23

Моделирование оптико-акустических детекторов с цилиндрическими резонаторами переменного сечения

© А.В. Борисов, Д.Р. Макашев, А.А. Бойко, Ю.В. Кистенев

Национальный исследовательский Томский государственный университет,
Томск, Россия

e-mail:

Поступила в редакцию 05.08.2025 г.
В окончательной редакции 25.08.2025 г.
Принята к публикации 25.11.2025 г.

Представлены результаты численного исследования (с его использованием динамической модели) характеристик резонансного оптико-акустического детектора (ОАД) с двумя связанными цилиндрическими резонаторами переменного сечения. Получены зависимости амплитуды давления в центре резонатора (там, где расположена пучность стоячей акустической волны), показано, что увеличение сечения резонаторов в области пучности акустической волны по отношению к их исходному сечению приводит к увеличению давления в этой области, что может быть использовано для увеличения чувствительности ОАД. Также показано, что оценки чувствительности, полученные с использованием широко применяемой аналитической формулы расчета чувствительности резонансного ОАД, принципиально отличаются от результатов расчетов динамической модели для ОАД с резонаторами переменного сечения. Это свидетельствует о неприменимости аналитического выражения для оценки чувствительности резонансных ОАД с резонаторами переменного сечения.

Ключевые слова: газовая оптико-акустическая спектроскопия, резонансный оптико-акустический детектор, цилиндрический резонатор переменного сечения.

DOI: 10.21883/0000000000

Введение

Перспективным методом проведения медицинских скрининговых тестов является регистрация профиля летучих молекулярных маркеров в выдыхаемом воздухе [1,2]. Данный метод прост в применении, комфортен для пациента, полученные результаты показывают его эффективность для диагностики бронхо-легочных, онкологических заболеваний, диабета, инфаркта миокарда [3–8]. Существует три основных группы инструментальных методов регистрации летучих молекулярных маркеров в выдыхаемом воздухе: газовая хроматография, химические сенсоры (электронный нос), газовая абсорбционная спектроскопия [8]. Последняя по совокупности таких параметров как селективность, чувствительность, стабильность характеристик, отсутствие расходных материалов наиболее подходит для рутинных клинических измерений. Поскольку концентрация большинства подобных маркеров невелика (на уровне единиц ppm и ppb), критически важным является повышение чувствительности инструментальных методов.

Одним из наиболее чувствительных методов абсорбционного газоанализа является лазерная оптико-акустическая спектроскопия [9,10]. Принцип данного метода основан на поглощении импульсного или модулированного лазерного излучения исследуемой смесью, находящейся в измерительной ячейке, при этом поглощенная энергия преобразуется в тепло, создавая акустическую волну с частотой, равной частоте модуляции лазерного излучения. Акустическая волна оказывает периодическое давление на стенки измерительной ячейки, которое регистрируется микрофоном. Чувствительность оптико-акустических спектрометров зависит от конструкции оптико-акустического детектора (ОАД). Наибольшую чувствительность имеют резонансные ОАД, основанные на использовании акустического резонанса [11]. Когда частота модуляции лазерного излучения совпадает с частотой акустического резонанса измерительной ячейки, сигнал на микрофоне увеличивается пропорционально добротности акустического резонанса. Величина последнего может достигать нескольких сотен.

Резонансные ОАД, использующие дифференциальные резонаторы Гельмгольца [12,13], состоят из двух расположенных параллельно идентичных цилиндрических резонаторов, открытые торцы которых попарно соединены буферными элементами. В каждом из резонаторов установлен микрофон (рис. 1, a). На рис. 1, b показан профиль волны давления в горизонтальном сечении ОАД для первых четырех резонансных мод, в первой из которых максимум и минимум давления находятся в центре резонаторов. Похожая ситуация реализуется для четвертой моды, но в этом случае резонансная частота существенно выше. Для второй и третьей мод максимумы и минимумы давления расположены не в резонаторах, а в буферах, а разность максимального и минимального давлений в этих случаях существенно меньше, чем в случае первой и четвертой мод. Наибольший практический интерес представляет первая

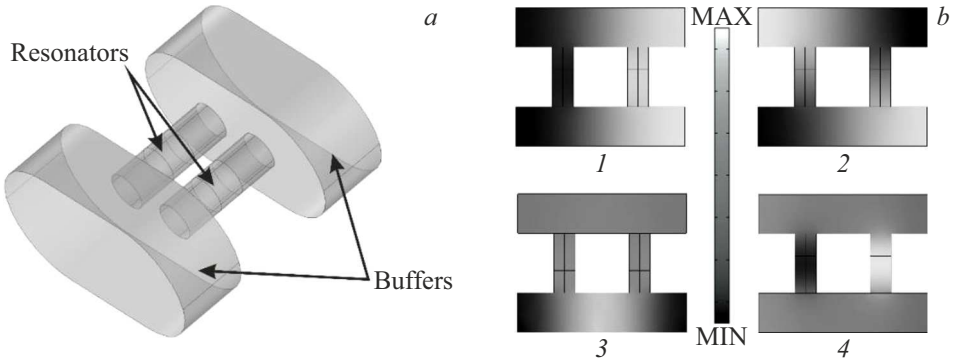

Рис. 1. Схема ОАД с двумя цилиндрическими резонаторами постоянного радиуса (*a*) и профиль волны давления в горизонтальном сечении ОАД для первых четырех (цифры *1–4*) резонансных мод (*b*).

резонансная мода, так как ей соответствует меньшая для всех мод частота, и имеется возможность реализации дифференциального режима детектирования, если два акустических микрофона расположены в центре резонаторов. При этом вычитание электрических сигналов с микрофонов позволяет удвоить полезный сигнал и существенно подавить шум. Данная конструкция ОАД широко применяется в оптико-акустических спектрометрах [14–19].

Чувствительность ОАД цилиндрического типа определяется чувствительностью микрофона и амплитудой волны давления, которая определяется выражением [20]

$$A_n(\omega_n) = \frac{(y-1)LQ_nF_n}{V_{\text{cell}}\omega_n}\alpha W_L, \tag{1}$$

где $A_n(\omega_n)$ — амплитуда „скачка“ давления, γ — показатель адиабаты, L — длина измерительной ячейки, Q_n — добротность ячейки на гармонике с номером n, V_{cell} — объем ячейки, ω_n — частота гармоники с номером n, F_n — нормированный интеграл перекрытия для гармоники с номером n, α — коэффициент поглощения среды, W_L — мощность лазерного излучения.

Поскольку чувствительность ОАД пропорциональна мощности лазерного излучения, посылаемого в ячейку, в качестве источников излучения часто используются параметрические генераторы света, имеющие мощность порядка десятков mW [14]. Однако они достаточно громоздки и имеют широкую линию генерации (порядка $1-3\,\text{cm}^{-1}$). Диодные и квантово-каскадные лазеры компактны, имеют узкую линию генерации, однако их мощность на несколько порядков меньше. Частично последний недостаток можно компенсировать за счет оптимизации конструкции ОАД.

Численное моделирование широко используется для поиска оптимальных характеристик ОАД с цилиндрическими резонаторами [21–28]. Оптимизация направлена на поиск геометрических параметров резонаторов и буферов, обеспечивающих высокую добротность ОАД и чувствительность спектрометра. Дополнительным фактором улучшения характеристик спектрометра является форма резонатора.

Целью настоящей работы является численное исследование акустических свойств ОАД с двумя связанными цилиндрическими резонаторами переменного сечения.

Материалы и методы

В настоящей работе рассмотрен вариант резонансного ОАД с двумя цилиндрическими резонаторами переменного сечения (рис. 2). В первом варианте (рис. 2, *a*) используются цилиндрические резонаторы, у которых радиус сечения имеет два локальных минимума, которые меньше, чем радиус сечения на стыке буферных элементов и резонаторов. Во втором варианте (рис. 2, *b*) используются цилиндрические резонаторы, у которых радиус сечения минимален на стыке буферных элементов и резонаторов и монотонно возрастает к центру каждого из резонаторов. В обоих вариантах радиус сечения максимален в центре каждого из резонаторов.

При моделировании за основу был взят резонансный ОАД с резонаторами постоянного сечения, имеющий добротность, равную 556 [21]. Его геометрические параметры: $D = 60\,\text{mm}$, $L = 47.5\,\text{mm}$, $r = 8.5\,\text{mm}$, $R = 29\,\text{mm}$, $l = 31.5\,\text{mm}$.

Для ОАД, представленного на рис. 2, решалась следующая система уравнений:

$$\frac{\partial\tilde{\rho}}{\partial t} + \nabla(\tilde{\rho}\mathbf{v}) = 0, \tag{2}$$

$$\tilde{\rho}\left(\frac{\partial\mathbf{v}}{\partial t} + (\mathbf{v}\cdot\nabla)\mathbf{v}\right) = -\nabla\tilde{p} + \mu\nabla^2\mathbf{v} + \left(\xi + \frac{\mu}{3}\right)\nabla(\nabla\cdot\mathbf{v}), \tag{3}$$

$$\nabla\rho C_p\left(\frac{\partial\tilde{T}}{\partial t} + \mathbf{v}\cdot\nabla\tilde{T}\right) = \nabla\cdot(k\nabla\tilde{T}) + \alpha\tilde{T}\frac{\partial\tilde{p}}{\partial t} + Q, \tag{4}$$

$$\tilde{\rho}C_p\left(\frac{\partial\tilde{T}}{\partial t} + \mathbf{v}\cdot\nabla\tilde{T}\right) = \nabla\cdot(k\nabla\tilde{T}) + \alpha\tilde{T}\frac{\partial\tilde{p}}{\partial t} + Q, \tag{4}$$

$$\tilde{p} = \tilde{\rho}RT. \tag{5}$$

Здесь $\tilde{\rho}$ — плотность, $\mathbf{v}$ — скорость, $\tilde{p}$ — давление, $\tilde{T}$ — температура, t — время, μ — динамическая

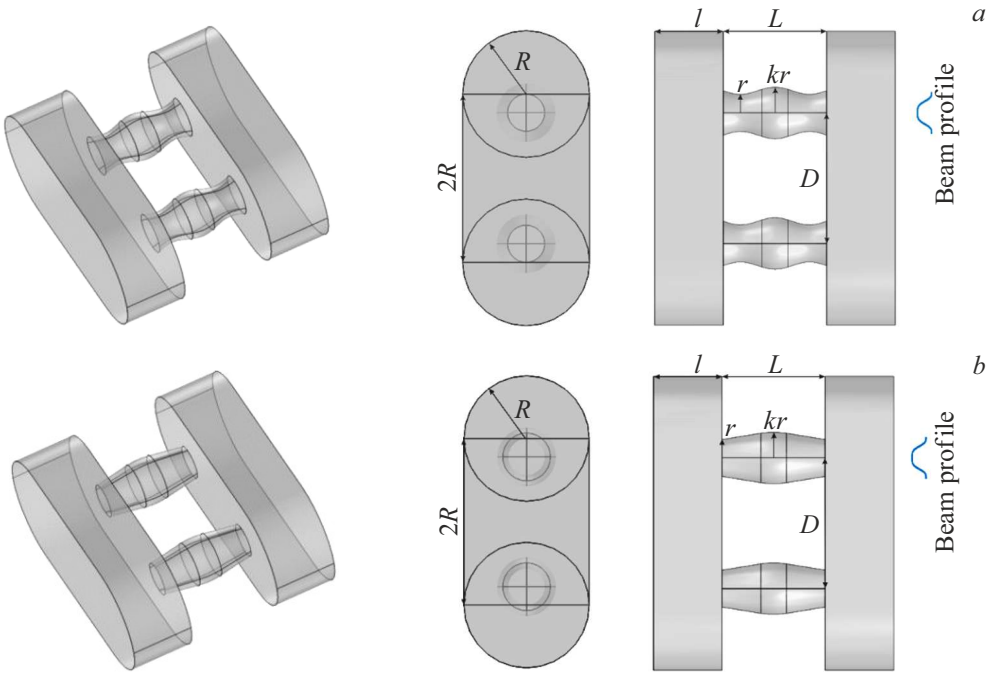

Рис. 2. ОАД с двумя цилиндрическими резонаторами переменного радиуса для геометрических форм (a) первого и (b) второго типов. r — минимальный радиус резонаторов, $k > 1$ — коэффициент, характеризующий максимальный радиус резонаторов, D — расстояние между резонаторами, L — длина резонаторов, R — радиусы соответствующих элементов буферов, l — длина буферов.

вязкость, ξ — объемная вязкость, C_p — теплоемкость при постоянном давлении, k — коэффициент теплопроводности, α — коэффициент теплового расширения, Q — внешняя тепловая энергия, R — универсальная газовая постоянная, ∇ — оператор набла, обозначение в виде точки означает скалярное произведение. Считалось, что исследуемая газовая смесь — идеальный газ.

В случае малых отклонений от равновесных значений ($\tilde{\rho} = \rho_0 + \rho,\ \rho \ll \rho_0,\ \tilde{T} = T_0 + T,\ T \ll T_0,\ \tilde{p} = p_0 + p,\ p \ll p_0$) систему (2)–(5) можно переписать в следующем виде:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \rho_0 \nabla \cdot \mathbf{v} = 0, \tag{6}$$

$$\rho_0 \frac{\partial v}{\partial t} = -\nabla p + \mu \nabla^2 \mathbf{v}, \tag{7}$$

$$\rho C_p \frac{\partial T}{\partial t} = k \nabla^2 T + \alpha T_0 \frac{\partial p}{\partial t} + Q, \tag{8}$$

$$p = c^2 \rho + \alpha \gamma \rho_0 T. \tag{9}$$

Здесь γ — показатель адиабаты, $c = \sqrt{\gamma R T_0}$ — скорость звука.

Для гармонических волн $\rho = \varrho e^{i\omega t}$, $p = P e^{i\omega t}$, $\mathbf{v} = \mathbf{u} e^{i\omega t}$ (здесь учитывалось, что равновесное значение скорости равно нулю), $T = \Theta e^{i\omega t}$ система (6)–(9) примет вид

$$i\omega \varrho + \rho_0 \nabla \cdot \mathbf{u} = 0, \tag{10}$$

$$i\omega \rho_0 u = -\nabla P + \mu \nabla^2 \mathbf{u}, \tag{11}$$

$$i\omega \rho C_p \Theta = k \nabla^2 \Theta + i\omega \alpha T_0 P + Q, \tag{12}$$

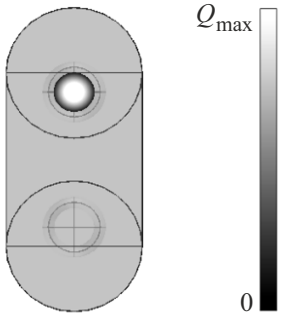

Рис. 3. Распределение теплового потока Q в поперечном сечении ячейки.

$$P = c^2 \varrho + \alpha \Theta \gamma \rho_0. \tag{13}$$

При решении системы (10)–(13) для геометрии, представленной на рис. 2, использовались следующие граничные условия: $\Theta = 0$, $\mathbf{u} = 0$. В качестве источника акустической волны рассматривался тепловой поток

$$Q = Q_0 e^{-\left(\frac{(}{y} - D/2\right)^2 + x^2} 2\sigma^2,$$

где $\sigma = \frac{2}{3} r$. На рис. 3 показано распределение Q в поперечном сечении ячейки.

Результаты

В соответствии с законами гидродинамики идеальной жидкости увеличение сечения резонаторов в области

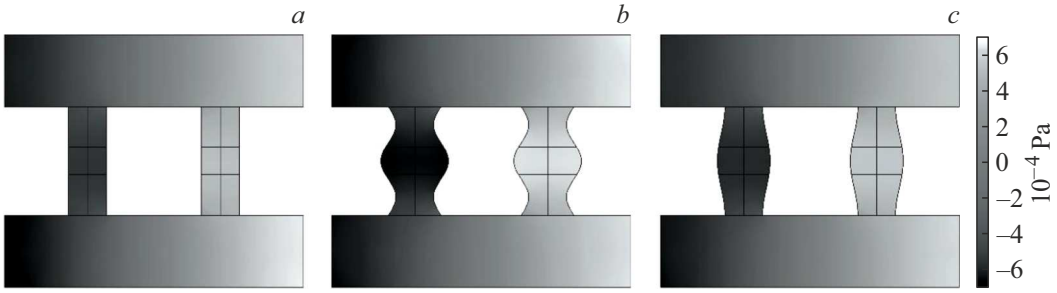

Рис. 4. Распределение давления для первой резонансной моды в горизонтальном сечении ОАД при $k = 1$ и резонансной частоте 1255 Hz (a), при $k = 1.8$ и резонансной частоте 1226 Hz для геометрической формы первого типа (b), $k = 1.6$ и резонансной частоте 1236 Hz для геометрической формы второго типа (c).

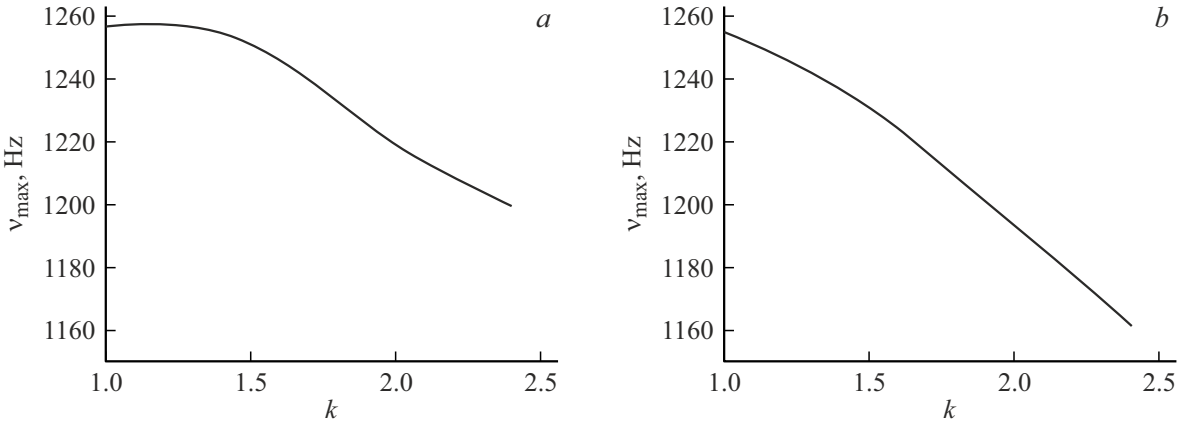

Рис. 5. Зависимость резонансной частоты от параметра k для геометрической формы первого (a) и (b) второго типов.

нахождения микрофонов по отношению к исходному сечению резонаторов должно привести к увеличению давления на них. Вариация продольной формы резонаторов осуществлялось изменением коэффициента k, характеризующего максимальный радиус резонаторов (рис. 2). Варьирование проводилось в диапазоне от r до kr. Параметр k изменялся от 1 до 2.4.

На рис. 4 показаны пространственные профили давления в трех взаимно перпендикулярных сечениях ОАД для первой резонансной моды при $k = 1$, при $k = 1.8$ для геометрической формы первого типа, $k = 1.6$ для геометрической формы второго типа.

В каждом из вариантов максимум и минимум давления для первой резонансной моды находятся в центрах резонаторов.

Изменение частоты акустического резонанса для первой кольцевой моды в зависимости от величины параметра k показано на рис. 5. Видно, что идет небольшой монотонный спад резонансной частоты. Этот эффект может быть полезен при использовании параметрических генераторов света, поскольку снижение частоты модуляции лазерного источника накачки снижает тепловую нагрузку на нелинейный кристалл.

Зависимость максимального значения амплитуды давления P в центре резонаторов на резонансной частоте ОАД от параметра k для двух типов геометрических форм, рассчитанная с использованием динамической модели (10)–(13), представлена на рис. 6. Из рис. 6 видно, что для обоих типов существует величина k, при которой разность давлений в центре соседних резонаторов будет наибольшей, т. е. чувствительность ОАД будет максимальной. В случае геометрической формы первого типа можно добиться большей чувствительности, уменьшая минимальный радиус и увеличивая максимальный. При этом нужно учитывать, что минимальный радиус ограничен радиусом пучка излучения, а максимальный ограничен расстоянием между резонаторами.

Зависимость добротности ОАД от параметра k для геометрической формы первого типа показана на рис. 7.

Представляет интерес оценить применимость формулы (1) для расчета амплитуды волны давления в резонансных ОАД с резонаторами переменного сечения. На рис. 8 представлен расчет амплитуды давления A_n по формуле (1), в которой величина добротности как функция параметра k находилась из рис. 7, т. е. для резонансного ОАД с геометрической формой первого типа. Аналогично учитывалось, что для этой геометрической формы объем измерительной ячейки V_{cell} также зависит от этого параметра (рис. 2, a. Здесь $n = 1$.

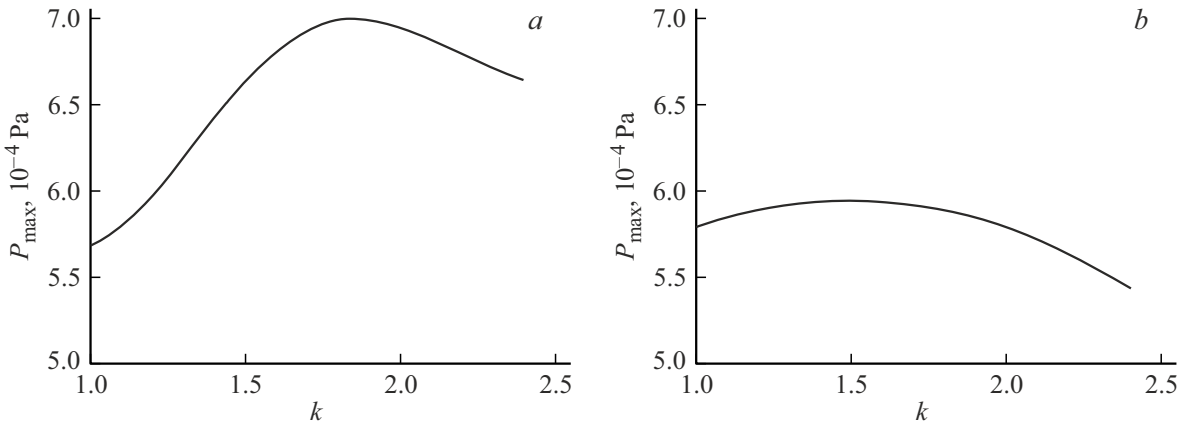

Рис. 6. Зависимость максимального (амплитудного значения) давления в центре резонаторов на резонансной частоте от параметра k для геометрической формы первого (a) и второго (b) типов.

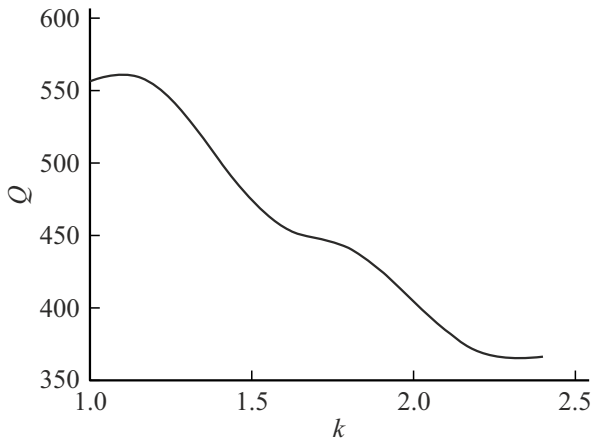

Рис. 7. Зависимость добротности резонансного ОАД от параметра k для геометрической формы первого типа.

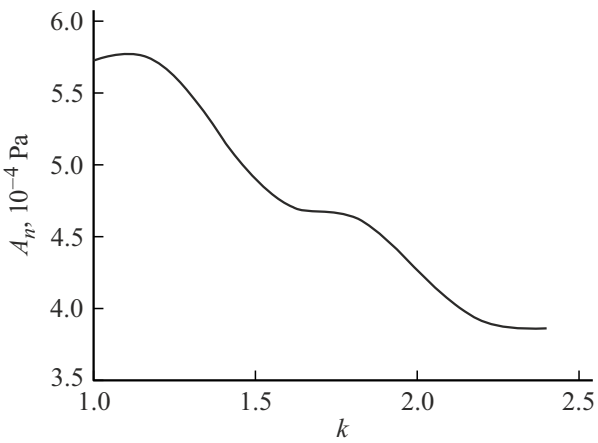

Рис. 8. Зависимость A_n на частоте резонанса от параметра k для резонансного ОАД с геометрической формой первого типа.

Из рис. 8 видно, что зависимость A_n от параметра k, рассчитанная по формуле (1), практически повторяет зависимость добротности Q от параметра k (рис. 7). Однако аналогичная зависимость амплитуды давления в центре резонатора (там, где расположена пучность стоячей акустической волны), рассчитанная с использованием динамической модели (уравнения (10)–(13)), принципиально отличается за исключением предельного случая $k = 1$ (рис. 6). Это свидетельствует о неприменимости выражения (1) для оценки чувствительности резонансных ОАД с резонаторами переменного сечения.

Заключение

В настоящей работе предложен и проанализирован вариант резонансного ОАД с двумя цилиндрическими резонаторами переменного сечения. В первом варианте (рис. 2, a) используются цилиндрические резонаторы, у которых радиус сечения имеет два локальных минимума, которые меньше, чем радиус сечения на стыке буферных элементов и резонаторов. Во втором варианте используются цилиндрические резонаторы, у которых радиус сечения минимален на стыке буферных элементов и резонаторов, и монотонно возрастает к центру каждого из резонаторов. В обоих вариантах радиус сечения максимален в центре каждого из резонаторов. Численное моделирование показало, что, увеличивая сечение в области положения пучности стоячей акустической волны, соответствующей первой резонансной акустической моде, можно добиться увеличения амплитуды давления и соответственно увеличения чувствительности ОАД. Во всех расчетах минимальный радиус резонаторов был фиксирован и определялся диаметром пучка лазерного излучения.

Получены зависимости амплитуды давления в центре резонатора (там, где расположена пучность стоячей акустической волны), рассчитанные с использованием динамической модели и с использованием широко применяемой аналитической формулы расчета чувствительности резонансного ОАД. Они принципиально отличаются от

результатов расчетов динамической модели для ОАД с резонаторами переменного сечения. Это свидетельствует о неприменимости аналитического выражения для оценки чувствительности резонансных ОАД с резонаторами переменного сечения. Представленные результаты могут быть использованы для конструирования высокочувствительных оптико-акустических спектрометров.

Финансирование работы

Работа выполнена в рамках государственного задания ТГУ, тема номер FSWM-2025-0038.

Конфликт интересов

Авторы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

Список литературы

[1] A. Smolinska, A-Ch. Hauschild, R. Fijten, J.W. Dallinga, J. Baumbach, F.J. van Schooten. J. Breath Res., **8** (2), 027105 (2014). DOI: 10.1088/1752-7155/8/2/027105
[2] C. Louren co, C. Turner. Metabolites, **4** (2), 465 (2014). DOI: 10.3390/metabo4020465
[3] M.P. van der Schee, T. Paff, P. Brinkman, W. Marinus. C. van Aalderen, E.G. Haarman, P.J. Sterk. CHEST, **147** (1), 224 (2015). DOI: 10.1378/chest.14-0781
[4] L.D. Bos, P.J. Sterk, S.J. Fowler. J. Allergy Clin. Immunol., **138** (4), 970 (2016). DOI: 10.1016/j.jaci.2016.08.004
[5] 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
[6] Yu.V. Kistenev, A.V. Borisov, D.A. Kuzmin, O.V. Penkova, N.Yu. Kostyukova, A.A. Karapuzikov. J. Biomed. Opt., **22** (1), 017002 (2017). DOI: 10.1117/1.JBO.22.1.017002.
[7] A.A. Boyko, A.V. Borisov, V.S. Zasedatel, V.V. Romanchuk, Yu.V. Kistenev. J. Biomed. Photonics & Engineering, **8** (4), 40301 (2022). DOI: 10.18287/JBPE22.08.040301.
[8] Y.V. Kistenev, A.V. Borisov, V.S. Zasedatel, L.V. Spirina. J. Biophotonics, **16** (9), e202300198 (2023). DOI: 10.1002/jbio.202300198
[9] C. Haisch. Measurement Science and Technology, **23** (1), 012001 (2011). DOI: 10.1088/0957-0233/23/1/012001
[10] D.C. Dumitras, D.C. Dutu, C. Matei, A.M. Magureanu, M. Petrus, C. Popa. J. Optoelectronics and Advanced Materials, **9** (12), 3655 (2007).
[11] М.А. Проскурнин, В.Р. Хабибуллин, Л.О. Усольцева, Е.А. Вырко, И.В. Михеев, Д.С. Волков. УФН, **192** (3), 294 (2022). DOI: 10.3367/UFNe.2021.05.038976
[12] В.А. Капитанов, А.И. Карапузиков, Ю.Н. Пономарев, И.В. Шерстов. Резонансный оптико-акустический детектор и оптико-акустический лазерный газоанализатор. Патент РФ № 51 746 U1, 2006.
[13] А.И. Карапузиков, А.А. Карапузиков, И.В. Шерстов. Оптико-акустический детектор. Патент РФ № 133 306 U1, 2013.
[14] A.A. Karapuzikov, I.V. Sherstov, D.B. Kolker, A.I. Karapuzikov, Yu.V. Kistenev, D.A. Kuzmin, M.Yu. Styrov, N.Yu. Dukhovnikova, K.G. Zenov, A.A. Boyko, M.K. Starikova, I.I. Tikhonyuk, I.B. Miroshnichenko, M.B. Miroshnichenko, Yu.V. Myakishev, V.N. Loconov. Physics Wave of Phenomena, **22** (3), 189 (2014). DOI: 10.3103/S1541308X14030054.
[15] В.Н. Алферов, Д.А. Васильев. Приборы и техника эксперимента, **1** (5), 148 (2020). DOI: 10.31857/S0032816220050080
[16] И.В. Шерстов, Д.Б. Колкер. Квант. электрон., **50** (11), 1063 (2020). DOI: 10.1070/QEL17316
[17] I.V. Sherstov, V.A. Vasiliev. Infrared Physics & Technology, **119**, 103922 (2021). DOI: 10.1016/j.infrared.2021.103922
[18] S. Alahmari, X. W. Kang, M. Analytical and Bioanalytical Chemistry, **411** (17), 3777 (2019). DOI: 10.1007/s00216-019-01877-0
[19] Y.V. Kistenev, A.V. Borisov, D.A. Kuzmin, A.A. Bulanova, A.A. Boyko, N.Y. Kostyukova, A.A. Karapuzikov. Proc. SPIE 9707, Dynamics and Fluctuations in Biomedical Photonics XIII, 97070M (March 17, 2016). DOI: 10.1117/12.2214645
[20] Ю.Н. Пономарев. Оптика атмосферы и океана, **8** (1), 224 (1995).
[21] Г.К. Распопин, Д.Р. Макашев, А.В. Борисов, Ю.В. Кистенев. Опт. и спектр., **130** (6), 826 (2022). DOI: 10.21883/OS.2022.06.52622.28-22
[22] C.M. Lee, K.V. Bychkov, V.A. Kapitanov, A.I. Karapuzikov, Y.N. Ponomarev, I.V. Sherstov, V.A. Vasiliev. Optical Engineering, **46** (6), 064302-064302-8 (2007). DOI: 10.1117/1.2748042
[23] A. Miklós, P. Hess, Z. Bozóki. Rev. Scientific Instruments, **72** (4), 1937 (2001). DOI: 10.1063/1.1353198
[24] A.L. Ulasevich, A.V. Gorelik, A.A. Kouzmouk, V.S. Starovoitov. Infrared Physics & Technology, **60**, 174 (2013). DOI: 10.1016/j.infrared.2013.04.011
[25] M. Tavakoli, M. Tavakoli, A. Tavakoli, M. Taheri, H. Saghafifar. Optics & Laser Technolog., **42** (5), 828 (2010). DOI: 10.1016/j.optlastec.2009.12.012
[26] L. Wu, T. Chen, B. Xiang, L. Xing. Appl. Sci., **14** (23), 11343 (2024). DOI: 10.3390/app142311343
[27] G. Wu, X. Wu, Z. Gong, J. Xing, Y. Fan, J. Ma, W. Peng, Q. Yu, L. Mei. Optics Express, **31** (21), 34213(2023). DOI: 10.1364/OE.502733
[28] J. M. Rey, C. Romer, M. Gianella, M.W. Sigrist. Appl. Phys. B, **100** (1), 189 (2010). DOI: 10.1007/s00340-010-3994-x.