – температура, R – универсальная газовая постоянная, $m_f = \rho \cdot S_f \cdot h_f$ – масса вещества, ρ – плотность вещества, S_f – площадь пленки вещества, h_f – толщина пленки, p_s – давление насыщенного пара, p_e – давление пара вне пограничного слоя.

Коэффициент α определяет силу взаимодействия между веществом слоя и материалом поверхности, на которой он расположен. Чем меньше его величина, тем сильнее вещество «прилипает» к поверхности (выше адгезия). Таким образом, коэффициент α зависит не только от физико-химических свойств вещества, но и от свойств поверхности (например, шероховатость), от парных свойств «вещество слоя – вещество поверхности». Теоретическое определение этого коэффициента – отдельная сложная проблема [Mu et al., 2000], выходящая за рамки данной работы. В каждой паре «вещество – поверхность» величину коэффициента α можно определить экспериментально.

Давление насыщенного пара p_s определим с помощью уравнения Клаузиуса – Клапейрона в следующей интегральной форме [Clausius, 1850]:

$$p_s(T_a) = A e^{-\frac{MH}{RT_a}}, \quad (2)$$

где H – теплота фазового перехода [Дж/кг], A – константа (предэкспонент) [Па].

Введем понятие массы насыщенного пара m_s при температуре T_a . Она определится из следующего уравнения: $m_s = \frac{p_s M}{RT_a}$. Также запишем выражение для изменения массы испарившегося вещества в следующем виде: $m_e = m_0 - m_f$, $m_0 = \rho S_f h_{f0}$ – начальная масса слоя, h_{f0} – начальная толщина пленки, $m_f(t) = \rho S_f h_f$ – текущая масса в некоторый момент времени t .

Давление паров в воздухе вне пограничного слоя зависит от массы испарившегося вещества m_e :

$$p_e = \frac{m_e}{m_s} p_s. \quad (3)$$

Уравнение (1) имеет аналитическое решение следующего вида:

$$m_f(t) = m_0 - \frac{AM}{RT_a} e^{-\frac{MH}{RT_a}} (1 - e^{-\beta t}), \quad (4)$$

где $\beta = \alpha S_f R \sqrt{\frac{T_a}{2\pi RM}}$. Величину, обратную β , $t_v = \frac{1}{\beta}$ можно считать характерным временем парообразования (время экспоненциального увеличения массы пара), за это время в воздухе окажется количество паров, сопоставимое с максимальным – меньше в e раз.

Масса паров вещества в воздухе может быть определена из следующего выражения:

$$m_v = \frac{AM}{RT_a} e^{-\frac{MH}{RT_a}} (1 - e^{-\beta t}), \quad (5)$$

а выражение для поверхностной концентрации вещества имеет вид

$$C_s = \frac{m_f(t)}{S_f} = \frac{m_0 - m_e}{S_f}. \quad (6)$$

В некоторых условиях слой вещества испаряется полностью, но это не обязательно произойдет. Поскольку мы предполагаем, что в естественных условиях принудительный отвод пара от поверхности отсутствует, давление паров может достигнуть насыщенного значения и испарение прекратится. Из уравнения (4) следует выражение для времени полного испарения слоя t_e :

$$t_e = -\frac{1}{\beta} \ln \left(1 - \frac{RT_a}{AM} e^{\frac{MH}{RT_a}} m_0 \right). \quad (7)$$

Уравнение (7) может не иметь решения (выражение под логарифмом меньше нуля), тогда слой не испарится. В этом случае при стремлении времени в бесконечность ($t \rightarrow \infty$) масса слоя стремится к некоторому пределу, определяемому выражением

$$m_{\min} = m_0 - \frac{AM}{RT_a} e^{-\frac{MH}{RT_a}}. \quad (8)$$

Физически этот предел означает наступление равновесия между испарением и конденсацией вещества.

Для обобщения результатов моделирования на широкий класс веществ и условий удобно рассмотреть задачу в безразмерной постановке.

Безразмерный вид уравнений

Рассмотрим в качестве масштаба времени характерное время $t_v = \frac{1}{\beta}$, в качестве масштаба массы пара — начальную массу вещества m_0 . Тогда безразмерное время $\tau = t \cdot \beta$. Изменение во времени относительной массы пара вещества, то есть отношение массы пара к начальной массе вещества (уравнение (5)), имеет вид

$$C_{mv} = \frac{m_v}{m_0} = a_1 e^{-a_2} (1 - e^{-\tau}), \quad (9)$$

где $a_1 = \frac{AM}{RT_a m_0}$, $a_2 = \frac{MH}{RT_a}$ — безразмерные параметры. Поскольку, по условиям нашей задачи, параметр a_1 — это очень большая величина ($a_1 \gg a_2$), удобнее рассмотреть обобщенный параметр $\gamma = \ln(a_1) - a_2$ и переписать уравнение (9) в виде

$$C_{mv} = e^\gamma (1 - e^{-\tau}). \quad (10)$$

Выражение для времени испарения (7) преобразуется в безразмерном виде так:

$$\tau_e = -\ln(1 - e^{-\gamma}). \quad (11)$$

В случае если полного испарения не происходит (в уравнении (11) под логарифмом отрицательное выражение), то выражение для предельной массы пара в безразмерном виде выглядит так:

$$C_{v \max} = 1 - \frac{m_{\min}}{m_0} = e^\gamma. \quad (12)$$

Таким образом, динамику процесса образования пара будут определять безразмерный параметр γ , а также масштабы массы m_0 и времени $\frac{1}{\beta}$.

Особенности разных типов веществ и применимость модели

Представленная выше модель на основе уравнения Герца – Кнудсена – Ленгмюра и уравнения Клапейрона – Клаузиуса вполне универсальна и может применяться для взрывчатых и наркотических веществ при условии, что вещество в тонком слое испаряется в газовую фазу и выполняются приведенные выше допущения. Ключевой параметр в этой модели — летучесть, определяемая давлением насыщенных паров при заданной температуре (уравнение (2)). Этот параметр зависит от кинетических характеристик испарения (теплота испарения, предэкспонент) и молекулярной массы вещества. Летучесть рассматриваемых групп веществ отличается. Взрывчатые вещества обычно имеют очень низкое давление насыщенного пара. Наркотики также бывают часто малолетучими (табл. 1).

Рассматриваемые вещества могут находиться в разном агрегатном состоянии. Для твердых веществ важным допущением, ограничивающим применение модели, является пренебрежение дисперсностью слоя. Если кристаллы достаточно велики (размер кристаллов сопоставим с толщиной слоя), то нельзя рассматривать слой как сплошной и однородный.

Некоторые вещества в процессе испарения могут испытывать химические превращения (например, кокаин). Тогда масса паров вещества будет меньше, чем в случае отсутствия деградации. В нашей модели это не учитывается (см. допущения).

Адгезия вещества к поверхности может существенно повлиять на абсолютное значение паров в воздухе. Например, ТНТ характеризуется адгезией к различным поверхностям [Zakon et al., 2012]. В нашей модели этот эффект учитывается с помощью коэффициента α , который является свободным параметром, подлежащим экспериментальному определению. Тогда каждая пара «вещество – поверхность» характеризуется своим значением α .

Учитывая приведенные ограничения, проведем расчеты для нескольких модельных веществ. Необходимые для расчетов параметры приведены в табл. 1 [To et al., 2020; Jha et al., 2015; Razlansari et al., 2022; Matz, Schröder, 1996; Jenkins, 1976].

Таблица 1. Физико-химические свойства модельных веществ

Вещество	Теплота испарения/сублимации, H (кДж/моль)	Предэкспонент, A (Па)	Молярная масса, M (г/моль)	Параметр, α (оценка)
Взрывчатые				
TNT	92,8	$\sim 2 \cdot 10^{10}$	227	0,01–0,1
RDX (гексоген)	109	$\sim 6,4$	222	0,01–0,1
PETN	104	$\sim 1,2 \cdot 10^{11}$	316	0,01–0,1
Наркотические				
Амфетамин	57	$\sim 1 \cdot 10^7$	135	0,1–0,5
Кокаин	74	$\sim 1 \cdot 10^6$	303	0,01–0,1
Героин	100	$\sim 1 \cdot 10^5$	369	0,01–0,1

2. Результаты расчетов и обсуждение

Проведем расчеты динамики испарения веществ в соответствии с предложенной моделью. Для расчетов примем массу вещества в слое, равной $m_0 = 10^{-10}$ кг, площадь слоя — $S_f = 0,0001$ м². Это соответствует поверхностной концентрации вещества $C_s = 100$ нг/см², что характерно для отпечатка пальца. Температура окружающей среды — $T_a = 295$ К.

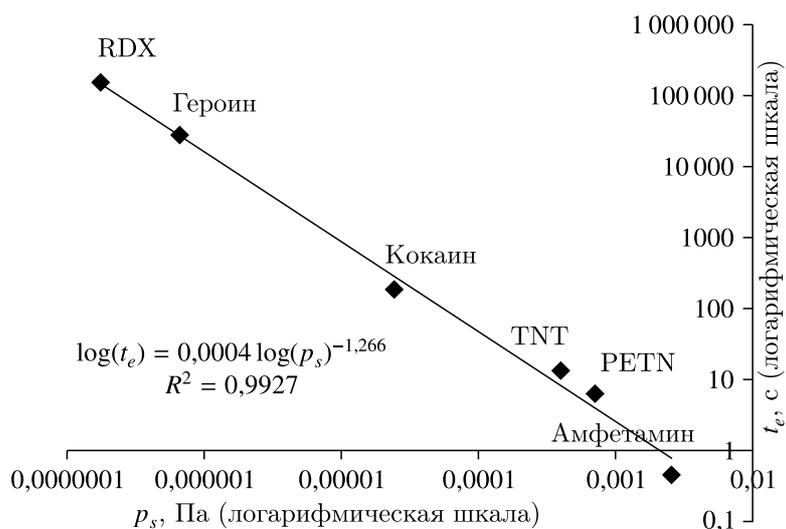


Рис. 1. Зависимость полного времени испарения вещества массой $m_0 = 10^{-10}$ кг с площади слоя $S_f = 0,0001$ м² от давления насыщенных паров вещества (в логарифмических координатах)

Летучесть веществ (давление насыщенных паров) определяет полное время испарения в соответствии с формулой (7) (рис. 1).

В расчете при заданных условиях все вещества испарятся полностью в течение времени t_e , кроме RDX, обладающего наименьшей летучестью. Предельная относительная масса RDX, оставшаяся на поверхности, составит 84 % от первоначальной (рис. 2, а). Динамику испарения иллюстрирует рис. 2: на рис. 2, а приведены кривые для слаболетучих веществ, на рис. 2, б — для веществ средней летучести. Из рисунков можно видеть, что слаболетучие вещества испаряются за часы либо испаряются только частично (как RDX), вещества со средней величиной давления насыщенных паров испаряются за секунды и доли секунды. Для наглядности графики приведены в относительных единицах по массе: относительная масса — это текущая масса вещества в момент времени t по отношению к начальной массе.

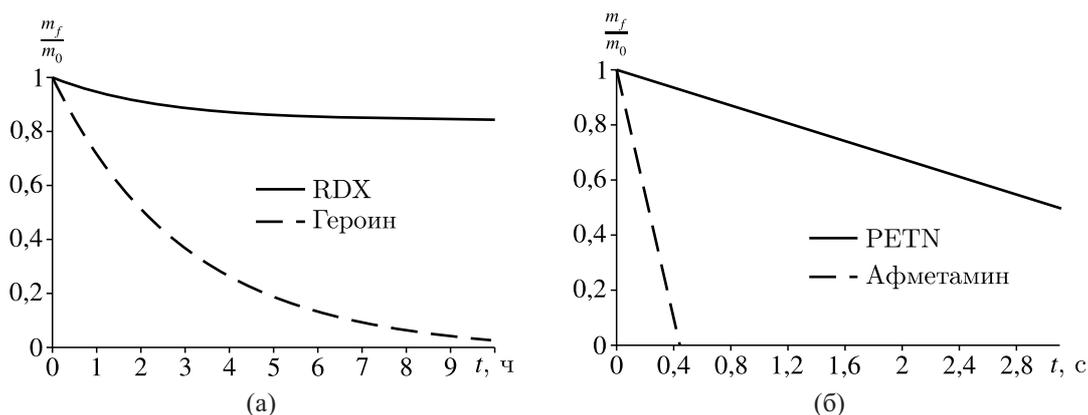


Рис. 2. Относительная масса вещества в зависимости от времени для слаболетучих веществ (а) и веществ со средней летучестью (б). Расчет для начальной массы $m_0 = 10^{-10}$ кг, $S_f = 0,0001$ м²

Таким образом, если рассматривать следовые количества модельных веществ ($C_s = 100$ нг/см²), то при комнатной температуре (22 °С) все они обратятся в пар, кроме RDX (он превратится в пар только на 16 %). Причем для большинства из этих веществ скорость испа-

рения будет очень велика — время испарения составит доли секунды. При полном испарении вещества с поверхности вся его масса в виде молекул пара будет доступна для обнаружения соответствующими методами. В данном расчете это 100 нг.

При анализе уравнений в безразмерном виде мы получили важный безразмерный параметр γ , характеризующий испарение заданной массы вещества с определенными свойствами при заданной температуре. Этот параметр позволяет оценить предельную массу паров и время испарения вещества в соответствии с формулами (11) и (12). Такая оценка позволит определить возможность обнаружения паров вещества с помощью аппаратуры регистрации паров с известной чувствительностью.

На рис. 3 приведены значения параметра γ , вычисленного при заданных выше условиях для модельных веществ.

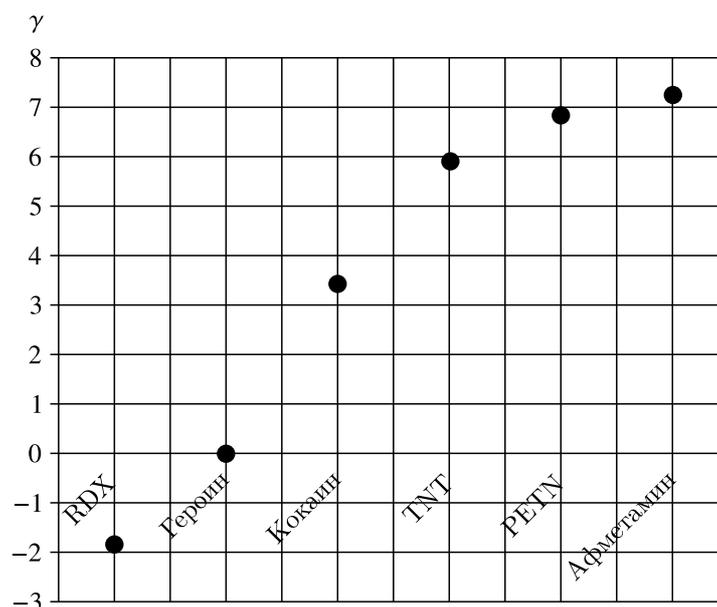


Рис. 3. Безразмерный параметр γ для модельных веществ (расчет для данных из табл. 1, $m_0 = 10^{-10}$ кг, $T_a = 295$ К)

На рис. 4 показано изменение относительной массы паров веществ от безразмерного времени для веществ из группы слаболетучих (рис. 4, а) и среднелетучих (рис. 4, б). Расчетное время полного испарения для этих веществ: героин — 7,37 ч, PETN — 6,19 с, амфетамин — 0,44 с, RDX не испарится полностью.

В расчетах мы рассматривали поверхностную плотность вещества, 100 нг/см^2 . Если плотность вещества на поверхности будет больше, то ряд из наших модельных веществ перейдет в группу «неиспарившихся полностью», а время испарения для остальных увеличится. Например, если плотность вещества на поверхности станет в 100 раз больше, $10\,000 \text{ нг/см}^2$, то полностью не испарятся, кроме RDX, также героин и кокаин (у первых в воздухе окажутся доли процента молекул, для кокаина предельная доля испарившейся массы — 30%). Время полного испарения такого слоя TNT и PETN составит 25 мин и 10 мин соответственно, амфетамин испарится за 45 секунд. Аналогичное влияние на динамику и полноту испарения окажет температура. Снижение температуры до 0°C сделает невозможным полное испарение слоя героина и кокаина и увеличит время полного испарения остальных веществ.

Из уравнения (11) следует, что предел, при котором вещество перестает полностью испаряться, — при $\gamma = 0$. Тогда можно определить максимальную массу (или поверхностную

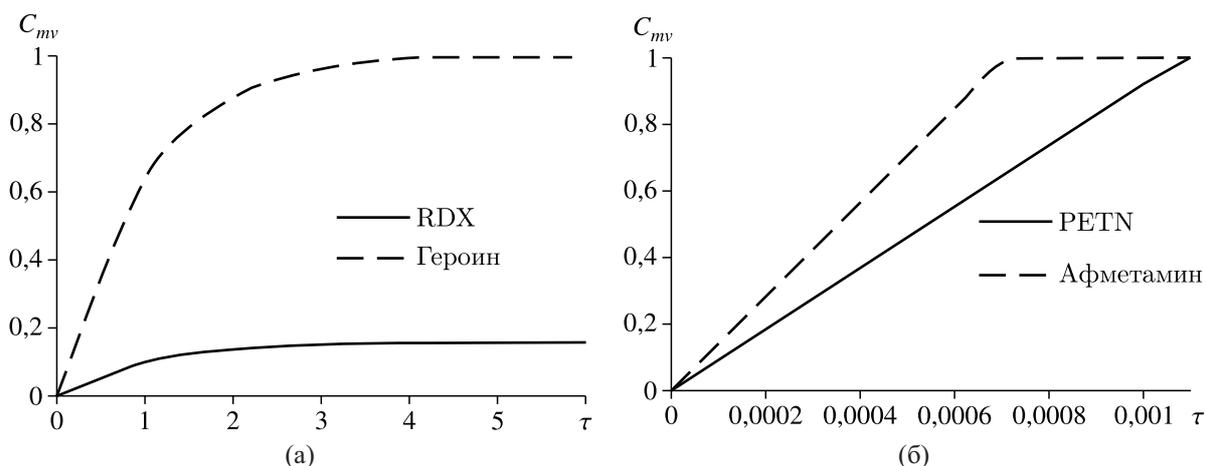


Рис. 4. Относительная масса паров вещества в зависимости от безразмерного времени для слаболетучих веществ (а) и веществ со средней летучестью (б). Расчет для начальной массы $m_0 = 10^{-10}$ кг, $S_f = 0,0001$ м²

плотность) вещества, которое при заданной температуре и с присущими ему свойствами сможет испариться, из следующего условия: $m_0 \leq \frac{AM}{RT_a} \exp\left(-\frac{MH}{RT_a}\right)$. Гексоген испарится полностью при 295 К, если масса вещества в слое составляет 16 нг и менее, а при 273 К этот предел снижается до 0,5 нг. Если масса в слое будет больше, чем данный предел, то испарится только эта минимальная масса. Наличие такого предела обусловлено достижением давления насыщенного пара над тонким слоем вещества, что ведет к прекращению испарения. Отметим, что этот предел относится именно к массе вещества в слое, а не к его поверхностной концентрации. Масса вещества может быть распределена по большей или меньшей площади поверхности (слой будет иметь толщину меньше или больше), предел массы по испарению будет тот же. Этот предел имеет определяющее значение для оценки возможности обнаружения паров, так как чувствительность методов и средств обнаружения должна соответствовать данному пределу.

Следует отметить, что расчеты проводились для параметра α , среднего из приведенных в табл. 1 значений. Однако, как указано выше, этот параметр не является только характеристикой вещества, но также и характеристикой поверхности. Его более высокое значение означает меньшую адгезию вещества к конкретной поверхности, и наоборот. Таким образом, на гладких поверхностях вещество будет задерживаться менее эффективно, чем на шероховатых и пористых.

Рассмотрим влияние параметра α на результаты расчетов. В предложенной модели параметр α не входит в другие определяющие параметры, а только в параметр β : $\beta = \alpha S_f R \sqrt{\frac{T_a}{2\pi RM}}$. Значит, в соответствии с приведенными выше формулами этот параметр не оказывает влияние ни на предельные условия, ни на максимальное количество паров вещества в воздухе. Но он определяет динамику процесса, то есть скорость испарения вещества из слоя, время полного испарения. Чем больше α (и меньше адгезия вещества к поверхности), тем пропорционально выше скорость испарения и меньше время окончательного испарения слоя. При проектировании стационарных установок, рассчитанных на длительные измерения, не важно время образования паров, и в таких задачах единственным важным параметром является предельная масса образующихся паров. Поэтому в таких задачах не имеет особенного значения, с какой именно поверхности происходит испарение. Для установок экспресс-анализа время образования паров имеет решающее значение. В рамках данной модели за динамику процесса отвечают параметр β и входящий в него параметр α , а значит, свойства поверхности и особенности адгезии вещества на поверхности.

Время испарения имеет практическое значение в предельных случаях — для малолетучих веществ (давление насыщенных паров при 295 К — менее 10^{-3} – 10^{-1} Па), и для высоколетучих (давление насыщенных паров при 295 К — более 10^2 Па). В первом случае медленное, в течение минут и часов (рис. 1), испарение снижает возможности мобильного обнаружения паров, во втором пары могут слишком быстро рассеяться в воздухе. При средних уровнях давления насыщенных паров вещества (10^{-1} – 10^2 Па) временные характеристики не так важны — пары окажутся в воздухе за достаточно короткое время и не успеют рассеяться до момента их обнаружения.

Итак, в результате расчетов и анализа математической модели выявлены параметры, позволяющие оценить возможность обнаружения паров вещества при испарении этого вещества из тонкого слоя на поверхности. Эти параметры позволяют определить предельную массу паров вещества в воздухе и время полного испарения. Таким образом, зная чувствительность приборов, регистрирующих пары опасных веществ, и их динамические характеристики, можно сделать вывод о возможности обнаружения таких веществ, исходя из предположения о начальной поверхностной концентрации и массе вещества в слое.

Заключение

В задачах предотвращения наркотрафика и противодействия террористическим угрозам в точках возможного провоза наркотических и взрывчатых веществ организуются системы контроля. Один из способов обнаружения следов опасных веществ — это регистрация этих веществ в воздухе. Типичный путь попадания молекул опасных веществ в воздух, где они могут быть обнаружены, — это испарение из следа (отпечатка), оставленного на поверхности.

Проблема обнаружения следовых количеств взрывчатых и наркотических соединений на основе регистрации их паров требует точных количественных оценок. При этом важный вопрос, который позволяет решить математическое моделирование, — какое количество вещества при заданных условиях может испариться из тонкого слоя на поверхности и будет ли его достаточно для современных средств обнаружения. Также имеют значения временные характеристики процесса — насколько быстро происходит испарение.

Для решения задачи оценки возможности обнаружения паров опасных веществ в работе предложена универсальная математическая модель испарения тонкого слоя вещества с поверхности, основанная на уравнениях Герца–Кнудсена–Ленгмюра и Клаузиуса–Клапейрона. Модель учитывает ключевые параметры, влияющие на испарение: физико-химические свойства вещества (молярная масса, теплота испарения, предэкспонент давления паров), температуру окружающей среды, начальную массу и адгезию к поверхности. Анализ модели позволил выявить безразмерный параметр γ , позволяющий в обобщенной форме описать предельные условия испарения и оценить испарившуюся массу вещества.

Проведенные расчеты показали, что для большинства исследованных веществ (TNT, РЕТN, амфетамин, кокаин, героин) при поверхностной концентрации 100 нг/см^2 и комнатной температуре происходит практически полное испарение, за исключением RDX, у которого остается на поверхности до 84 % массы. Время испарения сильно варьируется: от долей секунды (амфетамин) до нескольких часов (героин). Таким образом, были количественно определены масса паров, способная попасть в воздух, и время, необходимое для этого процесса, в зависимости от параметров вещества и условий среды.

Полученные результаты имеют важное практическое значение для совершенствования методик обнаружения паров опасных веществ. Во-первых, они позволяют на этапе проектирования определить, возможно ли обнаружение конкретного вещества в заданных условиях с учетом чувствительности детектора. Это критично как для стационарных систем длительного мониторинга

(где важна предельная масса паров), так и для систем экспресс-анализа (где также важным является время испарения). Во-вторых, выявлена роль параметра α (адгезии), влияющего на скорость испарения, но не на предельную массу паров.

С фундаментальной точки зрения работа представляет вклад в развитие молекулярно-кинетической теории испарения, расширяя ее применение на микроскопические количества веществ в условиях, близких к реальным. Введение универсального параметра γ и вывод аналитических выражений для динамики испарения представляют теоретическую ценность и могут быть использованы в других задачах физической химии и материаловедения.

Перспективы дальнейших исследований включают учет более сложных факторов: деградации веществ, диффузионных ограничений, эффекта микрорельефа поверхности, а также экспериментальную верификацию модели для различных веществ и материалов. Возможна также адаптация модели для прогноза поведения многокомпонентных следов и разработки интеллектуальных систем обнаружения с использованием методов машинного обучения.

Список литературы (References)

- Карпузиков А. И., Набиев Ш. Ш., Надеждинский А. И., Пономарев Ю. Н.* Лазерные методы обнаружения паров взрывчатых веществ в открытой атмосфере: аналитические возможности для противодействия террористической угрозе // *Оптика атмосферы и океана*. — 2010. — Т. 23, № 10. — С. 894–904.
- Karpuzikov A. I., Nabiev Sh. Sh., Nadezhdinskii A. I., Ponomarev Yu. N.* Laser methods of detection of explosive matter vapors in the open atmosphere: analytical possibilities of counteracting the terror threats // *Atmospheric and Oceanic Optics*. — 2010. — Vol. 23, No. 10. — P. 894–904. (Original Russian paper: *Karpuzikov A. I., Nabiev Sh. Sh., Nadezhdinskij A. I., Ponomarev Yu. N.* Lazernye metody obnaruzheniya parov vzryvchatyh veshchestv v otkrytoj atmosfere: analiticheskie vozmozhnosti dlya protivodejstviya terroristicheskoj ugroze // *Optika atmosfery i okeana*. — 2010. — Vol. 23, No. 10. — P. 894–904.)
- Кудряшова О. Б., Грузнов В. М., Балдин М. Н., Кихтенко А. В., Тивилёва М. И., Титов С. С.* Характеризация сублимации следов тринитротолуола с поверхности стекла // *Известия высших учебных заведений. Физика*. — 2022. — Т. 65, № 9. — С. 27–33. — DOI: 10.17223/00213411/65/9/27
- Kudryashova O. B., Gruznov V. M., Baldin M. N., Kikhtenko A. V., Tivileva M. I., Titov S. S.* Charakterizaciya sublimacii sledov trinitrotoluola s poverhnosti stekla [Characteristics of sublimation of traces of trinitrotoluene from the glass surface] // *Izvestiya vysshih uchebnyh zavedenij. Fizika*. — 2022. — Vol. 65, No. 9. — P. 27–33 (in Russian).
- Тивилёва М. И., Грузнов В. М., Кихтенко А. В., Бобровников С. М., Горлов Е. В., Аксенов В. А.* Влияние динамики следов взрывчатых веществ на возможности их регистрации газохроматографическим и лидарным методами // *Технологии безопасности жизнедеятельности*. — 2024. — № 6. — С. 5–14. — DOI: 10.17223/29491665/6/1
- Tivileva M. I., Gruznov V. M., Kikhtenko A. V., Bobrovnikov S. M., Gorlov E. V., Aksenov V. A.* Vliyanie dinamiki sledov vzryvchatyh veshchestv na vozmozhnosti ih registracii gazohromatograficheskim i lidarnym metodami [The influence of the dynamics of traces of explosives on the possibility of their registration by gas chromatographic and lidar methods] // *Tekhnologii bezopasnosti zhiznedeyatelnosti [Life Safety / Security Technologies]*. — 2024. — No. 6. — P. 5–14 (in Russian).
- Clausius R.* Ueber die bewegende Kraft der Wärme und die Gesetze, welche sich daraus für die Wärmelehre selbst ableiten lassen // *Annalen der Physik*. — 1850. — Vol. 155, No. 3. — P. 368–397.
- Ferraz-Caetano J., Teixeira F., Cordeiro M. N. D. S.* Data-driven, explainable machine learning model for predicting volatile organic compounds' standard vaporization enthalpy // *Chemosphere*. — 2024. — Vol. 359. — Article No. 142257. — P. 1–8. — DOI: 10.1016/j.chemosphere.2024.142257
- Greenbaum E., Rodriguez M., Sanders S. A.* Biosensors for detection of chemical warfare agents. — New York, NY, USA: Marcel Dekker, Inc., 2004. — P. 375–388.
- Gruznov V. M., Baldin M. N., Filonenko V. G.* High-speed gas analysis for explosives detection // *Vapor and Trace Detection of Explosives for Anti-Terrorism Purposes*. — 2004. — P. 87–99.
- Hawley C.* Hazardous materials monitoring and detection devices. — 3rd ed. — Boston: Jones & Bartlett Learning, LLC, 2020.

- Haynes W.M.* CRC handbook of chemistry and physics. — Boca Raton, FL: CRC Press, 2016.
- Jha K., Hayashi K., Yadava R. D. S.* Drugs of abuse and their detection methodologies: Contribution of chemical sensor // *Current Organic Chemistry*. — 2015. — Vol. 19, No. 12. — P. 1191–1201. — DOI: 10.2174/1385272819666150318223054
- Jenkins A.* An improved method for qualitative and quantitative detection of vapors from low volatility compounds. — 1976. — Patent Specification No. 1 451 632.
- Khan S., Valiyaneerilakkal U., Kumar S., Singh A., Ahmed A., Perera H. C. S., Mahadeva R., Alawatugoda J., Arya S.* Nanosensors in hazardous explosives trace detection — challenges and future directions // *Microchemical Journal*. — 2024. — Vol. 200. — Article No. 110474. — P. 1–12. — DOI: 10.1016/j.microc.2024.110474
- Kim Y., Jeon Y., Na M., Hwang S.J., Yoon Y.* Recent trends in chemical sensors for detecting toxic materials // *Sensors*. — 2024. — Vol. 24, No. 2. — Article No. 431. — P. 1–18. — DOI: 10.3390/s24020431
- Kudryashova O.B., Titov S.S.* A mathematical model for sublimation of a thin film in trace explosive detection problem // *Molecules*. — 2022. — Vol. 27, No. 22. — P. 1–9. — DOI: 10.3390/molecules27227939
- Maji S.R., Roy C., Sinha S.K.* Gas chromatography – mass spectrometry (GC-MS): a comprehensive review of synergistic combinations and their applications in the past two decades // *Journal of Analytical Sciences and Applied Biotechnology*. — 2023. — Vol. 5, No. 2. — P. 72–85. — DOI: 10.48402/IMIST.PRSM/jasab-v5i2.40209
- Matz G., Schröder W.* Fast GC/MS field screening for excavation and bioremediation of contaminated soil // *FACT*. — 1996. — Vol. 1, No. 2. — P. 77–85.
- Moore D.S.* Instrumentation for trace detection of high explosives // *Review of Scientific Instruments*. — 2004. — Vol. 75, No. 8. — P. 2499–2512. — DOI: 10.1063/1.1771493
- Mu R., Ueda A., Wu M.H., Tung Y.S., Henderson D.O., Chamberlain R.T., Curby W., Mercado A.* Experimental and theoretical demonstration of the interfacial interaction potential between an adsorbed film and a smooth substrate // *The Journal of Physical Chemistry B*. — 2000. — Vol. 104, No. 1. — P. 105–109. — DOI: 10.1021/jp993363y
- Persad A.H., Ward C.A.* Expressions for the evaporation and condensation coefficients in the Hertz–Knudsen relation // *Chemical Reviews*. — 2016. — Vol. 116, No. 14. — P. 7727–7767. — DOI: 10.1021/acs.chemrev.5b00511
- Razlansari M., Ulucan-Karnak F., Kahrizi M., Mirinejad S., Sargazi S., Mishra S., Rahdar A., Díez-Pascual A.M.* Nanobiosensors for detection of opioids: A review of latest advancements // *European Journal of Pharmaceutics and Biopharmaceutics*. — 2022. — Vol. 179. — P. 79–94. — DOI: 10.1016/j.ejpb.2022.08.017
- Saxena P., Shukla P.* A review on recent developments and advances in environmental gas sensors to monitor toxic gas pollutants // *Environmental Progress & Sustainable Energy*. — 2023. — Vol. 42, No. 5. — Article No. e14126. — P. 1–18. — DOI: 10.1002/ep.14126
- To K.C., Ben-Jaber S., Parkin I.P.* Recent developments in the field of explosive trace detection // *ACS Nano*. — 2020. — Vol. 14, No. 9. — P. 10804–10833. — DOI: 10.1021/acsnano.0c01579
- Willis M.P., Varady M.J., Pearl T.P., Fouse J.C., Riley P.C., Mantooth B.A., Lalain T.A.* Physics-based agent to simulant correlations for vapor-phase mass transport // *Journal of Hazardous Materials*. — 2013. — Vol. 263. — P. 479–485. — DOI: 10.1016/j.jhazmat.2013.09.064
- Zakon Y., Lemcoff N.G., Marmur A., Zeiri Y.* Adhesion of standard explosive particles to model surfaces // *The Journal of Physical Chemistry C*. — 2012. — Vol. 116, No. 43. — P. 22815–22822.