

激光吸收光谱技术中扫描频率的选择

陈玖英 刘建国 何亚柏 许振宇 李 晗 姚 路 袁 松 阮 俊 何俊峰 阚瑞峰*

(中国科学院安徽光学精密机械研究所环境光学与技术重点实验室, 安徽 合肥 230031)

摘要 基于可调谐半导体激光吸收光谱(TDLAS)技术的传感器系统性能受激光器特性、探测器特性、调制参数、激光器控制电路和信号采集电路等的影响。激光器和探测器特性与当前的生产制造水平密切相关,对于直接吸收法,调制参数主要指扫描幅度和扫描频率,而扫描幅度的确定以得到完整吸收信号为准。对扫描频率的选择和优化进行了详细的讨论。在一定的理论基础上通过实验分别观察各扫描频率对直接吸收信号的影响,通过分析检测信号的特征,如幅值、半峰全宽、调整的判定系数、信噪比、积分吸光度及偏差等得出其变化规律,总结出扫描频率的选择依据。该研究为 TDLAS 直接吸收法中扫描频率的确定提供了实验依据。

关键词 光谱学;可调谐二极管激光吸收光谱;扫描频率;直接吸收法

中图分类号 O436 **文献标识码** A **doi**: 10.3788/AOS201333.0230003

Scanning Frequency Optimization of Laser Absorption Spectroscopy

Chen Jiuying Liu Jianguo He Yabai Xu Zhenyu Li Han Yao Lu Yuan Song
Ruan Jun He Junfeng Kan Ruifeng

(Key Laboratory of Environmental Optics and Technology, Anhui Institute of Optics and Fine Mechanics,
Chinese Academy of Sciences, Hefei, Anhui 230031, China)

Abstract The system performance of tunable diode laser absorption spectroscopy (TDLAS) is affected by the characteristics of laser, the characteristics of detector, the modulation parameters, control circuit of laser and acquisition circuit of signal, etc. The characteristics of laser and detector are determined by the level of present production-manufacturing. For direct absorptive method, the modulation parameters contain scanning amplitude and scanning frequency. Scanning amplitude is adjusted to obtain complete absorption signal. The optimization and selection of scanning frequency are discussed in detail. Aiming at this problem, the influence of scanning frequency on direct absorption signals is observed by experiment based on a certain theory in the present paper, and the basis and method of scanning frequency optimization are summarized by analyzing the signal characteristics including amplitude, peak width, adjusted coefficient determination, signal-to-noise ratio and integrated absorbance, etc. The result of the experiment provides a definite basis for the selection of scanning frequency in TDLAS direct absorptive method.

Key words spectroscopy; tunable diode laser absorption spectroscopy; scanning frequency; direct absorptive method

OCIS codes 300.1030; 300.6260; 300.6340; 230.0040

1 引 言

可调谐半导体激光吸收光谱(TDLAS)技术基

于室温工作的半导体激光器和高分辨吸收光谱技术,具备非侵入、快速响应和现场实时测量等优点,

收稿日期: 2012-08-31; **收到修改稿日期**: 2012-09-29

基金项目: 国家 973 计划(2010CB234607)、国家自然科学基金(61108034)和中国科学院先导专项(XDA05040102)资助课题。

作者简介: 陈玖英(1982—),女,博士研究生,主要从事燃烧过程重要组分的激光光谱测量和温度修正等方面的研究。

E-mail: jychen@aiofm.ac.cn

导师简介: 刘建国(1968—),男,博士,研究员,主要从事环境污染光学监测新技术、目标散射特性和遥感监测技术等方面的研究。E-mail: jgliu@aiofm.ac.cn

* **通信联系人**。E-mail: kanruifeng@aiofm.ac.cn

已广泛应用于大气环境监测^[1]、节能减排^[2]、火灾早期预警^[3]、生态环境监测^[4]、工业过程检测控制^[5]和发动机检测^[6]等方面。基于 TDLAS 技术的光学传感器可高灵敏、快速、可靠地测量多个参数,如温度、气体组分浓度、流速、密度和压力等^[7~11]。

痕量气体检测常用波长调制或频率调制的 TDLAS 技术,具有较高的检测灵敏度;而直接吸收光谱技术具有能够消除光强波动、吸收展宽影响等特点,不需要定标,通过 HITRAN 数据库的吸收线强等参数直接计算得到待测气体浓度^[12]。传感器的系统性能受激光器特性、探测器特性、调制参数、激光器控制电路和信号采集电路等的影响。激光器和探测器特性与当前的生产制造水平密切相关,对于直接吸收法,调制参数主要指扫描幅度和扫描频率,而扫描幅度的确定以得到完整吸收信号为准。本文主要讨论扫描频率对测量结果的影响,进而给出扫描频率的选择和优化依据,为优化传感器的性能提供实验基础。

2 基本原理

根据比尔-朗伯定律,频率为 ν ,强度为 I_0 的入射光经过气体吸收后的透射光强为

$$I_t(\nu) = I_0(\nu)\exp[-S(T)\phi(\nu - \nu_0, T)PxL], \quad (1)$$

式中 $S(T)$ 为吸收线线强,仅为温度 T 的函数,单位为 $\text{cm}^{-2} \cdot \text{atm}^{-1}$,其中 $1 \text{ atm} = 101.325 \text{ kPa}$; $\phi(\nu - \nu_0, T)$ 为归一化的吸收线线型函数,单位为 cm , $\int \phi(\nu - \nu_0, T) d\nu = 1$; P 为混合气体的静态总压强,单位为 atm ; x 为吸收气体的体积浓度,单位为 1; L 为吸收光程长,单位为 cm 。

常用吸光度来描述气体对光的吸收特性,即:

$$\ln\left(\frac{I_0}{I_t}\right)_\nu = S(T)\phi(\nu - \nu_0, T)PxL, \quad (2)$$

式中 I_0 为进入待测气体前的入射光强, I_t 为经过待测气体后的透射光强。上式两端对频率积分,可得积分吸光度 A :

$$A = \int \ln\left(\frac{I_0}{I_t}\right) d\nu = S(T)PxL. \quad (3)$$

在激光控制器上加载 1 个低频锯齿波,以一定频率扫描吸收线,即可得到激光强度随波长变化的扫描信号。当激光通过目标气体时,数据采集得到的信号是一个叠加在斜坡背景上的吸收峰。为了得到无气体吸收时的背景信号,可以利用吸收峰两端的无吸收

部分进行多次多项式拟合(如图 1 所示)。通过数据处理,得到气体吸光度 $\ln\left(\frac{I_0}{I_t}\right)_\nu$ 曲线,如图 2 所示。根据(3)式可知,在已知温度、压强、光程的情况下,测得积分吸光度,即可计算出该吸收气体的浓度。

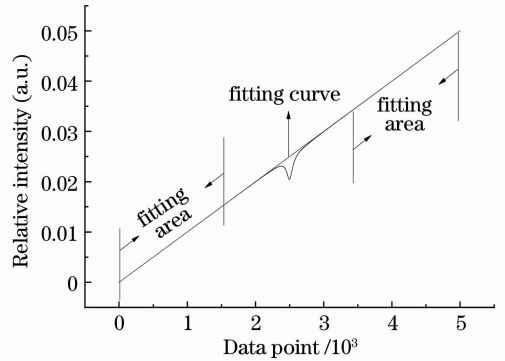


图 1 拟合吸收信号方法

Fig. 1 Method of fitting absorption signal

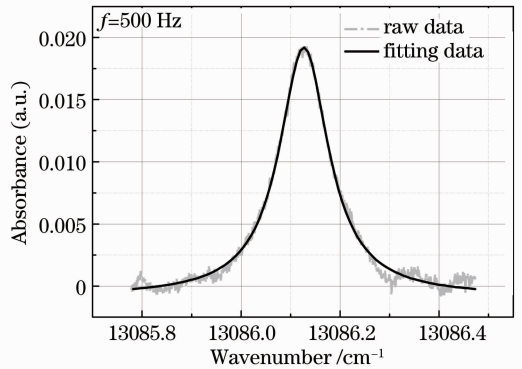


图 2 吸光度曲线

Fig. 2 Curves of absorbance

3 实验过程

实验装置如图 3 所示,光源为中心波长在 764 nm (对应 O_2 的吸收线)附近的分布反馈式 (DFB) 激光器,由 ITC102 型温度电流控制器控制,采用不同频率、峰-峰值电压为 445 mV 的锯齿波电压信号调制激光器的注入电流,使激光器的输出波长扫过目标吸收线。探测器为硅光电二极管,采用光伏工作模式;采集卡的带宽为 60 MHz,采样精度为 12 位。激光器尾纤输出的光经过光纤耦合器后分成 2 路,其中光功率占 90% 的一路经光纤准直透镜准直后通过一段开放光程,到达光电探测器的光敏面,光电转换后输出电流信号,经前置放大器滤波放大后输出电压信号,最后由数据采集卡采集以做后续分析处理。光功率占 10% 的一路经过标准具用于激光相对波长校准。改变激光器扫描电压的频率,采集

扫描频率分别为 50、100、200、500、1000 Hz 的直接吸收光谱,每个周期采样 5000 个点。

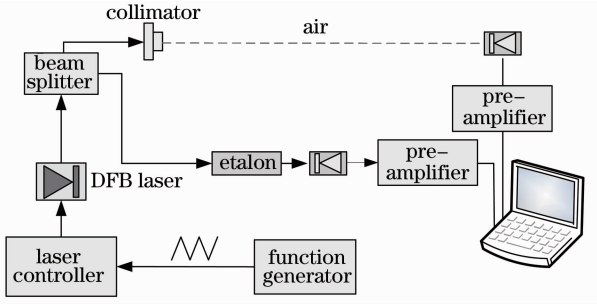


图 3 实验装置原理图

Fig. 3 Schematic of experimental setup

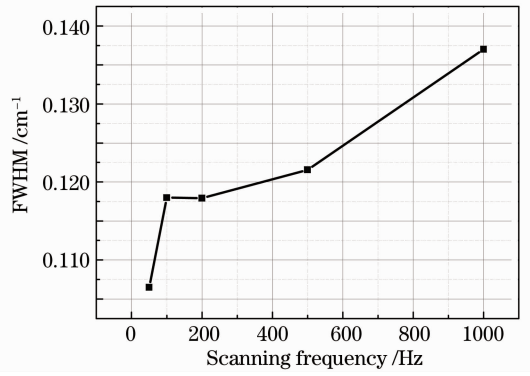


图 5 吸光度 FWHM 随扫描频率变化曲线

Fig. 5 FWHM of absorbance versus scanning frequency

4 实验结果及分析

图 4~8 分别为吸光度曲线的峰值、半峰全宽 (FWHM)、调整的判定函数、积分吸光度的信噪比和积分吸光度及其偏差随扫描频率变化图。从图 4 可知,吸光度曲线的峰值随着扫描频率的增大而单调下降;从图 5 可知,吸光度曲线的 FWHM 随着扫描频率的增大而单调增加;实验过程中气体浓度、温度、压强和光程可以看成不变量,所以积分吸光度应保持不变,即吸光度曲线下的面积不变,峰值降低必然导致 FWHM 增加,实验结果和理论推导一致。

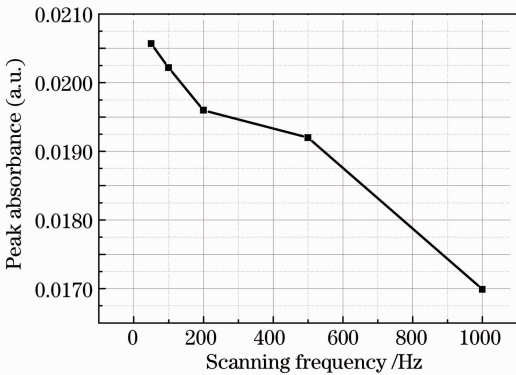


图 4 吸光度峰值随扫描频率变化曲线

Fig. 4 Peak absorbance versus scanning frequency

从图 6、7 可知,吸光度曲线调整的判定系数和积分吸光度的信噪比随扫描频率的增加先增大再减小,有最大值。从实验选取的 5 个点看,扫描频率为 500 Hz 时拟合系数和信噪比均最佳。

从图 8 可知,积分吸光度的值随扫描频率的变化没有明显规律,但其与平均值的偏差的大小有一定规律,从图中可看出扫描频率为 500 Hz 时积分吸光度最接近其平均值,偏差最小。图 9 为吸光度曲线拟合的偏差平方和 χ^2 随扫描频率变化曲线,从图中可看出偏差平方和随扫描频率先减小再增大,有

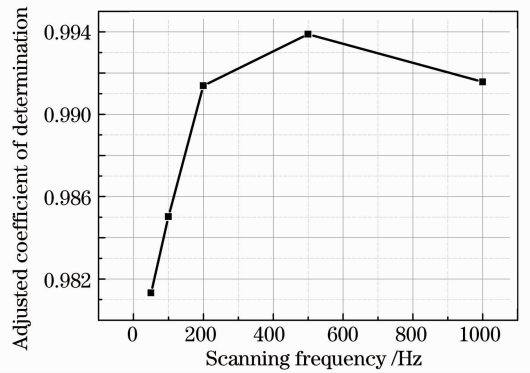


图 6 吸光度调整的判定系数随扫描频率变化曲线

Fig. 6 Adjusted coefficient of determination of absorbance versus scanning frequency

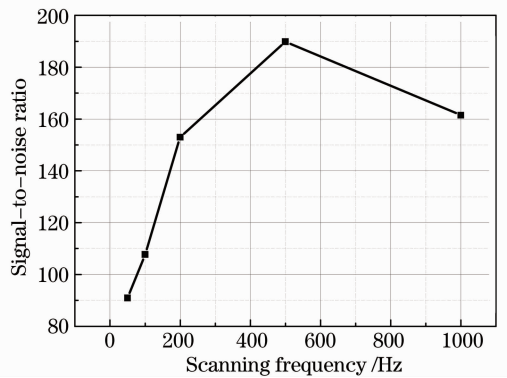


图 7 积分吸光度的信噪比随扫描频率变化曲线

Fig. 7 Signal-to-noise ratio of integrated absorbance versus scanning frequency

最小值,扫描频率为 500 Hz 时偏差平方和达最小值。

根据上述分析可知,综合各项指标,本实验中扫描频率为 500 Hz 时测量结果较好,如图 10 所示,用洛伦兹线型拟合吸光度曲线的残差在 ± 0.001 以内。

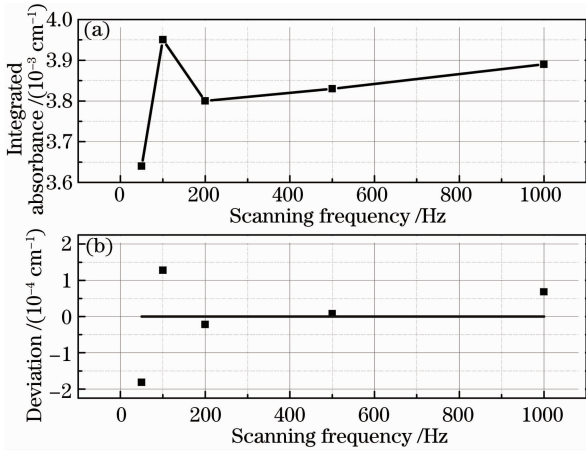


图 8 (a) 积分吸光度及其 (b) 偏差随扫描频率变化曲线
Fig. 8 (a) Integrated absorbance and (b) its deviation versus scanning frequency

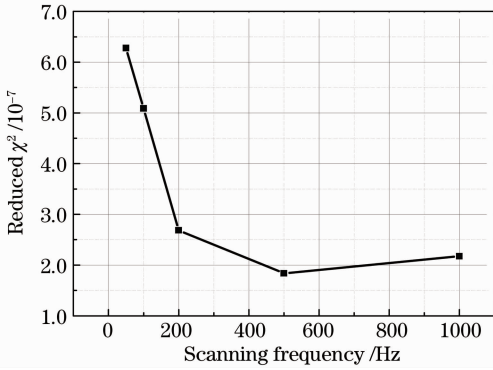


图 9 吸光度曲线拟合的偏差平方和随扫描频率变化曲线
Fig. 9 Reduced χ^2 versus scanning frequency

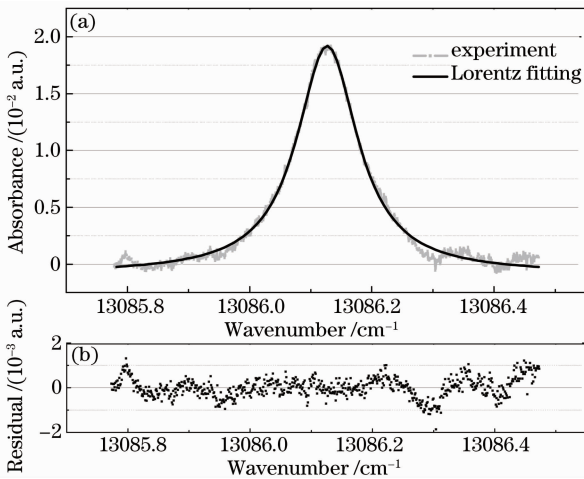


图 10 扫描频率为 500 Hz 时的 (a) 吸光度曲线及 (b) 残差
Fig. 10 (a) Absorbance and (b) its residual at 500 Hz scanning frequency

多角度剖析,分析了检测到的吸收信号的特征指标如吸光度曲线峰值、FWHM、调整的判定系数、积分吸光度信噪比、积分吸光度及其偏差等,利用实验方法归纳总结出其变化规律,达到选择最佳扫描频率的目的。该研究为 TDLAS 直接吸收法中扫描频率的确定提供了实验依据。

参 考 文 献

- 1 Wang Guishi, Cai Tingdong, Wang Lei *et al.*. Application of digital frequency locking techniques in real-time measurement of methane in atmosphere[J]. *Chinese J. Lasers*, 2011, **38**(10): 1008002
王贵师, 蔡廷栋, 汪磊等. 基于数字频率锁定技术实时探测实际大气中甲烷浓度[J]. *中国激光*, 2011, **38**(10): 1008002
- 2 Tang Yuanyuan, Liu Wenqing, Kan Ruifeng *et al.*. Rapid and sensitive measurements of motor vehicle exhausts using quantum cascade lasers[J]. *Chinese J. Lasers*, 2011, **38**(12): 1215003
汤媛媛, 刘文清, 阚瑞峰等. 基于量子级联激光器高灵敏快速检测机动车尾气排放气体浓度[J]. *中国激光*, 2011, **38**(12): 1215003
- 3 Chen Dong, Liu Wenqing, Zhang Yujun *et al.*. Tunable diode laser spectroscopy system for fire gases sensing[J]. *Chinese J. Lasers*, 2006, **33**(11): 1552~1556
陈东, 刘文清, 张玉钧等. 可调谐半导体激光光谱火灾气体探测系统[J]. *中国激光*, 2006, **33**(11): 1552~1556
- 4 He Ying, Zhang Yujun, Zhu Anning *et al.*. Open-path ammonia high sensitivity on-line monitoring in farmland based on laser techniques[J]. *Acta Optica Sinica*, 2011, **31**(s1): s100407
何莹, 张玉钧, 朱安宁等. 开放式农田氨气的高灵敏激光在线监测[J]. *光学学报*, 2011, **31**(s1): s100407
- 5 Zhang Zhirong, Dong Fengzhong, Wang Yu *et al.*. On-line monitoring of industrial toxic gases with a digital-control module[J]. *Acta Optica Sinica*, 2011, **31**(s1): s100304
张志荣, 董凤忠, 王煜等. 基于数字控制模块的工业有毒气体在线监测仪[J]. *光学学报*, 2011, **31**(s1): s100304
- 6 Yang Bin, He Guoqiang, Liu Peijin *et al.*. TDLAS-based measurements of parameters for incoming flow hot-firing test of air-breathing rocket engine[J]. *Chinese J. Lasers*, 2011, **38**(5): 0508006
杨斌, 何国强, 刘佩进等. 利用 TDLAS 技术开展吸气式发动机来流热试实验参数测量[J]. *中国激光*, 2011, **38**(5): 0508006
- 7 M. G. Allen. Diode laser absorption sensors for gas-dynamic and combustion flows[J]. *Meas. Sci. Technol.*, 1998, **9**(4): 545~562
- 8 J. A. Silver, D. J. Kane, P. S. Greenberg. Quantitative species measurements in microgravity flames with near-IR diode lasers[J]. *Appl. Opt.*, 1995, **34**(15): 2787~2801
- 9 H. Teichert, T. Fernholz, V. Ebert. Simultaneous *in situ* measurement of CO, H₂O and gas temperatures in a full-sized coal-fired power plant by near-infrared diode lasers[J]. *Appl. Opt.*, 2003, **42**(15): 2043~2051
- 10 L. C. Philippe, R. K. Hanson. Laser-diode wavelength modulation spectroscopy for simultaneous measurement of temperature, pressure, and velocity in shock-heated oxygen flows[J]. *Appl. Opt.*, 1993, **32**(30): 6090~6103
- 11 D. Richter, D. G. Lancaster, F. K. Tittle. Development of an automated diode laser based multicomponent gas sensor[J]. *Appl. Opt.*, 2000, **39**(24): 4444~4450
- 12 Xu Zhenyu, Liu Wenqing, Kan Ruifeng *et al.*. Study on the arithmetic of absorbance inversion based on tunable diode-laser absorption spectroscopy [J]. *Spectroscopy and Spectral Analysis*, 2010, **30**(8): 2201~2204
许振宇, 刘文清, 阚瑞峰等. 可调谐半导体激光吸收光谱中的吸光度反演算法研究[J]. *光谱学与光谱分析*, 2010, **30**(8): 2201~2204

栏目编辑: 李文喆

5 结 论

在实验的基础上,通过对实验数据进行多方位