

文章编号: 1001-3806(2013)03-0284-05

频率-振幅调制相位差对 TDLAS 2 次谐波线型的影响

翟维 吴尚谦* 董跃辉 刘爱英 皇甫张棣

(昆明理工大学 理学院, 昆明 650500)

摘要: 为了研究频率-振幅调制(FM-AM)间相位差对 TDLAS 2 次谐波信号及线型的影响,采用考虑残余振幅调制的波长调制光谱技术计算方法,推导出了考虑 FM-AM 相位差的 2 次谐波信号的理论计算公式,并模拟计算了 FM-AM 相位差对谐波信号线型造成的影响。结果表明,2 次谐波信号正峰值、左右负峰值、基线值均随 FM-AM 相位差发生变化,而左右负峰的间距不受其影响,保持不变。该计算结果对 TDLAS 气体检测有重要的意义。

关键词: 光谱学; 可调谐二极管激光吸收光谱; 波长调制; 线型; 相位差

中图分类号: O433.5⁺1

文献标识码: A

doi: 10.7510/jgjs.issn.1001-3806.2013.03.003

Effect of FM-AM phase difference on the second harmonic line shape of TDLAS

ZHAI Wei, WU Shang-qian, DONG Yue-hui, LIU Ai-ying, HUANGFU Zhang-di

(Faculty of Science, Kunming University of Science and Technology, Kunming 650500, China)

Abstract: In order to study the effect of phase difference between frequency modulation and amplitude modulation on both the second harmonic signal and its line shape, the mathematical derivations for wavelength modulation spectroscopy were presented in consideration of residual amplitude modulation, and then the theoretical calculation formulas of considering FM-AM phase difference were deduced. In addition, the impact of FM-AM phase difference on harmonic signal line shape was also simulated and calculated. The results show that the second harmonic signal positive peaks and the left and right negative peak as well as the signal baseline are all changed with the FM-AM phase difference. However, the distance between left and right negative peak value is not affected by it, remaining unchanged. The calculation results have important significant on tunable diode laser absorption spectroscopy gas detection.

Key words: spectroscopy; tunable diode laser absorption spectroscopy; wavelength modulation; line shape; phase difference

引言

近年,随着中国经济的快速发展,大气污染问题也得到了人们的广泛关注。如何在当前的技术条件下对大气质量进行有效监测,成为治理大气污染的首要问题。与传统非光学检测方法相比,可调谐二极管激光吸收光谱技术^[1-2](tunable diode laser absorption spectroscopy, TDLAS)具有高精度、高灵敏度、响应速度快、恶劣环境适应性强、可同时检测多种气体等优点,广泛应用于工业生产、环境监测、大气科学、光谱测量、痕量分析等领域。

作者简介: 翟维(1987-),男,硕士研究生,主要从事激光气体检测、雨量计的研究。

* 通讯联系人。E-mail: wusq@kmust.edu.cn

收稿日期: 2012-09-02; 收到修改稿日期: 2012-10-12

在 TDLAS 2 次谐波信号的研究中调制极为重要,但由于在直接对波长进行调制的时候会伴随产生残余振幅调制,因此,在信号的处理方法上分为忽略残余振幅调制的纯频率调制(frequency modulation, FM)方法与考虑残余振幅调制影响的频率-振幅调制(frequency modulation and amplitude modulation, FM-AM)方法。MEYERS 和 PUTZER^[3], REID 和 LABRIE^[4]分别通过泰勒级数展开和傅里叶级数展开的方法得到了纯频率调制条件下的 2 次谐波信号数学表达式。BJORKLUND^[5-6], POKROWSKY^[7], LENTH^[8]和 GEHRTZ^[9]等人提出了考虑残余振幅调制影响的频率调制光谱技术,对谐波线型理论和信噪比提高等问题的研究做出了贡献。

频率调制与振幅调制之间的相位并非完全一致,而是存在着相位差,并且该相位差对 2 次谐波信

号及线型都有影响,因此相位差影响的研究对谐波检测技术的发展有重要的意义。LENTH^[8]通过实验得出了 FM-AM 相位差对线型的影响, DHARAM-SI^[10]对相位差为特定值情况下的谐波线型进行了分析。作者所在研究小组在之前的研究中^[11-12]已对 FM-AM 相位差为 $\pi/2$ 这一特殊值时,残余振幅调制对 TDLAS 2 次谐波线型及信噪比的影响分别进行了模拟对比计算,获得了有意义的研究结果。在此基础上,本文中在理论上重点分析计算了任意 FM-AM 相位差对 2 次谐波信号线型造成的影响。

1 考虑振幅调制的波长调制光谱技术 2 次谐波的计算方法

同时考虑了频率调制和振幅调制的 TDLAS 检测系统基本构成图如图 1 所示。

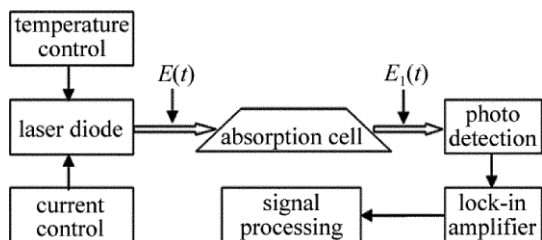


Fig. 1 Basic structure of a wavelength modulation spectroscopy detection system

温度控制器使激光器工作在恒定温度下,电流控制电路产生低频锯齿扫描信号以及频率较高的正弦调制信号,低频锯齿扫描信号实现待测气体吸收谱线的扫描,正弦调制信号实现对激光进行频率调制,电流控制电路发出的参考信号与光电探测器出射的电信号同时通过锁相放大器,从而提取出 2 次谐波信号。经过调制的激光在频率发生变化的同时振幅也发生变化,激光器出射的光电场可表示为^[11-13]:

$$E(t) = E_0 [1 + M \cdot \sin(\omega_m t + \theta)] \cdot \exp[i\omega_1 t + i\beta \sin(\omega_m t)] \quad (1)$$

式中 M 为振幅调制系数, ω_1 为激光载波频率, ω_m 为调制信号频率, β 为频率调制系数, θ 为 FM-AM 相位差,假设纯频率调制方法的调制系数为 m ,它与同时考虑频率调制和振幅调制方法调制系数的关系为 $m = X_m \times \beta$ ^[14],其中 X_m 为调制频率与吸收线半峰全宽的比值,当 $m = 2.2$ 时 2 次谐波信号能够取得最大值^[4,12]。根据 Bessel 函数公式:

$$\sum_{n=-\infty}^{\infty} J_n(\beta) \exp(in\omega_m t) =$$

$$\exp[i\beta \sin(\omega_m t)] \quad (2)$$

将 (2) 式代入 (1) 式整理后可得:

$$E(t) = E_0 \sum_{n=-\infty}^{\infty} r_n(\beta, M, \theta) \exp(i\omega_1 t + in\omega_m t) \quad (3)$$

其中:

$$r_n(\beta, M, \theta) = J_n(\beta) + \frac{M}{2i} e^{i\theta} J_{n-1}(\beta) - \frac{M}{2i} e^{-i\theta} J_{n+1}(\beta) \quad (4)$$

受调制后的激光经过吸收池受到气体吸收衰减后的光电场为:

$$E_1(t) = E(t) \cdot T(\nu) \quad (5)$$

其中,透射系数 $T(\nu)$ 的表达式为:

$$T(\nu) = \exp[-\delta(\nu) - i\varphi(\nu)] = \exp(-\delta_n - i\varphi_n) \quad (6)$$

式中,实部 δ_n 为吸收衰减^[15],虚部 φ_n 为色散。将 (6) 式代入 (5) 式可得:

$$E_1(t) = E_0 \sum_{n=-\infty}^{\infty} r_n(\beta, M, \theta) \cdot \exp(i\omega_1 t + in\omega_m t) \cdot \exp(-\delta_n - i\varphi_n) \quad (7)$$

经吸收衰减后的激光入射到光电探测器上,将光信号转变成电流信号,根据电场平方律关系,产生的光电流可表示为:

$$i(t) = i_0 \sum_{n, n'=-\infty}^{\infty} r_n r_{n'}^* \exp[i(n - n')\omega_m t] \cdot \exp(-\delta_n - \delta_{n'}) \exp[-i(\varphi_n - \varphi_{n'})] \quad (8)$$

式中 $r_n r_{n'}^* = r_n(\beta, M, \theta) r_{n'}^*(\beta, M, \theta)$,其中*表示共轭。取 $n - n' = 2$ 即可抽取得到 2 次谐波成分电流信号 i_{2f} 的表达式:

$$i_{2f}(t) = i_0 \sum_{n=-\infty}^{\infty} r_{n+1} r_{n-1}^* \cdot \exp(-\delta_{n+1} - \delta_{n-1}) \exp[-i(\varphi_n - \varphi_{n-1})] \quad (9)$$

式中 $r_{n+1} r_{n-1}^* = r_{n+1}(\beta, M, \theta) r_{n-1}^*(\beta, M, \theta)$ 为复函数,其实部与虚部可解析分离,即可表示为 $r_{n+1} \cdot r_{n-1}^* = R_n(\beta, M, \theta) + iI_n(\beta, M, \theta)$,其中 $R_n(\beta, M, \theta)$ 为它的实部, $I_n(\beta, M, \theta)$ 为它的虚部,其可分别表示为:

$$R_n(\beta, M, \theta) = J_{n-1}(\beta) J_{n+1}(\beta) + \frac{M^2}{4} J_{n-2}(\beta) J_n(\beta) + \frac{M^2}{4} J_n(\beta) J_{n+2}(\beta) + \frac{M}{2} \sin\theta [J_{n-2}(\beta) J_{n+1}(\beta) + J_n(\beta) J_{n+1}(\beta) + J_{n-1}(\beta) J_n(\beta) + J_{n-1}(\beta) J_{n+2}(\beta)] - \frac{M^2}{4} \cos 2\theta [J_n^2(\beta) + J_{n-2}(\beta) J_{n+2}(\beta)] \quad (10)$$

$$I_n(\beta M \theta) = \frac{M}{2} \cos \theta [J_{n-2}(\beta) J_{n+1}(\beta) - J_n(\beta) J_{n+1}(\beta) - J_{n-1}(\beta) J_n(\beta) + J_{n-1}(\beta) J_{n+2}(\beta)] - \frac{M^2}{4} \sin 2\theta [J_n^2(\beta) - J_{n-2}(\beta) J_{n+2}(\beta)] \quad (11)$$

在实际检测中气体吸收衰减信号对应2次谐波的实部,因此忽略虚部的影响,经过变换后光电流的2次谐波可以表示为:

$$i_{2f}(t) = i_0 \sum_{n=-\infty}^{\infty} R_n(\beta M \theta) \cdot \exp(-\delta_{n+1} - \delta_{n-1}) \quad (12)$$

(12)式表明,FM-AM相位差 θ 对2次谐波信号 i_{2f} 有直接影响。

2 FM-AM相位差对2次谐波信号线型的影响

影响谐波线型的因子主要包括调制频率、残余振幅和相位差。在调制频率和残余振幅一定的情况下,根据(12)式通过计算可以得到不同相位差条件下的2次谐波信号线型。为了便于分析FM-AM相位差的影响,下面首先计算相位差为 $\pi/2, \pi, 3\pi/2$ 这3种典型情况下吸收信号的2次谐波信号线型。

图2是残余振幅 $M=0.05, m=2.2$,相位差分别为 $\pi/2, \pi$ 和 $3\pi/2$ 时计算得到的吸收线型的计算结果。其中,横坐标为扫描频率,纵坐标为2次谐波信号大小。从图2可以看出,随着FM-AM相位差的变化,左右负峰值、正峰值和基线值发生了变化,左右负峰间距不变,与相位差取典型值 $\pi/2$ 时相比,当相位差为 π 时,左负峰增大了12%,右负峰减小了14%,正峰值变化仅为0.35%,基线值的变化幅度较大,减小量为 $\pi/2$ 时的2倍;当相位差为 $3\pi/2$ 时,左负峰增大了23%,右负峰减小了30%,正峰值、基线值与 $\pi/2$ 时相等。

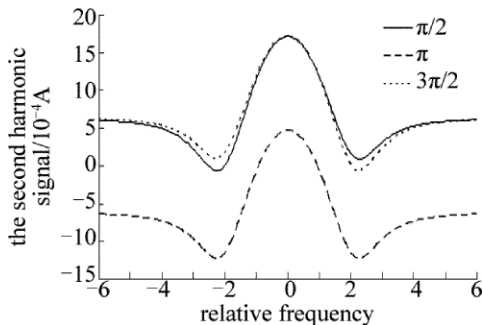


Fig. 2 Variations of the second harmonic signal with phase difference

图3是2次谐波信号线型各参量定义的示意图。其中 P 为正峰到基线的距离, N 为负峰到基线的距离, S 为左右负峰值之间的频率间距。下面,分

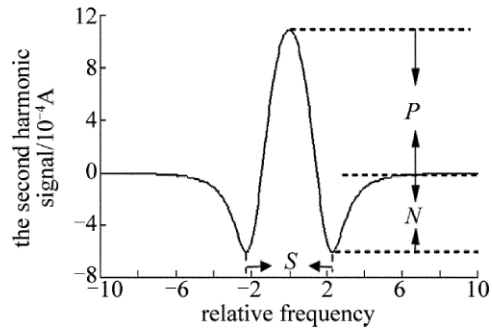


Fig. 3 Definition of the line shape parameters of the second harmonic signal

别对正峰值 P 、左负峰值 N_l 和右负峰值 N_r ,以及基线值进行分析。

图4是FM-AM相位差变化时2次谐波信号左右负峰值的变化图。其中 N_l 和 N_r 分别是左负峰和右负峰的模拟计算值,fit N_l 和fit N_r 分别表示对左负峰和右负峰拟合得到的线型。计算结果表明,左负峰在 $[0, \pi/2]$ 与 $[3\pi/2, 2\pi]$ 区间随着FM-AM相位差的增大,左负峰值增大;在 $[\pi/2, 3\pi/2]$ 区间随着FM-AM相位差的增大,左负峰值减小。右负峰的变化趋势与左负峰恰好相反。

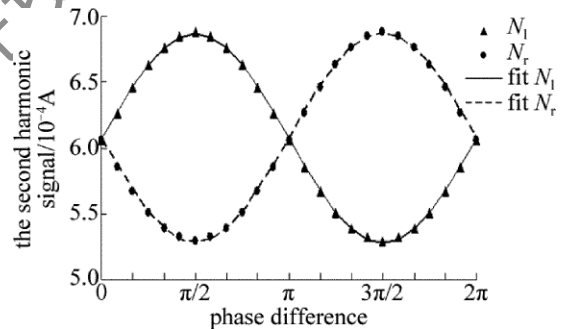


Fig. 4 Left and right negative peaks of the second harmonic signal varying with phase difference

左负峰值拟合得到的方程为 $y = 0.0006073 - 1.033 \times 10^{-7} \cos x + 7.928 \times 10^{-5} \sin x$,其中,误差平方和为 2.508×10^{-11} ,均方根误差为 1.093×10^{-6} ,确定系数为0.9997,校正后的确定系数为0.9996。右负峰值拟合得到的方程为 $y = 0.0006073 - 1.033 \times 10^{-7} \cos x - 7.928 \times 10^{-5} \sin x$,拟合参量与左负峰相同。从拟合的线型和方程可知,线型拟合的效果较好,左右负峰都是以 2π 为周期变化的。

从2次谐波线型可以看出,FM-AM相位差变化时,正峰值也在发生变化。正峰值随FM-AM相位差的变化如图5所示,其中 P 代表模拟计算的正峰值,fit P 是对正峰值拟合的线型,由计算结果可知,在 $[0, \pi/2]$ 区间,随着FM-AM相位差的增大,正峰值减小;在 $[\pi/2, \pi]$ 区间,随着FM-AM相位差的增

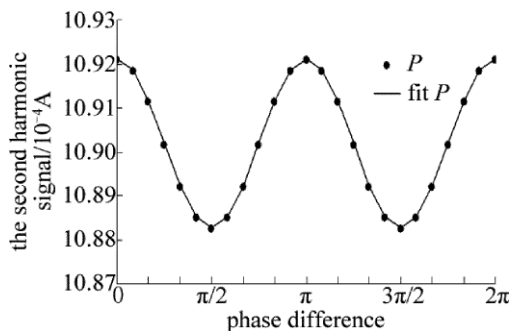


Fig. 5 Variations of the second harmonic signal positive peak with phase difference

大,正峰值增大。2 次谐波信号在 $[\pi, 2\pi]$ 区间的变化趋势与 $[0, \pi]$ 一致。

正峰值拟合得到的方程为 $y = 0.0010902 - 1.925 \times 10^{-6} \cos(2x) - 3.917 \times 10^{-22} \sin(2x)$, 误差平方和为 1.218×10^{-18} , 均方根误差为 2.408×10^{-10} , 确定系数与校正后的确定系数均为 1, 正峰值是以 π 为周期变化的, 而且幅度的变化较小。

图 6 是 2 次谐波左右负峰差值随 FM-AM 相位差的变化, 它进一步反映了左右负峰值的变化趋势。其中, 左右负峰差值表示左负峰值减去右负峰值, N_{lr} 是模拟计算的左右负峰差值, $\text{fit } N_{lr}$ 是对 N_{lr} 进行拟合得到的线型。由图可知, 在 $[0, \pi/2]$ 与 $[3\pi/2, 2\pi]$ 区间, 左右负峰差值随着 FM-AM 相位差的增大而增大; 在 $[\pi/2, 3\pi/2]$ 区间, 左右负峰差值随着 FM-AM 相位差的增大而减小, 当相位差为 $\pi/2$ 时, 左负峰达到最大值, 右负峰达到最小值, 左右负峰差值为最大; 而相位差为 $3\pi/2$ 时, 左负峰达到最小值, 右负峰达到最大值, 左右负峰差值为最小。

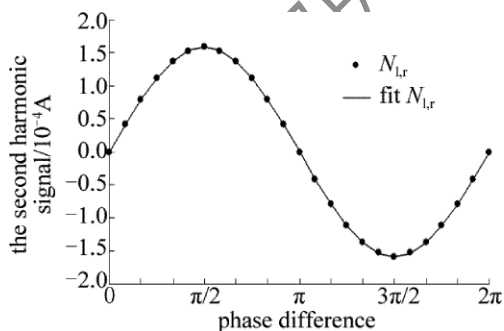


Fig. 6 Difference of the left and right negative peak of the second harmonic signal varying with phase difference

左右负峰差值拟合得到的方程为 $y = 0.0001586 \sin(x - 5.663 \times 10^{-14})$, 拟合的误差平方和为 7.010×10^{-19} , 均方根误差为 1.785×10^{-10} , 确定系数与校正后的确定系数均为 1。由拟合方程可知, 左右负峰差值是以正弦函数形式变化的, 它的变化周期为 2π 。

2 次谐波信号基线值随 FM-AM 相位差的变化如图 7 所示。其中, baseline 是计算得到的基线值, fit baseline 是对 baseline 拟合的线型, 从基线值的计算结果可知, 在 $[0, \pi/2]$ 区间, 基线值随 FM-AM 相位差的增大而增大; 在 $[\pi/2, \pi]$ 区间, 基线值随 FM-AM 相位差的增大而减小; 相位差在 $[\pi, 2\pi]$ 区间时的变化趋势与 $[0, \pi]$ 相同, 当 FM-AM 相位差为 $\pi/2$ 和 $3\pi/2$ 时基线值达到最大。

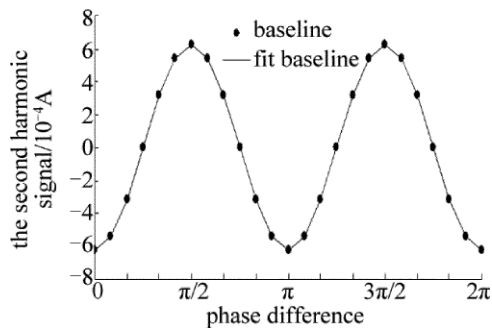


Fig. 7 Variations of second harmonic signal baseline with phase difference

基线值拟合得到的方程为 $y = 0.000625 \sin(2x - 1.571)$, 其中, 误差平方和为 6.478×10^{-20} , 均方根误差为 5.427×10^{-11} , 确定系数、校正后的确定系数均为 1。从拟合的方程可知, 基线值是以正弦函数形式变化的, 它的变化周期为 π 。

3 结 论

采用考虑残余振幅调制频率光谱技术的方法, 对 2 次谐波信号线型随 FM-AM 相位差的变化做出了详细的分析计算。由调制条件为 $m = 2.2$ 情况下得到的计算结果可知: 当 FM-AM 相位差变化时, 左右负峰值、正峰值、基线值发生变化, 左右负峰间距保持不变。左右负峰是以 2π 为周期变化的, 左负峰在相位差分别为 $0, \pi, 2\pi$ 时, 与典型值 $\pi/2$ 时相比, 2 次谐波信号的幅度减小了 12%, 在相位差取 $3\pi/2$ 时, 与典型值 $\pi/2$ 时相比, 2 次谐波信号变化的幅度最大, 信号减小了 23%; 右负峰在相位差分别为 $0, \pi, 2\pi$ 时, 与典型值 $\pi/2$ 时相比, 2 次谐波信号的幅度增大了 14%, 在 $3\pi/2$ 时, 与典型值 $\pi/2$ 时相比, 2 次谐波信号幅度增大了 30%; 左右负峰差值的变化是以正弦函数的形式发生变化的, 周期为 2π , 它与左负峰值的变化趋势是相同的, 但是在相位差分别为 $0, \pi, 2\pi$ 时, 2 次谐波信号减小的幅度为 $\pi/2$ 时的 1 倍, 在 $3\pi/2$ 时, 2 次谐波信号减小的幅度为 $\pi/2$ 时的 2 倍; 正峰值是以 π 为周期变化

的,与相位差为 $\pi/2$ 时相比 2 次谐波信号在相位差取 $0, \pi, 2\pi$ 时变化幅度最大,变化的最大值仅有 0.35%。在相位差为 $3\pi/2$ 和 $\pi/2$ 时 2 次谐波信号值相等;基线值也是以正弦函数形式变化的,它的周期是 π ,与正峰值的变化趋势正好相反,但是,在相位差取 $0, \pi, 2\pi$ 时 2 次谐波信号减小的幅度为 $\pi/2$ 时的 2 倍,在 $3\pi/2$ 时与 $\pi/2$ 相比 2 次谐波信号值相等。

参 考 文 献

- [1] HUANG W, GAO X M, ZHANG W J, *et al.* High-sensitivity near infrared tunable diode laser spectroscopy detection [J]. *Optic and Optoelectronic Technology*, 2004, 2(3): 5-8 (in Chinese).
- [2] BAO W Y, ZHU Y, CHEN J, *et al.* Signal analysis and spectrum distortion correction for tunable diode laser absorption spectroscopy system [J]. *Spectroscopy and Spectral Analysis*, 2011, 31(4): 1015-1019 (in Chinese).
- [3] MEYER O E, PUTZER E J. Measurement broadening in magnetic resonance [J]. *Journal of Applied Physics*, 1965, 30(12): 1987-1991.
- [4] REID J, LABRIE D. Second-harmonic detection with tunable diode lasers comparison of experiment and theory [J]. *Applied Physics*, 1981, 26(3): 203-210.
- [5] BJORKLUND G C. Frequency-modulation spectroscopy: a new method for measuring weak absorptions and dispersions [J]. *Optics Letters*, 1980, 5(1): 15-17.
- [6] BJORKLUND G C, LEVENSON M D, LENGTH W, *et al.* Frequency modulation (FM) spectroscopy [J]. *Applied Physics*, 1983, B32(3): 145-192.
- [7] POKROWSKY P, ZAPKA W, CHU F, *et al.* High frequency wavelength modulation spectroscopy with diode lasers [J]. *Optics Communications*, 1983, 44(3): 175-179.
- [8] LENTH W. High frequency heterodyne spectroscopy with current-modulated diode lasers [J]. *IEEE Journal of Quantum Electronics*, 1984, 20(9): 1045-1050.
- [9] GEHRTZ M, LENTH W, YOUNG A T, *et al.* High-frequency-modulation spectroscopy with a lead-salt diode laser [J]. *Optics Letters*, 1986, 11(3): 132-134.
- [10] DHARAMSI A N. A theory of modulation spectroscopy with applications of higher harmonic detection [J]. *Applied Physics*, 1996, D29(3): 540-549.
- [11] CAI Y, WU S Q, WU A, *et al.* Study on calculation method of wavelength modulation spectroscopy detection limit [J]. *Laser Technology*, 2012, 36(3): 390-393 (in Chinese).
- [12] WU A, WU Sh Q, CAI Y, *et al.* Effect of RAM on WMS signal line shape [J]. *Laser Technology*, 2012, 36(3): 357-360 (in Chinese).
- [13] WERLE P. Spectroscopic trace gas analysis using semiconductor diode lasers [J]. *Spectrochimica Acta*, 1995, A52(8): 805-822.
- [14] SILVER J A. Frequency-modulation spectroscopy for trace species detection: theory and comparison among experimental methods [J]. *Applied Optics*, 1992, 31(6): 707-717.
- [15] GILLEN J I, McINTYRE D H. Simultaneous line center and line-width measurement using dual frequency modulation spectroscopy [J]. *Applied Optics*, 2010, 49(29): 5528-5536.