引用格式: ZHAO Nan, LIU Yang, ZHAO Ningyang, et al. Establishment and Optimization of Photoacoustic Cell Model in Photoacoustic Spectrum Detection System[J]. Acta Photonica Sinica, 2021, 50(7):0730001 赵南,刘阳,赵宁阳,等,光声光谱检测系统中光声池模型的建立与优化[J],光子学报,2021,50(7):0730001

光声光谱检测系统中光声池模型的建立与优化

赵南,刘阳,赵宁阳,马珑格,李媚聪,焦晶晶,丁琛斐 (石家庄铁道大学电气与电子工程学院,石家庄 050043)

摘 要:光声池作为光声光谱气体检测系统中的核心器件直接影响系统的检测精度,以经典圆柱形光声池为基础研究对象,利用有限元分析软件,结合压力声学及热粘性声学两种物理场对光声池内的声热耦合过程进行建模,通过仿真对比谐振腔和缓冲腔的几何参数变化对光声池性能的影响,进而确定其最优尺寸。仿真结果表明:谐振腔、缓冲腔的长度和半径均会影响谐振频率和声压。充分考虑对比结果及工业制造难度后,选定谐振腔最佳长度为120 mm,最优半径为3 mm,缓冲腔半径为35 mm。在此基础上,设计了一种谐振腔与缓冲腔为圆角连接的光声池,与同尺寸直角光声池相比,圆角光声池在提高光声信号和降低流动噪声干扰方面更具优势,品质因数提高至1.109倍,池常数增大到3635.1 Pa·cm/W,声压提高到1.26×10⁻⁵Pa。在甲烷气体的浓度检测中,系统灵敏度可达到0.87 ppm,检测结果较理想,符合高灵敏度的要求。因此,圆角连接光声池在性能上有明显提升,可为光声池的优化设计提供参考。

关键词:光声光谱;仿真建模;有限元分析;光声池;优化设计

中图分类号:TN249;O439

文献标识码:A

doi:10.3788/gzxb20215007.0730001

Establishment and Optimization of Photoacoustic Cell Model in Photoacoustic Spectrum Detection System

ZHAO Nan, LIU Yang, ZHAO Ningyang, MA Longge, LI Meicong, JIAO Jingjing, DING Chenfei

(Schoolof Electrical and Electronic Engineering, Shijiazhuang Tiedao University, Shijiazhuang 050043, China)

Abstract: The photoacoustic cell, as the core component of the photoacoustic spectroscopy gas detection system, directly affects the detection accuracy of the system. Based on the classic cylindrical photoacoustic cell, the finite element analysis software is used to combine the two physics of pressure acoustics and thermoviscous acoustics and build a model to simulate the acoustic—thermal coupling process in the photoacoustic cell. The effect of different geometric parameters of the resonant cavity and buffer cavity on the performance of the photoacoustic cell is compared through simulation, and then, the optimal size is determined. The simulation results show that the length and radius of the resonant cavity and the buffer cavity will affect the resonance frequency and acoustic pressure. After fully considering the comparison results and the difficulty of industrial manufacturing, the optimal length of the resonant cavity is selected as 120 mm, the optimal radius is 3 mm, and the buffer cavity radius is 35 mm. On this basis, a photoacoustic cell with a rounded connection between the resonant cavity and the buffer cavity is designed. Compared with the right—angle photoacoustic cell with the same size, the round—corner photoacoustic cell has more advantages in improving the photoacoustic signal and reducing the flow noise interference. The quality

基金项目:河北省省级科技计划(河北省重点研发项目)(No.18273901D),河北省教育厅项目(No.Z2015060),校预研项目(No.20152026)

第一作者:赵南(1982—),女,讲师,博士,主要研究方向为光声光谱技术应用。Email: znyatou@sohu.com

通讯作者:刘阳(1996—),女,硕士研究生,主要研究方向为微弱气体信号检测。 Email: 1536605913@qq.com

收稿日期:2020-12-07;录用日期:2021-02-24

factor is increased to 1.109 times, the cell constant is increased to $3.635.1~{\rm Pa\cdot cm/W}$, and the acoustic pressure is increased to $1.26\times 10^{-5}~{\rm Pa}$. In the concentration detection of methane gas, the system sensitivity can reach $0.87~{\rm ppm}$, and the detection result is ideal, which meets the requirements of high sensitivity. Therefore, the performance of the round-corner photoacoustic cell has been significantly improved, which can provide a reference for the optimal design of the photoacoustic cell.

Key words: Photoacoustic spectroscopy; Simulation modeling; Finite element analysis; Photoacoustic cell; Optimal design

OCIS Codes: 300.6360; 260.5740; 280.4788; 300.6380; 300.6390

0 引言

现有的气体检测技术中,光声光谱技术是一种灵敏度高、选择性好的痕量气体检测技术。该技术以光、热、声间的能量转换即光声效应为基础,通过对声压信号的处理实现气体浓度检测。目前该技术已在工业生产、环境检测[1-2]、医疗[3]、电气设备等领域广泛使用[4-6]。

光声池作为产生光声效应的载体,其性能直接影响整个检测系统的灵敏度,因此,光声池的设计极其关键。经典的圆柱形光声池已在国内外研究中广泛使用,近年来,亦有学者在此基础上进行了各种新型光声池的探讨。KOST B等^[7]提出一种多个轴对称截锥连接的光声池,在17维搜索空间中找到的最佳解决方案是具有近似喇叭形末端的对称谐振腔,信号强度提高了约36%;陈伟根课题组^[8]利用一阶纵向谐振光声池探测乙炔分子时,在缓冲腔内部增加了声学滤波器,减少了背景噪声;ULASEVICH A L 等^[9]提出了一种小型化共振II型光声池,降低了麦克风噪声的影响,具有更高的气体检测灵敏度。郑德忠课题组^[10]提出一种长度可调节的T形光声池,不仅提高了光声池内声压,也解决了谐振频率随外界环境变化而发生的漂移问题;赵彦东课题组^[11]设计了一款基于石英增强光声光谱技术的椭圆形光声池,并增加气体吸收路程,提高了品质因数;HAOUARI R课题组^[12]设计了一款土豆形状的谐振腔,通过声学拓扑优化方式提高了灵敏度,获得更小的谐振频率,输出声压为圆柱形谐振腔的两倍;董磊课题组^[13]提出使用定制大尺寸音叉使得研究领域扩展到THz,在弛豫率更快的状态下提高信号检测灵敏度。程刚课题组^[14]将谐振腔的两端设计成喇叭形,减小了光束打在缓冲腔壁上带来的噪声影响,不仅增强了光声信号,也提高了光声池品质因数和池常数。

在以一阶纵向圆柱形光声池为基础的研究中,谐振腔、缓冲腔的几何尺寸会直接影响光声信号的大小,而现有的研究中,大多是直接选取其尺寸,鲜有进行具体仿真对比和分析说明的。鉴于光声池结构优化设计过程较复杂,且多样本对比分析时所需加工周期长、成本高。本文首先用有限元分析软件在压力声学与热粘性声学两种物理场下,对两端带圆柱形缓冲腔的圆柱形光声池的几何参数进行了小步长仿真对比分析,并根据激光器及实际加工情况确定其最优结构尺寸。并在上述研究的基础上,提出一种新型的圆角连接光声池,即缓冲腔与谐振腔以圆角方式连接,减少气体流动带来的噪声影响,增大声压信号的幅值,提高系统检测灵敏度。

1 基本原理

光声光谱技术是利用光声效应检测气体的一种方法^[15],其原理为待测分子吸收光能后释放出的热能会在气体介质中产生声波^[16],通过高灵敏度的微音器将微弱声信号转化为电信号^[17],并用锁相放大器进行信号处理,检测系统结构如图1所示。

以圆柱形光声池为基础,调制光源通过充满待测气体的光声池,气体吸收光能产生的热源为 $H(r,\omega)$,其表达式为

$$H(r, \omega) = \alpha I(r, \omega) = N\sigma C P_{\text{light}} g(r, \omega)$$
(1)

式中,r为柱坐标系 (r,θ,z) 下的向量; ω 为光源调制频率; α 为气体吸收系数,该值与物质在波数v处的吸收谱线强度、吸收线型、温度、压强等因素有关; $I(r,\omega)$ 为入射光光强;N为气体分子数密度; σ 为气体分子吸收截面;C为待测气体浓度; P_{light} 为入射光功率; $g(r,\omega)$ 为归一化的光强分布。

光声池内由于热量造成气体压力变化的声压信号波动方程为[18]

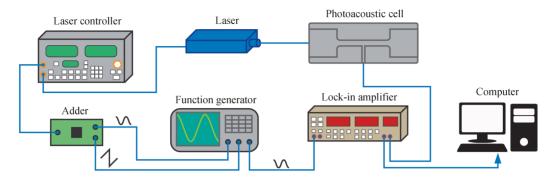


图1 检测系统结构

Fig. 1 Structure diagram of detection system

$$\left(\nabla^2 + \frac{\omega^2}{c^2}\right) P(\mathbf{r}, \omega) = \frac{\gamma - 1}{c^2} i\omega H(\mathbf{r}, \omega)$$
 (2)

式中, ∇^2 表示拉普拉斯算符,c为声速, γ 为定压摩尔热容与定容摩尔热容的比值。求解非其次波动方程可得

$$P(\mathbf{r}, \boldsymbol{\omega}) = \sum_{i} A_{i}(\boldsymbol{\omega}) P_{i}(\mathbf{r})$$
(3)

式中 $,A_{i}(\omega)$ 为第j模态下的振幅 $,P_{i}(r)$ 为声压简正模态,其值满足波动方程及边界条件

$$\left(\nabla^2 + \frac{\omega_j^2}{c^2}\right) P_j(\mathbf{r}) = 0 \tag{4}$$

$$\nabla P_j(\mathbf{r}) \cdot \mathbf{n} \Big|_{\text{surface}} = 0 \tag{5}$$

在标准圆柱形光声池中 $P_i(r)$ 可用柱坐标系 (γ, θ, z) 表示为

$$P_{j}(\mathbf{r}) = \frac{\cos}{\sin} (m\theta) [AJ_{m}(k_{r}r)] [C\sin(k_{z}z) + D\cos(k_{z}z)]$$
(6)

式中,A、B、D为系数, J_m 为第一类贝塞尔函数, $k_r = \pi \alpha_{mn}/R_{res}, k_z = \pi q/L$, α_{mn} 为第 m 阶贝塞尔函数的第 n个根,g、m 和 n分别为简正模态纵向、角向和径向的特征数,L 为谐振腔长, R_{res} 为谐振腔半径。

考虑光声池内的声能损耗,引入品质因数Q,圆柱形谐振光声池的光声信号幅值表示为

$$A_{j}(\boldsymbol{\omega}) = -\frac{\alpha Q(\gamma - 1)LCP_{\text{light}}}{V_{c}\boldsymbol{\omega}_{j}} \frac{1}{L_{c}} \iint P_{j}^{*}(\boldsymbol{r}) g(\boldsymbol{r}) dV_{c}$$

$$(7)$$

式中, ω_i 为光声池内声谐振最低阶简正角频率;V。为谐振腔体积。令积分项为 J_i 为

$$J_{j} = \frac{1}{I} \iint P_{j}^{*}(\boldsymbol{r}) g(\boldsymbol{r}) dV_{c}$$
 (8)

池内声压可表示为

$$P(\mathbf{r}, \omega_j) = -\frac{(\gamma - 1)Q_j L J_j P_j(\mathbf{r})}{\omega_i V_o} C \alpha P_{\text{light}}$$
(9)

将 $-(\gamma-1)Q_jLJ_jP_j(r)/\omega_jV_c$ 记为 C_{cell} , 称为光声池常数。因此, 在光声池内激发得到光声信号 S 的表达式为 $^{[19]}$

$$S = C_{\text{cell}} \alpha P_{\text{light}} S_{\text{m}} C \tag{10}$$

(11)

式中、 S_m 为微音器灵敏度。

已知激光功率、池常数及微音器灵敏度时,通过测量光声信号S反演可得待测气体的浓度C。 光声池处于两端开口,工作在一阶纵向谐振状态下,即[qmn]为[100]时,谐振频率 f_{100} 可表示为[14]

品质因数 Q₁₀₀ 为^[14]

$$Q_{100} = \frac{R_{\text{res}}}{d_{\text{v}} + (\gamma - 1)d_{\text{h}}(1 + 2R_{\text{res}}/L)}$$
(12)

式中, d, 为粘滞边界层厚度, d, 为热边界层厚度, 分别表示为

$$d_{v} = \sqrt{\frac{2\eta}{\rho_{0}\omega_{j}}} \tag{13}$$

$$d_{\rm h} = \sqrt{\frac{2KM}{\rho_0 \omega_i C_p}} \tag{14}$$

式中, ρ_0 为气体密度, η 为粘滞系数,K为热导率, C_p 为定压摩尔热容,M为气体摩尔质量,而圆柱形光声池在一阶纵向谐振模式下的池常数 C_{100} 表达式为 [20]

$$C_{100} = \frac{2(\gamma - 1)QL}{\pi\omega V_c} \tag{15}$$

2 建模与仿真

以两侧带圆柱形缓冲腔的圆柱形光声池为研究对象,其结构示意图如图2所示。利用COMSOL软件对该光声池进行建模,在压力声学与热粘性声学两种物理场下,对光声池的几何参数进行了小步长仿真对比分析,并结合实际情况给出缓冲腔、谐振腔的最优尺寸。

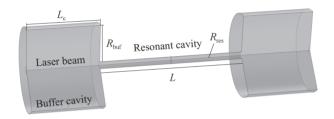


图2 光声池结构示意图

Fig. 2 Schematic diagram of photoacoustic cell structure

2.1 光声池模型建立

光声信号在光声池内的传播遵循波动方程,在实际检测过程中,光声信号在光声池内主要会有粘滞损失和热损失,即粘滞损耗 d_v和热传导损耗 d_h。为了使分析计算更加精确,采用边界层网格剖分,预定义普通物理场极细化网格,其中最大单元格尺寸为2.4 mm,最小单元格为0.004 8 mm,边界层层数定义为10,拉伸因子为1。边界层厚度 d_{visc}根据式(16)计算,划分为3652个域单元格和272个边界单元,其中包括2134个三角形、1518个四边形,网格剖分如图3所示。与此同时,设置光声池内壁速度场为无滑移,温度场为等温的边界条件,减少其他因素的干扰。

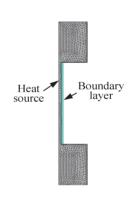


图 3 光声池网格模型 Fig.3 Grid model of photoacoustic cell

$$d_{\rm visc} = 0.22 \sqrt{\frac{100}{f_{\rm min}}} \tag{16}$$

式中,fmin表示扫描最低频率。

检测气体为体积分数为 0.01% 的甲烷气体,中心波长 1 653.7 nm,并且选择 25℃下的气体分子数,吸收截面通过 HITRAN数据库选取。为了使模型的仿真环境更贴近于实验环境,光声池内缓冲气体材料定义为氮气,氮气的物理常数如表 1 所示。光源设置遵循式(1),并以圆柱形入射光声池,光源功率为 14.3 mW,光束的高斯分布展宽为 0.5 mm。

表1 氮气的物理常数 Table 1 Physical constants of nitrogen

Substance	$\rho_0/(\mathrm{kg}\cdot\mathrm{m}^{-3})$	γ	$M/(\operatorname{kg}\cdot\operatorname{mol}^{-1})$	$\eta/(\operatorname{pa}\cdot \operatorname{S}^{-1})$	$K/(\mathbf{W} \cdot \mathbf{m}^{-1} \cdot \mathbf{K}^{-1})$	$C_P/(\mathbf{J} \cdot \mathbf{mol}^{-1} \cdot \mathbf{K}^{-1})$
N_2	1.25	1.401	0.028	1.75×10^{-5}	26×10^{-3}	29.1

2.2 光声池模型几何参数的研究

光声池的几何尺寸会对光声信号产生较大的影响,在设计优化结构前,确定谐振腔和缓冲腔的几何尺 寸极其重要。根据文献[19]可知,缓冲腔长度L为声波波长 λ 的1/4,谐振腔长度为L的1/2时可较好地降低 噪声,即 $l_{i}=L/2=\lambda/4$,因此,仿真设置参数时,可只定义谐振腔长度L,缓冲腔长度L用L/2表示。

在已建模型的基础上,运用参数化扫描对光声池的3个变量即谐振腔长度L、谐振腔半径 R_{mn} 、缓冲腔半 径 R_{but} 进行研究。由于中部截面处声压值处处相等[21],选定谐振腔中心边界点处研究每个变量声压信号的 影响,采用固定2个变量,改变另1个变量的方法,以步长20Hz进行粗扫,扫描结果如图4所示,图中从左至 右可明显得出9组峰柱,9组峰柱从左到右依次为谐振腔长度 L=140 mm、130 mm、120 mm、110 mm、100 mm、 90 mm、80 mm、70 mm、60 mm, 手调 R_{res} 、 R_{tot} 所对应的数值。为了突出结果,对仿真结果进行了颜色归类,图 中可明显看出 R_{rs} 越大,声压越低。每个峰柱中同色的声压曲线簇是同一L和 R_{rs} ,手调 R_{tot} 所得。

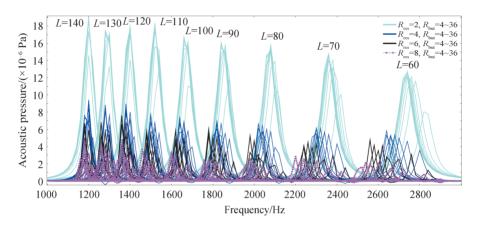


图 4 三个变量的粗扫仿真结果

Fig. 4 Rough scanning simulation results of three variables

由图 4 可看出, 当 L 小于 100 mm 时, 声压值明显降低。为了得到更好的声压响应, 选取 L 大于 100 mm 的范围,进行步长为5Hz的细扫,为了便于比较结果,将L最大值选取为170mm,扫描结果如图5所示,可看 出声压峰值大致呈现递减趋势,其中,谐振腔半径同样只选取了2 mm、4 mm、6 mm、8 mm。

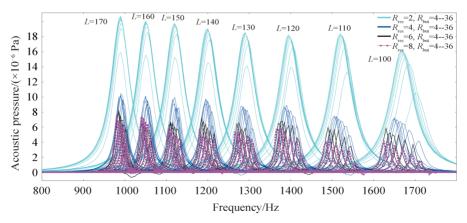


图 5 三个变量的细扫仿真结果

Fig. 5 Detailed scanning simulation results of three variables

为了提高精确度,对 R_{res} 选取 2 mm、3 mm 和 4 mm,进行再一次细化仿真,当 R_{res} 为 2 mm 时,声压相对较高,但是 2 mm 的半径容易使激光光束打在光声池内壁上,带来噪声。由图 6 可知,谐振腔半径为 3 mm 时的声压总体高于 4 mm 时的声压,且半径变化对谐振频率影响较小,综合考虑选取 3 mm 的谐振腔半径。由谐振腔半径为 3 mm 时的声压图可看出,总体声压呈递减趋势,但总体变化不明显,为了使光声池小型化、便携化,综合考虑选取谐振腔的长度为 120 mm。

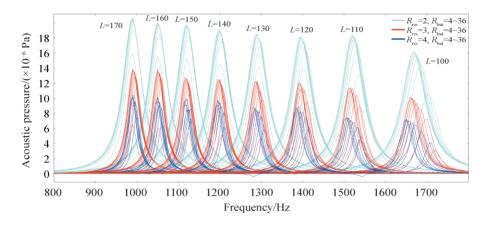


图 6 谐振腔半径为 2 mm、3 mm 和 4 mm 时的声压

Fig. 6 Acoustic pressure with resonant cavity radius of 2 mm, 3 mm and 4 mm

研究表明缓冲腔半径的改变会造成谐振频率、品质因数、池常数的变化^[22]。此外,缓冲腔还可减小背景噪声。由图7可以明显看出改变缓冲腔半径会造成声压和谐振频率的变化,那么,根据式(12)、(15)可知相应理论值会发生变化,因此,缓冲腔的大小需进一步分析。由图7(a)可知缓冲腔半径变化时池内声压及谐振频率发生变化,为了寻找出最优尺寸,进一步细化仿真,分析结果如图7(b)所示,可看出当缓冲腔半径为35 mm时声压最大,因此缓冲腔半径选取35 mm。

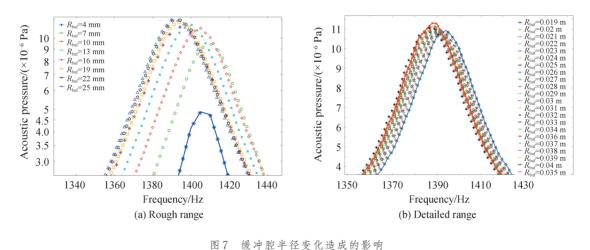


Fig. 7 The influence caused by the change of the buffer cavity radius

选定谐振腔腔长为 120 mm、半径为 3 mm,缓冲腔腔长为 60 mm、半径为 35 mm,建立模型后,同样加入热源,设置在 6000 Hz内的频域中进行粗扫,声压与频率响应曲线如图 8 所示。在 1400 Hz 左右有明显的峰值,而在 2900 Hz、4200 Hz、5800 Hz附近也有峰值,但相对响应较小,细化频率范围为 $1300 \sim 1500 \text{ Hz}$,步长为 2 Hz,再一次进行扫描,由图 9 可知最高声压为 $1.19 \times 10^{-5} \text{ Pa}$,此时谐振频率为 1387.9 Hz。

为了看出光声池内的声压分布情况,选择谐振频率为1387.9 Hz,此时光声池内声压分布情况如图10所示,图中颜色从蓝到红代表声压从弱到强,谐振腔的中心位置声压最大,达到1.19×10⁵ Pa,因此,光声池内的声压最大处适合安装微音器,而在两端声压最小处适合设置气体进出口。

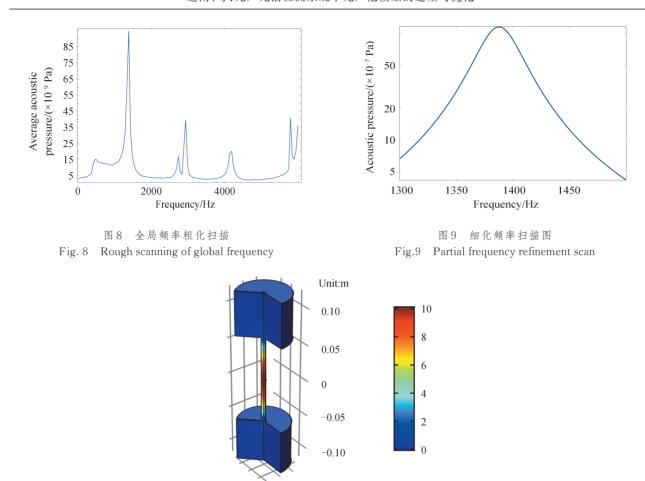


图 10 1 387.9 Hz 时光声池内声压分布情况

Fig.10 The distribution of acoustic pressure in the photoacoustic cell at 1 387.9 Hz

3 光声池的优化研究

从光声池几何结构分析中可知,光声池的几何参数很大程度会影响光声池的谐振频率、品质因数和池常数,这些性能会影响光声光谱检测系统灵敏度。因此,需进一步探究光声池的优化设计。在圆柱形光声池基础上提出一种圆角连接谐振腔和缓冲腔的光声池,如图 11 所示,圆角的连接方式会让气体平缓地进入谐振腔内,减少气体流动带来的噪音影响,那么,圆角的大小需进一步确定。通过试验设计的方式采用单变量方法,改变圆角的半径,步长为 1 mm,频率范围为 1 300~2 000 Hz,图 12 为直角、圆角光声池声压与谐振频率响应对比图,从图上明显看出,圆角连接光声池与直角光声池相比,中心声压有所提高。

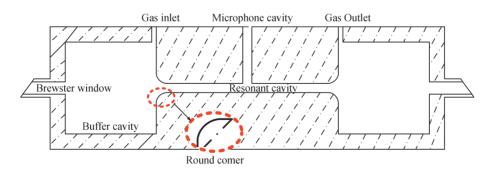


图 11 圆角光声池

Fig. 11 Photoacoustic cell with rounded corners

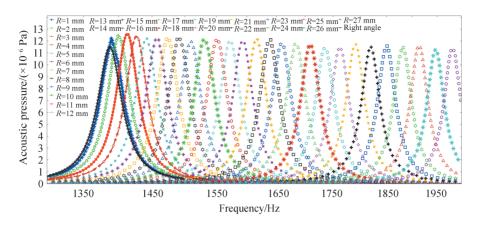


图 12 直角与圆角光声池声压对比

Fig. 12 Acoustic pressure comparison of right-angle and round-angle photoacoustic cell

由于圆角半径的增加会导致谐振频率增加,不利于池常数的提高,在此只考虑对直角光声池与1 mm到 10 mm的圆角光声池的性能进行研究,计算结果如表 2~3 所示,可看出谐振频率最大有 144.1 Hz 的变动,与此同时,品质因数会有所提高,在半径为 0.003 m时,圆角光声池的品质因数为直角光声池品质因数的 1.109倍,并且此时声压有明显的上升,其二维声压图如图 13 所示,最高声压为 1.26×10⁻⁵ Pa,根据式(15)得此时的理论值池常数提高到 3 635.1 Pa·cm/W,并由表中平均声压一栏可知光声池内平均声压会随着半径的增大而减小,但是幅度减小得不明显,而且圆角光声池的平均声压高于直角光声池内声压,综合考虑选取选取半径为 0.003 m的圆角。

表 2 直角光声池性能数据

Table 2 Performance data of right-angle photoacoustic cell

f/Hz	Q	P/Pa	$C_{\text{cell}}/(\text{Pa} \cdot \text{cm} \cdot \text{W}^{-1})$
1 387.9	32.341	0.099 7	3 552.3

表 3 圆角光声池性能数据

Table 3 Performance data of round corner photoacoustic cell

R/m	f/Hz	Q	P/Pa
0.001	1 390.7	35.564	0.126 86
0.002	1 401.2	35.699	0.116 06
0.003	1 413.9	35.859	0.111 24
0.004	1 427.5	36.031	0.106 74
0.005	1 442.6	36.221	0.104 89
0.006	1 458.7	36.432	0.102 45
0.007	1 475.4	36.631	0.100 39
0.008	1 493.6	36.856	0.099 33
0.009	1 512.7	37.091	0.0980 5
0.01	1 532.0	37.327	0.098 47

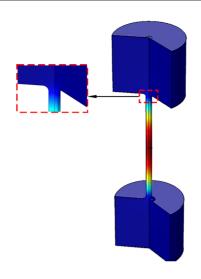


图 13 圆角光声池声压分布

Fig. 13 Acoustic pressure distribution of a photoacoustic cell with rounded corners

4 实验验证

根据光声光谱检测技术的相关理论、第 2.2 节光声池尺寸的确定与第 3 节光声池的优化,建立如图 1 的检测系统,光声信号检测系统主要由激励光源调制、光声信号产生和信号处理部分组成。构建的气体监测系统主要检测甲烷气体,检测系统启动后,先由配气系统配置标准气体,通过质量流量计(Horiba, D519MG)控制气体以 200 mL/min 的速率由进气口进入自制光声池内,其中,此光声池采用导热率较高的铜制造,腔体内壁抛光镀镍,主要由谐振腔、两个缓冲腔、进出气口、两个布鲁斯特窗口构成,且谐振腔与缓冲腔圆角连接,其尺寸与仿真结果相同,谐振腔长度为 120 mm、半径为 3 mm,缓冲腔长度为 60 mm、半径为 35 mm。由光纤耦合激光器(中科院,FC1654)经过激光控制器(ILX Lightwave,LDC3900)和函数发生器(Tektronix,TDS1012)调制后发出与甲烷气体分子吸收谱线一致的光束,再射入光声池内。光声池中气体分子吸收光能后转化的声波信号由安装在谐振腔中心与腔壁齐平的微音器(北京声望,MPA416)采集,其灵敏度为 50 mV/Pa,通过锁相放大器(Stanford Research Systems,SR830)解调,采集卡(National Instruments,NI-USB6216)进行采集信息,并连接计算机进行信号处理。

实验在常压下进行,温度控制在25°C。光声池内先充5 min高纯 N_2 ,再充人体积分数为0.01%的甲烷气体,调制激光器使其波长输出控制在甲烷吸收峰1654 nm 处,控制调制频率在 $1000\sim1800$ Hz范围内,对光

声信号进行多次测量取平均值,如图 14 所示,光声信号幅值在调制频率为1 394 Hz时光声信号最大,此时品质因数计算公式为[23]

$$Q = \frac{f}{\Delta f} \tag{17}$$

式中,f为光声信号取最大值所对应的频率, Δf 为 $1/\sqrt{2}$ 共振峰处的频率全线宽。由图 14 可知全线宽约为 51 Hz,可得 Q为 27.33。由于吸收系数为 0.157 6 cm⁻¹,池常数通过式(10)计算得 2 574 Pa·cm/W。对比分析理论数值、仿真数值和实验结果可得表 4,实验结果中谐振频率与理论计算接近,但品质因数和池常数都与理论结果有一定误差。理论值都是理想状态下的计算结

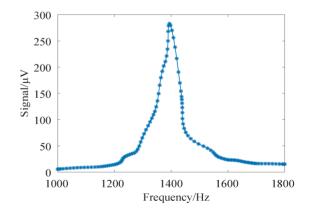


图 14 频率响应图 Fig. 14 Frequency response diagram

果,常常只考虑谐振腔,忽略缓冲腔及温湿度造成的影响;光声池的实际加工工艺水平也会对结果造成一定 影响。多种因素在实验过程中带来误差累计,造成数值的偏差等。

表 4 实验与计算结果比较

Table 4 Comparison of experiment and calculated results

	Analytic value	Simulation value	Experimential value
f/Hz	1 395	1 413.9	1 394
Q	35.36	35.86	27.33
$C_{\text{cell}}/(\text{Pa} \cdot \text{cm} \cdot \text{W}^{-1})$	3 787.3	3 635.1	2 574

5 系统检测灵敏度测试

系统检测灵敏度可衡量检测系统的性能,表达式为

$$s = \frac{C}{\text{SNR}} \tag{18}$$

式中,s为系统检测灵敏度,SNR为信噪比,信噪比是有用信号功率与噪声功率的比值,可通过检测出的光声

信号幅值与检测系统背景噪声标准差计算。在检测系统背景噪声时,激光器的输出功率和波长恒定不变,在光声池中充入高纯 N_2 ,每隔5 s记录一次噪声电压,共计200 s,检测结果如图15 所示,噪声分布相对较平稳,大小用均值和标准差表示为 2.47 ± 0.243 μ V。运用配气系统和质量流量计向光声池内充入0.01% 的 CH_4 与高纯 N_2 ,调制波长,锁相放大器的时间常数设为1 s,检测到光声信号为284 μ V,从而可得出信噪比为114.98,相应的系统检测灵敏度为0.87 ppm。由以上分析可知,搭建的气体检测系统性能较好,探测灵敏度较好,满足气体检测的高灵敏度要求。

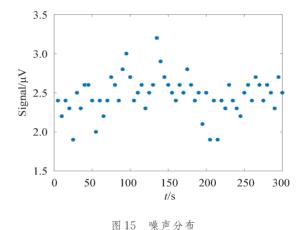


Fig.15 Noise distribution diagram

6 结论

光声光谱法对痕量气体的检测意义重大,体现出灵敏度高、选择性好、响应速度快等独特优势。本文依据光声光谱基本原理,利用有限元分析软件中的声学和热粘性物理场对光声池的几何参数进行了设计和优化,并对其声场分布进行了仿真模拟。运用COMSOL中参数化扫描对谐振腔半径和长度进行仿真,选定谐振腔的半径为3 mm,长度为120 mm。在参数化扫描过程中加入另一变量缓冲腔半径,扫描结果显示半径改变会造成谐振频率的漂移,对比分析后确定缓冲腔的最优半径为35 mm。其次,运用全局扫描确定光声池的谐振频率,并从光声池声压分布中得到谐振腔的中心位置处声压最大且为1.19×10⁻⁵ Pa。基于圆柱形光声池提出一种缓冲腔和谐振腔为圆角连接的光声池,采用单变量分析法确定圆角半径最优尺寸为3 mm,经过仿真对比得出圆角光声池池内声压是直角光声池的1.109倍,品质因数增大到35.856,池常数提高到3635.1 Pa·cm/W。实验测得基于圆角光声池搭建的甲烷气体检测系统的检测灵敏度为0.87 ppm。

参考文献

- [1] CHENG Gang, CHEN Jiajin, CAO Yanan, et al. Influence of cylindrical photoacoustic cell structure and environmental factors on acoustic eigenfrequency[J]. Acta Photonica Sinica, 2020, 49(2): 0230001. 程刚,陈家金,曹亚南,等. 圆柱形光声池结构及环境因素对声学本征频率的影响[J]. 光子学报, 2020, 49(2): 0230001.
- [2] WANG Shushou, CHE Rensheng, WANG Yutian, et al. Study on optical fiber gas sensor based on photoacoustic effect [J]. Chinese Journal of Lasers, 2004, 31(8): 979-982. 王书涛, 车仁生, 王玉田,等.基于光声光谱法的光纤气体传感器研究[J]. 中国激光, 2004, 31(8): 979-982.
- [3] JIANG Shenyu, SUN Meixiu, LI Yingxin, et al. Breath analysis using laser spectroscopy techniques: development and future[J]. Chinese Journal of Lasers. 2018, 45 (2): 197-205.
 姜琛昱, 孙美秀, 李迎新, 等. 激光光谱技术在呼吸气体分析中的发展与未来[J]. 中国激光, 2018, 45(2):197-205.

- [4] MA Ying, YU Liang, ZHENG Huadan, et al. Optimization of overtone resonance based quartz-enhanced photoacoustic spectroscopy spectrophone[J]. Acta Photonica Sinica, 2017, 46(8): 0811002.

 马英, 余亮, 郑华丹, 等. 基于泛频振动的石英增强光声光谱测声器优化设计[J]. 光子学报, 2017, 46(8): 0811002.
- [5] LI Zehao, YANG Chunyong, TANG Zihao, et al. Design and performance analysis of curved body and girdled waist photoacoustic cells[J]. Chinese Journal of Lasers, 2021, 48(1):0111002. 李泽昊, 杨春勇, 唐梓豪, 等. 曲体束腰型光声池的设计及性能分析[J]. 中国激光,2021.48(1):0111002.
- [6] WANG Qiaoyun, YIN Xiangyu, YANG Lei, et al. Geometrical optimization of resonant ellipsoidal photoacoustic cell in photoacoustic spectroscopy system[J]. Spectroscopy and Spectral Analysis, 2020, 40(5):1351–1355. 王巧云, 尹翔宇, 杨磊,等. 共振光声光谱系统中椭球形光声池的理论分析[J]. 光谱学与光谱分析, 2020, 40(5):1351–1355
- [7] KOST B, BAUMANN B, GERMER M. et al. Numerical shape optimization of photoacoustic resonators [J]. Applied Physics B, 2011,102(1):87-93.
- [8] LIU Bingjie, TANG Yuan, CHEN Weigen. Analysis on resonant photoacoustic cell in photoacoustic spectroscopy monitoring system for detecting trace gases in transformer oil[J]. High Voltage Apparatus, 2014, 50(2): 42-47 刘冰洁, 唐远, 陈伟根. 光声光谱检测变压器油中气体的共振光声池研究[J]. 高压电器, 2014, 50(2): 42-47.
- [9] ULASEVICH A L, GORELIK A V, KOUZMOUK A A. Compact resonance II -shaped photoacoustic cell for gas detection[J]. Journal of Applied Spectroscopy, 2014, 81(3): 470-475.
- [10] ZHENG Dezhong, ZHAO Nan. Design and experimental analysis of new photoacoustic cell[J]. Chinese Journal of Lasers, 2014, 41 (4): 257-261. 郑德忠, 赵南. 新型光声池的设计及实验分析[J]. 中国激光, 2014, 41(4): 257-261.
- [11] ZHAO Yandong, FANG Yonghua, LI Yangyu. Theoretical study of quartz-enhanced photoacoustic spectroscopy based on elliptical cavity resonance[J]. Acta Physica Sinica, 2016, 65(19);36-46. 赵彦东,方勇华,李扬裕. 基于椭圆腔共振的石英增强光声光谱理论研究[J]. 物理学报, 2016, 65(19);36-46.
- [12] HAOUARI R, ROCHUS V, LAGAE L, et al. Topology optimization of an acoustical cell for gaseous photoacoustic spectroscopy using COMSOL multiphysics [C]. Proceedings of the COMSOL Conference, Rotherdam, UK, 2017: 1-6.
- [13] DONG Lei, WU Hongpeng, ZHENG Huadan, et al. Recent progress in quartz-enhanced photoacoustic spectroscopy[J]. Chinese Journal of Lasers, 2018, 45(9): 55-66. 董磊, 武红鹏, 郑华丹, 等. 石英增强光声传感技术研究进展[J]. 中国激光, 2018, 45(9):55-66.
- [14] CHENG Gang, CAO Yuan, LIU Hun. Numerical calculation and optimization of the photoacoustic cell in the photoacoustic spectroscopy device[J]. Acta Physica Sinica, 2019, 68(7):133-143. 程刚,曹渊,刘锟,光声光谱检测装置中光声池的数值计算及优化[J]. 物理学报, 2019, 68(7):133-143.
- [15] GU Lintao, CUI Xinhua, WEI Wei, et al. Ferulic acid promotes survival and differentiation of neural stem cells to prevent gentamicin-induced neuronal hearing loss.[J]. Experimental Cell Research, 2017, 360(2):257-263.
- [16] LAMASTRA F R, GRILLI M L, LEAHU G, et al. Photoacoustic spectroscopy investigation of Zinc oxide/diatom frustules hybrid powders[J]. International Journal of Thermophysics, 2018, 39(9):110.
- [17] MIKLOS A, HESS P, BOZOKI Z. Application of acoustic resonators in photoacoustic trace gas analysis and metrology [J]. Review of Scientific Instruments, 2001, 72(4):1937-1955.
- [18] 殷庆瑞,王通,钱梦碌.光声光热技术及其应用[M].北京:科学出版社,1991.
- [19] LI Jinsong, LIU Kun, ZHANG Weijun, et al. The influence of CO₂ molecular relaxation dynamics on photoacoustic signal in near infrared range(NIR)[J]. Spectroscopy and Spectral Analysis, 2008, 28(9):1953-1957. 李劲松, 刘锟, 张为俊, 等. 近红外波段 CO₂分子弛豫动力学效应对光声信号的影响[J]. 光谱学与光谱分析, 2008, 28 (9):1953-1957.
- [20] LI Debin, YU Lin, YANG Hegang, et al. Calculation and analysis of photoacoustic pool parameters of sf6 decomposition components by infrared photoacoustic device[J]. Industrial Safety and Environmental Protection, 2019, 45(11):40-44+53. 李德彬, 余霖, 杨和刚,等. 红外光声装置检测 SF6分解组分光声池参数计算与分析[J]. 工业安全与环保, 2019, 45(11):40-44+53.
- [21] CHENG Gang, CAO Yanan, TIAN Xing, et al. The influence of photoacoustic cell geometry on the performance of photoacoustic spectroscopy [J]. Spectroscopy and Spectral Analysis, 2020, 40(8):2345-2351. 程刚,曹亚南,田兴,等.光声池几何形状对光声光谱检测性能的影响[J].光谱学与光谱分析, 2020, 40(8):2345-2351.
- [22] BIJNEN F G C, REUSS J, HARREN F J M. Geometrical optimization of a longitudinal resonant photoacoustic cell for sensitive and fast trace gas detection[J]. Review of Scientific Instruments, 1996, 67(8):2914-2923.
- [23] ANDRAS M, PETER H, ZOLTAN B. Application of acoustic resonators in photoacoustic trace gas analysis and metrology[J]. Review of Scientific Instruments, 2001, 72(4):1937–1956.

Foundation item: Hebei Provincial Science and Technology Program (Key Research and Development Project of Hebei Province) (No. 18273901D), Hebei Provincial Department of Education Project (No.Z2015060), School Pre-research Project (No.20152026)