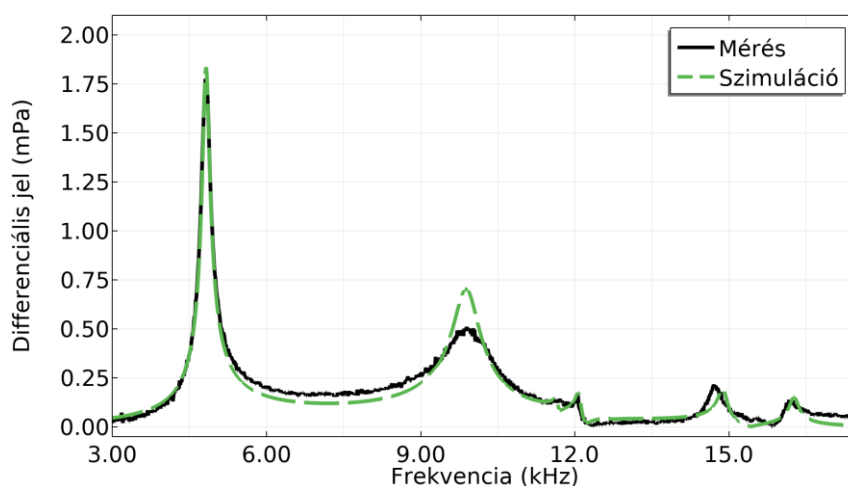


2.

A VÉGESELEMES MÓDSZER ALKALMAZÁSA A FOTOAKUSZTIKUS SPEKTROSKÓPIÁBAN

Csókási Áron¹, Dr. Bozóki Zoltán¹, Magashegyi István^{1,2,3}¹ Szegedi Tudományegyetem, Fizikai Intézet, Optikai és Kvantumelektronikai Tanszék, Szeged² Szegedi Tudományegyetem, Fizikai Intézet, Elméleti Fizikai Tanszék, Szeged³ HUN-REN Wigner Fizikai Kutatóközpont, Szilárdtestfizikai és Optikai Intézet, Budapest

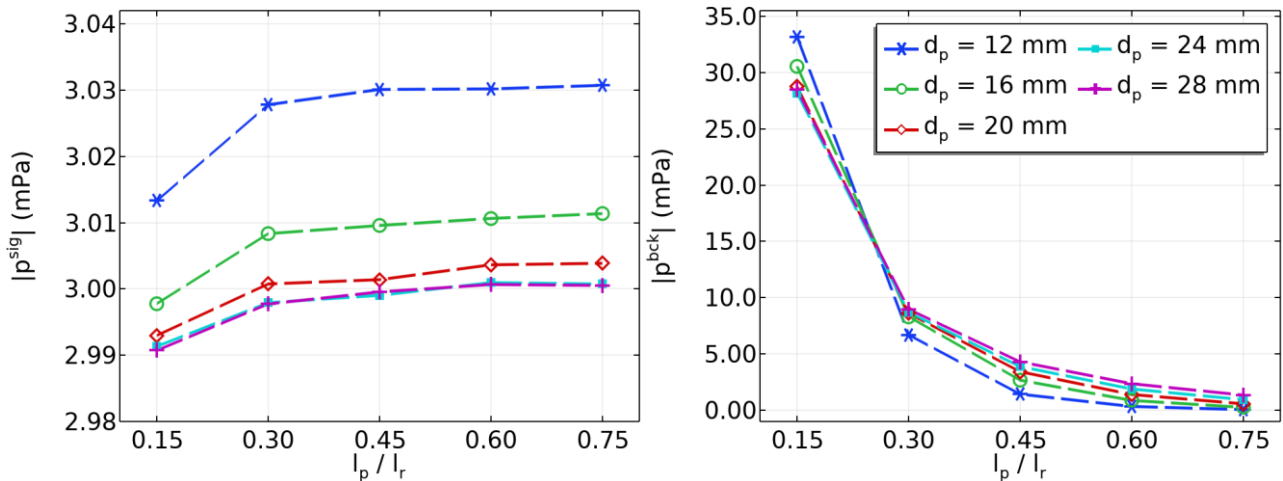
A fotoakusztikus spektroszkópia egy olyan módszer, amely az optikai abszorpció és az akusztikus jelenségek közötti kapcsolatot használja ki a ppm/ppb mennyiségű gázkoncentrációk kimutatására. Ennek oka, hogy a módszer rendkívül érzékeny, nem igényel optikai detektort és közvetlenül az abszorpcióból származó hangot méri. Az elmúlt évtizedekben számos területen – környezetfizika, orvosi diagnosztika, olaj- és földgázipar – vált megbízható mérési eljárássá. A jelenséget A. G. Bell fedezte fel 1880-ban és a kezdeti izgalmas kísérletek után az effektus nem örvendett nagy érdeklődésnek, mivel fényforrásnak alapvetően a Nap, detektornak pedig csak az emberi fül állt rendelkezésre. Az előző évszázad második felében megjelenő modern lézertechnika és a jelfeldolgozás fejlődésével a fotoakusztikus rendszerek érzékenysége és szelektivitása jelentősen nőtt, azonban a pontos mérés továbbra is nagymértékben függ a fotoakusztikus kamra geometriai és akusztikai tulajdonságaitól. Párhuzamosan ezzel a folyamattal a végeselem-módszer (VEM) és az ehhez kapcsolódó numerikus eszközök is rohamos fejlődésen mentek keresztül, ezzel lehetővé téve az összetett fizikai rendszerek részletes vizsgálatát és ezen fizikai rendszerek optimalizálását már a tervezési fázisban. A bemutatni kívánt munka fő célja egy ún. differenciális, longitudinális fotoakusztikus kamra modellezése és geometriai optimalizálása végeselemes módszer segítségével. Az optimalizálás célja a kamra jel-háttérzaj viszonyának növelése a geometria kis mértékű változtatásával.



1. ábra: A mért és a szimulált rezonanciagörbe 3 kHz-től 17,5 kHz-ig.

A kutatás során a Szegedi Tudományegyetem Fotoakusztikus Kutatócsoportja által kifejlesztett fotoakusztikus mérőberendezéssel mértük a fotoakusztikus kamra rezonanciagörbét 3 – 17,5 kHz tartományban. A kimért rezonanciacsúcsok fizikai hátterét derítettük fel a végeselem-módszer segítségével. A méréshez használt és modellezni kívánt kamratípus két hengeres rezonátort tartalmaz, amelyek a végükön egy-egy puffertérfogattal vannak összekötve. A rezonátorok első longitudinális módusa gerjeszthető a legnagyobb hatékonysággal. A numerikus modellezés a COMSOL Multiphysics és a Spyder szoftverek segítségével valósultak meg. A végeselem-módszer lényege, hogy a fizikai problémát minden esetben egy matematikai problémává kell alakítani, ami (parciális) differenciálegyenletekhez vezet. A differenciálegyenletek numerikus megoldását egy ún. végeselem

diszkretizáció (hálózás) előzi meg. Ez azt jelenti, hogy a vizsgált geometriát véges számú, egymáshoz csomópontokban kapcsolódó elemekre bontjuk fel, ezek a hálóelemek. A differenciálegyenletek numerikus megoldása során a hálóelemek csomópontjaiban kapjuk meg a keresett függvény(ek) értékeit, ezután a módszer ezekből az értékekből interpolációval adja meg a teljes geometria bármely pontjában a keresett függvény(ek) értékeit. Mivel numerikus módszerről van szó, ezért igényli a konvergencia vizsgálatát is. Korábban már mások is foglalkoztak fotoakusztikus rendszerek VEM szimulációjával és pontos egyezést mutattak a szimulációs eredményeik a mérésekkel [1, 2, 3].



2. ábra: A fotoakusztikus jel (balra) és a háttérzaj (jobbra) amplitúdójának változása különböző puffertérfogat esetén. A d_p paraméter a puffer átmérője az l_p/l_r pedig a puffer és rezonátor hosszának aránya.

A mérés után a szimulációs térben készítettük el a modellt, ami megadja a vizsgált kamra válaszát az adott modulációs frekvenciatartományra. Az eredmények alapján a numerikus modell jó egyezést mutat a rezonanciagörbe tendenciájában és jelszintjeiben a mért eredményekkel, a mérés verifikálja a modell érvényességét (1. ábra). A verifikálás után egy lehetséges módszert dolgoztunk ki a háttérzaj szimulálására, amely segítségével egy, a kamrára jellemző mennyiséget lehet definiálni: jel–háttérzaj arány (*signal-to-background ratio*, SBR). A háttérzaj ebben az esetben a lézer-ablak kölcsönhatás által generált akusztikus hang. Ez két fő mechanizmuson keresztül lép fel: vagy fényszórás útján történik, amikor a fotonok impulzusa átadódik az ablak felületének, ami mechanikai rezgéseket okoz, amelyek nyomáshullámokat generálnak; vagy az ablak felületének fényelnyelés útján történő felmelegedése révén, ami további fotoakusztikus forrást eredményez [3]. Az említett mechanizmusok közül csak a másodikat vettük figyelembe, így kettő hőforrást definiáltunk: egy, ami a gázminta melegítéséhez tartozik, a másik az ablak felmelegedéséhez tartozó. Ezen optimalizálás alatt a geometriát egyszerűbbnek rajzoltuk meg és szimmetriasíkokat is alkalmaztunk, ezzel csökkentve a számítási időt. A jel–háttérzaj viszony maximalizálásához használt szimuláció során a puffertérfogat átmérője és hossza változott. Az SBR számításához mindkét hőforrás fotoakusztikus hangkeltése esetén megadtuk a differenciális jelet az adott frekvenciatartományban. Az így kapott jeleket egy Cauchy–Lorentz-eloszlást követő függvényvel illesztettük, majd az illesztett függvények amplitúdóinak hányadosaival adtuk meg az adott SBR értéket. Az eredmények alapján elmondható, hogy a fotoakusztikus jel (a mérendő gázkomponens lézergörjesztése esetén detektálható jel) amplitúdója alig változik (2. ábra balra) a puffer méreteinek módosításával, ugyanakkor a háttérzaj (az ablak felmelegedése által generált akusztikus jel) érzékenyen reagál (2. ábra jobbra) ezekre a változtatásokra: a pufferhossz növelésével olyan geometria konstruálható, amely esetén a két rezonátorban lévő nyomás azonos fázisban van, ezáltal a differenciális mérés hatásosan kioltja a háttérzajt. A végelelem-módszer segítségével olyan geometriai konfigurációt is meg lehet határozni, amely esetén a fotoakusztikus kamra jel–háttérzaj aránya a harmincszorosára növelhető.

Felhasznált irodalom

- [1] V. Zeninari et al., Photoacoustic Detection of Methane in Large Concentrations with a Helmholtz Sensor: Simulation and Experimentation. (*Int J Thermophys* **37**, 7, 2016).
- [2] B. Parvitte et al., Quantitative simulation of Photoacoustic signals using finite element modelling software. (*Appl. Phys. B* **111**, 383-389, 2013).
- [3] M. Cotterell et al., Optimizing the performance of aerosol photoacoustic cells using a finite element model. Part 1: Method validation and application to single-resonator multipass cells. (*Aerosol Science and Technology*, 53(10), 1107–1127., 2019).