

SIMULACIÓN Y CARACTERIZACIÓN DE UNA CELDA OPTOACÚSTICA UNIDIMENSIONAL

A. Peuriot¹, G. Santiago², V. Slezak¹

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

(2) Laboratorio Láser, Facultad de Ingeniería, Universidad de Buenos Aires
Paseo Colón 850 (1063), Ciudad de Buenos Aires, Argentina

apeuriot@citefa.gov.ar

Se modela la respuesta en frecuencia de una celda optoacústica cilíndrica apta para flujo de gases destinada a la detección de trazas. La celda se comporta como un resonador abierto para modos longitudinales. Las perturbaciones introducidas por los tubos de entrada y salida de los gases y la presencia de las ventanas ópticas hacen necesario incluir en los extremos del resonador sendos volúmenes *buffer*. Esto permite disminuir la captación de ruido acústico y satisfacer la condición de resonancia de bordes abiertos. El modelo unidimensional, basado en una línea de transmisión acústica equivalente, incluye los efectos del resonador de Helmholtz asociado con la cavidad donde se aloja el micrófono. A tal fin la celda es dividida en muchas secciones adyacentes, cada una caracterizada por una inductancia, capacitancia y resistencia acústicas. Se estudió la respuesta acústica en función de las dimensiones físicas de la celda. Se contrasta el modelo a partir de una celda de polietileno aplicada a la detección de NO₂ en aire utilizando un láser visible pulsado. La señal es amplificada, digitalizada a través del puerto de sonido de una PC y procesada en el dominio de la frecuencia. El espectro experimental es comparado con el modelo, obteniéndose buena concordancia.

The frequency response of a flow-through photoacoustic cell for traces detection is modeled. The cell behaves like a cylindrical open resonator for longitudinal modes. The perturbation introduced by the gas inlets and windows makes necessary the inclusion of buffer volumes at both ends of the resonator. This design allows to lower the background noise at the same time as to satisfy the condition of open resonator. The one-dimensional model, based on an equivalent acoustic transmission line, includes the effects of a Helmholtz resonator associated with the cavity where the microphone is placed. For this purpose, the cell is divided in many adjacent sections, each one characterized by an acoustical capacitance, inductance and resistance. The frequency response is studied for different cell dimensions. The model is proved in an experiment of NO₂ traces detection with a polyethylene cell using visible radiation. The photoacoustic signal is digitized through the sound port of a PC and further processed. Excellent agreement of the model with experimental data is obtained.

I. Introducción

La espectroscopía optoacústica (OA) es una herramienta muy sensible para detección de trazas gaseosas en el monitoreo de la contaminación ambiental, en medicina y biología. En el pasado se ha discutido el comportamiento acústico teórico de distintas celdas resonantes y no-resonantes. De esta manera se han comparado diferentes configuraciones con respecto a su respuesta. En particular, un modelo que describe celdas OA funcionando en los primeros modos longitudinales es el análogo acústico de una línea de transmisión eléctrica.⁽¹⁾ El método permite describir distintas geometrías y es aplicable a diferentes esquemas, como los que optimizan la relación señal/ruido incluyendo la entrada y salida de gases en nodos de presión de la cavidad acústica o evitando que el calentamiento periódico de las ventanas sea escuchado por el micrófono.

En este trabajo se presentan resultados cuantitativos de la teoría de línea de transmisión que permiten el diseño de una celda OA de flujo para medición de trazas de dióxido de Nitrógeno en Nitrógeno acoplada a través de un conducto a una cavidad de Helmholtz, que incluye el micrófono. El modelo se basa en una

cadena de mallas que representan secciones infinitesimales de la celda, lo cual permite incluir fuentes de excitación distintas distribuidas a lo largo de la misma. Esto permitiría analizar la respuesta para altas absorbancias y para régimen de saturación. La celda construida según los resultados teóricos es utilizada para validar el modelo. Para ello se estudia la respuesta de amplitud vs. frecuencia usando un láser de Nd:YAG con generación de segunda armónica intracavidad de alta repetición variable.

II. Teoría

Un resonador acústico puede ser considerado unidimensional cuando la longitud de onda del sonido sea mayor que las dimensiones transversales del mismo. Un método apropiado para describirlo está basado en la analogía de las ecuaciones acústicas unidimensionales y las ecuaciones electromagnéticas de una guía de onda, como un cable coaxial. Las ecuaciones acústicas de un sistema sin pérdidas se pueden escribir como:⁽²⁾

$$\frac{\partial p}{\partial t} + \frac{\rho c^2}{S} \frac{\partial u}{\partial x} = 0$$

$$\frac{\rho}{S} \frac{\partial u}{\partial t} + \frac{\partial p}{\partial x} = 0$$
(1)

donde p es la presión, u el caudal, ρ la densidad del gas, S la sección transversal del resonador y c la velocidad del sonido en el medio. Las correspondientes ecuaciones para una línea de transmisión son:

$$\frac{\partial V}{\partial t} + \frac{1}{C} \frac{\partial I}{\partial x} = 0$$

$$L \frac{\partial I}{\partial t} + \frac{\partial V}{\partial x} = 0$$
(2)

donde V es la diferencia de potencial, I la corriente, L y C la inductancia y capacitancia por unidad de longitud del cable, respectivamente. Por semejanza entre (1) y (2) se deduce la correspondencia entre los pares (p, u) y (V, I) ; de allí pueden deducirse las expresiones para la capacitancia (compliancia) e inductancia (inertancia) acústica de un conducto de longitud unidad: $C^* = S/\rho c^2$ y $L^* = \rho/S$.

Las pérdidas se introducen como una resistencia ohmica R por unidad de longitud del cable y conductancia G del dieléctrico aislante y las impedancias complejas resultan $i\omega L + R$ y $i\omega C + G$.

Análogamente, en el resonador acústico se suponen pérdidas de energía en una capa límite cercana a las paredes, que dependen de la conductividad térmica del gas en el caso de G^* y de la viscosidad para R^* , de la frecuencia y el radio del conducto.⁽¹⁾

La relación entre las presiones de la onda de sonido a la entrada y salida de un conducto de sección uniforme y longitud dx puede representarse por un circuito equivalente T , como la malla unitaria incluida en la figura 1.

El modelo puede ser utilizado para frecuencias inferiores a las correspondientes a la resonancia transversal de más baja frecuencia (modo azimutal):

$$f_{corte} = 1.84 c / 2 \pi r_{max}$$
(3)

donde r_{max} es el radio máximo de la celda.⁽²⁾

Si las secciones de tubos adyacentes son muy distintas, como en el caso de un resonador terminado en sendos *buffer*, se considera una impedancia serie compuesta por una resistencia e inductancia cuyos valores dependen de las secciones y perímetros de ambas secciones.⁽³⁾

La fuente de corriente dI , que representa el calor producido por la potencia de láser absorbida dW_{abs} , en condiciones adiabáticas, puede ser expresada como:

$$dI = \frac{\gamma - 1}{\rho c^2} dW_{abs}$$
(4)

donde $\gamma = c_p/c_v$ es la relación entre los calores específicos.

Debido a que la comprobación experimental se realiza con un láser visible y una celda con ventanas de vidrio óptico de alta calidad, no se considera calentamiento de las mismas. Se incluye, en cambio, un volumen de Helmholtz terminado en un micrófono electroreto de dimensiones pequeñas, conectado por un tubo angosto al punto medio del resonador. Esta configuración permite realizar experiencias donde es necesario alejar el micrófono del resonador.⁽⁴⁾

En la figura 1 se muestra el circuito equivalente de la malla unitaria y de la cavidad de Helmholtz. La impedancia Z y la admitancia Y de la malla unitaria se calculan en base a las dimensiones de la sección considerada (resonador o *buffer*). La fuente de corriente dI representa la energía del láser absorbida en una sección dx . Z_{diaf} es la impedancia de la transición del resonador al tubo que conecta con el volumen de Helmholtz (V_H), ver fig. 3; Z_{tb} y Z'_{tb} representan las impedancias complejas de la línea de transmisión que describe al tubo.⁽²⁾ La impedancia de carga de la misma está constituida por la transición a V_H (Z_{tr}) en serie con el paralelo de la impedancia Z_{aux} que representa al V_H y la del micrófono Z_{mic} .

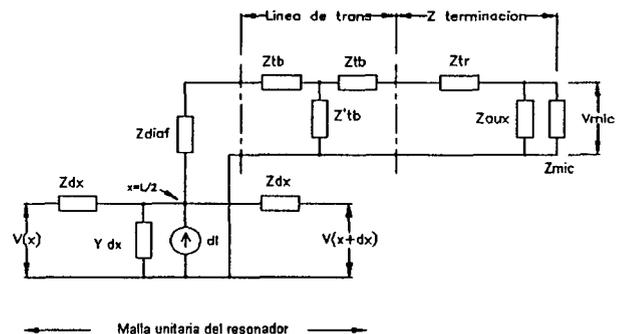


Figura 1. Circuito equivalente

Se introduce una corrección en los extremos abiertos del resonador (ΔL) que se agrega en ambos lados; ésta puede ser interpretada como un efecto de borde debido al pasaje de un campo unidimensional adentro del conducto a uno tridimensional afuera del mismo. Esta corrección puede aproximarse por:⁽²⁾

$$\Delta L \approx 0.6 r$$
(5)

donde r es el radio del resonador.

En lugar del formalismo matricial utilizado por otros autores^(5,6), hemos aplicado el modelo de línea de transmisión planteando las ecuaciones de Kirchhoff para cada nodo de corriente del circuito T , suponiendo en cada malla una fuente de corriente que representa el calor producido por la absorción de la radiación láser en ese tramo infinitesimal del conducto.

III. Diseño de la celda optoacústica

Se aplicó el modelo a una celda cilíndrica de largo total L con un resonador de radio $r \ll L$ y largo $L/2$, abierto en ambas puntas a sendos volúmenes *buffer* de gran sección y largo $L/4$ para evitar que el ruido eventual proveniente de las ventanas llegue al micrófono y asegurar máxima reflexión en los extremos del resonador abierto. Las condiciones de contorno, definidas por un antinodo de presión en las ventanas, permiten amplificación en las frecuencias de resonancia dadas por:

$$f_n = n c / 2(L + 2\Delta L) \quad n = 1, 3, 5 \quad (6)$$

Se pueden demostrar las siguientes relaciones para el factor de calidad Q de una celda operando en modos longitudinales y el factor de la misma $F = p/W_{abs}$ en una frecuencia de resonancia f_n :

$$\begin{aligned} Q_n &\propto r / L^{1/2} \\ F_n &\propto L \cdot Q_n / f_n S L \propto L^{1/2} / r \end{aligned} \quad (7)$$

En el diseño de la celda OA se impuso una frecuencia de resonancia alrededor de unos pocos kHz, donde es plana la respuesta del micrófono y la potencia media del láser pulsado por Q-switch, que varía con la repetición, superior a los 20 mW. Este último requerimiento asegura una mejor relación señal/ruido para medición de trazas. El radio del resonador debe permitir que el haz del láser no se disperse a partir de las paredes del mismo y no se produzca una señal OA espúrea.

Basado en estos condicionamientos se eligió un radio r de 6 mm y longitud total de la celda L 140 mm. El radio de los *buffer* se determinó aplicando el modelo para r fijo y distintos valores de D_{bf} (diámetro del *buffer*). En la figura 2 se muestran los resultados obtenidos: se observa una saturación en la respuesta de la celda para $D_b > 40$ mm. Se observa que la presión en los *buffer* cae a cero, salvo para un diámetro comparable al del resonador (curva de puntos).

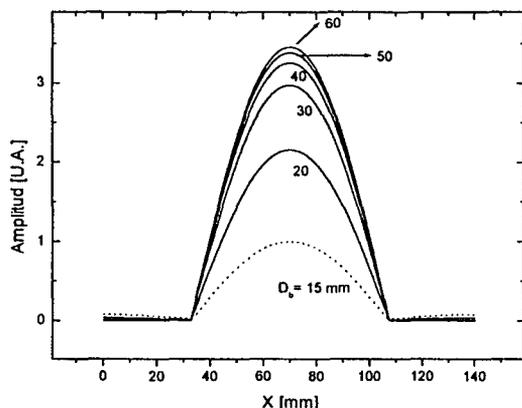


Figura 2. Amplitud de la onda acústica a lo largo de la celda, a la frecuencia de resonancia.

La entrada y salida de los gases se ubicó en los nodos coincidentes con la transición *buffer*-resonador para evitar ruidos provenientes de turbulencias en mediciones con flujo.

El diseño resultante se muestra en la figura 3.

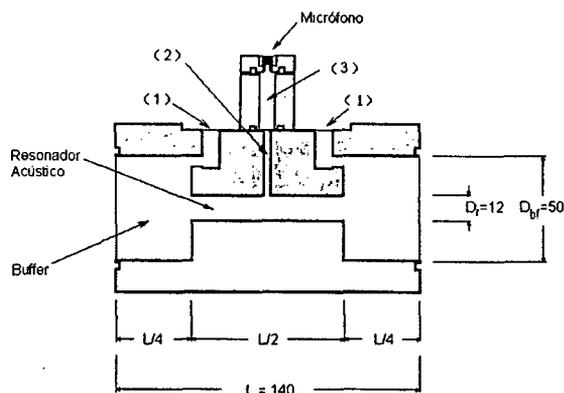


Figura 3. Corte transversal de la celda. Dimensiones en mm. (1) Entrada/Salida de gases, (2) Tubo: $\Phi = 3\text{mm}$ $l = 30\text{mm}$, (3) Volumen de Helmholtz ($V_H = 1225\text{mm}^3$).

IV. Experimento

Se construyó la celda en polipropileno de alta densidad para estudiar al mismo tiempo la bondad del modelo y el comportamiento de este material ante la adsorción del dióxido de nitrógeno, que es una molécula polar. El micrófono es un electreto standard de Knowles Inc. (Mod. EK3024) cuya curva de respuesta típica es accesible por catálogo.

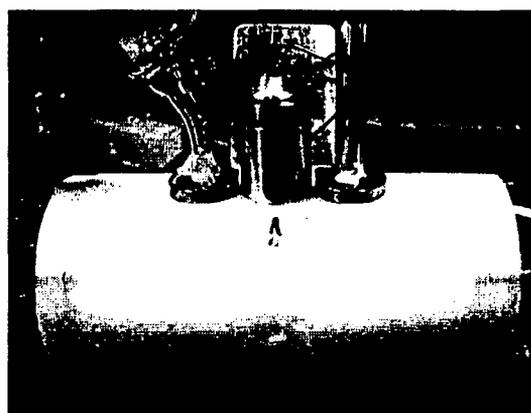


Figura 4. Foto de la celda

En la foto de la figura 4 pueden observarse el volumen de Helmholtz con el micrófono en su extremo y las conexiones de entrada/salida de gases.

El láser de excitación es un láser de Nd:YAG hecho en el laboratorio, bombeado por diodos con emisión en verde ($\lambda = 532$ nm, potencia hasta 40 mW en 5 kHz, estabilidad mejor que 10%, ancho de pulso 40 nsec FWHM, diámetro del haz ~ 2 mm).

La señal OA es digitalizada por la placa de sonido de una PC y procesada por FFT de alta resolución para cada frecuencia de repetición del láser.⁽⁷⁾ Se promedian

dos señales adquiridas durante 2 seg cada una para frecuencias de repetición distanciadas en 10 Hz desde 350 a 3400 Hz ($f_{coric} \approx 4000$ Hz). El sistema de adquisición se calibró en forma absoluta con señales conocidas de un generador de onda. El registro para cada frecuencia es normalizado respecto de la potencia media del láser medida simultáneamente. Durante la medición se lleva registro de la temperatura ambiente, la cual no varía en más de 0,5 °C.

En la figura 5 se muestra la respuesta en frecuencia, normalizada a la potencia (~ 20 mW), de la celda OA cuando el gas absorbente es NO₂ a 1,2 Torr en un baño de 700 Torr de Nitrógeno. Se puede observar, superpuesto al resultado experimental, la respuesta que se calcula por el modelo unidimensional descrito más arriba, donde se introducen como parámetros la corrección ΔL y la impedancia del micrófono. El programa calcula el factor F de la celda en base a 400 secciones de 0,35 mm de largo y para frecuencias espaciadas en 10 Hz. Se obtiene un resultado excelente en cuanto a amplitud, frecuencia de resonancia principal y Q con $\Delta L \sim 3$ mm (valor teórico aproximado 3,6 mm) e impedancia del micrófono: $R_{mic} = 1,25 \cdot 10^6$ N.s /m²; $L_{mic} = 77$ N.s² /m⁵ y $C_{mic} = 6 \cdot 10^{-12}$ m⁵/N.

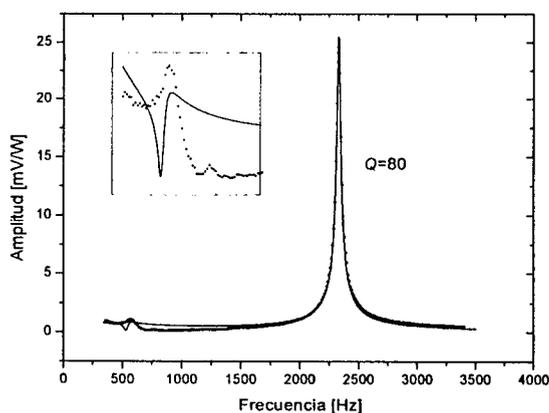


Figura 5a. Respuesta de la celda OA experimental (puntos) y modelo (trazo lleno). El inserto representa el detalle en baja frecuencia.

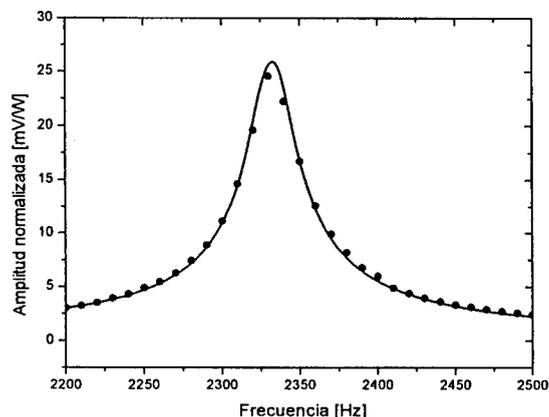


Figura 5b. Detalle de la respuesta alrededor de la resonancia.

No se poseen las características del micrófono utilizado; sin embargo estos valores se condicionan con las de un micrófono calibrado en fábrica por Bruel&Kjaer en las experiencias de Bijnen et al.⁽⁶⁾, modificando C_{mic} al doble.

Se puede observar un pico de resonancia de menor amplitud en la zona de bajas frecuencias, debido a la resonancia que introduce la cavidad de Helmholtz. La frecuencia de Helmholtz calculada⁽⁸⁾ en base a las dimensiones del tubo y volumen auxiliar resulta aproximadamente 700 Hz, que difiere en 10% del valor calculado por el modelo.

V. Conclusiones

Se consiguió un programa de cálculo que permite predecir con muy buena exactitud la constante de la celda, el factor de mérito Q y las frecuencias de resonancia, aún en un modelo de celda con geometría complicada por la conexión a un volumen auxiliar. Se demuestra además la eficiencia de los *buffer* en cuanto a supresión de señal proveniente de las ventanas. Asimismo el cálculo demuestra, como es de esperar, que los tubos de entrada y salida de los gases ubicados en nodos de la presión acústica no producen perturbaciones en el espectro OA.

Agradecimientos

Deseamos expresar nuestro reconocimiento a la Dra. L. Azcárate por el préstamo del láser de Nd:YAG utilizado en esta experiencia y al Lic. J. Codnia por su asistencia en la puesta a punto del mismo. Asimismo agradecemos al Sr. J. Luque por la ayuda brindada en los trabajos mecánicos, al Sr O. Vilar por su colaboración técnica y al Sr. Carlos Morales e Ing. F. González por los dibujos. Este trabajo fue financiado por la ANPCyT (PICT 04155), CITEFA y CONICET.

Referencias

- 1 - P.M. Morse y K.U. Ingard, *Theoretical Acoustics*, Princeton University Press, Princeton, NJ, 1986.
- 2 - A. Miklós, P. Hess y Z. Bozóki: *Rev. Sci. Instrum.* **72**, 1937-1955 (2001).
- 3 - S. Bernegger y M.W. Sigrist, *Infrared Phys.* **30**, 375-429 (1990).
- 4 - R. Kaestle y M.W. Sigrist, *Appl. Phys. B* **63**, 389-397 (1996).
- 5 - S. Bernegger y M.W. Sigrist, *Appl. Phys. B* **44**, 125-132 (1987).
- 6 - F.G.C. Bijnen, J. Reuss y F.J.M. Harren, *Rev. Sci. Instrum* **67**, 2914-2923 (1996).
- 7 - G. Santiago, V. Slezak y A. Peuriot, aceptado para su publicación en *Appl. Phys. B*.
- 8 - L.E. Kinsler, A.R. Frey, A.B. Coppens y J.V. Sanders, *Fundamentals of Acoustics*, John Wiley & Sons, New York, 4th.ed. (2000).