

## 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 pptv [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

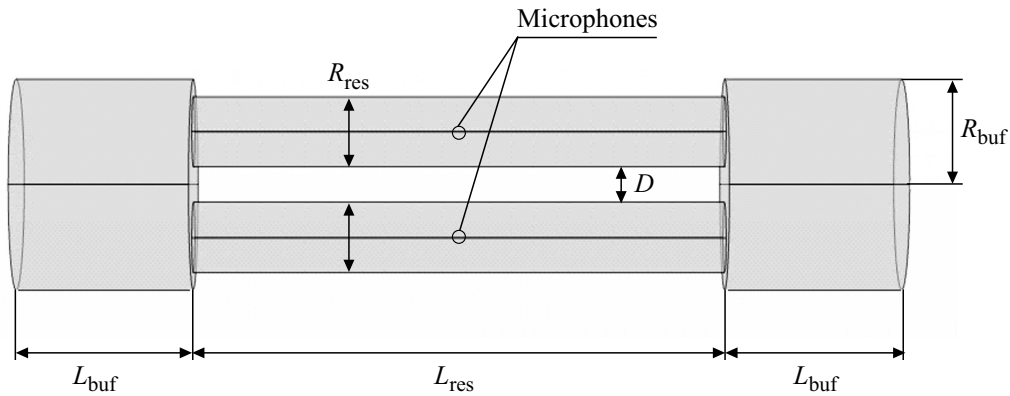


Рис. 1. Схематическое изображение ОАД с дифференциальными резонаторами Гельмгольца.

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),  $\rho$  — плотность среды,  $Q_m$  — источник, модулирующий тепловые возмущения газовой среды в ОАД,  $K = \omega/c - i\alpha$  — комплексное волновое число [24],  $\omega$  — частота акустической волны,  $c$  — скорость звука в среде,  $\alpha$  — коэффициент затухания амплитуды акустической волны. Потери энергии акустической волны при ее распространении связаны прежде всего с наличием вязкости и теплопроводности. Коэффициент затухания  $\alpha$  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  $\mu$  — коэффициент динамической вязкости, который учитывает затухание вследствие внутреннего трения слоев среды друг о друга при распространении акустической волны,  $\mu_B$  — 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

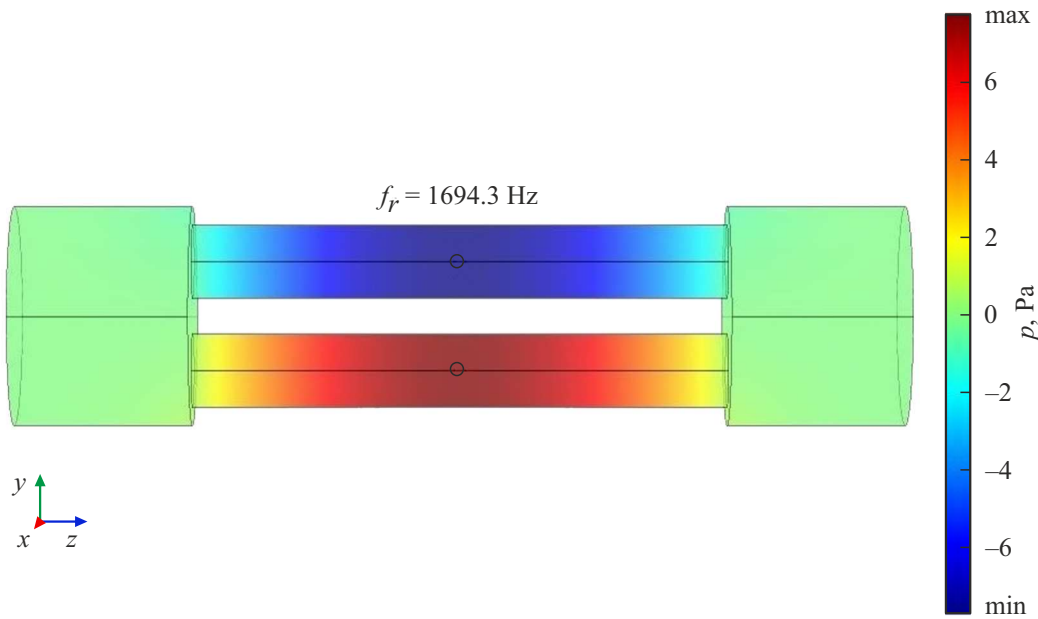
характеризующий потери при всестороннем сжатии среды,  $C_p$  — теплоемкость при постоянном давлении,  $k$  — коэффициент теплопроводности,  $\gamma = 1.4$  — показатель адиабаты. Третье слагаемое в скобках в выражении (2) учитывает потери при теплопереносе между областями с различным давлением. Как 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  $Q$ :

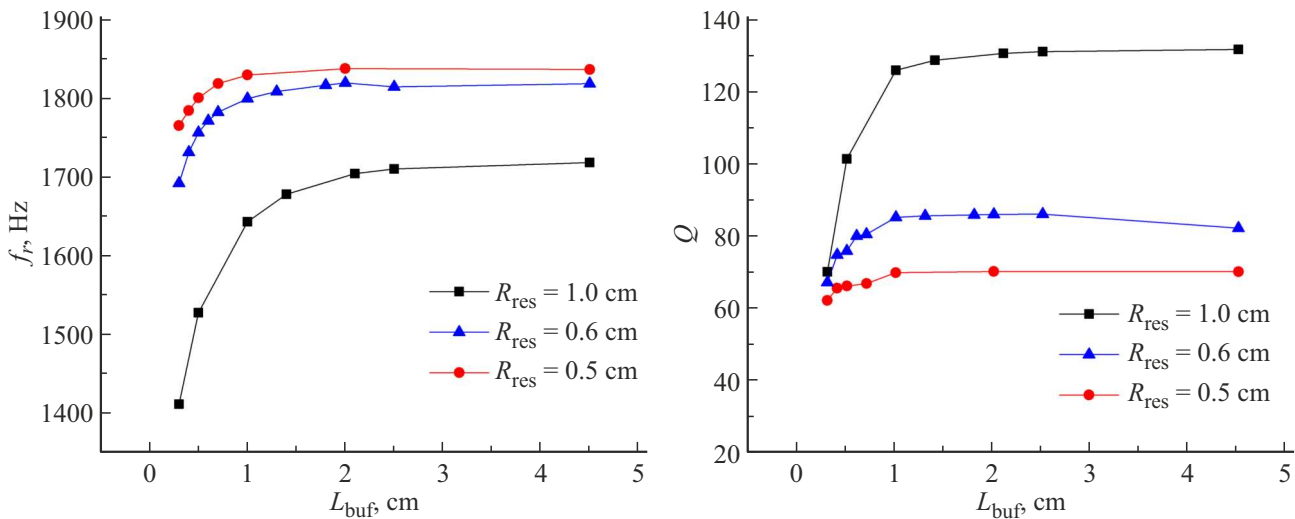
$$Q = \frac{f_r}{\Delta f},$$

где  $f_r$  и  $\Delta f$  — 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.



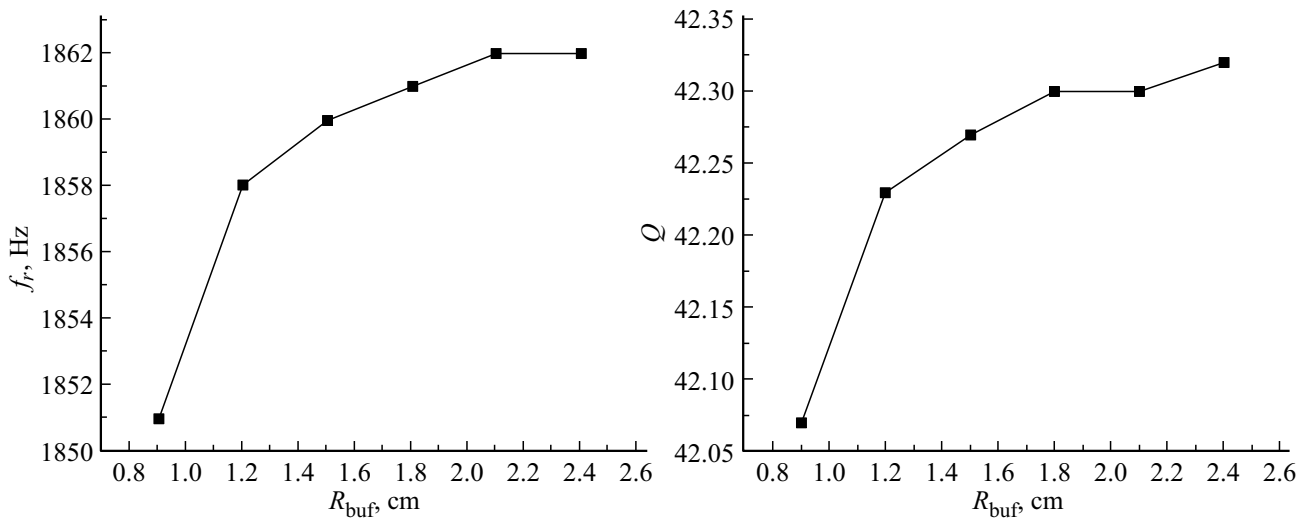
**Рис. 3.** Зависимости резонансной частоты  $f_r$  и добротности акустического резонанса  $Q$  от  $L_{\text{buf}}$  при различных  $R_{\text{res}}$ . Фиксированные параметры:  $D = 0.1$  cm;  $R_{\text{res}} = 0.5, 0.6, 1$  cm;  $R_{\text{buf}} = 2.5$  cm;  $L_{\text{res}} = 9$  cm. Меняющиеся параметры: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

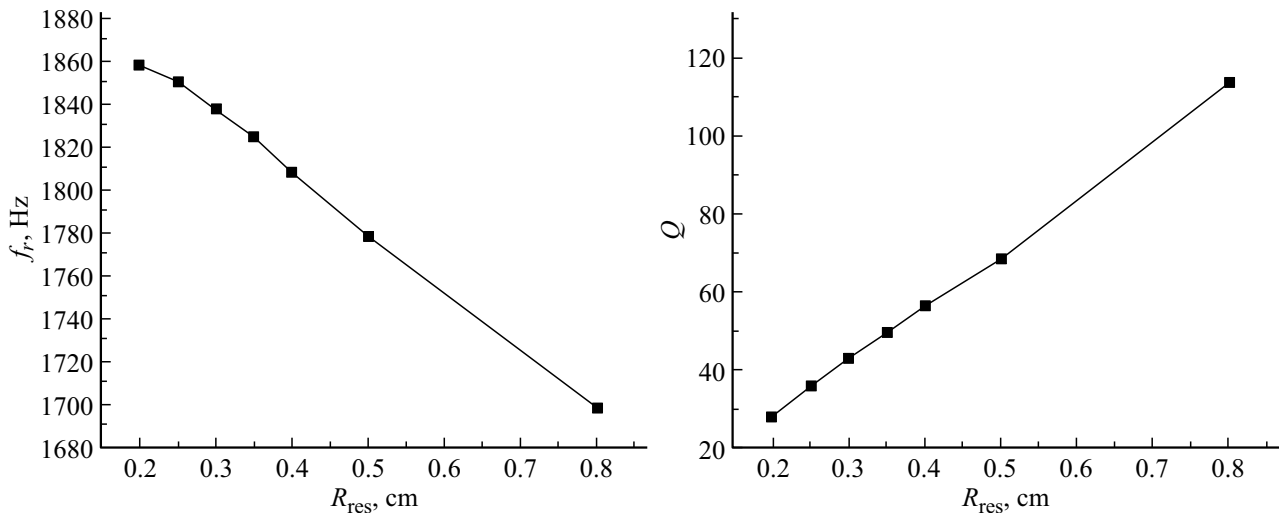
Анализ был ограничен кольцевой акустической модой, когда временные профили давления около микрофонов находятся в противофазе (рис. 2), что обеспечивает подавление акустических шумов и удвоение полезного сигнала [25,26]. Как видно на рис. 2, волны давления в противоположных резонаторах находятся в противофа-

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  $R_{\text{buf}}$ . Фиксированные параметры:  $D = 0.3$  cm,  $R_{\text{res}} = 0.3$  cm,  $L_{\text{res}} = 9$  cm,  $L_{\text{buf}} = 1$  cm. Меняющиеся параметры:  $R_{\text{buf}} = 0.9$ – $2.4$  cm.



**Рис. 5.** Зависимости резонансной частоты  $f_r$  и добротности акустического резонанса  $Q$  от  $R_{\text{res}}$ . 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:  $R_{\text{res}} = 0.2$ – $0.8$  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  $f_r$ .

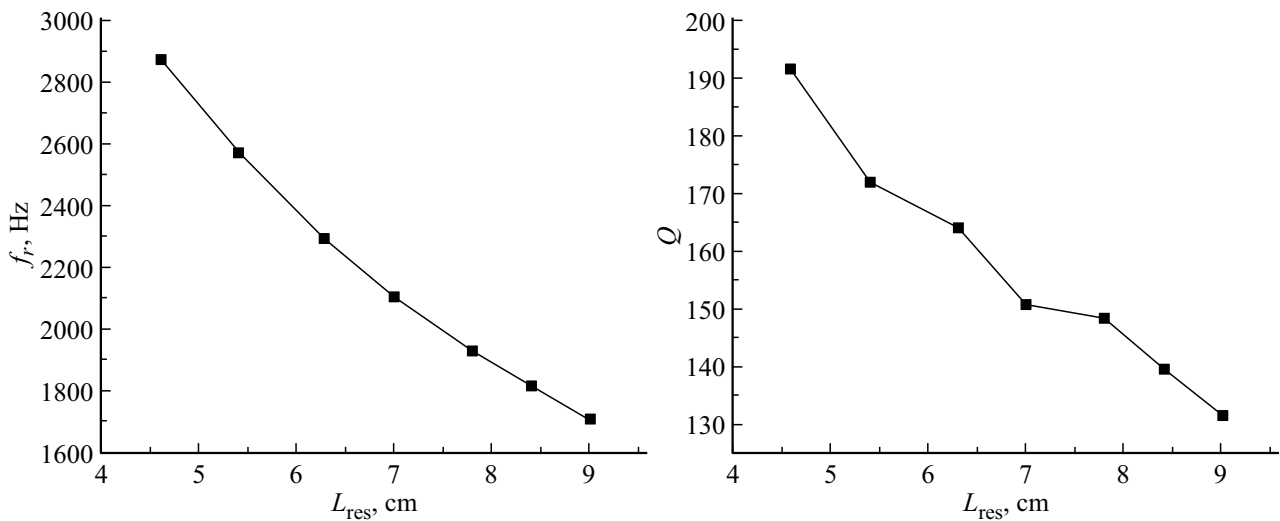
Использованная численная модель ОАД была предварительно проверена путем сравнения с результатами

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  $\sim 0.25$ , а резонансная частота  $f_r$  на  $\sim 10$  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  $\sim 90$ , а резонансная частота  $f_r$  уменьшилась на  $\sim 160$  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  $\sim 60$ , а резонансная частота  $f_r$  на  $\sim 1150$  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