

V 形结构离轴积分腔吸收光谱测量装置设计与研究

袁子豪^{1,2,3}, 黄印博^{1,3}, 钟磬^{3,4}, 卢兴吉^{1,3}, 黄俊^{1,3}, 张雷雷^{1,2,3}, 齐刚^{1,2,3}, 曹振松^{1,3*}¹中国科学院合肥物质科学研究院安徽光学精密机械研究所中国科学院大气光学重点实验室, 安徽 合肥 230031;²中国科学技术大学研究生院科学岛分院, 安徽 合肥 230026;³先进激光技术安徽省实验室, 安徽 合肥 230037;⁴航天系统部驻绵阳某部, 四川 绵阳 621000

摘要 以 $2\ \mu\text{m}$ 窄线宽分布式反馈(DFB)激光器为光源, 搭建了一套新型 V 形结构离轴积分腔吸收光谱实验装置。利用 LightTools 光学仿真软件对实验光路进行模拟仿真和优化分析, 获得了 V 形腔内的高反射镜表面光斑分布规律, 选择合适的入射角度可很好地提高镜面利用效率, 并进一步确定了在 V 形结构双边对称且单边臂长为 25 cm 的情况下, 腔体最佳夹角为 23.06° 。根据设计加工腔体并搭建吸收光谱实验装置, 使用体积分数为 400×10^{-6} 的 CO_2 标准气体在 $4991.258\ \text{cm}^{-1}$ 处对装置进行了实验研究, 标定了高反镜的实际反射率和 V 形腔的有效光程。通过测量装置的 Allan 方差评估了实验装置的性能, 实验结果表明, 当平均时间为 375 s 时, 装置检测限可达 0.35×10^{-6} 。利用该装置在 $4986.9955\ \text{cm}^{-1}$ 处对室内 NH_3 分子进行测量, 获得了 NH_3 的吸收谱线, 同时使用 Savitzky-Golay 算法对光谱数据进行平滑处理, 获得了 46.06 的信噪比, 展示了 V 形结构的离轴积分腔装置优异的弱检测能力, 为复杂环境下离轴积分腔装置的搭建提供了新的结构选择。

关键词 光谱学; 离轴积分腔; V 形结构; 模拟仿真; NH_3 检测; Savitzky-Golay 平滑

中图分类号 O433.1

文献标志码 A

DOI: 10.3788/CJL221333

1 引言

近年来, 激光吸收光谱技术凭借着高灵敏度、快速响应的优点被广泛应用于大气分子探测、环境污染检测和工业生产监测等领域^[1-4]。得益于激光器和其他元器件的快速发展, 激光光谱领域不断涌现出新的检测方法^[5-6]。其中, 腔增强吸收光谱技术利用高反射率的镜片将吸收光程大幅增加至千米级甚至更高, 实现了对痕量气体的超高灵敏度检测^[7]。离轴积分腔吸收光谱技术(OA-ICOS)作为腔增强技术的衍生技术, 其离轴入射的方式使得其抗干扰能力更强、装置调节更简单, 从而受到了研究人员的广泛关注^[8]。2001年, Paul等^[9]提出了离轴入射的概念。2007年, Zhao等^[10]将波长调制技术与离轴积分腔相结合, 获得了14倍探测极限的提升。2014年, Leen等^[11]利用Zemax软件对光路进行跟踪模拟, 对离轴入射到前腔镜表面并被反射回来的光进行了再利用, 提出了光学再入射方法, 实现了可探测功率22.5倍的提高。同年, Centeno等^[12-13]优化了再入射镜与前腔镜间的距离, 使信噪比提高了10倍, 并实现了对乙烯的实时测量, 32 s平均时间内的测量精度达到了 18×10^{-9} 。2019年, Wang等^[14]通过

将射频白噪声主动注入到激光器的驱动电流中, 抑制了腔模噪声, 增加了吸收光谱的线宽, 系统测量 CH_4 的检测灵敏度提升了4倍。2020年, Zheng等^[15]为了抑制离轴积分腔腔模噪声, 将激光光束一分为二, 使其同时输入到腔内, 这种双入双出光学耦合方法将信噪比提高了2.5倍。可以发现, 目前离轴积分腔系统性能提升的工作主要集中在激光光源、探测器等元器件性能的改善和信号的处理方式上, 相对增加了装置的复杂性。离轴积分腔的探测灵敏度主要由吸收光程决定, 理论上腔体的长度越长, 激光经高反射镜片来回反射的总有效光程也就越长, 然而腔体越长, 装置的体积就越大, 便携性、鲁棒性都会变弱^[8]。

本文通过改进腔体结构, 设计了基于V形结构的离轴积分腔装置, 使得结构更加紧凑, 稳定性高。通过LightTools软件优化设计了V形腔体结构, 分析了V形腔内的光路分布, 并搭建了一套 $2\ \mu\text{m}$ 波段V形腔体结构的离轴积分腔吸收光谱测量装置, 开展了相关测量实验。利用 CO_2 标准气体测试了V-OA-ICOS装置的性能, 并在 $4986.9955\ \text{cm}^{-1}$ 处测得了室内环境中 NH_3 的吸收信号。

收稿日期: 2022-10-17; 修回日期: 2022-11-14; 录用日期: 2022-11-21; 网络首发日期: 2023-01-04

基金项目: 国家自然科学基金重大科研仪器研制项目(42027804)、先进激光技术安徽省实验室青年基金(AHL2021QN01)

通信作者: *zscao@aiofm.ac.cn

2 实验原理

在离轴积分腔测量实验中,可以通过测量透过谐振腔的光强来获取所测气体的浓度。当一束光强为 I_{in} 的激光通过长度为 L 、腔镜反射率为 R_c 的谐振腔且腔内有吸收介质时,透射光强(I)为

$$I = I_{in} \frac{(1 - R_c)^2 \exp(-\alpha L)}{1 - R_c^2 \exp(-2\alpha L)}, \quad (1)$$

式中: α 为吸收系数。

当腔内没有吸收介质时,透射光强为

$$I_0 = I_{in} \frac{1 - R_c}{1 + R_c}. \quad (2)$$

由式(1)和式(2)可得吸收系数为

$$\alpha = \frac{1}{L} \ln \left\{ \frac{1}{2R_c^2} \left[\sqrt{4R_c^2 + \frac{I_0^2}{I^2} (1 - R_c^2)^2} - \frac{I_0}{I} (1 - R_c^2) \right] \right\}. \quad (3)$$

当使用高反射率的腔镜时, $R_c \rightarrow 1$,此时式(3)可以简化为

$$\alpha \approx \frac{1}{L} \left(\frac{I_0}{I} - 1 \right) (1 - R_c). \quad (4)$$

则有效吸收光程可近似为

$$L_{eff} \approx L / (1 - R_c). \quad (5)$$

对式(4)两边进行积分,有

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \alpha d\nu = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{1}{L} \left(\frac{I_0}{I} - 1 \right) (1 - R_c) d\nu = A(1 - R_c), \quad (6)$$

式中: ν 为入射光束的频率; A 为吸收光谱积分面积。吸收系数 α 与腔内吸收气体的分子数密度关系为

$$\alpha(\nu) = \sigma(\nu)c = S\phi(\nu)c, \quad (7)$$

式中: $\sigma(\nu)$ 为吸收截面; c 为气体分子数密度; S 为吸收谱线的线强; $\phi(\nu)$ 为吸收线型函数。选用Voigt线型对所得的吸收谱线进行线性拟合^[16]。

因为线型函数 $\phi(\nu)$ 的积分为单位1,所以对式(7)两边进行积分,有

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \alpha d\nu = \int_{-\infty}^{+\infty} \sigma(\nu)c d\nu = Sc. \quad (8)$$

由式(6)和式(8)联立可得

$$Sc = A(1 - R_c). \quad (9)$$

基于式(9),可以根据已知浓度气体的吸收谱线计算得到吸收光谱积分面积 A ,进而得出腔镜反射率 R_c 。然后,在相同的实验条件下,根据已经标定的腔镜反射率和所需测量的分子吸收谱线的参数,得出其分子数密度,即可获得所测气体浓度。

3 V形腔结构设计

3.1 仿真参数设置

使用LightTools光学设计软件对V形腔体结构进行三维光路追迹仿真,通过分析腔镜表面的光斑分布

来确定V形腔体的最佳结构。腔体仿真图如图1所示,由三片高反射镜片 M_0 、 M_1 和 M_2 构成。主要优化的参数包括: $L1$ 和 $L2$ 两臂的臂长 L_1 和 L_2 , $L1$ 和 $L2$ 两臂的夹角角度,以及激光在 XY 方向上离轴入射的角度。模拟仿真时,参数设置与实验装置参数一致,具体设置如下:两臂臂长 $L_1=L_2=25$ cm,腔镜直径为25.4 mm,反射率为99.99%,腔镜 M_0 、激光光源的位置保持不变。同时,为了激发更多的高阶模、提高信噪比,入射光经 M_0 进入腔内后尽可能靠近镜片 M_1 边缘反射,以保证光斑排布的均匀性。实验中 $L1$ 和 $L2$ 两臂的夹角角度通过改变 M_1 和 M_2 中心距离来改变。

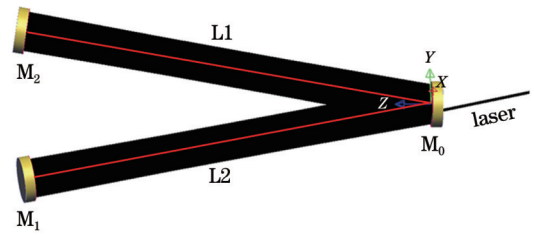


图1 V形腔腔体仿真图

Fig. 1 Simulation diagram of V-shaped cavity

3.2 仿真结果分析

激光经过高反射镜片 M_0 后离轴入射到V形腔体内,再被 M_1 反射回 M_0 并经 M_2 出射,在不同腔体夹角(镜片 M_1 、 M_2 中心距离为 d)下进行模拟,通过分析腔体两端高反射镜片 M_1 和 M_2 表面的光斑分布情况来研究V-OA-ICOS装置性能。模拟结果如图2、3所示,分析如下:

1) 与传统直腔OA-ICOS不同的是,V形腔镜面光斑不再呈近圆环形分布^[17],而是呈现方形分布,大幅提升了镜面表面的利用率。

2) 当夹角过小时,光斑主要呈两点分布,离轴效果无法充分体现。随着夹角不断增大,光斑分布由两点分布过渡至方形分布,而当夹角在大于一定值时($d \geq 10$ cm),光斑分布不再有明显变化,如图2所示。

3) 光源离轴入射到腔内,在夹角固定即 $d=10$ cm时,不同入射角度对出射镜 M_2 上光斑分布的影响如图3所示。光源 X 方向上的偏离影响光斑的上下分布,随着 X 方向角度(β_1)的增加,光斑分布越来越长;光源 Y 方向上的偏离影响光斑的左右分布,随着 Y 方向角度(β_2)的增加,光斑分布越来越宽。 X 、 Y 方向的离轴入射角度越大,腔内所激发的高阶模就越多,腔模变得越密集,腔镜表面的光斑分布也就越均匀,但过大的入射角度也会导致光斑分布范围超出镜面。

3.3 参数确定与腔体设计

在传统OA-ICOS中,高反镜表面光斑分布的圆环越大越密,激发的高阶模越多,越利于抑制腔模噪声,装置的信噪比越高^[18]。因此,在腔体设计时,应尽

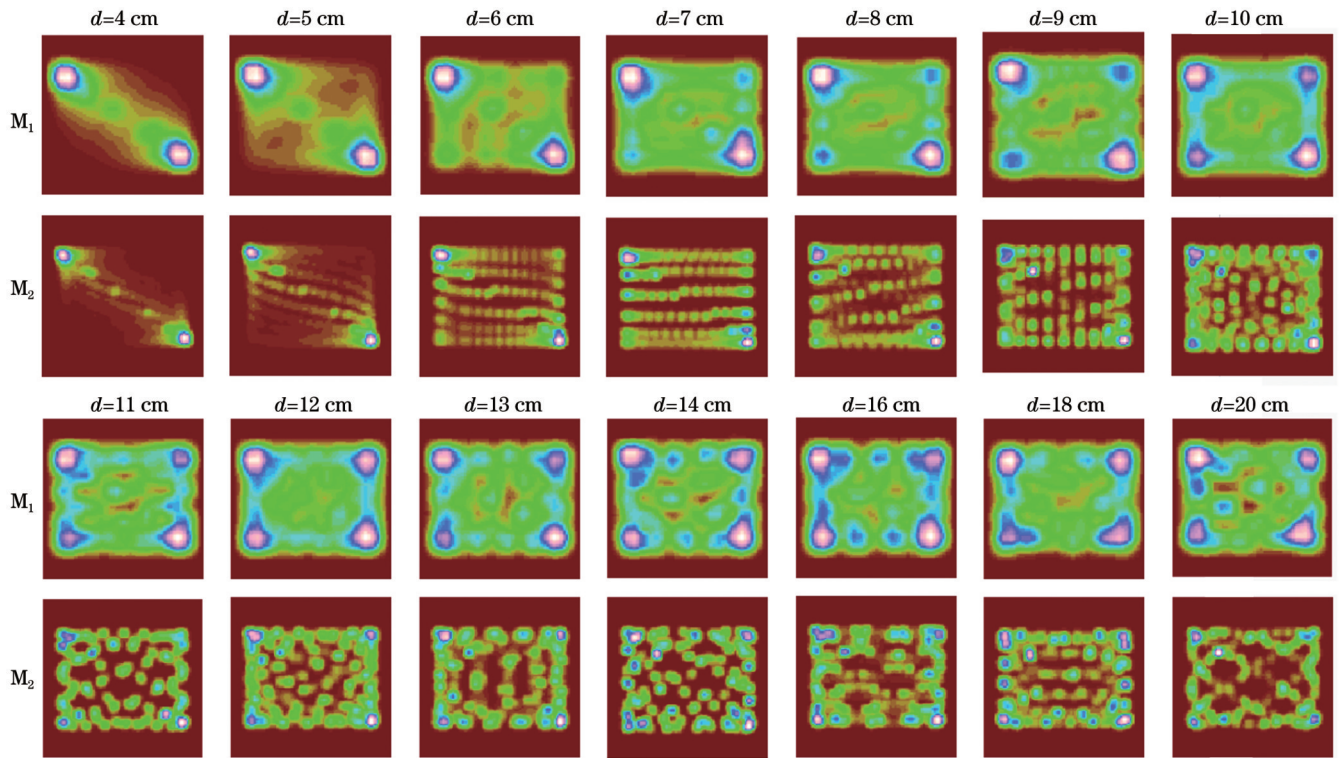


图 2 不同夹角下镜片 M_1 和 M_2 表面光斑分布

Fig. 2 Spot distributions on M_1 and M_2 surfaces at different angles

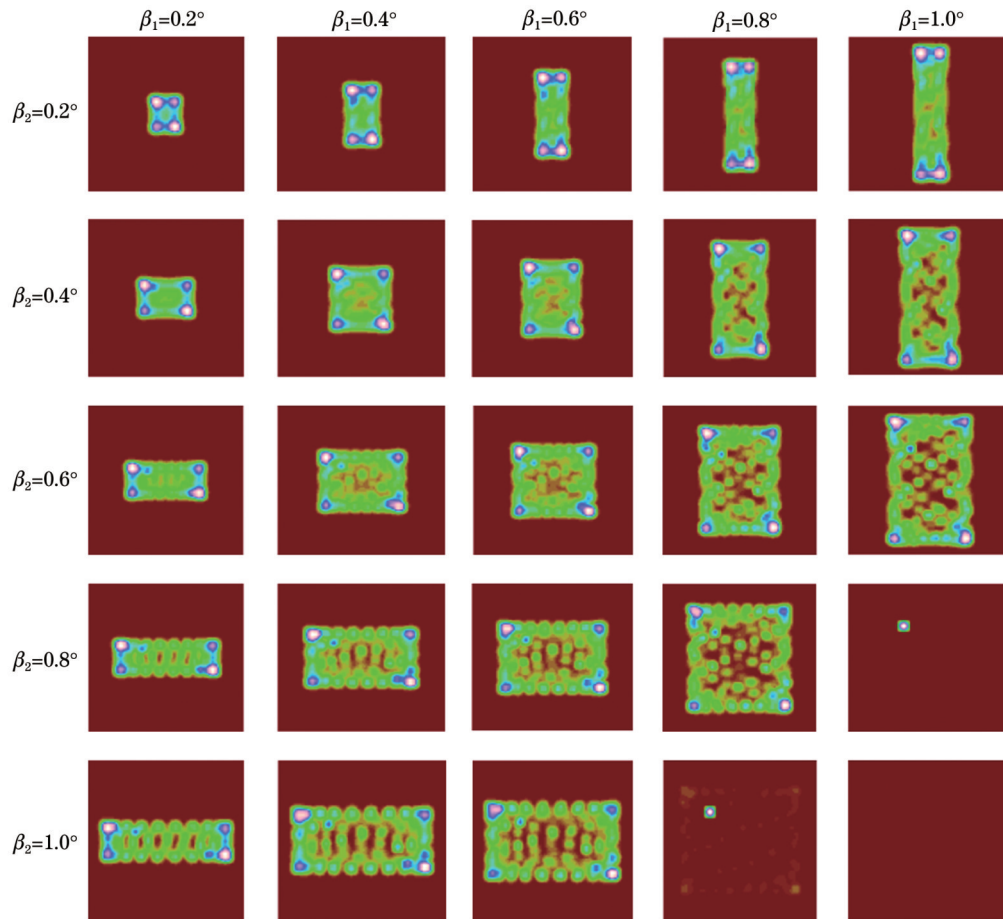


图 3 不同离轴入射角度下镜片 M_2 表面光斑分布

Fig. 3 Spot distributions on lens M_2 surface at different off-axis incidence angles

可能保证光斑分布宽广,提高镜面利用率,以减小腔内泄漏的能量和干涉噪声。同时,为了兼顾腔体的紧凑性,结合图 2,以臂长 $L_1=L_2=25\text{ cm}$, $d=10\text{ cm}$ 处的夹角为腔体参数进行设计加工。模拟了腔长为 50 cm 的直腔 OA-ICOS 与腔长为 50 cm 的 V-OA-ICOS 的

出射腔镜表面的光强分布图,结果如图 4 所示。其中:图 4(a)为 V-OA-ICOS 的光强分布,呈方形分布且镜面中心部分得到利用;图 4(b)为 OA-ICOS 的光强分布,呈圆环形分布且镜面中心部分未得到利用。因此,V-OA-ICOS 的腔镜表面利用率更高。

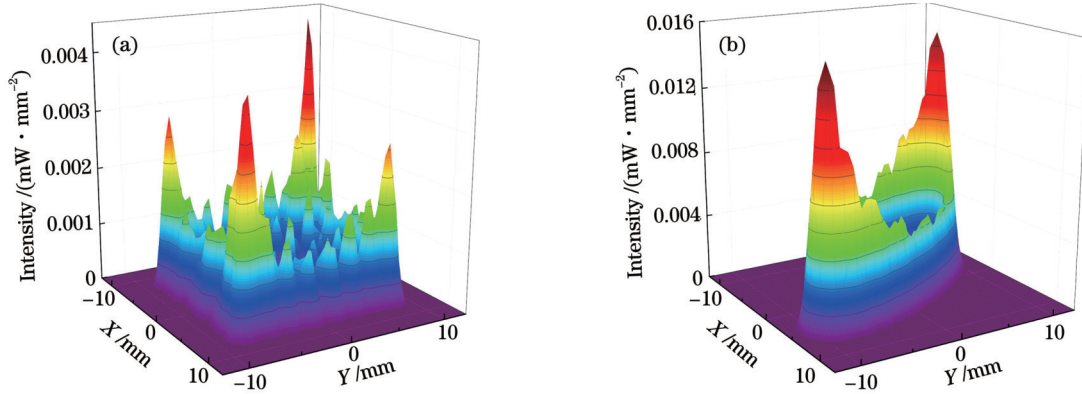


图 4 V-OA-ICOS 与 OA-ICOS 的出射腔镜表面的光强分布。(a) V-OA-ICOS; (b) OA-ICOS

Fig. 4 Intensity distributions of light emitting from surface of cavity mirror for V-OA-ICOS and OA-ICOS. (a) V-OA-ICOS; (b) OA-ICOS

由于所使用的高反射镜的直径为 25.4 mm,为了使光源更好地离轴入射到腔内以及采集透射光,腔体窗口片直径设计为 50.8 mm。综上,V 形腔体结构设计图如图 5 所示,对比传统 OA-ICOS,在相同的光程下,V 形腔的长度可缩短近一半,结构更加紧凑。

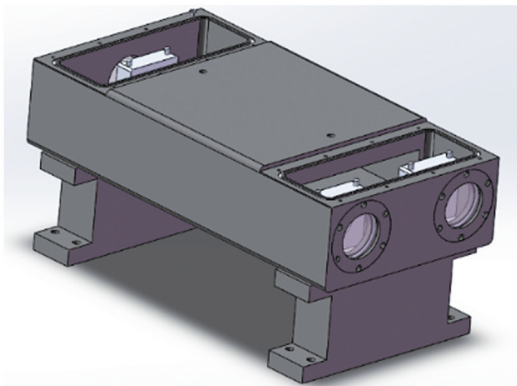


图 5 V 形腔体结构设计图

Fig. 5 Structure design of V-shaped cavity

4 实验装置

根据仿真结果搭建的 V-OA-ICOS 实验测量装置如图 6 所示。中心波长为 2004 nm、典型功率为 8 mW 的蝶形封装分布式反馈(DFB)半导体激光器的温度和电流由激光控制器控制。利用函数信号发生器输出的频率为 40 Hz、电压幅值为 800 mV 的三角波信号对激光控制器电流进行扫描,进而改变激光器输出波长。激光通过准直器输出后被分束镜(分束比为 1:9)分成两束光源。一路光源经过反射镜 M_7 、 M_8 后进入波长计用于波长监测,另一路光源经过反射镜 M_3 、 M_4 后耦合进入设计加工的 V 形腔内,腔内三个高反镜 M_0 、 M_1 、 M_2 呈 V 字形对称放置,其单边臂长为 25 cm, M_1 和 M_2 腔镜中心距离为 10 cm,即两臂夹角为 23.06° 。高反镜的直径为 25.4 mm,曲率半径为 1 m,反射率大于 99.9%。腔体采用三块直径为 50.8 mm、厚度为 5 mm 的氟化钙窗口片进行密封。进入腔内的激光在三个腔镜之

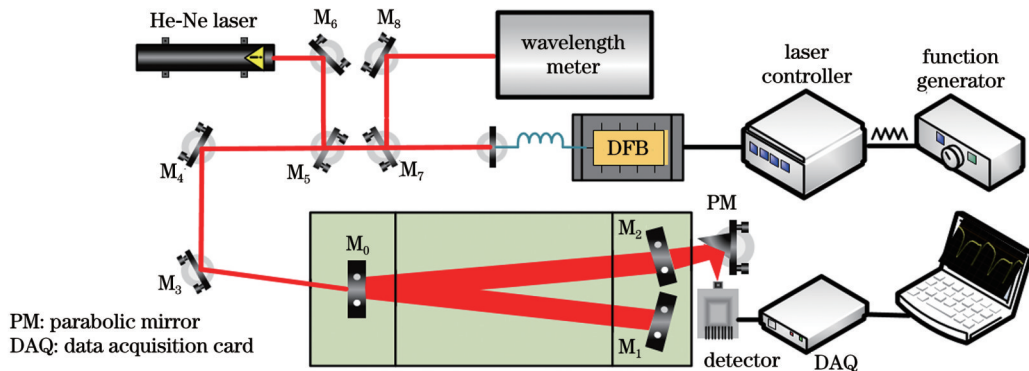


图 6 V-OA-ICOS 实验测量装置图

Fig. 6 V-OA-ICOS experimental measuring device

间来回反射多次,透射出的光经过离轴抛物面镜后被光电探测器接收转变为电信号,该信号被高速采集卡采集并输入到计算机中进行进一步处理。在进气口处使用质量流量控制器控制流量,以满足实验所需的流速和标准气体浓度要求,在出气口处连接压力控制器和机械泵,控制腔内压强。He-Ne 红光光源经过反射镜 M_5 、 M_6 调节后,与探测光源共光路,并作为指示光辅助光路调节。

5 实验结果与分析

5.1 腔镜反射率标定

使用体积分数为 400×10^{-6} 的 CO_2 标准气体作为

测试气体进行实验研究。为了避免其他气体分子吸收对 CO_2 测量造成干扰,同时兼顾激光器性能的稳定,根据 Hitran 数据库^[19],选择 CO_2 在 4991.258 cm^{-1} 处较为孤立的吸收谱线进行测量。

激光离轴入射到 V 形腔内,根据图 3 仿真结果,控制实验条件保持一致,仅调节反射镜 M_3 ,不断增加离轴入射角度,以激发更多的高阶模,密集的腔模会带来更高质量的信号,单次采集结果如图 7 所示,其中激光离轴入射角 $\gamma_1 < \gamma_2 < \gamma_3$ 。图 7(a)、(b)、(c)分别是在激光离轴入射角度越来越大情况下获得的 CO_2 吸收信号,其对应的高阶模越来越密集,符合传统 OA-ICOS 调控规律。

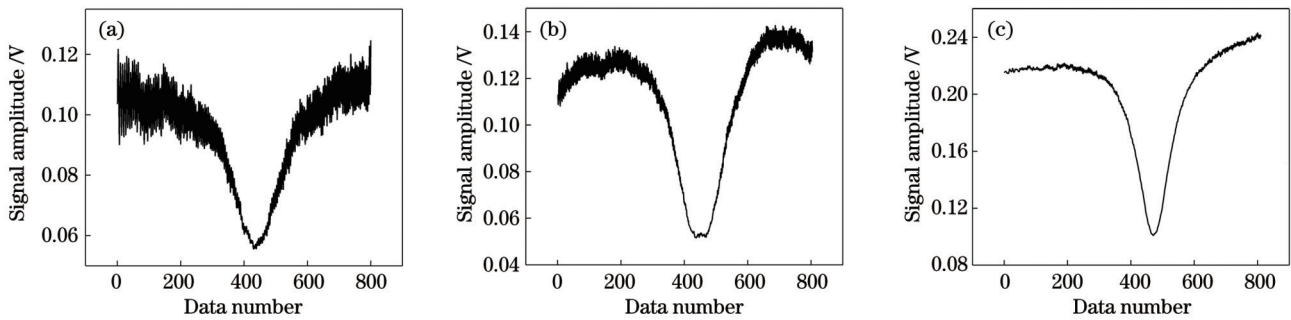


图 7 不同离轴入射角度时的腔模信号。(a) γ_1 ; (b) γ_2 ; (c) γ_3

Fig. 7 Cavity mode signals at different off-axis incidence angles. (a) γ_1 ; (b) γ_2 ; (c) γ_3

获得最佳离轴入射效果后,体积分数为 400×10^{-6} 的 CO_2 标准气体通过流量计以 100 mL/min 的流速进入腔体,腔内压强抽至 12 kPa ,激光控制器温度设置为 $25 \text{ }^\circ\text{C}$,电流为 109 mA 。利用函数信号发生器产生的频率为 40 Hz 、幅值为 600 mV 的三角波扫描信号扫描激光控制器电流以覆盖 CO_2 吸收谱线,对 500 次测量数据取平均,结果如图 8 所示。图 8(a)为 CO_2 吸

收谱线和 Voigt 拟合结果,吸收系数根据式(6)为 $(I_0/I - 1)/50$,拟合积分面积为 0.00286 ,拟合峰值为 0.08 cm^{-1} ;图 8(b)为拟合后的残差,残差的标准差为 $2.22 \times 10^{-4} \text{ cm}^{-1}$,可算得在此条件下装置的信噪比为 364。 CO_2 在 4991.258 cm^{-1} 处对应的线强为 $1.292 \times 10^{-21} \text{ cm} \cdot \text{molecule}^{-1}$,已知气体体积分数为 400×10^{-6} ,装置所处环境温度为 298 K ,压强为 11997 Pa ,根据式(9)和理想气体状态方程,可计算得到腔镜的反射率为 99.947% ,由式(5)可得到装置的有效吸收光程约为 943 m 。

5.2 装置性能评估

为了进一步衡量装置的性能,利用该装置对体积分数为 400×10^{-6} 的 CO_2 标准气体进行连续 50 min 的测量。采集周期为 3 s 的一组数据,获得的采样结果如图 9 所示。其中图 9(a)为装置的稳定性测试结果,测得的体积分数波动范围为 $-10 \times 10^{-6} \sim +10 \times 10^{-6}$ 。利用 Allan 方差进一步分析装置的探测限,结果如图 9(b)所示,当平均时间为 3 s 时,获得的装置检测下限为 2.3×10^{-6} ,当平均时间为 375 s 时,装置检测下限为 0.35×10^{-6} 。

5.3 NH_3 分子吸收测量

利用搭建的 V-OA-ICOS 装置对实验室室内的 NH_3 分子进行测量。在进行测量前,根据 Hitran 数据库^[19]对 4987 cm^{-1} 处附近的 NH_3 、 H_2O 、 CO_2 吸收光谱进行模拟。模拟参数设置为:温度 298 K ,压强 2500 Pa ,

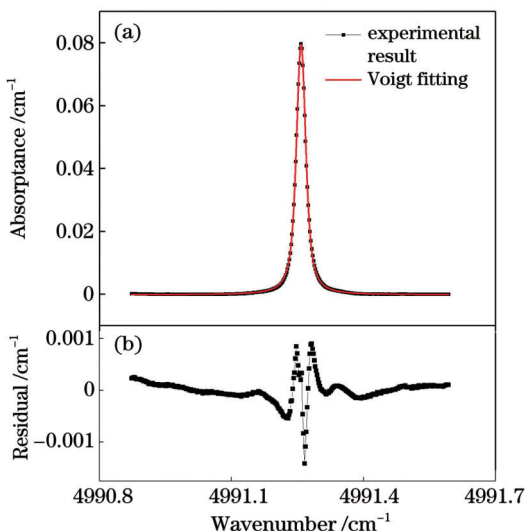


图 8 V-OA-ICOS 装置测量数据。(a) CO_2 吸收光谱;(b) Voigt 拟合残差

Fig. 8 Measurement data of V-OA-ICOS device. (a) CO_2 absorption spectrum; (b) residual of Voigt fitting

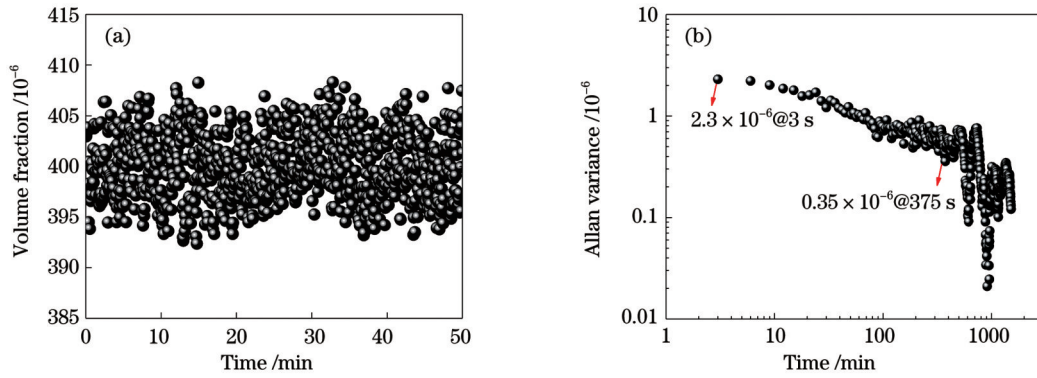


图 9 体积分数为 400×10^{-6} 的 CO_2 标准气体连续 50 min 的测量结果。(a) 稳定性测试; (b) Allan 方差

Fig. 9 Measurement results of standard CO_2 gas with volume fraction of 400×10^{-6} during 50 min. (a) Stability test; (b) Allan variance

光程 500 m; 气体分子的体积分分数分别设定为: CO_2 为 400×10^{-6} , H_2O 为 1.8%, NH_3 为 10×10^{-6} 。模拟结果如图 10 所示, NH_3 分子在 $4986.9955 \text{ cm}^{-1}$ 处的吸收谱线孤立, 不受 CO_2 和 H_2O 的影响, 因此选取在此处对 NH_3 进行测量, 其线强为 $7.703 \times 10^{-21} \text{ cm} \cdot \text{molecule}^{-1}$ 。

实验中, 腔内压强抽至 2666 Pa, 在 3000 次平均处理后获得图 11(a) 所示的吸收谱线。中间的吸收峰为水在 $4986.8584 \text{ cm}^{-1}$ 处的吸收峰, 吸收线强为 $6.466 \times 10^{-24} \text{ cm} \cdot \text{molecule}^{-1}$; 左侧吸收峰为 NH_3 在 $4986.6960 \text{ cm}^{-1}$ 和 $4986.7504 \text{ cm}^{-1}$ 处的吸收峰, 由于两者吸收线靠近, 因此吸收峰不对称; 右侧为 NH_3 在 $4986.9955 \text{ cm}^{-1}$ 处的吸收峰, 吸收峰较为对称。为了进一步提升吸收谱线的信噪比, 采用 Savitzky-Golay

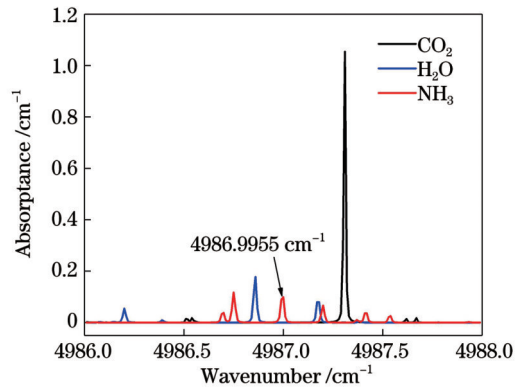


图 10 4987 cm^{-1} 附近 CO_2 、 H_2O 、 NH_3 模拟吸收谱线

Fig. 10 Simulated absorption spectra of CO_2 , H_2O , and NH_3 near 4987 cm^{-1}

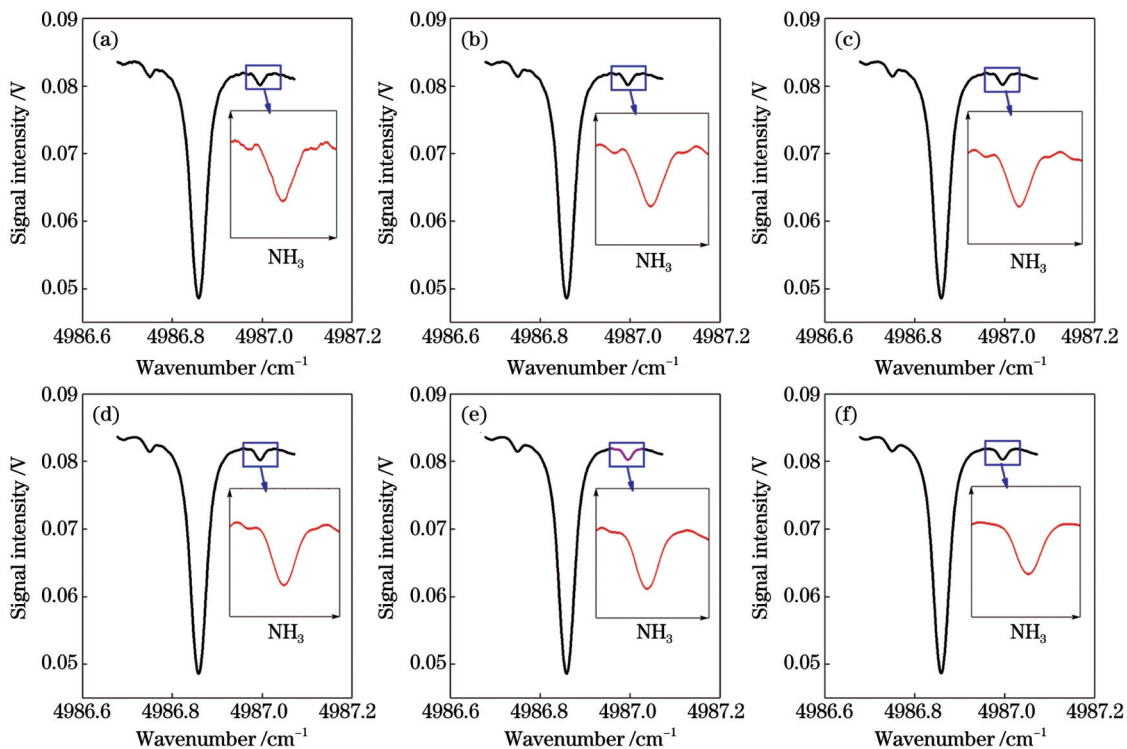


图 11 NH_3 吸收光谱及不同窗宽下的 Savitzky-Golay 平滑处理结果。(a) 原始吸收光谱数据; 窗宽为 (b) 30, (c) 40, (d) 50, (e) 60,

(f) 70 时利用 Savitzky-Golay 算法平滑处理后得到的光谱数据

Fig. 11 NH_3 absorption spectrum and Savitzky-Golay smoothing results at different window widths. (a) Raw absorption spectrum; spectral data obtained after smoothing by Savitzky-Golay algorithm when window width is (b) 30, (c) 40, (d) 50, (e) 60, and (f) 70

(S-G)卷积平滑算法对光谱数据进行处理,S-G平滑滤波的效果由参数阶次和窗宽大小决定^[20]。为了确定S-G算法最优参数,实验拟合阶次取2次阶次,分别选取了30、40、50、60、70共5组不同的窗宽,结果如图11(b)~(f)所示,随着窗宽的增加,谱线平滑效果越来越显著,然而当窗宽过大时,会出现光谱数据特征的损失。因此,为了平衡两者,选取窗宽为60时的S-G算法对谱线进行处理。

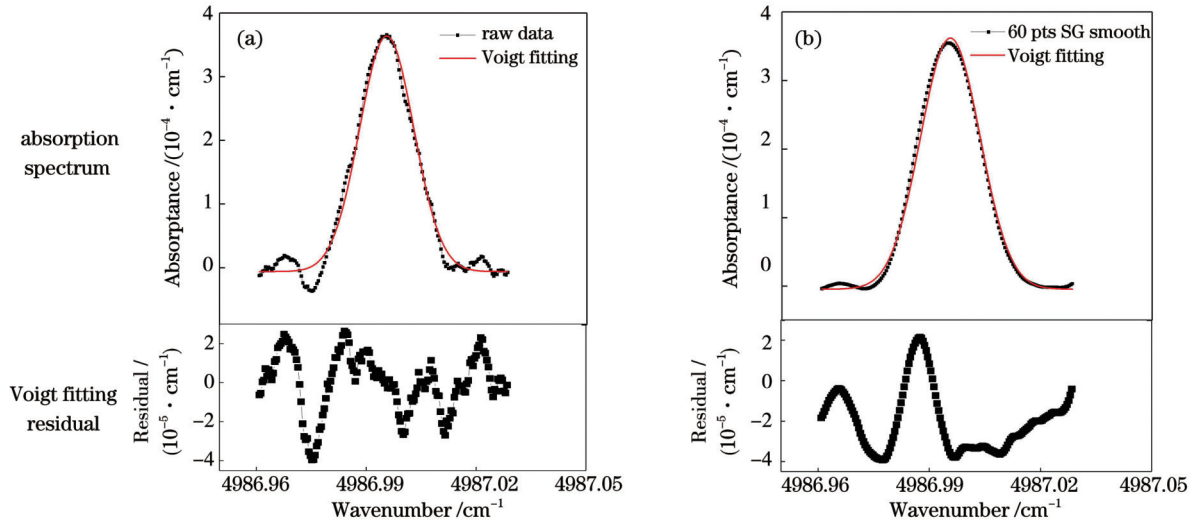


图 12 V-OA-ICOS装置NH₃吸收光谱及其Voigt拟合残差。(a)Savitzky-Golay平滑处理前;(b)Savitzky-Golay平滑处理后
Fig. 12 NH₃ absorption spectrum and Voigt fitting residual of V-OA-ICOS device. (a) Before smoothing by Savitzky-Golay algorithm; (b) after smoothing by Savitzky-Golay algorithm

6 结 论

基于LightTools光学仿真软件,模拟了V形结构离轴积分腔实验光路,高反射镜面光斑分布表明V形结构腔光斑不同于传统直腔光斑的圆环状分布,而是均匀的方形分布,镜面的表面利用率更高。在单边臂长为25 cm、双边对称的情况下,兼顾装置紧凑性,模拟确定了V形腔最佳夹角为23.06°,并进一步加工设计了腔体,搭建了一套V形离轴积分腔吸收光谱实验测量装置。利用体积分数为400×10⁻⁶的CO₂标准气体对装置进行测试,标定了腔镜反射率为99.947%。对装置进行稳定性测试,测试时长为50 min,CO₂体积分数起伏范围为-10×10⁻⁶~+10×10⁻⁶。Allan方差分析结果表明,当装置平均时间为375 s时,装置检测限可达0.35×10⁻⁶。利用该装置对室内NH₃分子进行测量,获得了NH₃吸收光谱,在利用Savitzky-Golay算法平滑处理光谱数据后,信噪比由23.96提升至46.06。

V形结构离轴积分腔实验装置相比于传统直腔结构离轴积分腔,在总长度仅为传统腔长一半的情况下,装置稳定性高且更加紧凑,表现出优秀的检测能力,为开发应用于不同场景的测量痕量气体的传感器提供了选择。

对图11(a)和图11(e)中的4986.9955 cm⁻¹处的NH₃吸收谱线进行处理,结果如图12所示。其中:图12(a)为原始光谱数据处理结果,Voigt线型函数拟合后的残差的标准差为1.51877×10⁻⁵ cm⁻¹,拟合峰值为3.63848×10⁻⁴ cm⁻¹,计算得到信噪比为23.96;图12(b)为S-G平滑算法处理后的谱数据处理结果,Voigt线型函数拟合后的残差的标准差为7.86143×10⁻⁶ cm⁻¹,拟合峰值为3.62074×10⁻⁴ cm⁻¹,计算得到信噪比为46.06。

参 考 文 献

- [1] 刘文清, 陈臻懿, 刘建国, 等. 环境监测领域中光谱学技术进展[J]. 光学学报, 2020, 40(5): 0500001.
Liu W Q, Chen Z Y, Liu J G, et al. Advances with respect to the environmental spectroscopy monitoring technology[J]. Acta Optica Sinica, 2020, 40(5): 0500001.
- [2] 阙瑞峰, 夏晖晖, 许振宇, 等. 激光吸收光谱流场诊断技术应用研究与进展[J]. 中国激光, 2018, 45(9): 0911005.
Kan R F, Xia H H, Xu Z Y, et al. Research and progress of flow field diagnosis based on laser absorption spectroscopy[J]. Chinese Journal of Lasers, 2018, 45(9): 0911005.
- [3] Xia J B, Zhu F, Bounds J, et al. Spectroscopic trace gas detection in air-based gas mixtures: some methods and applications for breath analysis and environmental monitoring[J]. Journal of Applied Physics, 2022, 131(22): 220901.
- [4] 李金义, 李连辉, 赵焯, 等. 可调谐半导体激光吸收光谱技术在石油工业中的应用研究[J]. 激光与光电子学进展, 2022, 59(13): 1300006.
Li J Y, Li L H, Zhao S, et al. Application research of tunable diode laser absorption spectroscopy in petroleum industry[J]. Laser & Optoelectronics Progress, 2022, 59(13): 1300006.
- [5] 许非, 周晓彬, 刘政波, 等. 近红外光学反馈线性腔增强吸收光谱技术[J]. 光学精密工程, 2021, 29(5): 933-939.
Xu F, Zhou X B, Liu Z B, et al. Near-infrared optical-feedback linear cavity-enhanced absorption spectroscopy[J]. Optics and Precision Engineering, 2021, 29(5): 933-939.
- [6] Yuan Z H, Huang Y B, Lu X J, et al. Measurement of CO₂ by wavelength modulated reinjection off-axis integrated cavity output spectroscopy at 2 μm[J]. Atmosphere, 2021, 12(10): 1247.
- [7] 韩萃, 夏滑, 董凤忠, 等. 腔增强吸收光谱技术研究进展及其应

- 用[J]. 中国激光, 2018, 45(9): 0911003.
- Han L, Xia H, Dong F Z, et al. Progress and application of cavity enhanced absorption spectroscopy technology[J]. Chinese Journal of Lasers, 2018, 45(9): 0911003.
- [8] Shao L G, Mei J X, Chen J J, et al. Recent advances and applications of off-axis integrated cavity output spectroscopy[J]. Microwave and Optical Technology Letters, 2022(8): 1-17.
- [9] Paul J B, Lapson L, Anderson J G. Ultrasensitive absorption spectroscopy with a high-finesse optical cavity and off-axis alignment[J]. Applied Optics, 2001, 40(27): 4904-4910.
- [10] Zhao W, Gao X, Chen W, et al. Wavelength modulated off-axis integrated cavity output spectroscopy in the near infrared[J]. Applied Physics B, 2007, 86(2): 353-359.
- [11] Leen J B, O'Keefe A. Optical re-injection in cavity-enhanced absorption spectroscopy[J]. Review of Scientific Instruments, 2014, 85(9): 093101.
- [12] Centeno R, Mandon J, Cristescu S M, et al. Three mirror off axis integrated cavity output spectroscopy for the detection of ethylene using a quantum cascade laser[J]. Sensors and Actuators B: Chemical, 2014, 203: 311-319.
- [13] Centeno R, Mandon J, Cristescu S M, et al. Sensitivity enhancement in off-axis integrated cavity output spectroscopy[J]. Optics Express, 2014, 22(23): 27985-27991.
- [14] Wang J J, Tian X, Dong Y, et al. Enhancing off-axis integrated cavity output spectroscopy (OA-ICOS) with radio frequency white noise for gas sensing[J]. Optics Express, 2019, 27(21): 30517-30529.
- [15] Zheng K Y, Zheng C T, Li J H, et al. Near-infrared methane sensor system using off-axis integrated cavity output spectroscopy with novel dual-input dual-output coupling scheme for mode noise suppression[J]. Sensors and Actuators B: Chemical, 2020, 308: 127674.
- [16] 赵卫雄. 积分腔输出光谱技术及其应用研究[D]. 合肥: 中国科学院合肥物质科学研究院, 2008: 3-5.
- Zhao W X. Integrated cavity output spectroscopy and its application [D]. Hefei: Hefei Institutes of Physical Science, Chinese Academy of Sciences, 2008: 3-5.
- [17] 周子昕, 黄印博, 卢兴吉, 等. $2\ \mu\text{m}$ 波段再入射离轴积分腔输出光谱设计与实验[J]. 物理学报, 2019, 68(12): 129201.
- Zhou Z X, Huang Y B, Lu X J, et al. Design and experiment of re-injection off-axis integrated cavity output spectroscopy technology in $2\ \mu\text{m}$ band[J]. Acta Physica Sinica, 2019, 68(12): 129201.
- [18] Shen G F, Chao X, Sun K. Modeling the optical field in off-axis integrated-cavity-output spectroscopy using the decentered Gaussian beam model[J]. Applied Optics, 2018, 57(11): 2947-2954.
- [19] Gordon I E, Rothman L S, Hill C, et al. The HITRAN2016 molecular spectroscopic database[J]. Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer, 2017, 203: 3-69.
- [20] 胡波. 在线光谱数据的滤波优化与 TDLAS 系统集成[D]. 天津: 天津大学, 2010: 8-21.
- Hu B. Filtering optimization for on-line spectral data and TDLAS system integration[D]. Tianjin: Tianjin University, 2010: 8-21.

Design and Study of Absorption Spectrum Measurement Device with V-Shaped Off-Axis Integrated Cavity

Yuan Zihao^{1,2,3}, Huang Yinbo^{1,3}, Zhong Qing^{3,4}, Lu Xingji^{1,3}, Huang Jun^{1,3}, Zhang Leilei^{1,2,3},
Qi Gang^{1,2,3}, Cao Zhensong^{1,3*}

¹Key Laboratory of Atmospheric Optics, Anhui Institute of Optics and Fine Mechanics, Hefei Institutes of Physical Science, Chinese Academy of Sciences, Hefei 230031, Anhui, China;

²Science Island Branch, Graduate School, University of Science and Technology of China, Hefei 230026, Anhui, China;

³Advanced Laser Technology Laboratory of Anhui Province, Hefei 230037, Anhui, China;

⁴A Department in Mianyang, Space System Department, Mianyang 621000, Sichuan, China

Abstract

Objective Off-axis integrated cavity absorption spectroscopy technology is widely used in atmospheric molecular detection, environmental detection, and industrial production monitoring because of its advantages of high sensitivity, fast response, and strong anti-interference. These characteristics have attracted considerable research attention. Currently, research on off-axis integrated cavity absorption spectroscopy primarily focuses on the performance improvement of lasers, detectors, and other components and signal processing methods; this increases the complexity of the device. The detection sensitivity of the off-axis integrated cavity is primarily determined by the optical path length. Theoretically, the longer the length of the cavity, the longer the total effective optical path. However, the longer the cavity, the larger the volume of the device, and the portability and robustness are weakened. Therefore, by improving the cavity structure, this study designed an off-axis integrated cavity device with a V-shaped structure, which makes the device more compact and highly stable.

Methods LightTools software was used to perform the optical path tracking simulation for the V-shaped cavity structure, and the optimal parameters of the V-shaped cavity were determined by analyzing the spot distribution on the surface of the highly reflective mirrors. When the arm lengths of the two arms were 25 cm, the angle between the two arms and the optimal off-axis incidence angle were confirmed by simulation, and the V-shaped cavity was designed and machined. In the experiment, a set of V-shaped structure off-axis integrated cavity absorption spectroscopy (V-OA-ICOS) measuring devices in the $2\ \mu\text{m}$ band was developed, and the related measurement experiments were performed. The performance of the V-OA-ICOS device was tested with standard CO_2 gas, and the effective absorption path length and detection limit of the device were determined. Furthermore, the absorption signal of indoor NH_3 was measured at $4986.9955\ \text{cm}^{-1}$.

Results and Discussions The simulation results (Figs. 2 and 3) indicate that the spot distribution on the surface of the highly

reflective mirrors in the V-shaped cavity exhibits a uniform square distribution (Fig. 4). When the distance between the centers of lenses M_1 and M_2 exceeds 10 cm, the spot distribution no longer changes significantly. The larger the off-axis incidence angle of the laser, the more uniform the spot distribution on the mirror surface. However, an incidence angle that is excessively large would also result in a larger spot distribution range beyond the mirror surface. Therefore, the V-shaped cavity has two symmetrical arms; one side is 25 cm, and the included angle is 23.06° (Fig. 5). A V-OA-ICOS experimental device was built with this V-shaped cavity (Fig. 6), and a series of experiments was carried out on the device with CO_2 standard gas with a volume fraction of 400×10^{-6} . When the pressure in the cavity is 12 kPa, a CO_2 absorption signal is obtained at 4991.258 cm^{-1} (Fig. 8). According to the calculations, the reflectivity of the cavity mirror is 99.947%. The device was measured for a long time of 50 min, and the device exhibits high stability. The Allan variance indicates that the detection limit of the device is 0.35×10^{-6} (Fig. 9) when the average time is 375 s. To further verify the weak detection ability of the device, indoor NH_3 was measured at $4986.9955 \text{ cm}^{-1}$ (Fig. 10). The Savitzky-Golay algorithm, with a fitting order of 2 and a window width of 60, was selected to smooth the obtained NH_3 signal (Fig. 11), and the signal-to-noise ratio increases to 46.06 (Fig. 12).

Conclusions In this study, a new V-OA-ICOS device was developed. LightTools software was used to simulate and optimize the optical path, and the distribution of spots on the surface of the highly reflective mirrors in the V-shaped cavity is uniform square, which makes the surface utilization of mirrors higher. Moreover, the optimal angle of the cavity is 23.06° when the V-shaped structure is symmetrical, the length of one arm is 25 cm, and the V-OA-ICOS experimental device was developed. The CO_2 standard gas with a volume fraction of 400×10^{-6} was used to test the device, and the reflectivity of the mirrors was calibrated to 99.947%. Subsequently, the stability of the device was tested for 50 min, and the volume fraction fluctuation is within $\pm 10 \times 10^{-6}$. The Allan variance results show that the detection limit of the device can reach 0.35×10^{-6} when the average detection time is 375 s. The indoor NH_3 absorption signal was measured using the fabricated device. The Savitzky-Golay algorithm was used to smoothen it, and the signal-to-noise ratio improves from 23.96 to 46.06. Compared with the traditional OA-ICOS device, the V-OA-ICOS device has higher stability and compactness, exhibiting excellent detection ability, which provides a choice for the development and application of trace gas sensors in different scenarios.

Key words spectroscopy; off-axis integrated cavity; V-shaped structure; simulation; NH_3 detection; Savitzky-Golay smooth