

Simulation of Optical Discharge Radiation Parameters in the 400 ÷ 200 nm UV Monochromator for Bactericidal Treatment

M. A. Kotov¹, M. V. Torchick¹, V. N. Androsenko¹, N. G. Solovyov¹,
A. N. Shemyakin¹, M. Yu. Yakimov¹, O. Yu. Manzenyuk²

¹*Ishlinskyi Institute for Problems in Mechanics Russian Academy of Sciences (IPMech RAS),
Moscow, 119526, Russia*

²*FBIS State Research Center for Applied Biotechnology and Microbiology,
Obolensk, Moscow region, 142279, Russia*

kotov@ipmnet.ru

Abstract

A special UV monochromator was created for bactericidal irradiation of malicious microorganisms in the wavelength range of 400 ÷ 200 nm. A continuous optical discharge was used as a radiation source. The work contains a description of the device, measurements of the radiation density at the place of biological object samples and a comparison with the results of numerical modeling of radiation propagation in the optical scheme used. The data obtained shows a high level of accuracy in determining the density of radiation arriving at the irradiated microorganisms in the UV range.

Keywords: continuous optical discharge, UV, monochromator, ray tracing, bactericidal irradiation.



A UV monochromator slide with wells for placing irradiated microorganisms

УДК 535.31

Моделирование параметров излучения оптического разряда в схеме УФ монохроматора $400 \div 200$ нм для бактерицидного воздействия

М. А. Котов¹, М. В. Торчик¹, В. Н. Андросенко¹, Н. Г. Соловьев¹,
А. Н. Шемякин¹, М. Ю. Якимов¹, О. Ю. Манзенюк²

¹*Институт проблем механики им. А. Ю. Ишлинского Российской академии наук
Россия, Москва, 119526, проспект Вернадского, д. 101-1*

²*ФБУН Государственный научный центр прикладной микробиологии и биотехнологии,
Россия, Московская область, п. Оболенск, 142279*

kotov@ipmnet.ru

Аннотация

Специальный УФ-монохроматор создан для бактерицидного облучения вредоносных микроорганизмов в диапазоне длин волн $400 \div 200$ нм. В качестве источника излучения использовался непрерывный оптический разряд. Работа содержит описание устройства, замеры плотности излучения в месте облучения образцов биологических объектов и сравнение с результатами численного моделирования распространения излучения в используемой оптической схеме. Полученные данные позволяют говорить о высоком уровне точности определения плотности излучения, приходящего на облучаемые микроорганизмы в УФ диапазоне.

Ключевые слова: непрерывный оптический разряд, УФ, монохроматор, трассировка лучей, бактерицидное облучение.

1. Введение

Одним из наиболее распространенных физических методов влияния на вредоносные для человека бактерии и микроорганизмы является ультрафиолетовое (УФ) излучение, из-за чего в последние десятилетия в медицинских областях появляется все больше приборов на его основе [1]. Повсеместное применение таких устройств ограничено в связи с уязвимостью человека к УФ излучению. Сквозь атмосферу проходит лишь малая его часть в диапазоне $400 \div 200$ нм. Оно, в основном, состоит из лучей $400 \div 315$ нм и незначительного количества лучей $315 \div 280$ нм. Более 75% излучения приходится на диапазон $0.3 \div 1.1$ мкм. Свет ниже 200 нм сильно поглощается кислородом в обычном воздухе и поэтому не может существовать кроме как в вакууме или в какой-либо другой невоздушной среде. Недавние исследования показали, что полоса коротковолнового края УФ с длиной волны примерно от 200 нм до 220 нм является относительно безопасной для кожи млекопитающих [2] и при этом обладает такими же антимикробными свойствами, что и обычное УФ-излучение длиной 254 нм, которое эффективно применяется в целях обеззараживания [3, 4].

В настоящее время реальную эффективность УФ диапазона $200 \div 220$ нм еще предстоит исследовать и о полной безопасности его постоянного использования говорить пока рано. Возможно, могут проявляться некоторые побочные эффекты. Однако, потенциальный небольшой вред от такого излучения может быть гораздо менее серьезным, чем, например, от вредоносных микроорганизмов. То есть может оказаться так, что легче защитить человека от

УФ излучения, чем от опасных бактерий и вирусов, которых оно уничтожает. Также есть и большая вероятность того, что станет возможной минимизация вредоносного воздействия излучения. Например, в работе [5] патогенные микроорганизмы облучали эксимерной лампой KtBr с длиной волны 207 нм. В качестве контроля сравнения использовали стандартную бактерицидную лампу 254 нм. Было обнаружено, что такое излучение уничтожало патогенные бактерии метициллинрезистентного золотистого стафилококка также эффективно, но степень повреждения клеток эпидермиса человека была очень низкая, в 1000 раз меньше, чем стандартное УФ облучение. С развитием новых технологий в оптике ограничение доставки излучения к очагу инфекции может быть преодолено за счет использования оптических волокон для доставки света к органу мишени. УФ облучение имеет большое значение для снижения уровня опасности последствий хирургических операций, а также может снизить экономические потери, связанные с длительным пребыванием в отделениях реанимации и интенсивной терапии [3].

Для определения восприимчивости вредоносных микроорганизмов к УФ облучению нужно знать параметры излучения, попадающего на их поверхность. В данной работе стояла задача сборки УФ монохроматора, его апробации в области спектра $400 \div 200$ нм и определения характеристик излучения для выделения необходимого узкополосного диапазона и дальнейшего изучения его воздействия на различные патогенные микроорганизмы. В качестве источника излучения использовался непрерывный оптический разряд (НОР), в котором плотная плазма поддерживается за счет поглощения непрерывного лазерного излучения [6, 7]. Благодаря высокой температуре такая плазма испускает более коротковолновые кванты и имеет высокую интенсивность излучения в УФ области.

2. Экспериментальная установка

Корпус монохроматора включал в себя несколько деталей (рис. 1). Генератором НОР являлось устройство XWS-65 [8], секция размещения источника излучения находилась внизу слева.

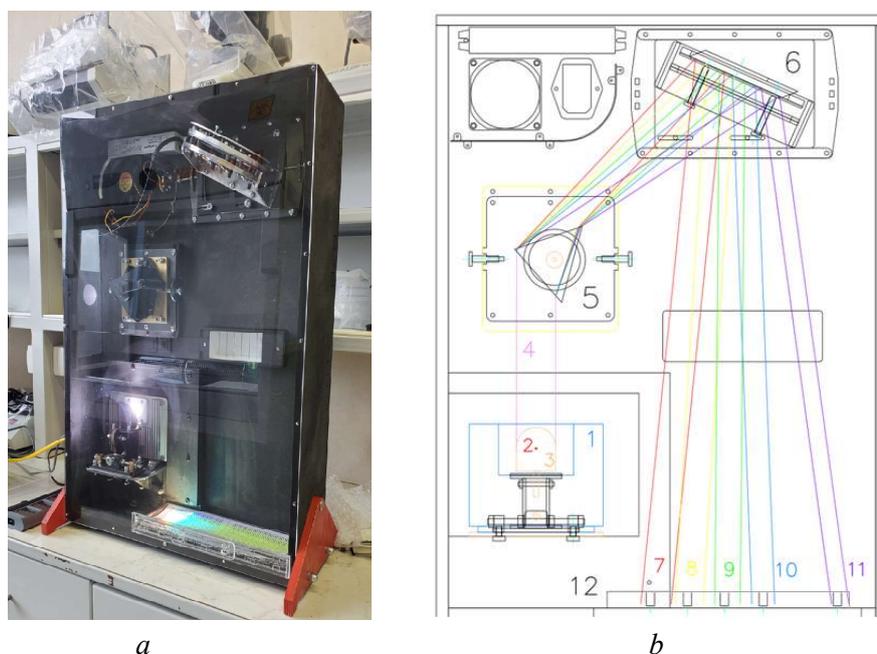


Рис. 1. Экспериментальная установка УФ монохроматора: (а) внешний вид; (б) схема монохроматора: 1 – секция размещения источника; 2 – НОР; 3 – параболическое зеркало; 4 – параллельный пучок излучения; 5 – кварцевая призма; 6 – плоское зеркало; 7–11 – спектр УФ излучения; 12 – предметное стекло с исследуемыми бактериями (облучаемый образец)

За счет того, что НОР (рис. 1, *b*, 2) был помещен в фокус зеркала параболической формы (рис. 1, *b*, 3) [9], пучок излучения, отразившись от зеркала, становился параллельным (рис. 1, *b*, 4). При прохождении через кварцевую треугольную призму (рис. 1, *b*, 5) происходило спектральное разложение излучения, которое потом, отражаясь от плоского зеркала (рис. 1, *b*, 6), попадало на облучаемый образец (рис. 1, *b*, 7–11). Такая оптическая схема позволила значительно уменьшить габариты монохроматора. В качестве образца использовалось специальное предметное стекло (рис. 1, *b*, 12 и рис. 2) – иммунологический луночный полистироловый планшет с 96 ячейками-лунками из биосовместимого пластикового материала [10], в которых располагались исследуемые микроорганизмы.



Рис. 2. Фотография предметного стекла УФ монохроматора с ячейками-лунками (см. рис. 1, *b*, 12) для размещения облучаемых микроорганизмов. Номера рядов ячеек 4–24

3. Определение параметров излучения

3.1. Экспериментальные замеры

Спектральная яркость используемого источника (рис. 3) широкополосного излучения на основе НОР определялась исходя из освещённости изображения плазмы, которое формировалось с помощью кварцевого ахроматического дублета на входную апертуру калиброванного спектрометра Ocean Optics HR4000 CG-UV-NIR со стандартным косинусным корректором CC-3-UV-S. Для учета размещения не всей области изображения плазмы на приёмной апертуре спектрометра, плазма фотографировалась в широком динамическом диапазоне через узкополосный светофильтр, полоса которого находилась в области непрерывного спектра. После чего к полученным с УФ монохроматора данным вносился поправочный коэффициент, учитывающий отношение области, зарегистрированной датчиком ко всей области плазмы.

Спектральные характеристики излучения (рис. 4), попадающего в схеме монохроматора на облучаемый образец, измерялись следующим образом. Вместо ряда центральных ячеек, в которых проводились исследования, устанавливалось перемещаемое вдоль миллиметровой линейки волокно спектрометра с косинусным корректором, которое всегда находилось перпендикулярно плоскости ячеек предметного стекла. Диаметр приемного окна спектрометра $S_d = 3.9$ мм. В диапазоне длин волн $\lambda = 220 \div 440$ нм проводились калиброванные измерения спектров. В диапазоне длин волн $\lambda = 200 \div 220$ нм измерения проводились волокном без косинусного корректора и значения яркости корректировались коэффициентом пропорциональности, определённым для длины волны $\lambda = 220$ нм. Измерения проводились на всём поле освещаемой области через каждые 2.5 мм в диапазоне длин волн $\lambda = 277 \div 412$ нм. В диапазоне $\lambda = 203 \div 277$ нм интервал между измерениями был равным 5 мм в связи с усилением дисперсии света на коротких длинах волн. Данные освещенности, длины волны и ширины полосы аппроксимировались по полной ширине на полувысоте пиков (значение FWHM – разница между максимальным и минимальным значениями, взятыми на уровне половины максимального значения) и определялись для каждой конкретной ячейки.

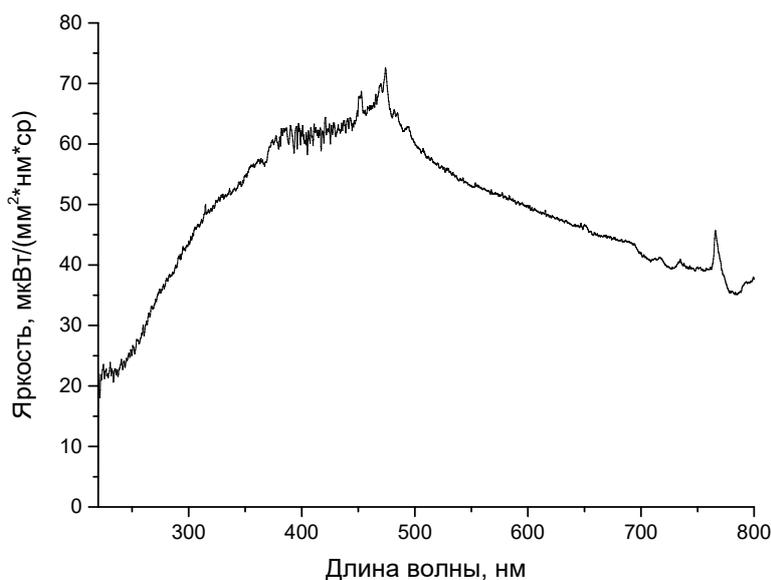


Рис. 3. Результаты измерения спектральной яркости используемого источника НОР в зависимости от длины волны излучения

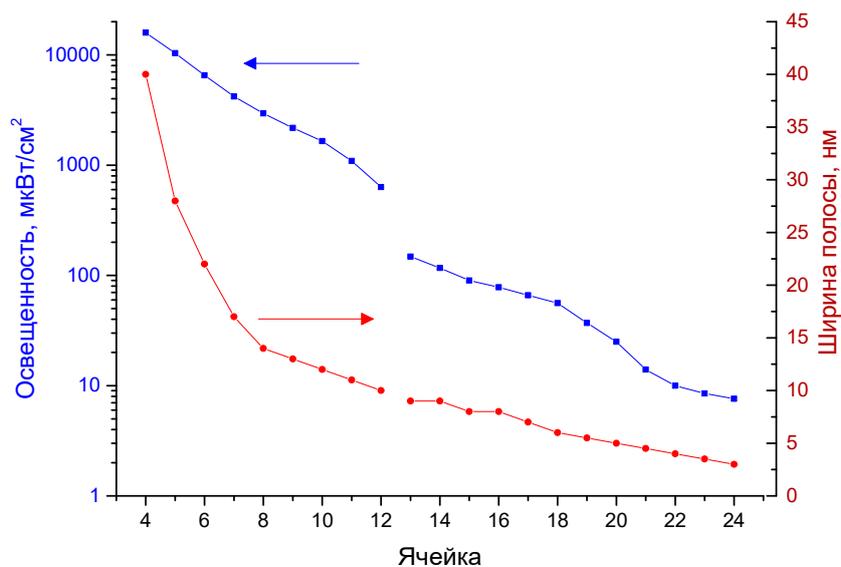


Рис. 4. Значения освещенности (слева) и ширины полосы (справа) в каждой ячейке предметного стекла, измеренные в диапазоне длин волн 400 ÷ 200 нм

Определение ширины полосы в каждой из ячеек на рис. 4 проводилось следующим образом. Сначала определялась зависимость разрешения длины волны λ от расположения волокна спектрометра x , усреднённая по 5 точкам

$$R = \frac{\lambda_i - \lambda_{i+4}}{x_{i+4} - x_i} \text{ [нм/мм]}$$

Далее, исходя из этих данных, проводился расчет ширины полосы в каждой точке в предположении датчика с бесконечно малым диаметром $W = R/S_d$, после чего осуществлялся пересчёт на ширину полосы для каждой ячейки предметного стекла диаметром 8 мм.

3.2. Численное моделирование

Для более точной оценки параметров излучения, попадающего в область ячеек с вредоносными микроорганизмами, и определения требуемой дозы облучения, необходимой для разрушения их структуры, было проведено численное моделирование распространения излучения в оптическом тракте монохроматора. Расчет проводился в программной среде Comsol Multiphysics с использованием метода трассировки лучей (ray tracing) подобно тому, как это делалось в работах [11, 12]. На рис. 5, *a* изображена геометрия расчетной области. Точечный источник, находящийся в фокусе параболического зеркала, испускал пучок из 1000 лучей в виде конуса. Длина волны в диапазоне 200 ÷ 400 нм менялась с шагом 5 нм от расчета к расчету. Мощность излучения от источника задавалась в зависимости от длины волны (рис. 5, *b*) – экспериментально полученные данные по яркости источника излучения (рис. 3) интегрировались по ширине полосы в 5 нм и пересчитывались по формуле

$$P(\lambda) = I(\lambda) S_{\text{ист}} \Omega, \quad (1)$$

где $I(\lambda)$ – интегральная яркость источника [мкВт/(мм²*ср)]; $S_{\text{ист}}$ – площадь поверхности НОР [мм²]; Ω – телесный угол конического пучка [ср]. На поверхности параболического зеркала задавался коэффициент отражения в зависимости от длины волны [9]. Коэффициент преломления для кварцевой призмы также задавался как функция длины волны [13]. На поверхности эллиптического зеркала устанавливалось условие полное отражение без учета поглощения.

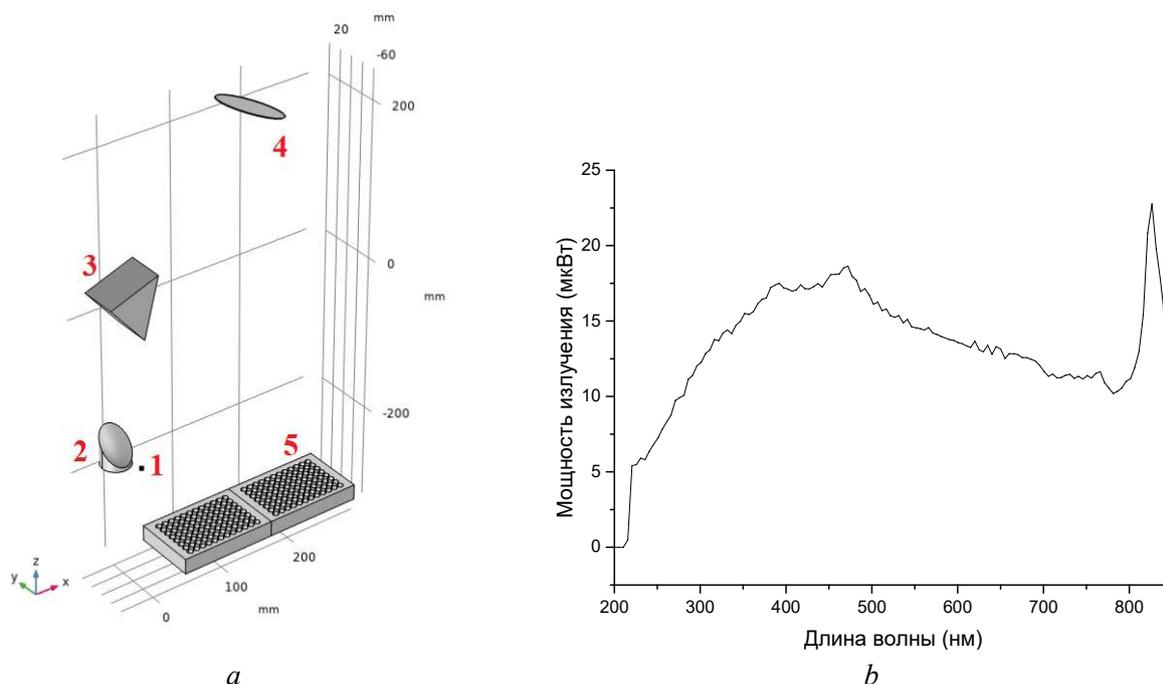


Рис. 5. (*a*) Расчетная геометрия: 1 – источник излучения, 2 – параболическое зеркало, 3 – кварцевая призма, 4 – плоское зеркало, 5 – облучаемый образец; (*b*) Зависимость мощности источника излучения от длины волны с шагом 5 нм

4. Результаты

В таблице 1 представлены значения длины волны максимальной светимости для каждой ячейки, полученные в ходе замеров спектрометром. На рис. 6 и рис. 7 представлено сравнение расчетных и экспериментальных результатов, полученных для параметров излучения, попадающего на четвертый (средний по ширине) продольный ряд ячеек предметного стекла (см. рис. 2).

Таблица 1

Максимум длины волны в каждой ячейке предметного стекла

ячейка	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14
λ , нм	411	370	340	317	299	284	273	262	255	235	230
ячейка	15	16	17	18	19	20	21	22	23	24	
λ , нм	226	223	220	217	213	211	209	207	204	203	

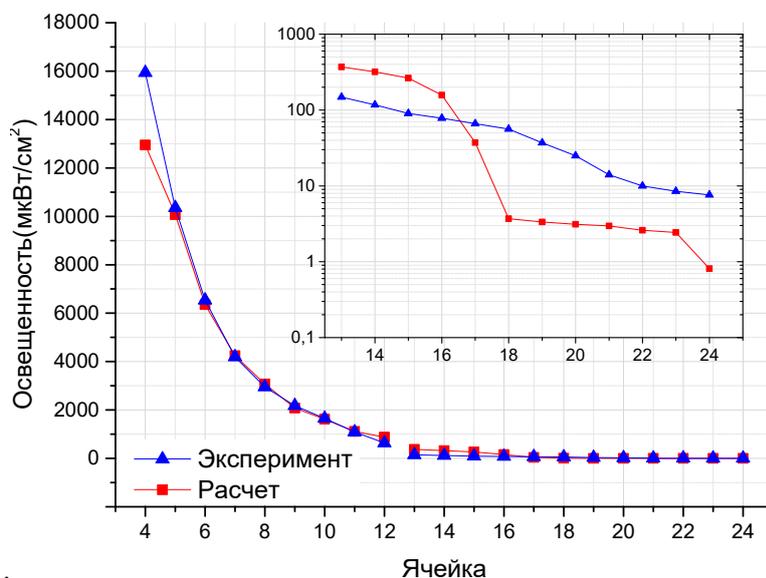


Рис. 6. Сравнение расчетных и экспериментальных данных по освещенности в ячейках

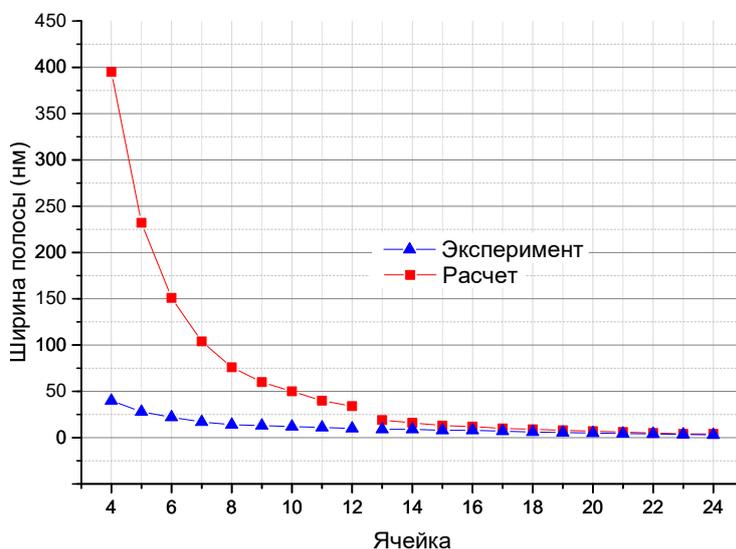


Рис. 7. Ширина спектральной полосы излучения, попадающего в каждую ячейку

Как видно из графиков, наилучшее совпадение достигается при меньших длинах волн. Можно выделить несколько основных причин расхождения данных:

- при определении ширины полосы в эксперименте (рис. 4) оценивались усредненные значения по полуширине интенсивности излучения в каждой ячейке. К тому же, по своим характеристикам измерительные приборы имели наибольшую чувствительность именно в УФ диапазоне, в расчете же учитывался ход лучей широкого спектра длин волн до 850 нм;

- в реальных условиях спектр излучения можно считать непрерывным, в расчетной модели задавалось дискретное число лучей и дискретные значения интенсивности излучения по длинам волн;
- истинные показатели преломления кварцевой призмы, поглощения и отражения зеркальных элементов могли несколько отличаться от справочных данных, взятых в качестве граничных условий для расчетной модели;
- используемый источник на основе НОР излучает во все стороны по площади поверхности плазмы разряда. В расчете моделировалось излучение от точечного источника и ограничивалось определенным телесным углом. Это влияет на форму пятна, попадающего на ячейки предметного стекла и на распределение интенсивности излучения в них.

5. Заключение

Данные, полученные при моделировании оптического хода лучей, испускаемых источником излучения на основе НОР, в схеме УФ-монокроматора, сконструированного для бактерицидной обработки патогенных микроорганизмов в диапазоне длин волн $400 \div 200$ нм, показывают хорошее соответствие с экспериментальными замерами параметров его излучения. Это позволяет с хорошей точностью определять значения доз облучения обрабатываемых микроорганизмов. Данная работа и работы [11, 12] показывают, что представленную расчетную модель можно использовать для создания цифрового двойника УФ облучателей для оперативной проверки характеристик излучения, приходящего на обрабатываемые микроорганизмы, и внесения изменений в оптические схемы и конструкции таких устройств.

Достигнутые значения спектральной яркости и плотности мощности излучения в ячейках предметного стекла имеют достаточно высокий уровень, особенно в коротковолновом УФ диапазоне, и показывают перспективность применения источников на основе оптического разряда для бактерицидной обработки патогенов, в т.ч. биопленкообразующих микроорганизмов [3].

Благодарности и ссылки на гранты

Работа поддержана грантом РФФ 23-25-00459.

Литература

1. Котов М. А. и др. Бактерицидная эффективность УФ, генерируемого лазерно-плазменным источником // Лазеры в науке, технике, медицине: Сборник научных трудов XXXII Международной конференции. Том 32 / под ред. ВА Петрова-М.: МНТОРЭС им. А.С. Попова, 2022.
2. Welch D., Buonanno M., Grilj V., et al. Far-UVC light: A new tool to control the spread of airborne-mediated microbial diseases // *Scientific Reports*. 2018. Vol. 8. No. 1. 2752
3. Kotov M. A., et. al. Effect of UV Radiation and Ozone on the Viability of Biofilms and Resting Forms of *Pseudomonas Aeruginosa* Bacteria // *Proceedings of the 9th International Conference on Physical and Mathematical Modelling of Earth and Environmental Processes. PMMEEP 2023. Springer Proceedings in Earth and Environmental Sciences. Springer*.
4. Buonanno M., Ponnaiya B., Welch D., Stanislauskas M., Randers-Pehrson G., Smilenov L., Lowy F. D., Owens D. M., Brenner D. J. Germicidal Efficacy and Mammalian Skin Safety of 222-nm UV Light // *Radiat Res*. 2017 Apr. Vol. 187. Issue 4. Pp. 483–491.
5. Buonanno M. et al. 207-nm UV light-a promising tool for safe low-cost reduction of surgical site infections. I: in vitro studies // *PloS one*. 2013. Vol. 8. No. 10. e76968
6. Генералов Н. А., Зимаков В. П., Козлов Г. И., Масюков В. А., Райзер Ю. П. Непрерывно горящий оптический разряд // *Письма в ЖЭТФ*, 1970, Т. 11. № 9. С. 447–449.

7. Котов М. А., Осипенко К. Ю., Соловьев Н. Г., Шемякин А. Н., Якимов М. Ю. Визуализация поведения оптического разряда при комбинированном режиме поддержания // Физико-химическая кинетика в газовой динамике. 2021. Т. 22, вып. 6. <http://chemphys.edu.ru/issues/2021-22-6/articles/963/>
8. <https://www.isteq.nl/xws-65.php> (дата обращения 04.12.2024)
9. <https://www.newport.com/p/50329AL> (дата обращения 04.12.2024)
10. www.spillifsciences.com (дата обращения 04.12.2024)
11. Kotov M. A., et al. Symmetrization and amplification of germicidal radiation flux produced by a mercury amalgam UV lamp in cylindrical cavity with diffusely reflective walls // *Symmetry*. 2022. Vol. 14. No. 1. P. 125
12. Kotov M. A., et al. Increase in illumination of 253.7 nm in a cylindrical PTFE cavity // *Processes in GeoMedia, Volume V*. Cham: Springer International Publishing, 2022. Pp. 117–130
13. https://alkor.net/alkorru/steklo_KU-1.html (дата обращения 04.12.2024)

References

1. Kotov M.A., et. al., Bactericidal efficiency of UV generated by a laser-plasma source, *Lasers in science, technology, medicine: Collection of scientific papers of the XXXII International Conference*, 2022, vol. 32 / edited by V. A. Petrov-M.: MNTORES named after A.S. Popov [in Russian].
2. Welch D., Buonanno M., Grilj V., et al., Far-UVC light: A new tool to control the spread of airborne-mediated microbial diseases, *Scientific Reports*, 2018, vol. 8, no. 1 2752 DOI 10.1038/s41598-018-21058-w
3. Kotov M.A., et. al., Effect of UV Radiation and Ozone on the Viability of Biofilms and Resting Forms of *Pseudomonas Aeruginosa* Bacteria, *Proceedings of the 9th International Conference on Physical and Mathematical Modelling of Earth and Environmental Processes*, PMMEEP, 2023, Springer Proceedings in Earth and Environmental Sciences. Springer, Cham. DOI 10.1007/978-3-031-54589-4_5
4. Buonanno M., Ponnaiya B., Welch D., Stanislauskas M., Randers-Pehrson G., Smilenov L., Lowy F. D., Owens D. M., Brenner D. J., Germicidal Efficacy and Mammalian Skin Safety of 222-nm UV Light, *Radiat Res.*, 2017 Apr., vol. 187, no. 4, pp. 483–491. DOI 10.1667/RR0010CC.1
5. Buonanno M., et al., 207-nm UV light-a promising tool for safe low-cost reduction of surgical site infections. I: in vitro studies, *PLoS one*, 2013, vol. 8, no. 10. e76968 DOI 10.1371/journal.pone.0076968
6. Generalov N. A., Zimakov V. P., Kozlov G. I., Masyukov V. A., Raizer Yu. P., Continuous Optical Discharge, *JETP Letters*, 1970, vol. 11, pp. 302–304.
7. Kotov M. A., et al., Visualization of an Optical Discharge Behavior in the Combined Mode of Sustaining, *Physical-Chemical Kinetics in Gas Dynamics*, 2021, vol. 22, no. 6 [in Russian]. DOI: 10.33257/PhChGD.22.6.963
8. <https://www.isteq.nl/xws-65.php> (accessed on 12/04/2024)
9. <https://www.newport.com/p/50329AL> (accessed on 12/04/2024)
10. www.spillifsciences.com (accessed on 12/04/2024)
11. Kotov M. A., et al., Symmetrization and amplification of germicidal radiation flux produced by a mercury amalgam UV lamp in cylindrical cavity with diffusely reflective walls, *Symmetry*, 2022, vol. 14, no. 1, p. 125. DOI 10.3390/sym14010125
12. Kotov M. A., et al., Increase in illumination of 253.7 nm in a cylindrical PTFE cavity, *Processes in GeoMedia, Volume V*. Springer International Publishing, 2022, pp. 117–130. DOI: 10.1007/978-3-030-85851-3_14
13. https://alkor.net/alkorru/steklo_KU-1.html (accessed on 12/04/2024)

Статья поступила в редакцию 9 декабря 2024 г.