

基于摩擦静电驱动离子迁移谱的可挥发有机物辨识系统

朱建雄

(东南大学机械工程学院, 南京, 210089)

摘要: 离子迁移谱分析仪是一种气相化合物的快速响应监测分析技术。然而, 传统等离子体放电系统体积庞大, 工作温度高, 不适合高精度的可挥发性有机物(VOCs)浓度辨识。因此, 我们报道了一种基于摩擦电驱动离子迁移技术的可挥发有机物检测装置, 通过机器学习辅助增强实现高精度VOC识别能力。基于摩擦静电导致本装置体积小, 操作环境无苛刻要求。此外, 我们提出的摩擦电的电荷积累机制, 通过多开关可调制几千伏的直流偏压输出, 匹配相关的尖顶板电极结构放电, 可获得不同挥发性有机化合物及其混合物的放电特性从而实现混合气体辨识。本系统展示了一种响应快速、功耗低的便携式VOC实时监测解决方案, 适合便携式环境监测。

关键词: 分子检测; 离子迁移谱; 机器学习; 离子放电

中图分类号: TH84

Triboelectric-driven Machine Learning-assisted Ion Mobility System for Volatile Organic Compounds Identification

ZHU Jianxiong

(Mechanical Engineering, Southeast University, Nanjing 210089, China;)

Abstract: Ion migration spectrometry is a fast response monitoring and analysis technique for gaseous compounds. However, the traditional plasma discharge system is not suitable for high-precision identification of volatile organic compounds (VOCs) because of its large volume and high operating temperature. Therefore, we report a volatile organic compounds detection device based on triboelectric driven ion migration technology, which is enhanced by machine learning to achieve high-precision VOC recognition. Based on static electricity, the device is small in size and the operating environment is not harsh. In addition, we propose a triboelectric charge accumulation mechanism, through multiple switches can modulate several thousand volts of DC bias output, matching the relevant peaked plate electrode structure discharge, can obtain the discharge characteristics of different volatile organic compounds and their mixtures to achieve mixed gas identification. This system presents a portable VOC real-time monitoring solution with fast response and low power consumption, which is suitable for portable environmental

monitoring.

Keywords: Molecules detection; ion mobility; machine learning; plasma discharge

1 研究背景

挥发性有机化合物(VOC)是一种在室温下容易蒸发或升华到周围空气中的气体化学物。传统等离子体分析仪体积庞大,工作环境苛刻,温度高,压力小,限制了其广泛应用^[1-6]。常规的高精度方式采用紫外光、 β -辐射等不同的电源来电离不同种类的分子。然而,这些外部电离电源导致系统的成本高和体积大,严格约束(如真空或低压)极大地限制工业应用。基于摩擦电和静电感应的耦合产生高压,而无需任何复杂的电子设备,价格便宜、体积小等诸多优点,是小型化的离子谱迁移仪的解决思路。

基于解决小型化痛点,提出了一种基于多开关摩擦电(TENG)作为电源的离子迁移的气体检测方法,用于实现各种VOC物种辨识。相比传统的气体分析仪,本装置方法具有便携、自供电、响应速度快等优点,且不受操作环境条件的严格限制。通过机器学习与输出的尖端板电极放电迁移,实现各种VOC分子的有效辨识,具体来说,根据摩擦电放电离子迁移的峰数、频率和幅度等特征,识别出不同的VOCs。

2 研究内容

离子迁移检测机理如图1所示,通过离子迁移模式的瞬态动力学识别各种VOC种类及其浓度。其中摩擦电装置实现高静电电压输出,其输出静电高压可达到1千伏以上。然后通过尖端板结构的放电,通过放电接收板实现不同气体环境辨识。电荷积累驱动来自于摩擦电荷积累,实现利用SM-TENG的离子迁移率进行大范围VOC分子检测的方法。其中可挥发性有机化合物(VOC)室内离子迁移特性随VOC种类和浓度的变化呈现出不同的瞬态现象。摩擦电的高压发生装置主要通过多开关操作按时间顺序的操作实现,通过滑动和多开关操作,从而产生了高压输出。通过利用针板结构来放电,可以实现响应voc的瞬态暗电流的显著模式差异。为了利用离子迁移率分析仪响应更好地识别VOC分子,机器学习增强技术(通过一系列参数,即峰数、频率和幅度,来了解不同VOC分子的唯一性)实现特征辨识。SM-TENG是受Bennet倍频机机构的启发,通过前后滑动和开关按时间顺序操作实现的。随着活动板的进一步滑动,介电介质“D”和“B”背面的电极将从地面获得更多的电荷,以平衡介电膜的静电感应电荷。当活动极板移动回初始状态时,更多的电荷将积聚在“A”上并导致高压输出(从1到2q)。随着SM-TENG的更多操作周期,介质“A”上的电荷将随着操作周期的增加而增加(从2到4q,甚至更多)。

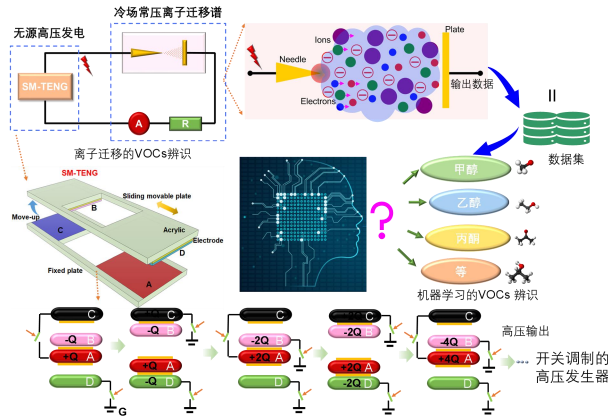


图1 基于摩擦静电驱动离子迁移谱的可挥发有机物辨识系统

为了确定混合挥发性有机化合物的传感可行性，如图2所示，将可挥发性有机化合物(即乙醇和丙酮)在预混合室中充分混合以进行测试。如果与其他废化学品混合，离子迁移模式也会发生变化。由于可挥发性有机化合物的分子结构复杂，可挥发性有机化合物可能存在聚类现象，但根据我们的观察仍然可以识别。由于挥发性有机化合物的密度，挥发性有机化合物分子更容易聚集。暗电流的模式以及挥发性有机化合物的浓度也可以被识别出来。

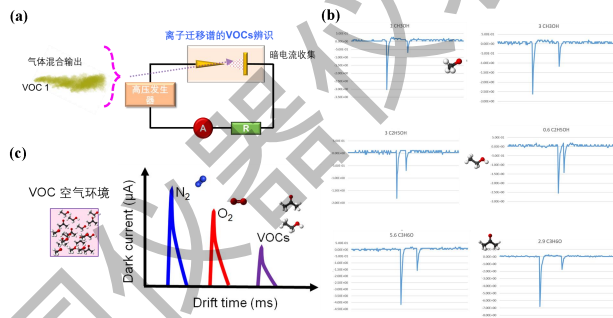


图2 单种气体与两种混合物的基于摩擦静电驱动离子迁移谱的可挥发有机物辨识

为了深入研究针板电极结构对离子迁移率的影响，如图3所示，对VOC放电进行了不同间隙距离的实验。为了量化放电与间隙距离的关系，研究了针板间隙与输出电压之间的数值关系，结果表明SM-TENG装置越小，输出电压越低。结果还表明，针板结构气隙距离越短，气体室内放电强度越强。离子在宽气隙中的漂移时间比窄气隙中的漂移时间长得多。测试离子在空气中的迁移率，由于气体室内排放的VOC种类和浓度不同，离子迁移模式也不同。甲醇、乙醇和丙酮等不同挥发性有机化合物的离子迁移模式存在显著差异。利用ML，可以很容易地根据VOCs的独特模式识别出废物化学物质的浓度。由于对乙醇独特的分子结构有很强的感觉，因此乙醇的准确度最高(分别为65%和70%)。其中每个类别测量了100个数据样本，每个样本的数据长度为16000。然后，我们随机选择每个类别的80个样本进行训练，并选择20个样本进行测试，以评估所提出的ML工具在区分不同VOC种类及其浓度方面的性

能。通过提供更大量的数据，以及使用更深层的神经网络，未来的准确性仍然可以进一步提高。

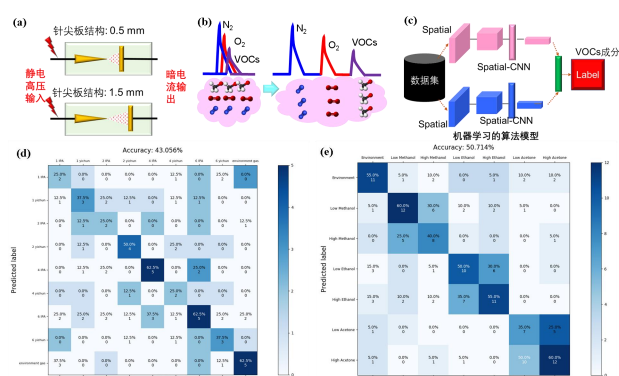


图3 机器学习辅助的摩擦静电驱动离子迁移谱的可挥发有机物辨识

3 结论

本文提出了一种基于多开关操作的离子迁移率分析仪的机器学习增强VOC浓度检测方法，解决了现有等离子体放电系统体积大、操作温度高、不适合VOC浓度检测的缺点。利用电荷积累机制，SM-TENG可以提供 ~ 600 V左右的高输出电压。利用SM-TENG的电压作为电源，获得了具有不同离子迁移特性的各种挥发性有机化合物的等离子体放电模式。为了提高VOC监测系统的检测精度，提出一种基于离子迁移率光谱数据自动提取的特定特征对不同VOC浓度进行分类的机器学习增强工具，还讨论了针板结构中瞬态时域与间隙距离的关系，验证了m1增强方法的鲁棒性，当间隙距离为 ~ 2 mm时，该方法的精度达到54.286%。研究表明，所提出的多开关操作平台可以在人工智能技术的帮助下检测多种VOC，为未来环境监测应用展示了一种快速响应、低功耗的便携式实时VOC监测解决方案。

参考文献

- [1] Wang, H., Zhu, J., He, T., Zhang, Z., Lee, C. Programmed-triboelectric nanogenerators—a multi-switch regulation methodology for energy manipulation. *Nano Energy*. 78, 105241 (2020).
- [2] Zhu, J., Ren, Z., Lee, C. Toward healthcare diagnoses by machine-learning-enabled volatile organic compound identification. *ACS Nano*. 26, 15(1): 894-903 (2021).
- [3] Zhu, J., Wang, H., Zhang, Z., Ren, Z., Shi, Q., Liu, W., Lee, C. Continuous direct current by charge transportation for next-generation IoT and real-time virtual reality applications. *Nano Energy*. 73, 104760 (2020).

- [4] Zhu, J., Sun, Z., Xu, J., Walczak, R., Dziuban, J., Lee, C. Volatile organic compounds sensing based on bennet doubler-inspired triboelectric nanogenerator and machine learning-assisted ion mobility analysis. *Science Bulletin*. 66, 1176-1185 (2021).
- [5] Yang, F., Lin, D., Pan, L., Zhu, J., Shen, J., Yang, L., Jiang, C. Portable smartphone platform based on a single dual-emissive ratiometric fluorescent probe for visual detection of isopropanol in exhaled breath. *Anal. Chem.* 93, 43, 14506–14513 (2021).
- [6] Zhu, J., Ji, S., Ren, Z., Wu, W., Zhang, Z., Ni, Z., Liu, L., Zhang, Z., Song, A., Lee, C. Triboelectric-induced ion mobility for artificial intelligence-enhanced mid-infrared gas spectroscopy. *Nature Communications*. 14 (2023):2524.

中国仪器仪表学会