

OPTIMIZACIÓN DE RESONADORES ACÚSTICOS PARA ESPECTROSCOPIA FOTOACÚSTICA EN GASES

A.S. Vallespi¹, N.L. Barreiro¹, A.L. Peuriot¹, V.B. Slezak¹, G.D. Santiago²

1 Centro de Investigaciones en Láseres y Aplicaciones CEILAP (CITEFA-CONICET), Juan Bautista de La Salle 4397, 1603 Villa Martelli, Argentina

2 Laboratorio Láser, Facultad de Ingeniería, Universidad de Buenos Aires, Paseo Colón 850, 1063 Bs. As., Argentina
asvw3bis@gmail.com

Recibido 28/02/11; aprobado 23/08/11

La espectroscopía fotoacústica permite la detección de trazas de gases ya que, en teoría, su límite está establecido por el ruido del micrófono y la electrónica asociada. En la práctica, la mínima concentración detectable aumenta debido fundamentalmente a dos factores: la pequeña absorción y dispersión de la radiación que atraviesa las ventanas de la celda, que contiene la muestra del gas, y el ruido proveniente de la bomba de circulación o turbulencias en el flujo de gas. Con el objetivo de disminuir estos efectos se diseñaron celdas con resonadores abiertos, filtros en los extremos y ventanas en ángulo de Brewster. Así mismo, se presenta una celda diferencial con dos resonadores paralelos, acoplados a dos filtros de cuarto de onda comunes a ambos. Se utiliza un micrófono diferencial cuyos puertos son conectados en el punto medio de ambos resonadores, lo cual permitiría reducir el ruido proveniente de puntos lejanos, tales como los debidos a calentamiento de las ventanas, aumentando la relación señal ruido. Se plantean dos modelos numéricos para analizar el comportamiento de los diseños ante una excitación luminosa. Se analizan los resultados y se obtienen las condiciones más favorables para aumentar la señal fotoacústica y disminuir el límite de detección.

Palabras clave: fotoacústica, detección de trazas.

The photoacoustic spectroscopy allows traces detection due to the fact that, theoretically, its limit is settled by the microphone and the associated electronics. Actually, the lowest measurable concentration increases essentially by two factors: the small absorption and scattering of radiation at the sample cell's windows and the noise caused by the circulation pump or flux turbulences. To accomplish the goal of reducing these effects, cells with open pipe resonators, filters at the endings and windows with Brewster angles were designed. Likewise, we propose a differential cell with two parallel resonators, which share quarter wave filters at both ends. The ports of a differential microphone are connected respectively to the mid-point of both resonators, so that the noise coming from far points (windows heating) lowers and the signal to noise ratio increases. Two numerical models have been applied in order to analyze the behaviour of different cell designs upon laser irradiation. The results are analyzed and the most favorable conditions for increasing the signal and lowering the detection limit are obtained.

Key words: photoacoustics, trace detection.

INTRODUCCIÓN

La espectroscopía fotoacústica (FA) es una técnica que en los últimos años se ha convertido en una herramienta muy efectiva para la detección de trazas gaseosas, caracterizada por su gran sensibilidad, selectividad, relativamente bajo costo y portabilidad entre otras. Se han reportado trabajos donde se alcanzaron límites de detección inferiores a partes por billón (1ppb=10⁻⁹). El límite de detección para trazas gaseosas se determina midiendo la señal de fondo de una muestra de aire cromatográfico atravesada por un haz láser. Dicha señal viene originada por diversos factores, ruido del micrófono y de la electrónica asociada, el calentamiento de ventanas por absorción y dispersión de la radiación del haz láser, vibraciones mecánicas y turbulencias en caso de trabajar con flujo de gases. Particularmente, las contribuciones dadas por el haz láser son señales coherentes. Con el objetivo de aumentar la relación señal-fondo, en este trabajo se estudian distintas celdas con resonadores abiertos unidimensionales excitando el segundo modo longitudinal, filtros de cuarto de onda en los extremos, ventanas en ángulo de Brewster y se presenta un diseño innovador de dos resonadores en paralelo, entre los

cuales se coloca un micrófono diferencial cuyos puertos se conectan a los mismos. Se exploran las características de los diseños mediante la simulación con dos métodos: líneas de transmisión y método de elementos finitos.

TEORÍA

Un resonador puede ser considerado unidimensional cuando la longitud de onda del sonido sea mayor que las dimensiones transversales del mismo. Un método adecuado para describirlo está basado en la analogía de las ecuaciones acústicas unidimensionales y las ecuaciones electromagnéticas de una línea de transmisión. De esta analogía surge que la presión es el análogo acústico de la diferencia de potencial, el flujo total $U = S \cdot v$ de un fluido con velocidad v y sección transversal S es el análogo acústico de la corriente eléctrica I y la fuente de calor W es representada por una fuente de corriente I_0 . Si se considera un tubo elemental de longitud L , sección S y perímetro D , excitado por un láser modulado a frecuencia angular ω (fig. 1) se obtiene para los análogos acústicos de la impedancia Z , el flujo U ,

resistencia R_a , inductancia L_a y capacidad C_a las siguientes ecuaciones ⁽¹⁾:

$$\begin{aligned} L_a &= \rho \cdot L/S \\ C_a &= V/\rho \cdot c^2 \\ R_a &= [\rho \cdot L \cdot D/2 \cdot S^2] \cdot \omega \cdot (d_v + (\gamma - 1) \cdot d_h) \end{aligned} \quad (1)$$

donde d_v y d_h son los espesores de las capas límite térmica y viscosa respectivamente ⁽²⁾, ρ la densidad del fluido, V el volumen del tubo, c la velocidad del sonido y $\gamma = C_p/C_v$ es el cociente de los calores específicos a presión y volumen constante.

A continuación se describirá brevemente el formalismo desarrollado por Bernegger et al. ⁽¹⁾, que luego se utilizará para diseñar distintos tipos de resonadores.

Cuando el calor es debido a la radiación láser absorbida W_{abs} la fuente de corriente por unidad de longitud se expresa como:

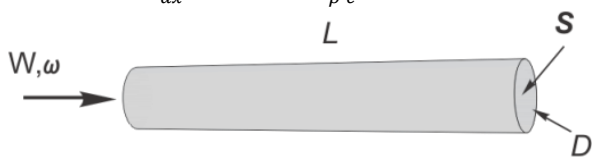
$$\frac{dI^0}{dx} = (\gamma - 1) \cdot \frac{W_{abs}}{\rho \cdot c^2} \quad (2)$$


Figura 1: tubo de fluido elemental de longitud L ; sección S , perímetro D excitado por una fuente láser de potencia W y frecuencia ω .

El estudio de las propiedades acústicas de las celdas FA unidimensionales se realiza en este trabajo mediante un modelo basado en las analogías de impedancias y fuentes distribuidas, en donde la onda acústica entrante es propagada por una matriz T de transferencia de impedancia mientras que un vector w contiene la contribución de la absorción de radiación láser a la onda acústica saliente. De esta manera, el tubo de fluido elemental de longitud δ se puede representar mediante una analogía eléctrica como un circuito de cuatro terminales especificadas por la matriz T y un vector w como se muestra en las figuras 2a y 2b, donde u y u^* son los vectores correspondientes a $u(x) = \begin{pmatrix} P(x) \\ U(x) \end{pmatrix}$, donde P es la amplitud de la presión y U el flujo total del fluido. Los vectores u^* y u están relacionados por la ecuación matricial ^(1,2):

$$u^* = T \cdot u + w \quad (3)$$

A partir de la figura 2 se obtienen la impedancia y el flujo correspondiente del tubo de fluido elemental:

$$\begin{aligned} Z &= [1/(R_a + j\omega L_a) + 1/(-j\omega C_a)]^{-1} \\ U(x + \delta) - U(x) &= [P(x + \delta) - P(x)]/Z + U_0 \end{aligned} \quad (4)$$

donde U_0 representa la fuente (equivalente a I_0 en la figura 2a).

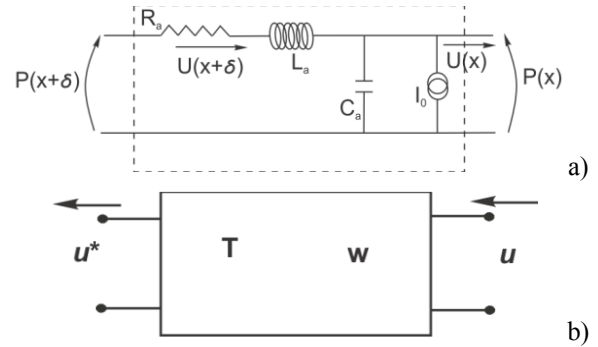


Figura 2: a) Circuito que representa la analogía eléctrica del tubo de fluido elemental. b) Puerto de cuatro terminales.

En general, una celda unidimensional se puede dividir en un número finito de rebanadas o tubos elementales de longitud L_i , perímetro D_i y sección transversal S_i . La absorción de radiación en cada elemento viene dada por w_i . Como se muestra en las figuras 3a y 3b cada elemento i se puede representar por un circuito eléctrico de cuatro terminales, los cuales se caracterizan por una matriz T_i y un vector w_i como se definiera antes. Mediante condiciones de contorno adecuadas para elementos adyacentes y la ecuación (3) se obtiene:

$$u_{i+1} = u_i^* = T_i \cdot u_i + w_i \quad (5)$$

y, por iteración, se obtiene una ecuación matricial que expresa u_n^* en términos de u_1 :

$$u_n^* = T_n \cdot (\dots (T_2(T_1 \cdot u_1 + w_1) + w_2) \dots) + w_n = \bar{T} \cdot u_1 + \bar{w} \quad (6)$$

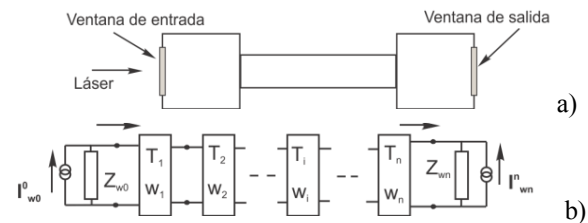


Figura 3: a) Esquema simplificado de celda unidimensional con sus ventanas de entrada y salida. b) Esquema donde se muestra el modelo de la celda mediante tubos elementales como circuitos de cuatro terminales y las ventanas con su analogía de fuente de corriente y su impedancia en paralelo.

Las condiciones de contorno al comienzo y al final de la celda, es decir, las ventanas de la misma se representan como impedancias Z_{w0} y Z_{wn} las cuales se consideran infinitas, además de I_{w0}^0 e I_{wn}^0 que representan las fuentes de calor debido a la absorción de la radiación láser en las ventanas de la celda, a las que se asigna un valor muy bajo (alrededor de 1%) respecto del calor generado en una muestra. Las condiciones de contorno en las ventanas se pueden expresar como una ecuación matricial para el vector desconocido u_1 :

$$\begin{bmatrix} [1/Z_{w0}, 1] \\ [1/Z_{wn}, -1] \cdot \bar{T} \end{bmatrix} \cdot u_1 = \begin{bmatrix} I_{w0}^0 \\ I_{wn}^0 - [1/Z_{wn}, -1] \cdot \bar{w} \end{bmatrix} \quad (7)$$

Invirtiendo (7) y aplicando (5) se obtiene u_i por iteración y, por lo tanto, la amplitud de la presión del sonido en cualquier punto de la celda. Al depender todos los elementos de la matriz en (6) de la frecuencia, todo el procedimiento se repite a pequeños intervalos de frecuencia, alrededor de un valor central de interés en forma numérica. La metodología descrita permite introducir fácilmente modificaciones tales como las entradas y salidas de gases, filtros de cuarto de onda, micrófonos, tubos con distintas secciones transversales, ventanas en ángulo de Brewster, etc., intercalando circuitos de cuatro terminales con una impedancia adecuada.

SIMULACIONES Y RESULTADOS

De acuerdo a lo expuesto anteriormente se realizó la simulación de tres celdas. Dos de ellas se simulan mediante líneas de transmisión y con el método de elementos finitos. Consisten en un único resonador de longitud $L_R = 16 \text{ cm}$ con extremos abiertos al cual se le agregan volúmenes de sección mucho mayor (*buffers*) de longitud $L_B = L_R/2 = 8 \text{ cm}$ para evitar el ruido proveniente de las ventanas y asegurar máxima reflexión en los extremos del resonador abierto. El diámetro de los resonadores es $D_R = 2 \text{ cm}$ y el de los *buffers* se deja como parámetro de ajuste para las simulaciones. En las figuras 4a y 4b se muestran los esquemas de los diseños realizados.

A los resonadores se agrega una corrección en los extremos abiertos del resonador (ΔL) debido a los efectos de borde ocasionados por el pasaje de un campo unidimensional adentro del resonador a uno tridimensional afuera del mismo. Esta corrección se aproxima por⁽³⁾:

$$\Delta L = 0.6r \quad (8)$$

donde r es el radio del resonador. Los resonadores al ser unidimensionales cumplen con la condición $r \ll L$. Las condiciones de contorno, definidas por un antinodo de presión en las ventanas, permiten amplificación en las frecuencias de resonancia dadas por:

$$\nu_n = nc/2(L + \Delta L) \quad (9)$$

La celda en la fig. 4a se compone del resonador con dos *buffers* en los extremos y, adosados a los mismos, resonadores de Helmholtz con filtros de cuarto de onda. En la fig. 4b se muestra una modificación con ventanas en ángulo de Brewster a la cual se adosan pistones que actúan como filtros de cuarto de onda. Para esta geometría se realizaron varias simulaciones variando parámetros tales como el radio de los *buffers*, las longitudes y diámetros de los pistones. En las figuras 5a y b se muestran las simulaciones por elementos finitos y líneas de transmisión respectivamente para la celda de la fig 4a. En la fig 5a se observa un máximo de amplitud en el centro del resonador mientras que la presión presenta nodos en los *buffers*. Este resultado se corresponde con la simulación de líneas de transmisión mostrado en 5b

para el caso de relación de diámetros de *buffer*/resonador 4:1. La posición de los filtros asegura que no se capten ruidos provenientes de turbulencia, ruidos por vibraciones mecánicas o por calentamiento de ventanas. Se observa que se produce un aumento del máximo de amplitud a medida que aumenta la relación hasta 3,5:1, donde la señal comienza a saturar y luego disminuye nuevamente para relaciones mayores. Se concluye que la relación 4:1 es la más conveniente como compromiso entre amplitud alta en el centro del resonador y baja en las ventanas.

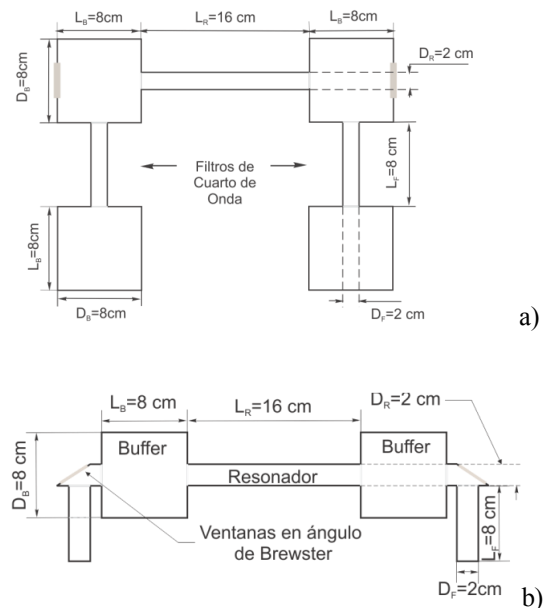


Figura 4: a) Diseño de la celda con buffers y filtros de cuarto de onda para trabajos con flujo de gases. b) Diseño de celda con ventanas en ángulo de Brewster y pistones.

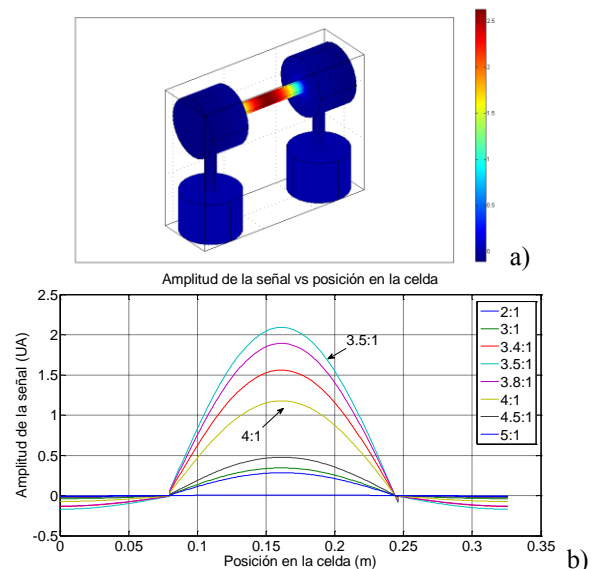


Figura 5: a) simulación por elementos finitos de la celda de la figura 4 a).

b) Simulación por líneas de transmisión de la celda 4 a)

En la figura 6a, para la celda con filtros y ventanas en ángulo de Brewster, se observa que el segundo modo de señal en el centro del resonador para el segundo modo longitudinal se produce cuando la longitud de los

pistones, ubicados en los nodos de presión, es igual a cuarto de onda ($L_F = 8 \text{ cm}$). En la figura 6b se observa que el máximo de amplitud se produce para un radio de los filtros de 1 cm. En la figura 6c la señal disminuye hasta anularse en el punto de unión del ducto donde se encuentran las ventanas, lo cual es deseable para evitar señales mecánicas espurias y por calentamiento de ventanas.

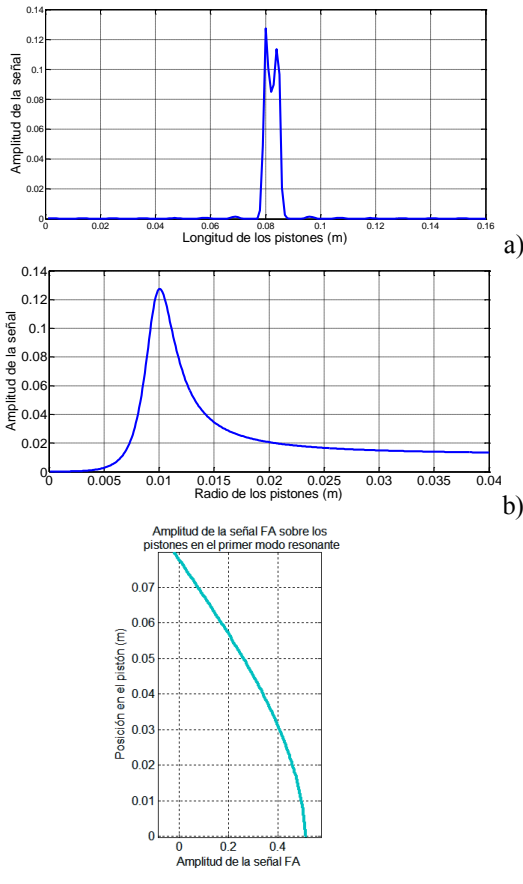


Figura 6: a) Amplitud vs longitud de pistones. b) Amplitud vs radio de los pistones. c) Posición en el pistón vs amplitud.

En la figura 7 se muestra el efecto de las pérdidas por disipación para distintos valores de las capas límite térmica y viscosa, d_v y d_h respectivamente. Se observa un ensanchamiento del pico de resonancia así como una disminución de la amplitud a medida que aumentan los valores de los parámetros d_v y d_h . La frecuencia angular de resonancia para ambos diseños presentados fue de 6449 s^{-1} .

Otra geometría de celda estudiada en este trabajo consiste en una configuración con dos resonadores en paralelo, como en Miklós et al.⁽⁴⁾. En nuestro caso estos son conectados por un ducto donde se coloca un micrófono diferencial con el objetivo de mejorar la relación señal/fondo (ver fig. 8).

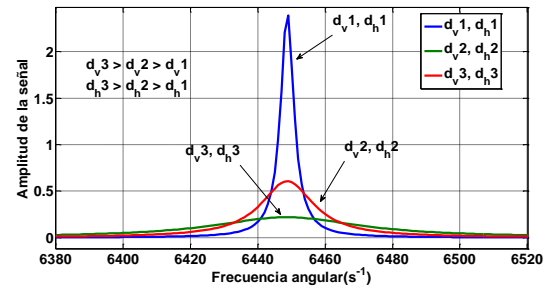


Figura 7: amplitud vs frecuencia angular. Se observa un ensanchamiento del pico y disminución de la amplitud para valores crecientes de d_v y d_h .

Para estudiar las características del diseño se realizó una simulación por elementos finitos únicamente ya que el método por líneas de transmisión no es aplicable con el método matricial explicado anteriormente. Las medidas de la celda fueron decididas en base a los requerimientos necesarios para realizar mediciones alternativamente intracavidad y extracavidad de NH_3 con un láser continuo de CO_2 , procurando que la frecuencia de resonancia se encuentre cercana a los valores posibles de frecuencia de modulación del láser.

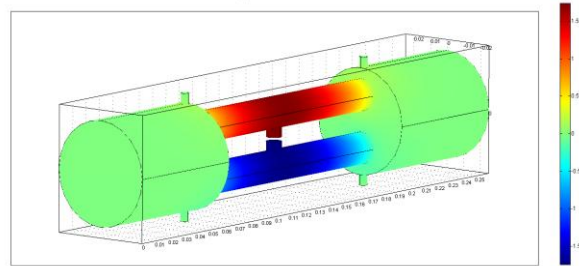


Figura 8: simulación de la celda diferencial por método de elementos finitos.

En la figura 8 se muestra la simulación de esta celda, siendo su longitud total $L = 26 \text{ cm}$. Los resonadores tienen una longitud $L_R = 13 \text{ cm}$ y los buffers $L_B = 6.5 \text{ cm}$, con diámetros $D_R = 1.5 \text{ cm}$ y $D_B = 5.0 \text{ cm}$, respectivamente. Esta configuración corresponde a una relación de diámetros buffer/resonador de 10:3.

En la figura 9 se muestran varias curvas de amplitud vs diámetro del resonador donde el parámetro es la relación buffer/resonador.

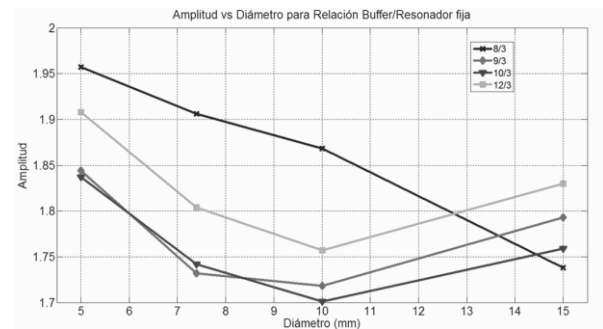


Figura 9: amplitud vs diámetro del resonador para distintas relaciones de diámetros buffer/resonador.

Se advierte que la curva correspondiente a las relaciones 8:3 presenta, para diámetros menores que 13 mm, amplitudes mayores que las demás curvas. Sin embargo, al aparecer diferencias no mayores que el 10% entre amplitudes para diferentes diseños, se elige un diámetro de 15 mm, por el compromiso de evitar reflexiones internas del haz láser, al mismo tiempo que una mayor relación *buffer*/resonador.

En la figura 10 se observa un gráfico de frecuencia de resonancia vs diámetro del ducto de conexión donde se aloja el micrófono, ya que en sucesivas simulaciones se observó un corrimiento en la frecuencia al modificar el diámetro del mismo. Dadas las dimensiones del micrófono, se elige un diámetro alrededor de 7,5 mm para la relación 10:3, lo cual define una frecuencia de modulación del láser de 1207 Hz.

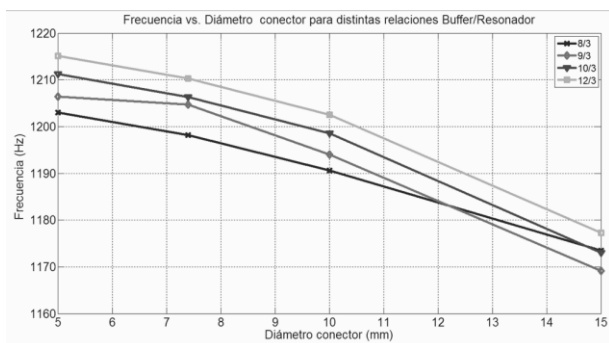


Figura 10: frecuencia vs diámetro del ducto conector para distintas relaciones de diámetros *buffer*/resonador.

CONCLUSIONES

En base a dos modelos complementarios se analizaron las dimensiones de filtros acústicos, aplicados a diseños con resonador abierto en los dos extremos, para limitar el ruido proveniente del calentamiento de las ventanas y del flujo de gas. Se concluye que filtros de un largo de cuarto de onda del segundo modo longitudinal, adosados en forma perpendicular al eje de la celda cerca de las ventanas, producen un máximo de presión en el centro del resonador y mínima presión cerca de las ventanas. El óptimo se consigue cuando el diámetro de los filtros coincide con el del resonador. En cuanto al filtro acústico para flujo de gas, consistente en dos volúmenes (*buffer*) conectados por un tubo, se observa que el óptimo se encuentra cuando la longitud del tubo es de un cuarto de onda y la relación de diámetros *buffer*/tubo del filtro es igual a cuatro. Se eligieron las dimensiones apropiadas de la celda con micrófono diferencial para los requerimientos del experimento.

Referencias

1. S. Bernegger and M. W. Sigrist, *Infrared Phys.* **30**, 375-429 (1990).
2. Antoine Chaigne, “Ondes Acoustiques”, Éditions de L’École Polytechnique (2003).
3. P. M. Morse and K. Uno Ingard, “Theoretical Acoustics”, Mc Graw-Hill, Princeton (1968).
4. A. Miklós, P. Hess, Z. Bozóki, *Rev. of Scientific Instrum.* **72**, 1937-1955 (2001).

5. G.D. Santiago, A. L. Peuriot, V. B. Slezak y M. G. González, *Anales AFA* **18**, 62-64 (2006).