

文章编号 1004-924X(2007)05-0623-05

干涉光谱法的氢气遥测系统设计

陶坤宇,孙金霞,付 森,周彦平

(哈尔滨工业大学 航天学院,黑龙江 哈尔滨 150001)

摘要:基于傅里叶变换光谱法原理,针对现有的傅里叶变换光谱仪结构,提出了一种基于干涉光谱法遥测氢的系统设计方案。采用石英碘钨灯作为光源,设计了一套完整的光学能量收集及干涉系统,满足了调校与测量的双重需求。利用 LightTools 对该系统进行了光学仿真,然后在 MATLAB 下对模拟接收器接收的光强度值进行了数据处理与分析。结果表明,采用该方案可以很好地对氢气进行远距离检测。最后,阐述了该系统对于其它推进剂检测的适用性。

关键词:干涉光谱法;傅里叶变换;遥测;氢气

中图分类号:V511;O657.3 文献标识码:A

Remote detecting system for hydrogen based on interferometric spectrometry

TAO Kun-yu, SUN Jin-xia, FU Sen, ZHOU Yan-ping

(School of Astronautics, Harbin Institute of Technology, Harbin 150001, China)

Abstract: A remote detecting system for hydrogen based on the interferometric spectrometry is presented. Using quartzose tungsten iodide lamp as lighting, an integrated optical device for collecting energy and interfering is designed for adjusting system and measuring hydrogen gas. Then the optical system is simulated by LightTools, the optical intensity received by a receiver is analyzed and processed by MATLAB, and the arithmetic is also set up. The results demonstrate the possibility of this technique in remote detecting hydrogen and the applicability of the remote detecting system in other fuel.

Key words: interferometric spectrometry; Fourier transform; remote detecting; hydrogen

1 引言

液氢是极危险的易燃、易爆物,但其效率高,重量轻,与不同氧化剂组合时性能非常好。在给定的燃烧室温度下,它的比推力比其它任何推进剂系统均高,所以几乎所有的轨道火箭都用它作燃料。在航天史上,因为氢泄漏而引发的事故很多,

因此对氢进行监测对于航天安全保障来说具有很重要的意义。

在火箭发射现场,由于推进剂加注现场环境复杂,发射台距离地面高度比较大,因此不可能在每一个角落都安装气敏传感器,并且用于检测氢气的气敏传感器主要是利用氢气的还原性进行检测,而它对各种还原性气体的灵敏度十分接近,因此传感器的选择性不好。如现场混有其它还原性

气体时,极容易产生误报警信号。此外,气敏传感元件由于工作条件恶劣,温度较高,长期使用易造成气敏特性漂移;而且传统元件性能参数分散,互换性差,给实用带来不便^[1]。因此,迫切需要一种选择性好,能够准确分辨出所要检测的气体,检测方便及时的遥测方式。

在远程检测的应用方面,近代光谱学的发展为实现液氢泄漏的远距离检测提供了途径。根据现场的需求,分析目前可以采用的光学遥测方式,包括差分吸收光谱学(DOAS)技术;傅里叶变换红外光谱(FTIR)技术;可调谐二极管激光吸收光谱学(TDLAS)技术;差分吸收激光雷达(DIAL)技术;激光诱导荧光(LIT)技术^[2]。从良好的可维护性、实时性、成本的可控性几个方面看,采用傅里叶变换红外光谱(FTIR)技术比较实用、比较合理。除了满足基本要求外,其分辨率高、适应的检测气体种类也能满足其它火箭燃料的要求。有报道,在可方便移动的感兴趣气体云的探测上,采用被动探测的傅里叶变换红外光谱的研究已获得进展^[3]。差分吸收激光雷达(DIAL)技术的优点是分辨率更高,可以探测更远的距离^[4],只是成本很高。在本系统的设计中,以发射现场和加注车间为设计目标,距离要求不是很远,可以通过调节发射功率、探测灵敏度、接收系统的口径来保证。

近红外光谱分析中使用最多的测量方法是漫反射法,这是因为漫反射法比较容易实现。入射光在样品内被不断地反射、折射和吸收,最终有一部分光从样品表面以漫反射方式出射,被探测器接收^[5]。

2 原子吸收光谱原理与傅里叶变换光谱法的实现

2.1 原子吸收光谱原理

原子吸收是指吸收物质为基态原子的吸收。原子的能级变化是原子中价电子跃迁的结果。原子吸收光谱的波长和频率由产生跃迁的两能级的能量差 δE 决定:

$$\delta E = h\nu = \frac{hC}{\lambda}, \quad (1)$$

式中 δE ——两能级的能量差,单位 eV(1 eV = 1.060 219 2 × 10⁻¹⁹ J);

λ ——波长, nm;

ν ——频率, s⁻¹;

C ——光速, m · s⁻¹;

h ——普朗克常量。

在所有谱线中,当跃迁的能级是原子的基态能级时,所发射的谱线叫共振线。通常情况下,原子绝大多数处于基态,因此原子吸收是以基态原子对共振线的吸收为基础的,可把原子吸收分析定义为通过测定基态原子对共振线的吸收来进行定量分析的方法。在原子光谱中,低能级为基态的共振线是吸收线,其它为非吸收线。本文选用 2 469.5 cm⁻¹ 和 15 237.4 cm⁻¹ (4.049 μm 和 0.656 μm) 这两条特征吸收谱线,是因为这两条谱线产生的几率相对大一些,并且处于可检测的光谱范围内。

2.2 傅里叶变换光谱法原理以及实现方法

傅里叶光谱方法利用干涉图和光谱图之间的对应关系,通过测量干涉图和对干涉图进行傅里叶积分变换来测定和研究光谱图。对于一个具有连续波长的复色光,其干涉图可用下式表示:

$$I(\delta) = \int_{-\infty}^{+\infty} B(\nu) \cos 2\pi\nu\delta \nu, \quad (2)$$

其中, $I(\delta)$ 代表了光强随光程差 δ 的变化,称之为干涉图; ν 为波数; $B(\nu)$ 项是修正后的光源强度,是光源频率的函数,实际上即是对应干涉图 $I(\delta)$ 的光源光谱。

把式(2)进行傅里叶变换,就能得到需要的光谱 $B(\nu)$, 即:

$$B(\nu) = \int_{-\infty}^{+\infty} I(\delta) \cos(2\pi\nu\delta) d\delta, \quad (3)$$

由于干涉图是偶函数,是左右对称的,因此只要对干涉图 $I(\delta)$ 半边进行傅里叶变换即可得到光谱图,故可改写为:

$$B(\nu) = 2 \int_0^{+\infty} I(\delta) \cos(2\pi\nu\delta) d\delta. \quad (4)$$

式(4)是傅里叶变换光谱学的基本方程。由此可看出,在某一时刻 t (对应一确定的光程差 δ), 对于每一个波数 ν , 皆可得到一个对应于该波数的光源强度值。这样,欲研究的光源函数 $B(\nu)$ 便是所记录的干涉强度函数的傅里叶余弦变换。只要对每一个波数重复地进行傅里叶余弦变换,可以得到光源的光谱分布函数 $B(\nu)$ 。

在红外光谱的实际测量中,让经过调制的干涉光通过样品,由于样品的特征吸收而使其中的某些光强减弱。虽然样品吸收会引起光谱改变,但从复光干涉图上看不出明显变化。只有经过傅里叶变换之后才能从获得的光谱与原光谱的比较中看到因样品特征吸收而发生的变化。

3 基于干涉光谱法的氢气遥测系统设计

光学系统如图1所示。

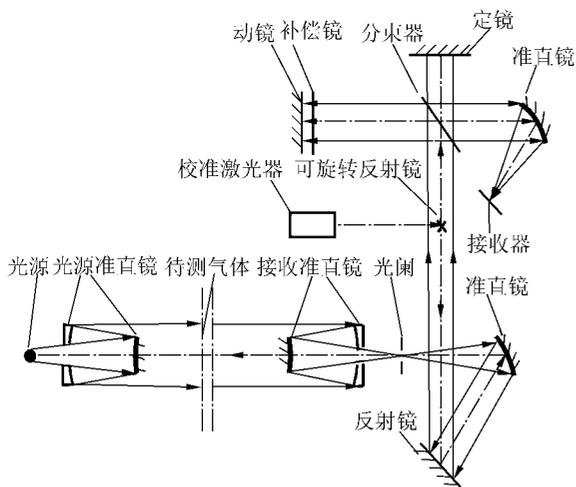


图1 氢气遥测用的傅里叶光谱系统

Fig. 1 Fourier spectral optic system for hydrogen gas in remote measurement

3.1 光源

由于本系统是遥测型的,光源功率需达到足以激发氢原子产生核外电子跃迁所需的能量,本文选用了1 000 W的石英碘钨灯作为光源。因为石英碘钨灯的辐射波段包含了本文选用的氢原子的特征吸收谱线 $2\,469.5\text{ cm}^{-1}$ 和 $15\,237.4\text{ cm}^{-1}$,并且它的能量比通常的Globar光源能量大得多,因此可以补偿长程测量中由于散射等原因造成的光能量损失。但是石英碘钨灯必须经过标定,并且要求输出均匀,这样才能保证测量时的准确性^[6]。

3.2 双反射式准直系统

本文提出的系统是遥测型光谱监测系统,它的遥测功能主要是由于在光路前部安置了一套双反射式准直系统,监测目标则置于两端反射组镜之间,因此可以达到长程监测的作用。反射式望远镜完全没有色差,可以用于很宽的波段^[7]。

本系统采用的是卡赛格林式望远镜系统,望远物镜中主镜的第一个大反射面是抛物面;副镜的第一个小反射面是双曲面。光源置于焦点上。物镜的相对孔径可以取为 $1/5$,口径为25 cm。望远镜目镜的材料在波长 $25\,000\sim 5\,200\text{ cm}^{-1}$ 范围内时采用石英,在中红外区 $5\,200\sim 700\text{ cm}^{-1}$ 范围内时采用ZnSe材料,可以在发射场恶劣的天气中作业,防止潮解^[8]。

3.3 动镜与定镜系统

动镜是干涉仪中唯一运动的部件,其运动精度是干涉仪性能好坏的关键。如果扫描过程中动镜平面倾斜 β 角,假如入射光束口径为 $D(\text{cm})$,则要使 β 值符合下式:

$$\beta < \frac{1}{20D\nu_{\max}}, \quad (5)$$

式中: ν_{\max} 为光谱中最高波数。为了确保测量精度,必须保证动镜平稳移动,而且其扫描必须为匀速直线运动。采用自适应动态准直技术可以降低动镜的驱动系统设计和机械加工精度要求^[9]。

3.4 定标与校准

系统位置的初始调整是通过使激光信号通过反射镜射入望远镜系统,从光源一端的望远镜接收激光信号。由于是反射式系统,因此还需要在两个主反射镜中间开一个小口,当进行系统调整时,小口处于开的状态,调整之后关上小口。因此,即使是望远镜的目镜和物镜之间相隔比较远,也可以通过这种方法调整系统位置。系统位置调整好之后,将旋转反射镜偏转 90° ,此时激光信号射入分光系统,因此可以用这个信号作为过零点的标志信号。

4 系统仿真与分析

由于LightTools是一种静态模拟仿真软件,因此不能模拟傅里叶光谱仪的动镜运动过程中接收器得到的光强度的变化过程。由此本文提出一种多点静态测量代替动态测量过程的思路。即:光源在某一单波数下,动镜每次改变一个位置,都进行一次仿真,并记录下接收器检测到的光强度,这些位置则模拟计算机的采样点。得到的这些光强度值实际上就是干涉图 $I(\delta)$,它是一条关于光程差的光强曲线。对这些光强度值进行离散余弦傅里叶变换,得到的就是光源强度。以上是在某

一波数下测量的过程,因为实际系统的光源会发射一定宽度波谱范围的光,检测器得到的也是一段连续的光谱,所以连续改变光源的谱值(指定光源每次仿真都辐射单光谱),计算出每次改变谱值后的光源强度,这些光强度就是要求的光源光谱。

4.1 仿真参数的确定

4.1.1 谱线间隔

- 取氢光谱的两条吸收谱线:

$2\,469.5\text{ cm}^{-1}, 15\,237.4\text{ cm}^{-1}$

- 分别取谱线宽度为:

$2\,475.5\sim 2\,463.5\text{ cm}^{-1},$

$15\,243.39\sim 15\,231.39\text{ cm}^{-1}$

- 每次改变光源光谱: 1 cm^{-1}

4.1.2 采样间隔

采样间隔需满足 $\Delta\delta \leq \frac{1}{2(\nu_{\max} - \nu_{\min})}$, 因为所取谱线宽度均为 12 cm^{-1} , 所以采样间隔 $\Delta\delta \leq \frac{1}{2 \times 12} \approx 0.04\text{ cm}^{-1}$, 本仿真在 $2\,475.5\sim 2\,463.5\text{ cm}^{-1}$ 取 $\Delta\delta = 0.001\text{ cm}^{-1}$, 在 $15\,243.39\sim 15\,231.39\text{ cm}^{-1}$ 取 $\Delta\delta = 0.0001\text{ cm}^{-1}$ 。

4.1.3 分辨率及采样点数

本系统设定的分辨率为 1 cm^{-1} , 采样点数为:

$$N_s = 2(\nu_{\max} - \nu_{\min}) / \Delta\nu, \quad (7)$$

将光谱范围带入式中, 得 $N_s = 2 \times 12 / 1 = 24$, 本仿真取 $N_s = 26$ 。

4.2 Matlab 下数据处理分析的结果

分析结果如图 2。

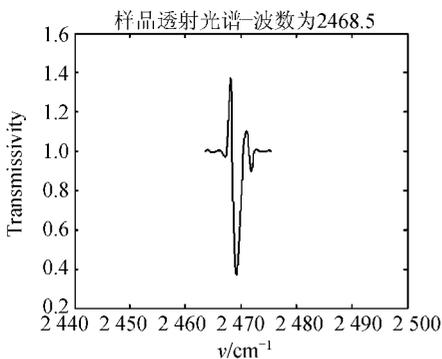


图 2 样品透射光谱拟合曲线

Fig. 2 Simulative curve of sample transmission spectra

要准确地进行气体成分判别, 光谱必须具有两个特点: 吸收峰尖锐并且位置准确。得到的氢

透射光谱图具备这两个条件, 说明本文所采取的仿真思路和方法正确。但是, 在试验结果中, 氢透射光谱图中也存在不足之处, 主要表现在: 在吸收峰附近, 出现了峰值 > 1 的激跃峰, 而在实际测量中样品光谱函数是小于等于背景光谱分布函数的, 因此不会出现 > 1 的情况。出现这个激跃峰的原因, 主要是构造光谱分布函数时使用了三次样条插值函数, 而插值法虽然可以构造出没有测量的其它离散点的数值, 但由于拟合过程造成畸变, 不能完全符合函数的真实变化曲线。

解决这个问题可采取以下几个方案: 第一, 增加采样光谱线宽度, 使插值函数更逼近真实情况, 这样谱线展宽之后, 可以减小因插值法带来的误差, 由于仿真的工作量庞大, 因此本文只是对氢特征吸收谱线比较窄的光谱范围进行采样; 第二, 设定更高的分辨率, 本仿真的分辨率为 1 cm^{-1} , 可以提高到 0.1 cm^{-1} ; 第三, 选用更精确的插值方法。在具体的系统设计中, 随着电子元器件的日益发展和计算机技术的提高, 第一个方案比较容易实施。

5 结 论

光谱检测法基于它的原理, 其最大的优点就是选择性好, 能够准确分辨出所要检测的气体, 并且检测方便即时。由于它是遥测的, 在加注现场测试的敏感点不需要使用电源, 所以不存在因不完全配线引起火花的安全危险; 另外, 这种方法还可以达到实时监测, 在第一时间做出危险警报。

其它推进剂对干涉光谱法也同样具有适用性, 目前除了采用液氢作为主要推进剂之外, 肼等其它有机物质也经常被选用。这些物质的化学结构决定了它们更容易产生红外段的吸收光谱, 因此本文提出的系统也适用于其它的推进剂。

随着科技的进步和对燃烧剂研究的深入, 已经有越来越多的可作为推进剂的物质被提出, 由于干涉光谱法的选择性很好, 可以准确地分辨出监测对象, 如有需要还可进行定量分析。因此, 利用这种方法对火箭加注过程进行监测的应用前景将非常可观。当然采用其它方法也是可行的^[10], 如: 可调谐差分吸收激光, 但是它的成本太高, 维护性也差, 推广使用有难度。

参考文献:

- [1] 刘文清,崔志成,董凤忠. 环境污染监测的光学和光谱学技术 [J]. 光电子技术与信息, 2002,15(5):1-2.
LIU W Q, CUI ZH CH, DONG F ZH. Optical and spectroscopic techniques for environmental pollution monitoring [J]. *Optoelectronic Technology and Information*, 2002,15(5):1-2. (in Chinese)
- [2] 吴瑾光. 近代傅里叶变换红外光谱技术及应用(上卷) [M]. 科学技术文献出版社, 1994.
WU Q G. *The Technique & Application About Fourier Transfer IR Spectra (volume 1)* [M]. Academic Technology and literature Press, 1994. (in Chinese)
- [3] WADSWORTH, WINTHROP, WILLIAMS, *et al.*. Mobile remote sensing FT-IR for plume detection [J]. *SPIE*, 2006, 6302:630201-3.
- [4] LAVOIE, HUGO, PUCKRIN, *et al.*. Recent advances in the passive standoff detection of chemical vapours by differential FTIR radiometry [J]. *SPIE*, 2005, 5795:96-97.
- [5] 赵强,张工力,陈星旦. 多元散射校正对近红外光谱分析定标模型的影响 [J]. 光学 精密工程, 2005, 13(1):53-58.
ZHAO Q, ZHAN G L, CHEN X D. Effects of multiplicative scatter correction on a calibration model of near infrared spectral analysis [J]. *Opt. Precision Eng.*, 2005, 13(1):53-58. (in Chinese)
- [6] 王淑荣,邢进,李福田. 利用积分球光源定标空间紫外遥感光谱辐射计 [J]. 光学 精密工程, 2006, 14(2):185-190.
WANG SH R, XING J, LI F T. Spectral radiance responsively calibration of ultraviolet remote sensing spectroradiometer in space using integrating sphere [J]. *Opt. Precision Eng.*, 2006, 14(2):185-190. (in Chinese)
- [7] 王序昆. 光谱学与光谱分析 [M]. 国防工业出版社, 1987.
WANG X K. *Spectroscopy and Spsectral Analysis* [M]. National Defense Industry Press, 1987. (in Chinese)
- [8] 吴平平,周文敏,王俊德. 实用傅里叶变换红外光谱学 [M]. 中国环境科学出版社, 1991.
WU P P, ZHOU W M, WANG J D. *Fourier Transfer IR Spectroscopy in Practicality Utility* [M]. Chinese environment Academic Press, 1991. (in Chinese)
- [9] 曾立波,尹邦胜,何冰,等. 傅里叶变换红外光谱仪动镜倾斜误差分析 [J]. 光学 精密工程, 2006, 14(2):191-196.
ZENG L B, YIN B SH, HE B, *et al.*. Error analyses of moving mirror in Fourier transform interferometer [J]. *Opt. Precision Eng.*, 2006, 14(2):191-196. (in Chinese)
- [10] VAICIKAUSKAS, VIKTORAS V, VIDMANTAS K, *et al.*. Infrared DIAL system for remote sensing of hazardous chemical agents Proc. [J]. *SPIE*, 2004, 5613:21-22.

作者简介:陶坤宇(1967—),男,湖北应城人,现在哈尔滨工业大学攻读博士学位,高级工程师,主要研究方向为光电探测与识别、空间目标的跟踪瞄准、空间对抗。E-mail: 3times@sina.com.cn