

DOI: 10.3969/j.issn.1007-5461.2023.05.019

基于衬底集成空心波导的气体检测性能研究

黄文彪¹, 方勇华^{1,2*}, 刘家祥², 司赶上²,
李振钢², 程真¹, 斯贝贝²

(1 中国科学技术大学环境科学与光电技术学院, 安徽 合肥 230026;
2 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环境光学与技术重点实验室,
安徽 合肥 230031)

摘要: 由衬底集成空心波导 (iHWG) 与傅里叶变换红外光谱仪 (FTIR) 结合组成的气体检测系统具有体积小、响应快、光路设计灵活、机械稳定性好等优点, 能够用于污染气体实时在线检测。iHWG 的几何参数如波导长度、横截面宽度和波导形状很大程度上影响了 FTIR-iHWG 系统的检测性能。基于空心波导的传输理论, 理论分析了不同几何参数对 iHWG 传输特性的影响。以体积浓度为 100×10^{-6} 的 NO_2 气体作为样本气体, 设计了四种不同几何参数的 iHWG, 实验验证了理论分析的正确性。结果表明, 同等条件下, 横截面宽度越大的波导, 其系统检测性能越高; 对于不同形状的 iHWG, 直线型 iHWG 系统检测性能更好。此研究结果将为 iHWG 的进一步优化设计提供借鉴。

关键词: 波导光学; 傅里叶变换红外光谱; 衬底集成空心波导; 气体检测; 几何参数

中图分类号: O657.33 文献标识码: A 文章编号: 1007-5461(2023)05-00798-09

Performance of gas detection based on substrate-integrated hollow waveguide

HUANG Wenbiao¹, FANG Yonghua^{1,2*}, LIU Jiexiang², SI Ganshang²,
LI Zhengang², CHENG Zhen¹, SI Beibei²

(1 School of Environment Science and Optoelectronic Technology, University of Science and Technology of China,
Hefei 230026, China;

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

Abstract: The gas detection system composed of substrate-integrated hollow waveguide (iHWG) and Fourier transform infrared spectrometer (FTIR) has the advantages of small volume, fast response time, flexible optical design and good mechanical stability, which can be used for real-time online detection of pollution gases. The geometric parameters of iHWG, such as waveguide length, cross-section width and

作者简介: 黄文彪 (1996-), 安徽庐江人, 研究生, 主要从事气体检测方面的研究。E-mail: hwenbiao@mail.ustc.edu.cn

导师简介: 方勇华 (1966-), 安徽黄山人, 博士, 研究员, 博士生导师, 主要从事光电信息获取与处理方面的研究。E-mail: yhfang@aiofm.ac.cn

收稿日期: 2021-07-30; 修改日期: 2021-09-07

*通信作者。

waveguide shape, can greatly affect the detection performance of FTIR-iHWG system. Based on the transmission theory of hollow waveguide, the influence of different geometric parameters is firstly analyzed on the transmission characteristics of iHWG. Then, four kinds of iHWG with different geometric parameters are designed using NO_2 gas with a volume ratio of 100×10^{-6} as sample gas, and the correctness of the theoretical analysis is verified experimentally. The results show that under the same conditions, the larger the cross-section width of the waveguide, the higher the detection performance of the system. And for different shapes of iHWG, the linear iHWG system has better detection performance. The results of this work will provide useful reference for further optimization design of iHWG.

Key words: waveguide optics; Fourier transform infrared spectrometer; substrate-integrated hollow waveguide; gas detection; geometric parameter

0 引言

傅里叶变换红外光谱 (FTIR) 技术是一种分析技术^[1], 广泛应用于环境监测^[2]、医学诊断^[3]和工业过程分析等领域。空心波导 (又称空芯光纤) 本质上是一种空心光管, 管内镀有电介质涂层, 既可用于光的传输, 又可作为一种微型气体池。空心波导结合 FTIR 技术被广泛应用于痕量气体的检测, 但是空心波导容易受到外界环境影响, 机械稳定性较差。

Wilk 等^[4]将空心通道集成到金属衬底中, 设计了一种新型空心波导, 被称为衬底集成空心波导 (iHWG), 其具有成本低、体积小、响应速度快、机械稳定性强等优点。在实际气体检测应用中改变 iHWG 的几何参数^[5], 可结合不同的光源^[6]、探测器^[7], 从而实现良好的检测效果。

作为一种新型的空心波导结构, iHWG 能够减小检测系统的体积并提高其机械稳定性。尽管 iHWG 技术近年来得到了快速发展, 但仍需进一步优化分析其几何结构参数。本文基于空心波导的传输理论, 将 FTIR 与 iHWG 相结合, 通过理论计算与实验分析了波导长度、横截面宽度和波导形状等不同几何参数对 iHWG 传输特性与检测性能的影响。

1 基本原理

衬底集成空心波导是在金属衬底上加工出光波导通道的, 根据需求可以设计出不同的几何结构。在 iHWG 与 FTIR 相结合的气体检测系统中, iHWG 的波导长度、通道的横截面宽度等因素对系统性能有重要影响^[8]。iHWG 是一种特殊的空心波导, 其传输损耗对系统检测性能具有重要影响, 此处按照空心波导的传输理论来计算其损耗。研究人员从波动和几何光学的角度提出了空心波导的传输理论, 如 Marcatili 和 Schmeltzer^[9]提出了 M-S 理论, Miyagi 等^[10]提出空心波导的弯曲损耗与弯曲半径有关。

光谱吸收技术基于朗伯-比尔 (Lambert-Beer) 定律

$$I = I_0 \exp(-k_2 c L), \quad (1)$$

式中: I 为出射光强, I_0 为入射光强, k_2 为待测气体在波长 λ 处的吸收截面, c 为气体浓度, L 为气体吸收路径的长度。气体浓度越大、吸收路径越长, 对入射光的吸收越强。常规的 iHWG 一般由直线和曲线组成, 入射光在直线和曲线型 iHWG 中的传输, 如图 1 所示。

对于图 1(a) 所示的直线型 iHWG, 有

$$L_a = \frac{L_0}{\cos \theta}, \quad (2)$$

式中: L_a 为气体实际吸收路径的长度, L_0 为iHWG光波导通道的设计长度, θ 为光的入射角。

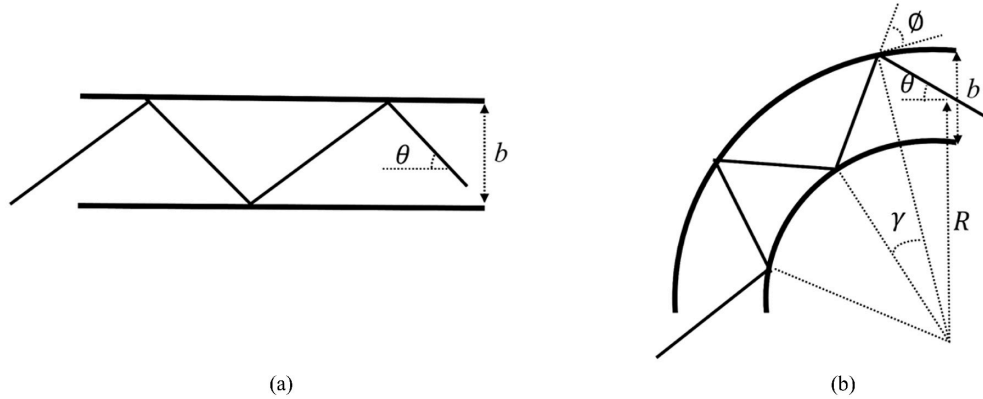


图1 光传输形式。(a) 直线型; (b) 弯曲型

Fig. 1 Optical transmission form. (a) Linear type; (b) Bending type

光在波导中传输会发生多次反射, 每一次反射都会产生一定的损失, 对于直线型 iHWG, 光反射的次数为

$$n = \frac{2L_0 \tan \theta}{b}, \quad (3)$$

式中: n 是反射次数, b 是波导的横截面宽度。因此对于直线型 iHWG 光传输

$$I = I_0 \beta_{\infty}^n \exp(-k_i c L_a), \quad (4)$$

式中 β_{∞} 是光在空心波导表面的反射率。

对于曲线型波导, Wei 等^[11]建立了一种计算方法, 用于分析弯曲空心波导对气体检测系统性能的影响。如图 1(b) 所示的曲线型 iHWG 中, θ 是光的入射角, ϕ 是光与侧壁的切向角, γ 是中心角, R 是波导弯曲半径, b 是波导的横截面宽度。切向角和入射角之间的关系可以表示为

$$\phi = \arccos \frac{R \cos \theta}{R + b/2}, \quad (5)$$

中心角可以由切向角表示为

$$\gamma = \phi - \arccos \frac{(R + b/2) \cos \phi}{R - b/2}. \quad (6)$$

气体实际的吸收路径长度可以由弯曲半径、横截面宽度、切向角和中心角来计算。在 iHWG 中, 由于其表面没有介质膜, 在此不考虑介质膜产生的校正系数, 其实际光程长度为

$$L_a = L_0 \frac{\sqrt{(R - b/2)^2 + (R + b/2)^2 - 2(R - b/2)(R + b/2) \cos \gamma}}{\gamma R}. \quad (7)$$

因此, 对于曲线型 iHWG 光传输

$$I = I_0 \exp(-k_i c L_a) \exp(-\alpha L_a), \quad (8)$$

式中 α 是衰减常数。Saito 等^[12]详细分析了弯曲空心波导的衰减常数, 其计算表达式为

$$\alpha = \frac{C\theta^2}{b} \left(1 + \frac{b^2}{8R^2\theta^4} \right), \tag{9}$$

式中 C 是与反射率相关的系数, 与几何参数无关。

由 (4) 式可以计算直线型波导的光传输与波导长度之间的关系。在数值计算中, 入射光强设定为 200, 当横截面宽度为 3 mm 时, 透射光强与波导长度的关系如图 2 所示, 随着波导长度增加, 透射光强降低。波导表面的加工精度对传输损耗有很大影响, 当横截面宽度为 3 mm、波导长度为 160 mm 时计算的透过率为 10.53%; 当横截面宽度为 3 mm、波导长度为 380 mm 时计算的透过率为 0.47%。

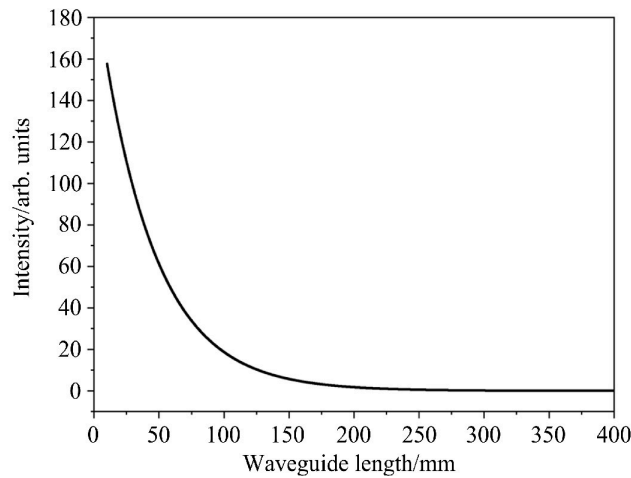


图 2 透射光强随波导长度的变化曲线

Fig. 2 Variation of transmitted light intensity versus waveguide length

由(8)式可以计算曲线型波导的光传输与横截面宽度和弯曲半径之间的关系。设定相同的光强, 当波导长度为 160 mm、弯曲半径为 33 mm 时, 透射光强与横截面宽度的关系如图 3(a)所示, 随着横截面宽度增加, 透射光强增大。当波导长度为 160 mm、横截面宽度为 3 mm 时, 透射光强与弯曲半径的关系如图 3(b)所示, 随着弯曲半径增加, 透射光强也增大。当波导长度为 160 mm、弯曲半径为 33 mm 时, 横截面宽度为 3 mm、4 mm 的波导计算的透过率分别为 2.26%、5.15%。

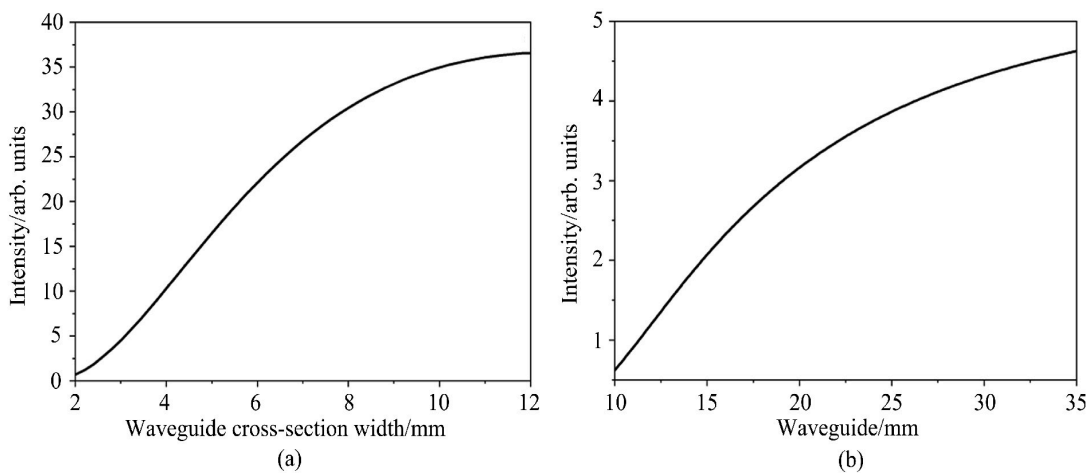


图 3 透射光强随 (a) 波导横截面及 (b) 波导弯曲半径的变化

Fig. 3 Variation of transmitted light intensity versus (a) width of the waveguide cross-section and (b) bending radius of waveguide

2 实验

2.1 iHWG设计

针对实验室的MB3000傅里叶变换红外光谱仪(其干涉仪与探测器之间的距离为105 mm)设计iHWG,并将其安装到FTIR中以实现气体检测功能。iHWG装置整体尺寸约为141 mm × 55 mm × 15 mm(长×宽×高),设计成两层结构。iHWG用铝合金进行加工,铣削出正方形截面的凹槽通道,将表面进行抛光处理并镀上一层金膜,提高其中红外波段的反射率,以获得更好的检测性能。在两板之间使用密封圈,保证装置的气密性。为了研究几何参数对系统检测性能的影响,设计了四种不同几何结构的波导通道,分别为结构1(直线)、结构2(加长直线)、结构3(曲线)和结构4(加宽曲线),四种结构iHWG的几何参数及实物图分别如表1、图4所示。

表1 iHWG的几何参数

Table 1 Geometric parameters of iHWG

iHWG	Shape	Waveguide length/mm	Cross section width/ mm	Equivalent absorption path length/mm
Structure 1	Straight line	160	3	161.57
Structure 2	Extended straight line	380	3	383.73
Structure 3	Curve	160	3	162.78
Structure 4	Widening curve	160	4	164.56

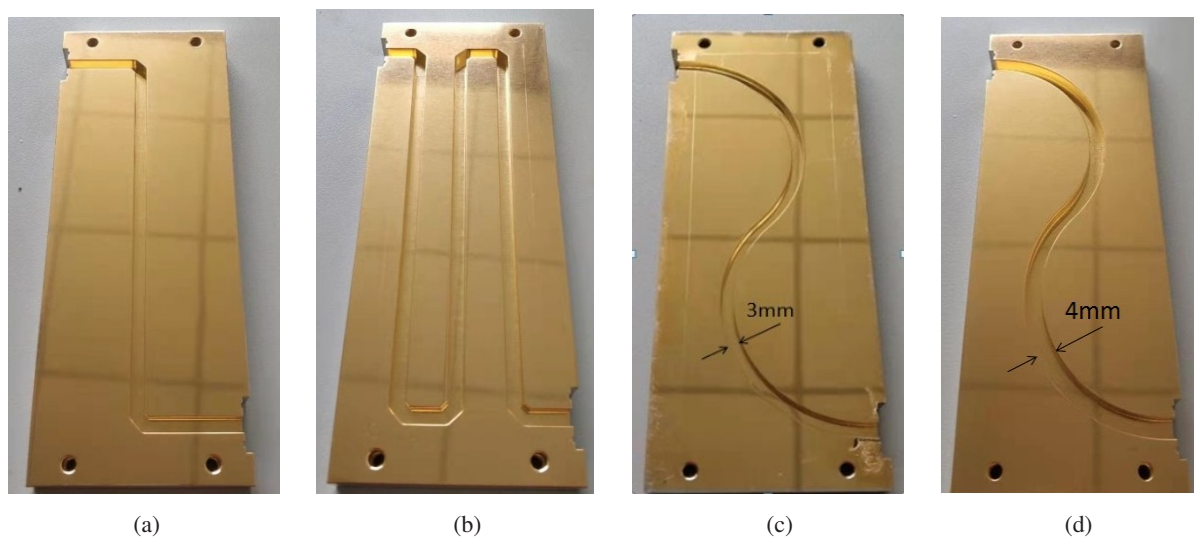


图4 四种iHWG设计实物图。(a) 结构1; (b) 结构2; (c) 结构3; (d) 结构4

Fig. 4 Physical drawings of four iHWG designs. (a) Structure 1; (b) Structure 2; (c) Structure 3; (d) Structure 4

2.2 实验系统

搭建了一套基于iHWG的中红外光谱气体检测实验系统,如图5所示,该系统包括5个关键部件:FTIR光谱仪、DTGS热释电型探测器、iHWG、配气仪和计算机。

FTIR 光谱仪覆盖 $1000\sim 4000\text{ cm}^{-1}$ 的光谱范围, 分辨率为 4 cm^{-1} , 使用两个离轴抛物面镜将红外光导入 iHWG 中。iHWG 入口端配有 KBr 窗片, 可以将红外辐射耦合到 iHWG 中, 通过 DTGS 探测器测量 iHWG 远端的输出。iHWG 气体池入口端上方、输出端上方分别设置进气口、出气口, 使用的是微型气动快速接头, 型号为 POC6-M3C, 接直径为 6 mm 的气管。用氮气吹扫气体检测系统, 去除环境大气中的干扰成分, 获得背景光谱。气体样品由配气仪输出, 配气仪可以精确控制混合气体的比例。气体流速设定为 200 mL/min 。考虑到 iHWG 容纳气体的体积, 系统的响应时间不到 1 s 。配气仪输出的混合气体连接到 iHWG 的进气口, 混合气体样品转移到 iHWG 的波导通道中, 中红外光在波导通道中传输并被待测气体吸收, 从而获得吸收光谱。

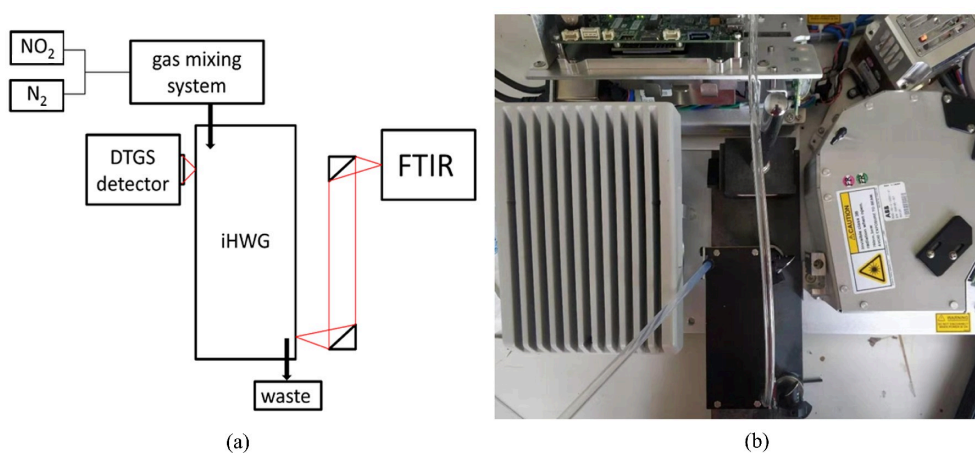


图5 气体检测系统 (a) 示意图及 (b) 实物图

Fig. 5 (a) Schematic diagram and (b) photo of gas detection system

3 分析与讨论

NO_2 气体在中红外波段有明显的吸收, 本研究采用体积比为 1×10^{-4} 的 NO_2 气体作为待测气体, 获取吸收光谱。经高斯滤波去噪处理, 通过比较吸光度幅值的大小分析不同结构 iHWG 的检测性能。

对于结构 1 和结构 2 的两种 iHWG, 波导长度分别为 160 mm 和 380 mm , 其余几何参数均相同。实测结构 1、结构 2 的透过率分别为 11.25% 、 0.5% , 与理论计算结果十分接近, 证明了直线型结构的 iHWG 可以利用空心波导传输理论进行设计与计算, 这为优化设计 iHWG 提供了帮助。理论上说, 虽然 iHWG 的传输损耗随着长度的增加而增大, 但气体的吸收也随长度的增加而增大, 因此当光源强度足够大时, 增加波导长度能够提高检测性能。在图 6 所示的 NO_2 吸收光谱图中, 结构 1 的 iHWG 检测性能更好。实验结果表明, 波导长度并非越长越好, 下面通过理论推导分析波导长度与检测性能的关系。

对于直线型 iHWG, 其吸光度的表达式为

$$A = \ln \frac{I_{\text{N}_2}(\lambda) + I'}{I_{\text{NO}_2}(\lambda) + I'}, \quad (10)$$

式中: $I_{\text{N}_2}(\lambda)$ 为氮气对应的背景光谱, $I_{\text{NO}_2}(\lambda)$ 为二氧化氮气体吸收后的光谱, I' 为仪器的平均噪声。根据 (10) 式能够计算出吸光度与波导长度的关系, 如图 7 所示。对于相同的光源与探测器, 存在一个最佳波导长度, 此长度下 iHWG 的检测性能最好。波导长度过长或过短均会导致其检测性能下降, 其最佳值是吸收路径长度与传输损耗之间平衡的结果。

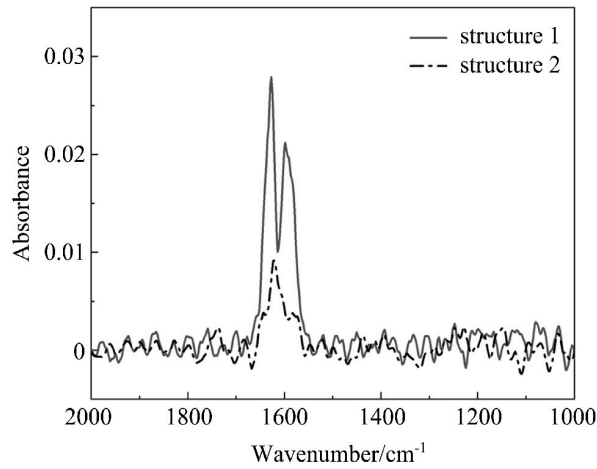


图6 结构1与结构2的iHWG实测吸收光谱

Fig. 6 Measured absorption spectra of iHWG of structure 1 and structure 2

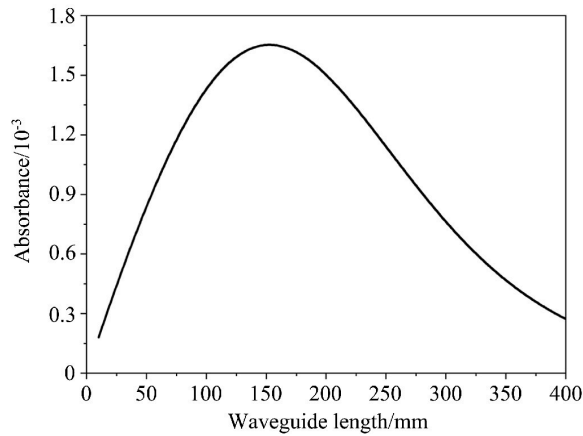


图7 吸光度与波导长度的理论曲线

Fig. 7 Theoretical curve of absorbance and waveguide length

对于结构3和结构4的两种 iHWG, 波导横截面宽度分别为 3 mm 和 4 mm, 其余几何参数均相同。实测结构3、结构4的透过率分别为 2.25%、6%, 与理论计算结果接近, 证明曲线型结构的 iHWG 同样能够利用

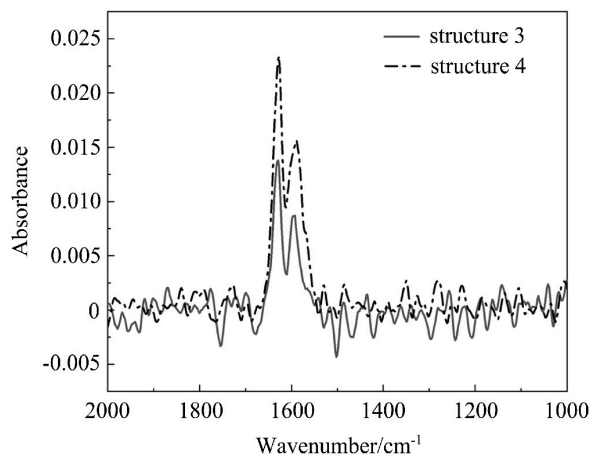


图8 结构3与结构4的iHWG实测吸收光谱

Fig. 8 Measured absorption spectra of iHWG of structure 3 and structure 4

空心波导传输理论进行设计与计算。在图8所示的 NO_2 吸收光谱图中, 波导横截面宽度为 4 mm 的加宽曲线型 iHWG 的检测性能更好, 因为波导的横截面宽度越大, 光在波导通道中的反射次数越少, 从而使波导的传输损耗减少。

对于结构 1 和结构 3 两种 iHWG, 它们具有相同的波导长度 (160 mm) 与横截面宽度 (3 mm)。由图9所示的 NO_2 吸收光谱图可以看出结构 1 信号幅值更大, 约为结构 3 的 2.5 倍, 对应检测性能更好, 结构 3 由于弯曲损耗导致其检测性能较差。弯曲的空心波导会产生巨大损耗, 弯曲损耗与弯曲半径有关, 弯曲半径越小则弯曲损耗越大^[10]。

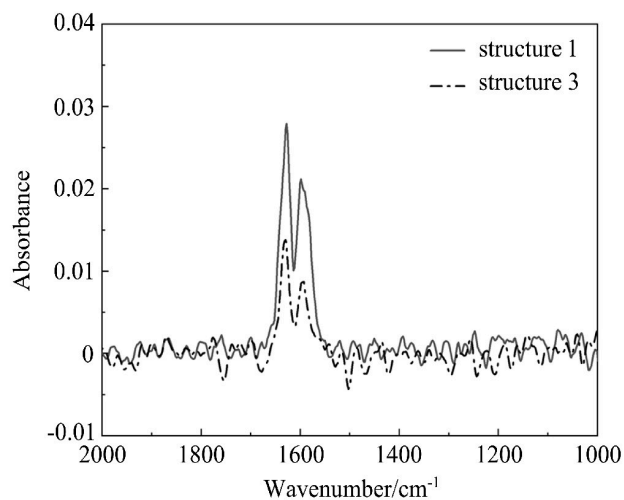


图9 结构 1 与结构 3 的 iHWG 实测吸收光谱

Fig. 9 Measured absorption spectra of iHWG of structure 1 and structure 3

4 结 论

基于 iHWG 的气体检测装置具有响应速度快、机械稳定性好、制作简单等优点。本研究基于空心波导的传输理论, 分析了波导长度和横截面宽度参数对 iHWG 传输损耗的影响, 仿真计算了几何参数对于 iHWG 传输性能的影响, 与实测结果相比, 仿真值与测量值具有良好的一致性, 验证了基于空心波导的传输理论分析优化 iHWG 的可行性。搭建了一套基于 FTIR-iHWG 的气体检测系统, 研究了不同几何参数 iHWG 的检测性能, 实验表明直线型 iHWG 具有更好的检测性能。研究结果为 iHWG 的进一步优化设计提供了帮助, 可根据不同应用的实际需求选择合适的几何参数, 提高了 iHWG 的适用性。

参考文献:

- [1] Fahrenfort J. Attenuated total reflection: A new principle for the production of useful infra-red reflection spectra of organic compounds [J]. *Spectrochimica Acta*, 1961, 17(7): 698-709.
 - [2] Liu W Q, Cui Z C, Liu J G, et al. Measurement of atmospheric trace gases by spectroscopic and chemical techniques [J]. *Chinese Journal of Quantum Electronics*, 2004, 21(2): 202-210.
- 刘文清, 崔志成, 刘建国, 等. 大气痕量气体测量的光谱学和化学技术 [J]. 量子电子学报, 2004, 21(2): 202-210.

- [3] Wang L Q, Mizaikoff B. Application of multivariate data-analysis techniques to biomedical diagnostics based on mid-infrared spectroscopy [J]. *Analytical and Bioanalytical Chemistry*, 2008, 391(5): 1641-1654.
- [4] Wilk A, Carter J C, Chrisp M, *et al.* Substrate-integrated hollow waveguides: A new level of integration in mid-infrared gas sensing [J]. *Analytical Chemistry*, 2013, 85(23): 11205-11210.
- [5] Kokoric V, Wissel P A, Wilk A, *et al.* mucipRECON: Multichannel preconcentrators for portable mid-infrared hydrocarbon gas sensors [J]. *Analytical Methods*, 2016, 8(36): 6645-6650.
- [6] Hagemann L T, McCartney M M, Fung A G, *et al.* Portable combination of Fourier transform infrared spectroscopy and differential mobility spectrometry for advanced vapor phase analysis [J]. *Analyst*, 2018, 143(23): 5683-5691.
- [7] Petrucic J S, Tütüncü E, Cardoso A, *et al.* Real-time and simultaneous monitoring of NO, NO₂, and N₂O using substrate-integrated hollow waveguides coupled to a compact Fourier transform infrared (FT-IR) spectrometer [J]. *Applied Spectroscopy*, 2018, 73: 103-98.
- [8] Hagemann L T, Ehrle S, Mizaikoff B. Optimizing the analytical performance of substrate-integrated hollow waveguides: Experiment and simulation [J]. *Applied Spectroscopy*, 2019, 73(12): 1451-1460.
- [9] Marcattili E A J, Schmeltzer R A. Hollow metallic and dielectric waveguides for long distance optical transmission and lasers [J]. *Bell System Technical Journal*, 1964, 43(4): 1783-1809.
- [10] Miyagi M, Harada K, Kawakami S. Wave propagation and attenuation in the general class of circular hollow waveguides with uniform curvature [J]. *IEEE Transactions on Microwave Theory and Techniques*, 1984, 32(5): 513-521.
- [11] Wei J Y, Wei Y Q, Zhu X S, *et al.* Miniaturization of hollow waveguide cell for spectroscopic gas sensing [J]. *Sensors and Actuators B: Chemical*, 2017, 243: 254-261.
- [12] Saito M, Matsuura Y, Kawamura M, *et al.* Bending losses of incoherent light in circular hollow waveguides [J]. *Journal of the Optical Society of America A*, 1990, 7(11): 2063.