

Исследование высокочастотных акустических резонансов оптико-акустического детектора с дифференциальными резонаторами Гельмгольца

© Г.К. Распопин, Д.Р. Макашев, А.В. Борисов, Ю.В. Кистенев

Национальный исследовательский Томский государственный университет,
634050 Томск, Россия

e-mail: yuk@iao.ru

Поступила в редакцию 19.12.2021 г.

В окончательной редакции 12.01.2022 г.

Принята к публикации 22.03.2022 г.

Численно исследованы акустические резонансы оптико-акустического детектора (ОАД) с дифференциальными цилиндрическими резонаторами Гельмгольца при вариации их основных параметров. Получены и проанализированы зависимости добротности акустического резонанса и резонансной частоты от геометрических параметров ОАД. Полученные результаты представляют интерес для разработки оптико-акустических газоанализаторов.

Ключевые слова: лазерный газоанализ, оптико-акустический детектор, компьютерное моделирование.

DOI: 10.21883/OS.2022.06.52622.28-22

Введение

Контроль летучих молекул в выдыхаемом воздухе является перспективным подходом для оперативного неинвазивного анализа метаболических процессов в организме [1]. Ряд летучих молекул, содержащихся в пробах выдыхаемого воздуха, ассоциируется с патологическими процессами в организме, т.е. эти молекулы являются биомаркерами определенных заболеваний. К ним относятся неорганические соединения, например, углекислый газ, кислород и оксид азота; летучие органические вещества, которые, в частности, включают насыщенные углеводороды (этан, пентан, альдегиды), непредельные углеводороды (изопрен), кислородсодержащие (ацетон), серосодержащие (этиловый меркаптан, диметилсульфид), азотсодержащие (диметиламин, аммиак) [2].

Ряд компонент выдыхаемого воздуха тесно коррелирует с их концентраций в кровотоке, что устраняет необходимость забора крови для анализа [3]. Перспективным методом рутинных медицинских тестов выдыхаемого воздуха является лазерная абсорбционная спектроскопия. Сравнительный анализ техники спектроскопии применительно к исследованию выдыхаемого воздуха представлен в обзоре [4].

Лазерная оптико-акустическая спектроскопия является одним из наиболее чувствительных методов лазерного газоанализа с пределом обнаружения, достигающим $ppbv$ [5]. Достоинствами оптико-акустических детекторов является линейность отклика при вариации концентрации целевых компонент в несколько порядков, малый объем пробы, что важно для биомедицинских приложений [6]. Чувствительность лазерных

оптико-акустических спектрометров существенно зависит от конструкции ячейки оптико-акустического детектора (ОАД). В нерезонансном ОАД частота модуляции оптической волны находится ниже частот акустического резонанса измерительной ячейки. В резонансном ОАД указанные частоты совпадают, и акустический сигнал усиливается кратно добротности Q акустического резонанса. Значение последнего может достигать нескольких сотен [7]. Соответственно резонансные ОАД предпочтительны для определения концентраций малых составляющих выдыхаемого воздуха.

Акустический резонанс в ОАД реализуется с использованием резонаторов Гельмгольца, одномерных цилиндрических резонаторов, объемных резонаторов [8,9]. Оптико-акустическая детекция с дифференциальным возбуждением сочетает преимущества резонансного режима и подавления акустических шумов [10]. Данная конструкция ОАД хорошо зарекомендовала себя на практике и широко используется и настоящее время для газоанализа [11–13]. Zéninari et al. [9] численно исследовали акустические резонансы подобного ОАД с дифференциальными резонаторами Гельмгольца в области частот около 600 Hz. Значение Q было равно 10.4 (моделирование) и 9.5 (эксперимент). Выбор такой невысокой частоты был обусловлен тем, что данный ОАД использовался в спектрометре с непрерывным лазером и механической модуляцией излучения. Современные импульсные лазеры работают на частотах до нескольких kHz.

Оптимизация конструкции резонансных ОАД сложна и затратна без использования математических моделей и численного анализа различных вариантов конструкций. В 2006 г. Baumann et al. предложили моделировать

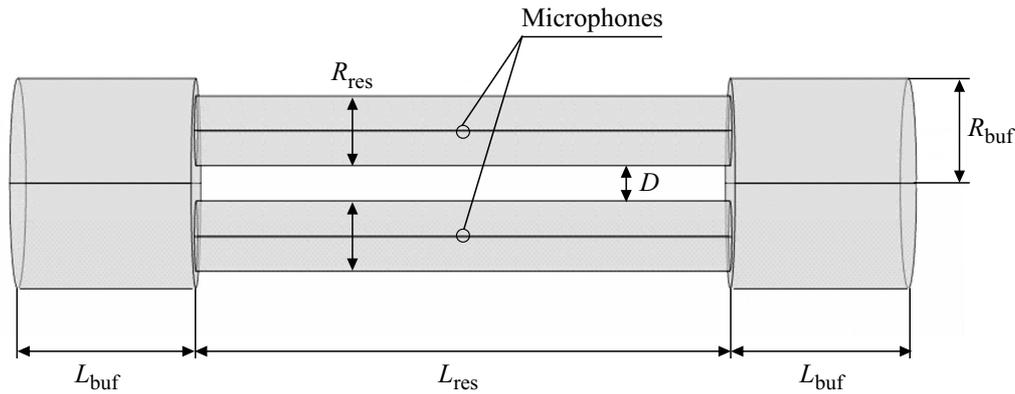


Рис. 1. Схематическое изображение ОАД с дифференциальными резонаторами Гельмгольца.

реакции ОАД с использованием метода конечных элементов [14,15].

Целью работы является численное исследование акустических резонансов ОАД с дифференциальными резонаторами Гельмгольца в области частот до 5 kHz.

Модель ОАД

Подробное описание процесса генерации акустических волн в ОАД, возникающих в результате поглощения средой модулированного оптического излучения, представлено в работах [16,17]. В качестве физической модели для описания газовой пробы использовано приближение вязкой теплопроводящей сжимаемой жидкости и условие медленности процессов конвективного переноса [18]. При этом распространение акустической гармонической волны в ОАД можно описать с помощью неоднородного уравнения Гельмгольца в частотной области [19–23]:

$$\nabla \left(-\frac{1}{\rho} \nabla p \right) - \frac{K^2 p}{\rho} = Q_m, \quad (1)$$

где p — поле акустического давления, которое находится из решения уравнения (1), ρ — плотность среды, Q_m — источник, модулирующий тепловые возмущения газовой среды в ОАД, $K = \omega/c - i\alpha$ — комплексное волновое число [24], ω — частота акустической волны, c — скорость звука в среде, α — коэффициент затухания амплитуды акустической волны. Потери энергии акустической волны при ее распространении связаны прежде всего с наличием вязкости и теплопроводности. Коэффициент затухания α рассчитывался по формуле [23]:

$$\alpha = \frac{\omega^2}{2\rho c^3} \left(\frac{4}{3} \mu + \mu_B + \frac{k(\gamma - 1)}{C_p} \right), \quad (2)$$

где μ — коэффициент динамической вязкости, который учитывает затухание вследствие внутреннего трения слоев среды друг о друга при распространении акустической волны, μ_B — коэффициент объемной вязкости,

Параметры ОАД

Параметр	Описание параметров
D	Расстояние между резонаторами
R_{res}	Радиус резонаторов
R_{buf}	Радиус буферов
L_{res}	Длина резонаторов
L_{buf}	Длина буферов
V_{buf}	Объем двух буферов
V_{res}	Объем двух резонаторов

характеризующий потери при всестороннем сжатии среды, C_p — теплоемкость при постоянном давлении, k — коэффициент теплопроводности, $\gamma = 1.4$ — показатель адиабаты. Третье слагаемое в скобках в выражении (2) учитывает потери при теплопереносе между областями с различным давлением. Как видно из (2), коэффициент затухания пропорционален квадрату частоты звуковой волны, следствием чего является гораздо более сильное затухание для высокочастотных акустических волн.

Суммарные потери энергии и эффективность усиления резонансного ОАД выражается через коэффициент добротности акустического резонанса Q :

$$Q = \frac{f_r}{\Delta f},$$

где f_r и Δf — резонансная частота и значение полуширины резонансного профиля, определяемое на уровне 0.707 от максимальной амплитуды.

В данной работе осуществлена оптимизация резонансной акустической ячейки, геометрия которой представлена на рис. 1. Оптико-акустический детектор состоит из двух параллельных одинаковых цилиндров (резонаторов), с двух сторон соединенных двумя буферами, представляющими одинаковые цилиндры большего диаметра. Микрофоны, с которых считывается сигнал,

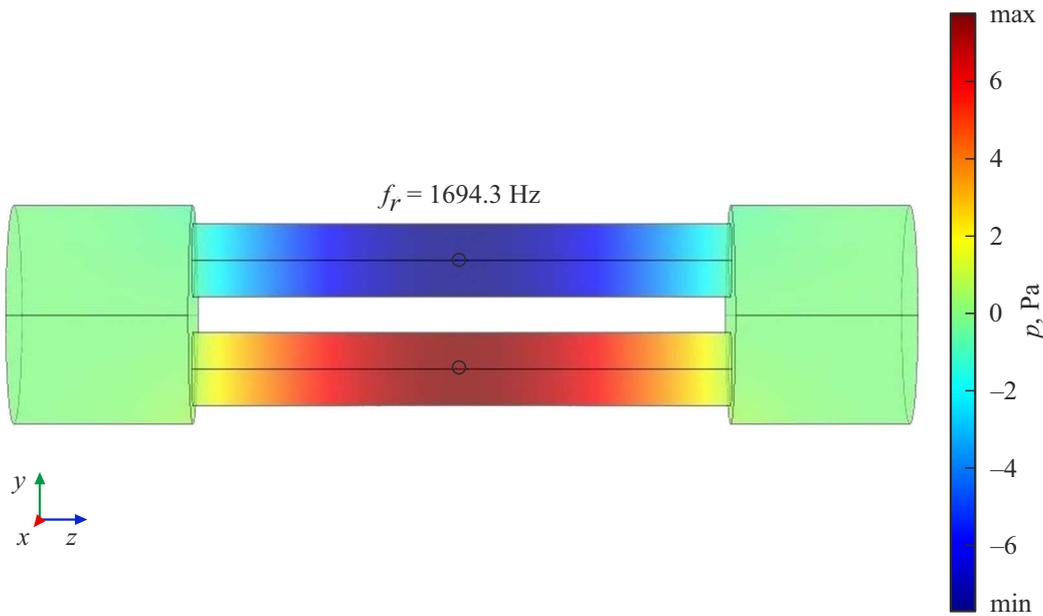


Рис. 2. Пример кольцевой акустической моды при $f_r = 1694.3$ Hz. Значения параметров расчета: $D = 0.75$ cm, $R_{\text{res}} = 0.5$ cm, $R_{\text{buf}} = 1.5$ cm, $L_{\text{res}} = 9$ cm, $L_{\text{buf}} = 3$ cm.

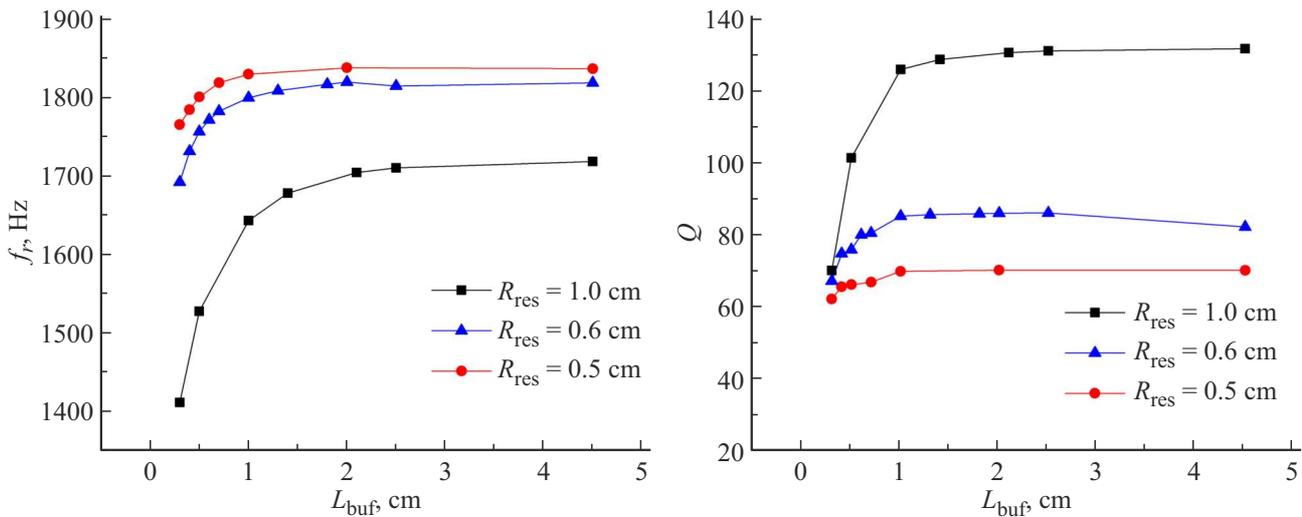


Рис. 3. Зависимости резонансной частоты f_r и добротности акустического резонанса Q от L_{buf} при различных R_{res} . Фиксированные параметры: $D = 0.1$ cm; $R_{\text{res}} = 0.5, 0.6, 1$ cm; $R_{\text{buf}} = 2.5$ cm; $L_{\text{res}} = 9$ cm. Меняющиеся параметры: $L_{\text{buf}} = 0.3-4.5$ cm.

расположены посередине резонаторов. Подобная форма ОАД имеет широкое применение [25,26]. Описание параметров ОАД представлены в таблице. Вдоль оси одного из резонаторов направляется импульсное лазерное излучение. В результате нагрева газа в этом резонаторе происходит перераспределение давления внутри всей акустической ячейки.

Анализ был ограничен кольцевой акустической модой, когда временные профили давления около микрофонов находятся в противофазе (рис. 2), что обеспечивает подавление акустических шумов и удвоение полезного сигнала [25,26]. Как видно на рис. 2, волны давления в противоположных резонаторах находятся в противофа-

зе, максимум (красный) и минимум (синий) давления расположены в центре резонаторов, где и находятся микрофоны. В качестве критерия оптимизации была взята добротность акустического резонанса Q . Также анализировалась резонансная частота f_r .

В расчетах использовались следующие равновесные значения давления $p_0 = 101\,325$ Pa и температуры $T_0 = 293.15$ K. Стенки ОАД считались идеально гладкими изотермическими поверхностями, что подразумевает меньшие значения энергетических потерь в сравнении с экспериментом. Для моделирования импульса излучения использовался аксиально симметричный лазерный пучок, интенсивность I в сечении которого задается

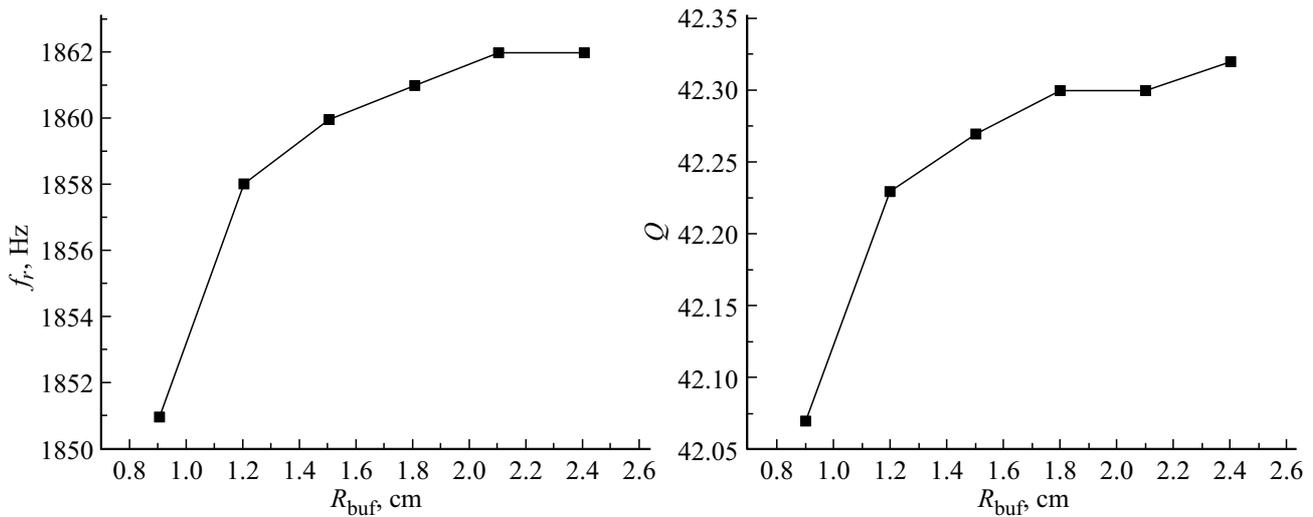


Рис. 4. Зависимости резонансной частоты f_r и добротности акустического резонанса Q от R_{buf} . Фиксированные параметры: $D = 0.3$ cm, $R_{\text{res}} = 0.3$ cm, $L_{\text{res}} = 9$ cm, $L_{\text{buf}} = 1$ cm. Меняющиеся параметры: $R_{\text{buf}} = 0.9\text{--}2.4$ cm.

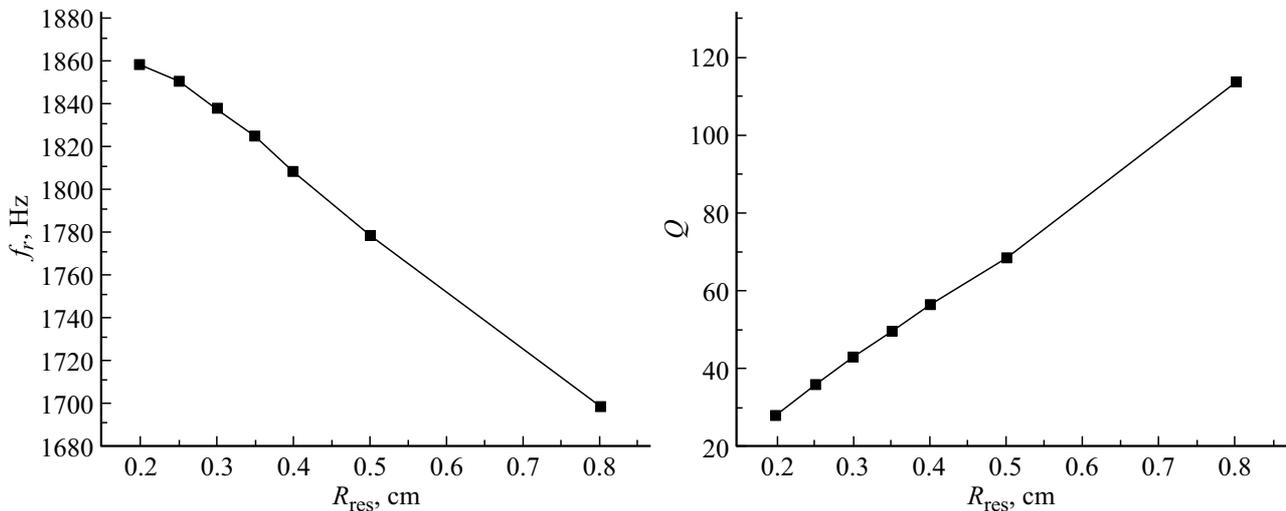


Рис. 5. Зависимости резонансной частоты f_r и добротности акустического резонанса Q от R_{res} . Фиксированные параметры: $D = 0.1$ cm, $R_{\text{buf}} = 2.5$ cm, $L_{\text{res}} = 9$ cm, $L_{\text{buf}} = 0.5$ cm. Меняющиеся параметры: $R_{\text{res}} = 0.2\text{--}0.8$ cm.

следующей формулой:

$$I = \frac{P}{\pi\sigma_0^2} \exp\left(\frac{-(x^2 + y^2)}{2\sigma_0^2}\right).$$

Нами использовались следующие параметры: мощность $P = 150$ mW, $\sigma_0 = 2 \cdot 10^{-4}$ cm — радиус пучка, x и y — поперечные координаты.

Расчет добротности акустического резонанса Q проводился путем изменения частоты повторения импульсов лазера вблизи собственной частоты ОАД, соответствующей кольцевой акустической моде. Были получены зависимости амплитуды акустического давления от частоты на микрофонах. С помощью этих данных была рассчитана добротность Q и резонансная частота f_r .

Использованная численная модель ОАД была предварительно проверена путем сравнения с результатами

работы Cotterell et al. [27], в которой была получена добротность акустического резонанса $Q = 104.6$ при резонансной частоте $f_r = 1353.4$ Hz. В нашем случае для тех же значений ОАД, что и в [27], были получены следующие оценки $Q = 114.9$ при $f_r = 1379$ Hz. Полученное различие для Q и f_r можно объяснить различным шагом численной сетки и использованием идеально гладких поверхностей в [27].

Результаты

1. Изменение параметров буфера

В данном разделе представлены результаты расчетов резонансной частоты f_r и добротности акустического резонанса Q ОАД в зависимости от параметров буфера.

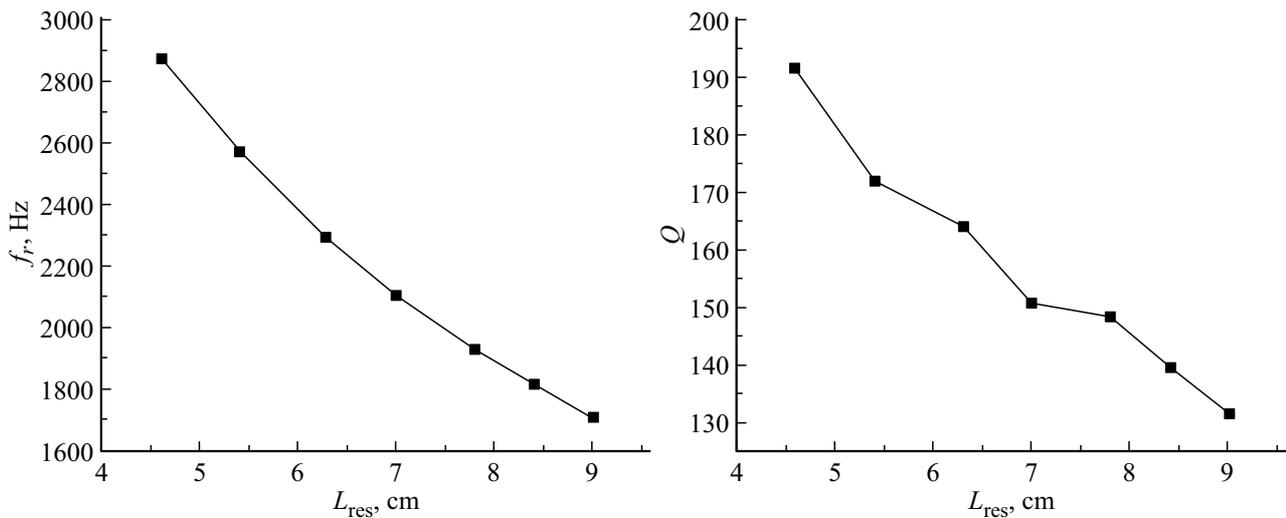


Рис. 6. Зависимости резонансной частоты f_r и добротности акустического резонанса Q от L_{res} . Фиксированные параметры: $D = 0.1$ cm, $R_{res} = 1$ cm, $R_{buf} = 2.5$ cm, $L_{buf} = 2.5$ cm. Меняющиеся параметры: $L_{res} = 4.6-9$ cm.

Влияние длины буфера L_{buf} на значения резонансной частоты f_r и добротности акустического резонанса Q ОАД представлены на рис. 3. Были рассмотрены три геометрии с различными радиусами резонатора $R_{res} = 0.5, 0.6, 1$ cm.

Как видно из данных графиков, Q и f_r растут при увеличении L_{buf} . Однако рост почти полностью прекращается при достижении $L_{buf} = 2R_{res}$. Это можно объяснить тем, что при $L_{buf} < 2R_{res}$ происходит контакт акустической моды со стенкой буфера. Это и вносит отрицательный вклад в добротность акустического резонанса Q . Стоит отметить, что насыщение роста добротности акустического резонанса Q происходит быстрее, чем резонансной частоты f_r . Отсутствие влияния L_{buf} на f_r при $L_{buf} > 2R_{res}$ повторяет результаты, полученные в [25] для кольцевых мод.

На рис. 4 представлены результаты расчетов резонансной частоты f_r и добротности акустического резонанса Q ОАД в зависимости от радиуса буфера R_{buf} .

Видно, что влияние радиуса буфера R_{buf} на резонансную частоту f_r и добротность акустического резонанса Q незначительно. При увеличении радиуса буфера с 0.9 до 2.4 cm добротность акустического резонанса Q выросла на ~ 0.25 , а резонансная частота f_r на ~ 10 Hz.

2. Изменение параметров резонатора

В данном разделе представлены результаты расчетов резонансной частоты f_r и добротности акустического резонанса Q ОАД в зависимости от параметров резонатора.

Влияние длины резонатора R_{res} на резонансную частоту f_r и добротность акустического резонанса Q ОАД представлено на рис. 5.

Видно, что добротность Q линейно растет при увеличении R_{res} , в то время как резонансная частота f_r ,

наоборот, линейно падает. При увеличении радиуса резонатора с 0.2 до 0.8 cm добротность акустического резонанса Q выросла на ~ 90 , а резонансная частота f_r уменьшилась на ~ 160 Hz. Таким образом, имеется возможность уменьшить резонансную частоту, положительно влияя на добротность акустического резонанса.

Влияние длины резонатора L_{res} на резонансную частоту f_r и добротность акустического резонанса Q ОАД представлено на рис. 6.

Видно, что резонансная частота f_r и добротность акустического резонанса Q сильно зависят от L_{res} . При уменьшении длины резонатора с 9 до 4.6 cm добротность акустического резонанса Q выросла на ~ 60 , а резонансная частота f_r на ~ 1150 Hz. Таким образом, в случае, если лазер позволяет достичь высоких значений частот импульсов, можно добиться очень хороших показателей добротности. А также, комбинируя изменение R_{res} и L_{res} , можно подбирать нужную резонансную частоту, имея при этом прирост в добротности акустического резонанса.

Заключение

Модификация ОАД с дифференциальными резонаторами Гельмгольца позволяет уменьшить показатели фонового шума и увеличить амплитуду снимаемого с микрофонов полезного акустического сигнала при частоте генерации лазерных импульсов, совпадающих с собственными частотами акустического резонанса ОАД.

В данной работе оптимизирована геометрия ОАД путем вариации его геометрических параметров, в частности, L_{buf} , R_{buf} , R_{res} , L_{res} . В качестве параметра оптимизации была выбрана добротность акустического резонанса Q . Также в работе исследовалась зависимость частоты акустического резонанса f_r от геометрических параметров ячейки. В результате анализа результатов

моделирования были сформулированы следующие выводы.

- Длина буфера не должна быть меньше, чем диаметр резонатора.
- Радиус буфера не оказывает значимое влияние на добротность акустического резонанса.
- Влияние параметров буфера на резонансную частоту минимально, за исключением случая, когда длина буфера меньше диаметра резонатора.
- Увеличение радиуса резонатора увеличивает добротность акустического резонанса, а также уменьшает резонансную частоту.
- Уменьшение длины резонатора увеличивает добротность акустического резонанса, а также увеличивает резонансную частоту.

Финансирование работы

Исследования выполнены при поддержке гранта по Постановлению Правительства Российской Федерации № 220 от 09 апреля 2010 г. (Соглашение № 075-15-2021-615 от 04.06.2021 г.)

Конфликт интересов

Авторы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

Список литературы

- [1] A.W. Boots, L.D. Bos et al. *Trends in Molecular Medicine*, **21** (10), 633 (2015). DOI: 10.1016/j.molmed.2015.08.001
- [2] A.G. Dent, T.G. Sutedja, P.V. Zimmerman. *J. Thorac. Dis.*, **5** (5), 540 (2013). DOI: 10.3978/j.issn.2072-1439.2013.08.44
- [3] W. Cao, Y. Duan. *Clinical Chemistry*, **52** (5), 800 (2006). DOI: 10.1373/clinchem.2005.063545
- [4] C. Lourenço, C. Turner. *Metabolites*, **4** (2), 465 (2014). DOI: 10.3390/metabo4020465
- [5] J.A. de Gouw, S.Te.L. Hekkert, J. Mellqvist, C. Warneke, E.L. Atlas, F.C. Fehsenfeld, A. Fried, G.J. Frost, F.J.M. Harren et al. *Environ. Sci. Technol.*, **43** (7), 2437 (2009).
- [6] A.A. Karapuzikov, I.V. Sherstov, A.I. Karapuzikov, M.Y. Shtyrov, N.Y. Dukhovnikova, K.G. Zenov, A.A. Boyko, M.K. Starikova, I.I. Tikhonyuk, I.B. Miroshnichenko, M.B. Miroshnichenko, D.B. Kolker, Y.B. Myakishev, V.N. Lokonov, Y.V. Kistenev, D.A. Kuzmin. *Physics of Wave Phenomena*, **22** (3), 189 (2014). DOI: 10.3103/S1541308X14030054
- [7] A. Miklós, P. Hess, Z. Bozóki. *Rev. Sci. Instr.*, **72** (4), 1937 (2001). DOI: 10.1063/1.1353198
- [8] B. Parvitte, C. Risser, R. Vallon, V. Zeninari. *Appl. Phys. B.*, **111** (3), 383 (2013). DOI: 10.1007/s00340-013-5344-2
- [9] V. Zeninari, R. Vallon, C. Risser, B. Parvitte. *Int. J. Thermophys.*, **37** (1), 1 (2016). DOI: 10.1007/s10765-015-2018-9
- [10] J.M. Rey, M.W. Sigrist. *Rev. Sci. Instr.*, **78** (6), 063104 (2007). DOI: 10.1063/1.2746817
- [11] A.V. Borisov, A.G. Syrkina, D.A. Kuz'min, V.V. Ryabov, A.A. Boyko, O. Zaharova, V.S. Zasedatel', Y.V. Kistenev. *J. Breath Res.*, **15** (2), 027104 (2021). DOI: 10.1088/1752-7163/abebd4
- [12] I.V. Sherstov, V.A. Vasiliev. *Infrared Phys. Technol.*, **119**, 103922 (2021). <https://doi.org/10.1016/j.infrared.2021.103922>
- [13] S. Alahmari, X.W. Kang, M. Hippler. *Analyt. Bioanalyt. Chem.*, **411**, 3777 (2019). <https://doi.org/10.1007/s00216-019-01877-0>
- [14] B. Baumann, B. Kost, H. Groninga, M. Wolff. *Rev. Sci. Instr.*, **77** (1), 044901 (2006). DOI: 10.1063/1.2186808
- [15] B. Baumann, M. Wolff, B. Kost, H. Groninga. *Appl. Opt.*, **46** (7), 1120 (2007). DOI: 10.1364/AO.46.001120
- [16] A. Rosencwaig. *Photoacoustics and photoacoustic spectroscopy*, (John Wiley & Sons Inc., Chichester, 1980).
- [17] S. Schafer, A. Miklós, P. Hess. In: *Encyclopedia of Spectroscopy and Spectrometry*, ed. by J.C. Lindon, G.E. Tranter, D.W. Koppenaal. (Academic, New York, 1999), p. 1815–1822. DOI: 10.1006/rwsp.2000.0234
- [18] L.M. Milne-Thomson. *Theoretical Hydrodynamics*, (Macmillan & Co Ltd., London, 1962).
- [19] P.M. Morse, K.U. Ingard, *Theoretical Acoustics*, (Princeton University Press, Princeton, 1986).
- [20] S. Marburg, B. Nolte. *Computational Acoustics of Noise Propagation in Fluids — Finite and Boundary Element Methods*, (Springer, Berlin, 2008). DOI: 10.1007/978-3-540-77448-8
- [21] D.T. Blackstock. *Fundamentals of Physical Acoustics*, (John Wiley & Sons Inc, New York, 2000).
- [22] A.I. Nachman, J.F. Smith, R. Waag. *JASA*, **88** (3), 1584 (1990). DOI: 10.1121/1.400317
- [23] A. Ghanbarzadeh-Dagheyani, C. Liu, A. Molaei, J. Heredia, J. Martinez Lorenzo. *Sensors*, **18** (6), 1674 (2018). DOI: 10.3390/s18061674
- [24] S.L. Garret. *Understanding Acoustics: An Experimentalist's View of Sound and Vibration*, 2nd ed. (Springer, Cham, 2020), p. 673–698. DOI: 10.1007/978-3-030-44787-8_14
- [25] I.V. Sherstov, L.V. Chetvergova. *Opt. Commun.*, **462**, 125184 (2020). DOI: 10.1016/j.optcom.2019.125184
- [26] V.A. Kapitanov, Y.N. Ponomarev, I.S. Tyryshkin, A.P. Rostov. *Spectrochimica Acta A*, **66** (4–5), 811 (2007). DOI: 10.1016/j.saa.2006.10.046
- [27] M.I. Cotterell, G.P. Ward, A.P. Hibbins, A. Wilson, J.M. Haywood, J.M. Langridge. *Aerosol Sci. Technol.*, **53** (10), 1128 (2019). DOI: 10.1080/02786826.2019.1648749