

# 基于 LabVIEW 的气体高分辨率光谱探测系统

龙精明 周卫东 吴志伟

(浙江师范大学信息光学研究所, 浙江 金华 321004)

**摘要** 搭建了一套基于 LabVIEW 的实时、在线气体高分辨率光谱探测系统,采用离轴入射腔增强吸收光谱技术,将外腔式二极管激光器(ECDL)作为激光光源,实现了粗细两种扫描方式的光谱测量,获得了 CO<sub>2</sub> 分子在 6358.65 cm<sup>-1</sup> 处的弱吸收谱峰、吸收光谱强度、线宽与气体浓度的关系,采用该吸收峰使整个系统的最小探测灵敏度达 1.1×10<sup>-6</sup> cm<sup>-1</sup>。在波数为 6450~6530 cm<sup>-1</sup> 范围内,所获得的 CO<sub>2</sub> 分子振动转动光谱与模拟结果基本一致。实验结果表明该系统不仅可行,而且具有较高的探测灵敏度和光谱精度,能满足气体不同光谱的探测需求。

**关键词** 测量;腔增强吸收光谱;外腔二极管激光器;离轴;LabVIEW;CO<sub>2</sub>

**中图分类号** O433.5 **文献标识码** A **doi**: 10.3788/CJL201340.0115003

## A High Sensitive Spectral Detection System of Gaseous Measurement Based on LabVIEW

Long Jingming Zhou Weidong Wu Zhiwei

(Institute of Information Optics, Zhejiang Normal University, Jinhua, Zhejiang 321004, China)

**Abstract** A real-time, on-line gaseous detection system with high-resolution spectrum is built based on LabVIEW. It employs off-axis cavity enhanced absorption spectroscopy technology, and uses an external cavity diode laser (ECDL) as a laser light source. Two kinds of scan mode, one in roughness, the other in fineness for spectral measurement are achieved. A weak absorption spectrum of CO<sub>2</sub> molecule as well as the relationship among the spectral intensity, line width and gaseous concentration is obtained at wave number of 6358.65 cm<sup>-1</sup>. The minimum detection sensitivity is 1.1×10<sup>-6</sup> cm<sup>-1</sup> for the entire system when using the 6358.65 cm<sup>-1</sup> spectral line. Vibration-rotation spectra of CO<sub>2</sub> molecule from experiment is basically consistent with the simulation results in the wave number range of 6450~6530 cm<sup>-1</sup>. Experimental results indicate that this system is not only feasibility but also has high detection sensitivity and spectral resolution, and meets the different spectral detection requirements of gas.

**Key words** measurement; cavity enhanced absorption spectroscopy; external cavity diode laser; off-axis; LabVIEW; CO<sub>2</sub>

**OCIS codes** 300.1030; 300.6260; 300.6390; 120.4640

## 1 引 言

随着人们对空气污染、气候变暖等大气环境问题越来越重视,各种气体吸收光谱检测技术大量涌现。腔增强吸收光谱技术(CEAS)作为一种近十几年来发展起来的新技术<sup>[1~6]</sup>,与传统吸收光谱技术<sup>[7,8]</sup>、腔衰荡吸收光谱技术(CRDS)<sup>[9~11]</sup>相比较,

因其具有独特的优点而得到了较快的发展。2001年,Pual等<sup>[11]</sup>将光束的离轴入射引入 CEAS,不仅简化了复杂的实验装置,大大提高了光谱精度,而且使其仍能保持较高的探测灵敏度。在腔增强吸收光谱实验中要求扫描激光波长,获取波长值与光谱数据,并利用计算机进行处理<sup>[12~14]</sup>,然而大部分实验

收稿日期: 2012-08-02; 收到修改稿日期: 2012-09-03

基金项目: 国家自然科学基金(61178034)、浙江省自然科学基金(Y1100268)、浙江省高校重大科技攻关(ZD2009006)和浙江师范大学创新团队资助课题。

作者简介: 龙精明(1983—),男,硕士研究生,主要从事激光光谱检测技术方面的研究。E-mail: jmlong@yahoo.cn

导师简介: 周卫东(1966—),男,博士,教授,主要从事激光光谱和激光技术等方面的研究。E-mail: wdzhou@zjnu.cn (通信联系人)

却并不能很好地满足对整个探测系统进行在线监控的需求。本文以外腔二极管激光器(ECDL)为光源,基于 LabVIEW 平台设计出一套高分辨率光谱探测系统,实现两种扫描方式的光谱测量,简化了实验操作过程,并使整个实验能够通过互联网进行远程监测。

## 2 原理与组成

### 2.1 光学原理

离轴入射腔增强吸收光谱技术(OA-CEAS)是通过将入射光束离轴注入光学谐振腔内,当实现光束可重入射条件,即满足  $2m\theta = 2n\pi$  关系时,光学谐振腔内的自由光谱区(FSR)将会变为原来的  $1/m^{[15,16]}$ ,其中  $m$  表示光在腔内的往返次数, $n$  为正整数, $\theta$  是由腔长  $L$  与反射镜的曲率半径  $r$  所决定,可由下式求得:

$$\cos \theta = 1 - L/r, \quad (1)$$

通过上述可知,只要光路调节合理,就可以通过减小 FSR 来提高光谱精度。下式是经过变换的腔内光强变化的偏微分方程<sup>[9]</sup>:

$$\frac{\partial I(\nu)}{\partial t} = \frac{c}{2L_{cav}} \{I_0(\nu)TC_p - 2I(\nu) \times \{1 - R\exp[-\alpha(\nu)L_a]\}\}, \quad (2)$$

式中  $C_p$  代表腔耦合参数, $I_0$  为入射光强度, $T$ 、 $R$  分别表示腔镜的透射与反射系数, $L_a$  为样品吸收长度, $L_{cav}$  为谐振腔长度,且在气体吸收情况下  $L_a = L_{cav}$ 。对(2)式进行积分,在充光达到稳定的情况下,可以导出输出光强的表达式为

$$I(\nu) = \frac{I_0(\nu)TC_p}{2\{1 - R\exp[-\alpha(\nu)L_a]\}}, \quad (3)$$

进一步可得

$$\frac{I_{emp} - I_{abs}}{I_{abs}} = \frac{R\{1 - \exp[-\alpha(\nu)L_a]\}}{1 - R}, \quad (4)$$

式中  $I_{emp}$  和  $I_{abs}$  分别表示腔内无吸收样品和有吸收样品时的输出光强。当  $\alpha(\nu)L_a \ll 1$  时,有

$$\frac{I_{emp} - I_{abs}}{I_{abs}} \approx \frac{R}{1 - R}\alpha(\nu)L_a, \quad (5)$$

由(5)式可知吸收系数和相对光强变化的关系,从而获得待测气体的吸收光谱曲线。

### 2.2 系统组成

OA-CEAS 的实验装置如图 1 所示,ECDL 作为整个系统的激光光源,其扫描方式、输出能量、扫描频率等均由 LabVIEW 程序控制。激光束通过分束器(BS)分为两束,一束较弱的光束被送入波长计中进行波长测量;另一束较强的光束则被离轴注入

两端由高反射镜( $R > 99.97\%$ )组成的光学谐振腔中,透过光强经透镜耦合至光电探测器,由数字示波器实时显示其强度信号的变化,最后吸收光谱数据通过通用接口总线(GPIB)被采集到计算机中,进行分析和处理,并保存为表格文件。

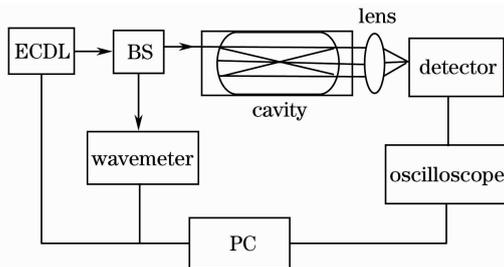


图 1 实验装置

Fig.1 Experimental setup

## 3 实验结果与分析

整个系统由自行设计的 LabVIEW 程序控制,在室温下工作。设置激光能量为 6 mW,扫描频率约为  $0.05 \text{ cm}^{-1}/\text{s}$ ,选择中心波数为  $6358.65 \text{ cm}^{-1}$ ,通过 HITRAN2004 数据库查得  $\text{CO}_2$  分子在室温(298 K)时该波数的吸收线强  $S = 1.727 \times 10^{-23} \text{ cm}^{-1}/(\text{mol} \cdot \text{cm}^{-2})$ ,相对于近红外光波段来说这样的吸收是非常弱的。再对 ECDL 进行精细扫描,这里的精细扫描是指通过改变 ECDL 外腔腔长来扫描激光波长,其最大扫描范围为  $0.4 \text{ cm}^{-1}$ 。图 2 是利用该方法所得到的  $\text{CO}_2$  气体在压强为 130 Pa 时的吸收光谱曲线,信噪比(SNR)约为 78.66,右下角的插图表示拟合曲线与实验数据的偏差,即残差图。

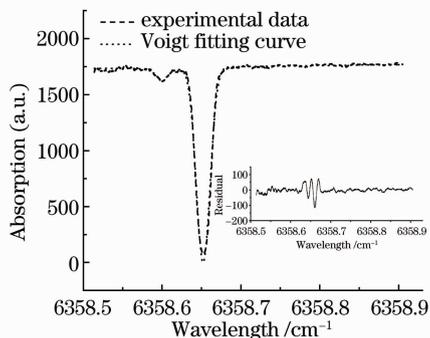


图 2 精扫描下  $\text{CO}_2$  吸收光谱曲线(激光能量为 10 mW)

Fig.2 Absorption spectra curve of  $\text{CO}_2$  by finely scanning (laser power of 10 mW)

在压强为 130 Pa 的情况下, $\text{CO}_2$  气体的压力展宽很小,可以近似认为谱线线宽主要是由多普勒展宽决定,该宽度可由  $\Delta\nu_D = 7.16 \times 10^{-7} \nu_0 \left(\frac{T}{M}\right)^{1/2}$  计

算得出, 式中  $T$  为绝对温度,  $M$  为分子量, 进而可得  $\text{CO}_2$  分子在中心波数  $\nu_0$  为  $6358.65 \text{ cm}^{-1}$  处的吸收截面  $\sigma_D$  ( $\sigma_D = S \frac{2}{\Delta\nu_D} \sqrt{\frac{\ln 2}{\pi}}$ ) 为  $1.37 \times 10^{-21} \text{ cm}^2$ , 若将光谱强度的信噪比为 2 时的吸收系数作为整个系统的检测极限, 这时可探测到相应的分子数密度为  $8.03 \times 10^{14} \text{ mol} \cdot \text{cm}^{-3}$ , 则系统最小探测灵敏度为

$1.1 \times 10^{-6} \text{ cm}^{-1}$ , 在腔长为  $65 \text{ cm}$  的光学谐振腔内实现这样的探测灵敏度是传统吸收光谱技术无法实现的。

反复用高纯度的  $\text{N}_2$  清洗光学谐振腔, 并抽成真空。再先后充入总压强为  $6 \text{ kPa}$ , 不同比例的  $\text{CO}_2$  与  $\text{N}_2$  混合气体, 所得各相对吸收强度如图 3 所示。

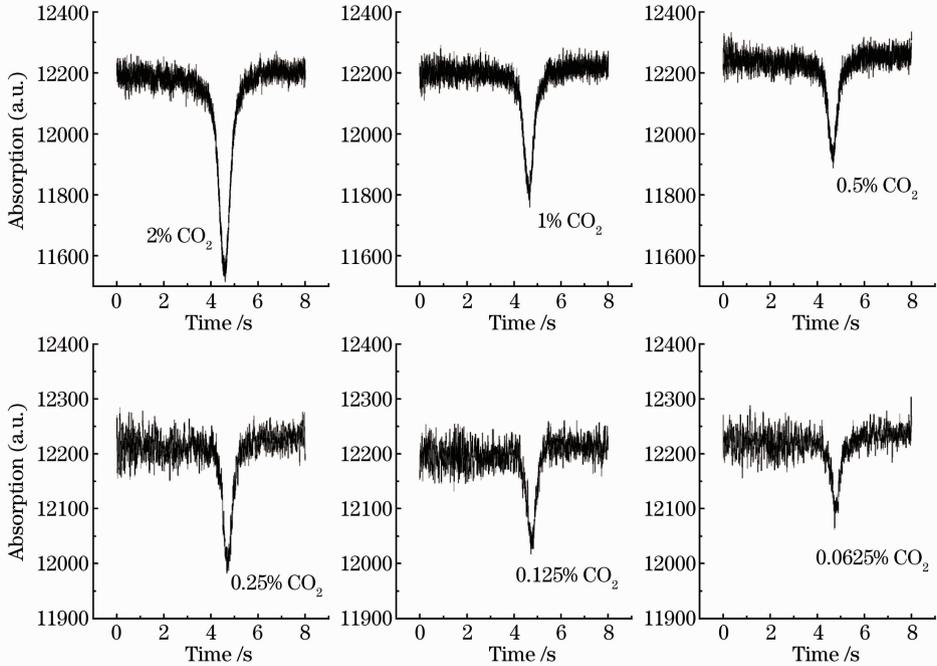


图 3 压强为  $6 \text{ kPa}$  时, 不同  $\text{CO}_2$  浓度的吸收光谱

Fig. 3 Absorbed spectra at different concentrations of  $\text{CO}_2$  with pressure of  $6 \text{ kPa}$

对图 3 中不同气体混合比的吸收光谱数据进行 Voigt 拟合后, 做浓度与相对吸收强度的关系图, 如图 4 所示, 从图中可看出  $\text{CO}_2$  气体在低浓度下, 其相对吸收强度与浓度具有较好的线性关系。

的比例, 线宽并未发生较大的变化, 并且可发现此时碰撞展宽明显大于多普勒展宽。

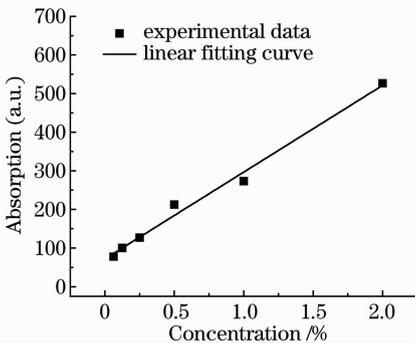


图 4 吸收强度与  $\text{CO}_2$  气体浓度的关系

Fig. 4 Relationship between absorption intensity and concentration of  $\text{CO}_2$

图 5 给出了总压强不变, 不同  $\text{CO}_2$  气体浓度比下, 多普勒展宽和碰撞展宽的变化情况。可以看出, 在混合压强为  $6 \text{ kPa}$  的条件下, 改变  $\text{CO}_2$  气体所占

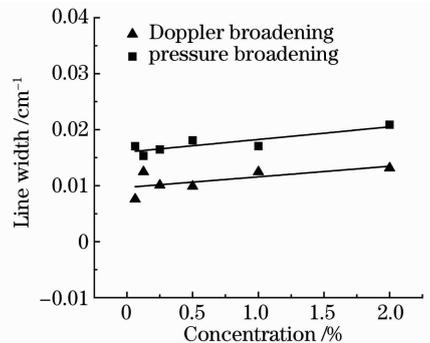


图 5 光谱线宽与  $\text{CO}_2$  浓度关系

Fig. 5 Variation of spectral linewidth at different concentrations of  $\text{CO}_2$

通过计算机上 LabVIEW 程序对激光器进行粗扫描, 即改变 ECDL 内光栅转动角度实现的波长扫描。图 6 是通过此方法所获得的  $\text{CO}_2$  气体压强为  $25.6 \text{ kPa}$ , 波数范围为  $6450 \sim 6530 \text{ cm}^{-1}$  的分子振动转动谱。图中上方为实验测得数据, 下方则是利

用 HITRAN2004 数据库所提供的光谱数据进行模拟的结果,经比较两者吻合得很好。

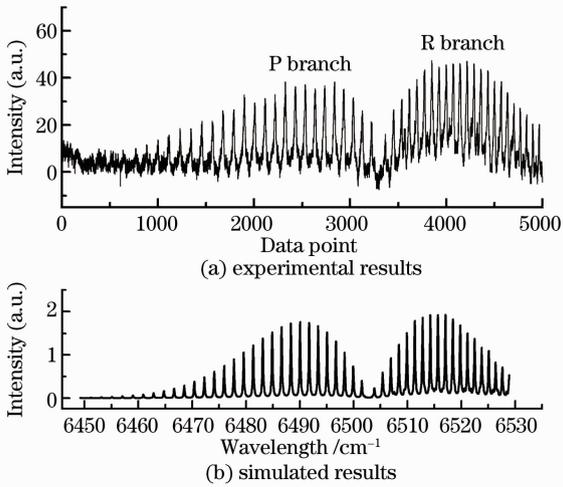


图 6 粗扫描下,CO<sub>2</sub> 的振动转动吸收光谱  
Fig. 6 Vibration-rotation spectra of CO<sub>2</sub> by roughly scanning

通过上述结果发现,这两种不同扫描方式的相互转换,很好地解决了待测气体在较高压强下吸收光谱线宽超出 ECDL 精细调节的最大扫描范围和较低压强下粗调节无法获取吸收光谱细节的两大问题,较简单地实现了不同的光谱探测需求。

## 4 结 论

将 LabVIEW 同离轴入射腔增强吸收光谱技术相结合,发挥了其各自的优势。较简单地实现了对 ECDL 的两种不同方式的波长扫描,并对 CO<sub>2</sub> 气体进行了光谱测量。实验结果表明,该系统的最小探测灵敏度可达  $1.1 \times 10^{-6} \text{ cm}^{-1}$ ,具有较高的光谱灵敏度和光谱精度,与腔衰荡吸收光谱技术相比,具有实验装置简单、成本低、操作简便等特点。能够运用到多种对 CO<sub>2</sub> 气体实时在线监测的环境中。另外,只要选择合适的激光波长,还可以实现对其他气体的在线监测。

## 参 考 文 献

1 R. Engeln, G. Berden, R. Peeter *et al.*. Cavity enhanced absorption and enhanced absorption magnetic rotation spectroscopy [J]. *Rev. Sci. Instrum.*, 1998, **69** (11): 3763~3769

2 A. O'Keefe. Integrated cavity output analysis of ultra-weak absorption[J]. *Chem. Phys. Lett.*, 1998, **293**(5-6): 331~336  
 3 A. O'Keefe, J. J. Scherer, J. B. Pual. CW integrated cavity output spectroscopy[J]. *Chem. Phys. Lett.*, 1999, **307**(5-6): 343~349  
 4 R. Peeters, G. Berden, A. Apituley *et al.*. Open-path gas detection of ammonia based on cavity-enhanced absorption spectroscopy[J]. *Appl. Phys. B*, 2000, **71**(2): 231~236  
 5 V. L. Kasyutich, C. S. E. Bale, C. E. Canosa-Mas *et al.*. Cavity-enhanced absorption: detection of nitrogen dioxide and iodine monoxide using a violet laser[J]. *Appl. Phys. B*, 2003, **76**(6): 691~697  
 6 P. S. Johnston, K. K. Lehmann. Cavity enhanced absorption spectroscopy using a broadband prism cavity and a supercontinuum source [J]. *Opt. Express*, 2008, **16** (19): 15013~15023  
 7 Fan Fengying, Song Zengyun. Measurement of CO<sub>2</sub> concentration with tunable diode laser absorption spectroscopy near 2 μm[J]. *Chinese J. Lasers*, 2012, **39**(2): 0215002  
 范凤英, 宋增云. 2 μm 附近二极管激光吸收光谱 CO<sub>2</sub> 浓度测量研究[J]. *中国激光*, 2012, **39**(2): 0215002  
 8 Rubin Qi, Zhenhui Du, Dongyu Gao *et al.*. Wavelength modulation spectroscopy based on quasi-continuous-wave diode lasers[J]. *Chin. Opt. Lett.*, 2012, **10**(3): 033001  
 9 A. O'Keefe, D. A. G. Deacon. Cavity ring-down optical spectrometer for absorption-measurements using pulsed laser sources[J]. *Rev. Sci. Instrum.*, 1988, **59**(12): 2544~2551  
 10 D. Romanini, A. A. Kachanov, N. Sadeghi *et al.*. CW cavity ringdown absorption spectroscopy[J]. *Chem. Phys. Lett.*, 1997, **264**(3-4): 316~322  
 11 J. B. Paul, L. Lapson, J. G. Anderson. Ultrasensitive absorption spectroscopy with a high-finesse optical cavity and off-axis alignment[J]. *Appl. Opt.*, 2001, **40**(27): 4904~4910  
 12 D. S. Baer, J. B. Paul, M. Gupta *et al.*. Sensitive absorption measurements in the near-infrared region using off-axis integrated-cavity-output spectroscopy[J]. *Appl. Phys. B*, 2002, **75**(2-3): 261~265  
 13 Pei Shixin, Cui Fenping, Zhan Yu *et al.*. Cavity-enhanced absorption spectroscopy based on diode laser[J]. *Acta Optica Sinica*, 2009, **29**(3): 831~837  
 裴世鑫, 崔芬萍, 詹煌等. 基于半导体激光的腔增强吸收光谱技术研究[J]. *光学学报*, 2009, **29**(3): 831~837  
 14 V. L. Kasyutich, P. A. Martin, R. J. Holdsworth *et al.*. An off-axis cavity-enhanced absorption spectrometer at 1605 nm for the <sup>12</sup>CO<sub>2</sub>/<sup>13</sup>CO<sub>2</sub> measurement [J]. *Appl. Phys. B*, 2006, **85**(2-3): 413~420  
 15 D. R. Herriott, H. Kogelnik, R. Kompfner. Off-axis paths in spherical mirror interferometers[J]. *Appl. Opt.*, 1964, **3**(4): 523~526  
 16 D. R. Herriott, H. J. Shulte. Folded optical delay lines[J]. *Appl. Opt.*, 1965, **4**(8): 883~889

栏目编辑:何卓铭