

基于可调谐激光吸收光谱技术的二硫化碳中红外光谱参数测量

管林强 邓昊 姚路 聂伟 许振宇 李想 臧益鹏 胡迈 范雪丽 杨晨光 阚瑞峰

Measurement of middle infrared spectroscopic parameters of carbon disulfide based on tunable diode laser absorption spectroscopy

Guan Lin-Qiang Deng Hao Yao Lu Nie Wei Xu Zhen-Yu Li Xiang Zang Yi-Peng Hu Mai Fan Xue-Li Yang Chen-Guang Kan Rui-Feng

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 68, 084204 (2019) DOI: 10.7498/aps.68.20182140

在线阅读 View online: <https://doi.org/10.7498/aps.68.20182140>

当期内容 View table of contents: <http://wulixb.iphy.ac.cn>

您可能感兴趣的其他文章

Articles you may be interested in

基于可调谐二极管激光吸收光谱技术的密闭玻璃容器中水汽浓度及压力的探测

Concentration and pressure measurement of water vapor in sealed glass containers based on tunable diode laser absorption spectroscopy

物理学报. 2016, 65(8): 084202 <https://doi.org/10.7498/aps.65.084202>

基于TDLAS技术的水汽低温吸收光谱参数测量

Measuring spectral parameters of water vapor at low temperature based on tunable diode laser absorption spectroscopy

物理学报. 2017, 66(20): 204204 <https://doi.org/10.7498/aps.66.204204>

基于可调谐半导体激光器吸收光谱的高灵敏度甲烷浓度遥测技术

High sensitive scheme for methane remote sensor based on tunable diode laser absorption spectroscopy

物理学报. 2017, 66(10): 100702 <https://doi.org/10.7498/aps.66.100702>

基于可调谐二极管激光技术利用小波去噪在2.008 μm 波段对 $\delta^{13}\text{C}\text{O}_2$ 的研究(已撤稿)

The research of $\delta^{13}\text{C}\text{O}_2$ by use of wavelet de-noising at 2.008 μm based on tunable diode laser absorption spectroscopy

物理学报. 2017, 66(2): 024202 <https://doi.org/10.7498/aps.66.024202>

基于光强与吸收率非线性同步拟合的吸收光谱测量方法

Laser intensity and absorbance measurements by tunable diode laser absorption spectroscopy based on non-line fitting algorithm

物理学报. 2018, 67(5): 057801 <https://doi.org/10.7498/aps.67.20171905>

基于高精度度光腔锁频激光的分子吸收光谱测量

Measurement of molecular absorption spectrum with a laser locked on a high-finesse cavity

物理学报. 2018, 67(10): 104206 <https://doi.org/10.7498/aps.67.20172532>

基于可调谐激光吸收光谱技术的二硫化碳中 红外光谱参数测量*

管林强¹⁾²⁾ 邓昊¹⁾²⁾ 姚路¹⁾ 聂伟¹⁾²⁾ 许振宇¹⁾ 李想¹⁾²⁾
臧益鹏¹⁾²⁾ 胡迈¹⁾²⁾ 范雪丽¹⁾ 杨晨光^{1)†} 阚瑞峰^{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, 环境光学与技术重点实验室, 合肥 230031)

2) (中国科学技术大学, 合肥 230026)

3) (中国科学院长春光学精密机械与物理研究所, 长春 130000)

(2018年12月5日收到; 2019年1月22日收到修改稿)

采用 4.6 μm 附近的量子级联激光器作为光源, 搭建了一套二硫化碳 (CS_2) 吸收光谱测量系统, 结合可调谐二极管激光吸收光谱技术, 对光谱范围为 2178.99—2180.79 cm^{-1} 的 CS_2 吸收光谱展开了深入研究, 重点测量了 2180.5—2180.74 cm^{-1} 的四条吸收谱线, 利用基于非线性最小二乘的多元线性回归算法对 CS_2 吸收光谱进行拟合, 精确得到了该范围内谱线的中心波长、线强以及空气展宽系数等光谱参数. 经计算, 对应谱线线强不确定度小于 5%, 空气展宽系数不确定度小于 15%, 这个结果可作为免标定 CS_2 红外光谱探测的基础光谱参数, 对痕量 CS_2 气体传感具有重要意义. 未来我们将进一步开展 2170—2200 cm^{-1} 整个谱段的 CS_2 谱线参数的测量, 以期填补其在 HITRAN 和 GEISA 数据库光谱参数的空白.

关键词: 二硫化碳 (CS_2), 量子级联激光器, 可调谐二极管激光吸收光谱, 光谱参数

PACS: 42.62.Fi, 33.20.Ea, 42.55.Px

DOI: 10.7498/aps.68.20182140

1 引言

二硫化碳 (CS_2) 是一种有毒的挥发性硫化物 (volatile sulfur compounds, VSC), 具有恶臭气味, 主要来源于自然和人工合成^[1]. CS_2 不仅是参与大气光化学反应的有害污染物, 而且在工业安全方面具有可燃性和危害性^[2]. 此外, CS_2 作为一种神经毒素, 可通过呼吸或者皮肤吸入, 即使是暴露在低水平的 CS_2 中, 也可能增加某些神经疾病的健康风险, 严重危害人体健康^[3-5]. 因此, 精确测量大气中 CS_2 的浓度具有重要意义. 目前, 激光光谱

技术因其高灵敏度、快速响应以及无损探测等优点被应用于 CS_2 痕量分析.

国内外诸多课题组基于激光光谱技术对 CS_2 的高灵敏度检测展开了深入研究. Yu 等^[6] 采用 1.4 km 的开放光路并结合紫外差分光学吸收光谱技术探测大气 CS_2 浓度, 其检测限在 2 ppb 左右. 相比紫外波段, 气体分子在红外波段, 尤其是中红外波段存在大量的基频吸收带, 更适合于高灵敏度气体传感与仪器的小型化^[7]. 天津大学杜振辉等^[2] 研制了量子级联中红外光谱的多通吸收池气体传感器, 结合波长调制光谱技术, 对大气中的 CS_2 实现了高灵敏度探测; Waclawek 等^[8] 采用工作在

* 国家重点研发计划 (批准号: 2016YFC201100) 资助的课题.

† 通信作者. E-mail: cgyang@aiofm.ac.cn

‡ 通信作者. E-mail: kanruifeng@aiofm.ac.cn

4.59 μm 的连续波分布式反馈量子级联激光器 (quantum cascade laser, QCL), 并结合石英增强型光声光谱技术, 研制了一种用于探测 CS_2 的紧凑型气体传感器系统. 然而, 由于通用的光谱数据库 HITRAN, GEISA 等缺乏 CS_2 的光谱参数, 目前高灵敏度 CS_2 气体传感器需要用标准的已知浓度气体对系统进行标定, 过程繁琐, 测量的准确度严重依赖于标准气体浓度的准确度 [9–11]. 因此, CS_2 气体分子光谱参数的精确测量对化学分析、环境监测、工业、医学检测等领域具有重要的意义 [2, 12]. 目前, 只有 Blanquet 等 [13] 利用傅里叶变换光谱仪测量了 2800—3000 cm^{-1} 光谱范围内 CS_2 的高分辨率吸收光谱, 并为 CS_2 整体分析提供了新的光谱参数. 工作中红外波段的 QCL 经过二十多年的发展, 产品工艺以及产品性能日趋成熟与稳定, 已逐渐应用于高灵敏度气体传感器的商业化应用 [14–16].

本文以中心波长为 4.6 μm 的 QCL 作为光源, 搭建了一套 CS_2 吸收光谱测量系统, 利用可调谐二极管激光吸收光谱 (tunable diode laser absorption spectroscopy, TDLAS) 技术测量了室温条件下 2178.99—2180.79 cm^{-1} 光谱范围内的 CS_2 吸收光谱, 采用基于非线性最小二乘的多元线性回归算法, 对不同压力下的光谱信号进行拟合, 并通过测量该光谱范围内已知浓度的 N_2O 吸收光谱, 精确给出了 CS_2 拟合吸收峰的中心波长, 通过相关公式计算, 分别得到了四条谱线的线强和空气展宽系数等光谱参数, 并计算了四条谱线对应光谱参数的不确定度.

2 测量原理

入射光经过气体介质后, 其强度变化遵循比尔-朗伯定律:

$$\frac{I(\lambda)}{I_0(\lambda)} = \exp[-\alpha(\lambda)CL], \quad (1)$$

其中 $I_0(\lambda)$ 为经目标气体的入射光强, $I(\lambda)$ 为透过目标气体后的出射光强, L 为有效吸收光程, $\alpha(\lambda)$ 为吸收系数, C 为气体浓度. 吸收系数可表示为

$$\alpha(\lambda) = \phi(\lambda - \lambda_0) S(T) N(T, P), \quad (2)$$

其中 $\phi(\lambda - \lambda_0)$ 为归一化的线型函数, 且 $\int_0^\infty \phi(\lambda - \lambda_0) d\nu = 1$; $S(T)$ 为吸收谱线线强; $N(T, P)$ 为分子数密度. 根据 (1) 式和 (2) 式可得

到积分吸光度:

$$\begin{aligned} A &= \int C\alpha(\lambda)L = \int C\phi(\lambda - \lambda_0)S(T)N(T, P)L \\ &= CS(T)N(T, P)L. \end{aligned} \quad (3)$$

其与压力成正比关系, 在其他条件已知的情况下, 可以通过线性拟合压力与积分面积的线性关系得到线强.

吸收光谱信号中的洛伦兹加宽主要和气体组分对应的加宽系数以及各个组分的压力有关, 其表达式为

$$\Delta\nu_L(\text{HWHM}) = \nu_{\text{self}} \cdot P_{\text{self}} + \nu_{\text{air}} \cdot P_{\text{air}}, \quad (4)$$

其中 $\Delta\nu_L$ 为半高半宽, ν_{self} 为待测气体分子的自加宽系数, ν_{air} 为空气加宽系数, P_{self} 为待测气体的组分压力, P_{air} 为空气的组分压力. 而由于空气中的 CS_2 含量在 ppb 量级甚至更低 [17, 18], 所以在实际测量中 CS_2 的组分压力极小, 可忽略不计, 所以 (4) 式可写为

$$\Delta\nu_L(\text{HWHM}) = \nu_{\text{air}} \cdot P_{\text{air}}. \quad (5)$$

由 (5) 式可知洛伦兹半高半宽与空气组分压力成正比关系, 通过线性拟合压力与洛伦兹半高半宽的线性关系可以得到空气展宽系数.

3 实验细节

为了测量 CS_2 的光谱参数, 搭建了如图 1 所示的实验装置, 采用工作在 4.6 μm 附近的 QCL (HAMAMATSU 1084-3462-D18) 作为光源, 通过电流驱动模块 (Wavelength PLD1250) 和温度控制模块 (PTC10K-CH) 精确控制激光器的工作温度和注入电流, 从而控制激光器的波长输入范围. 温度控制器长期的温度稳定性为 0.002 $^\circ\text{C}$, 满足高分辨率光谱测量的需要. 基于 LABVIEW 模拟仿真软件, 并结合 16 位高精度数据采集卡 (NI USB-6356) 生成锯齿波信号, 我们通过电流驱动模块注入激光器, 控制激光器的波长扫描范围. 出射光经过波长分束片分为两束, 一束光通过充有 50.5 cm 光程的 CS_2 样品吸收池后由热电制冷型碲镉汞中波红外探测器 (MCT Vigo PVI-4TE-6) 接收, 同时另一束光经过锗标准具产生干涉信号, 用于对目标谱线的波长标定, 并由另一支中红外光电探测器接收, 最终两路探测器信号由高精度的数据采集卡采集并保存.

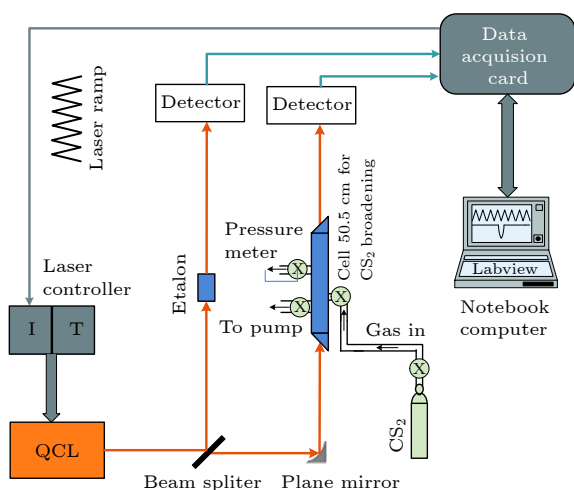


图 1 CS₂ 吸收光谱测量实验装置结构图

Fig. 1. Experimental schematic of CS₂ tunable diode laser sensor system.

实验过程中, 首先用高纯氮气 (≥ 99.999%) 对气体吸收池多次清洗后, 利用真空泵 (安捷伦 Varian TriScroll 300) 对吸收池抽真空处理, 使用高精度压力计 (Pfeiffer-CMR361) 记录此时的压力值, 约为 15 Pa. 然后, 冲入 CS₂ 气体样品, 考虑到标准浓度气体探测会由于浓度造成误差, 因此采用纯 CS₂ 气体 (99.95%) 并记录不同压力下的目标气体样品吸收光谱. 本文中, 采集卡的采样率为 1 MHz,

激光器扫描频率为 100 Hz. 为了进一步提高信噪比, 对光谱数据作 2000 次平均处理, 整个气体池及阀的漏率为 10⁻⁸ Pa·m³/s, 实验温度控制在 296 K.

4 结果与讨论

根据太平洋西北国家实验室^[19] (Pacific Northwest National Laboratory, PNNL) 数据库, CS₂ 在 600—3400 cm⁻¹ 存在明显的吸收峰, 其三个基本吸收带在 396.7, 656.5 和 1523 cm⁻¹ 附近, CS₂ 的第二个强吸收范围在 2180 cm⁻¹ 附近 (图 2). 由数据库可知在 1520 cm⁻¹ 附近有 H₂O 的强吸收线, 所以 1520 cm⁻¹ 附近不适合测量 CS₂ 光谱参数. 我们选定 2180—2181 cm⁻¹ 波段, 通过高分辨傅里叶变换光谱仪测量 CS₂ 在此波段的红外吸收光谱, 并结合 HITRAN 数据库模拟 CO, H₂O 等气体分子吸收光谱信号, 发现在该光谱范围内 CS₂ 有数条较强吸收谱线, 且 CO, H₂O 等气体分子的干扰较小, 因此, 该波长附近的 CS₂ 气体分子吸收谱线特别适合用于高灵敏度气体传感的目标谱线. 据此, 我们选用波长范围为 4.6 μm 附近的 QCL 作为光源, 开展 2180.5—2180.75 cm⁻¹ CS₂ 高精度光谱参数的测量.

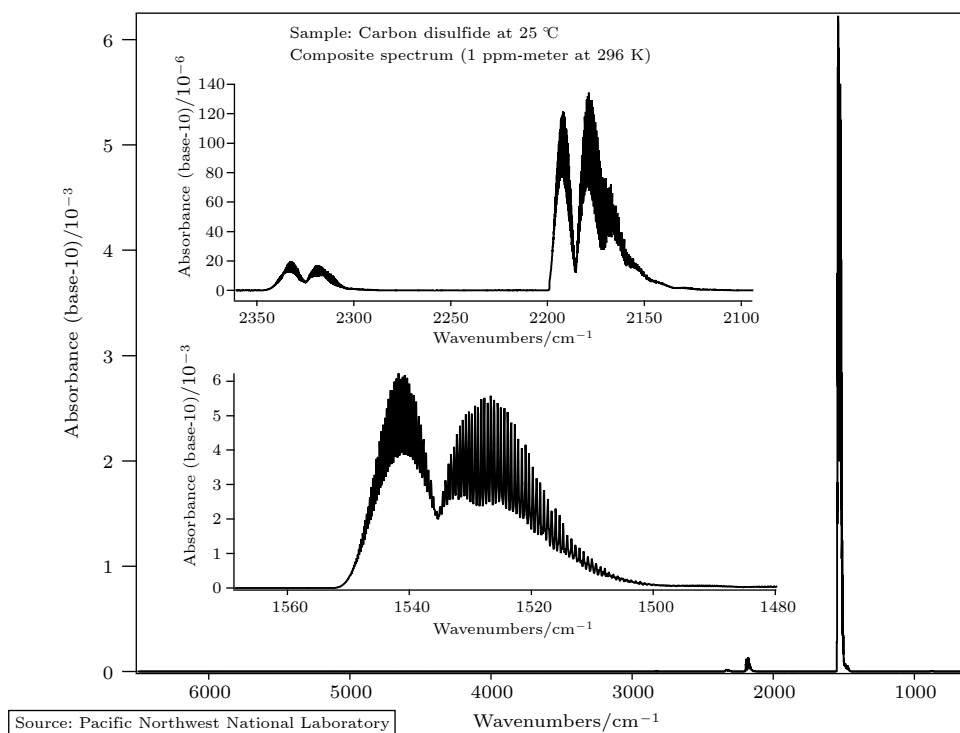


图 2 PNNL 数据库中 CS₂ 吸收光谱

Fig. 2. The CS₂ absorption spectra obtained from PNNL database.

由于数据库中并无 CS₂ 的参数, 因此本文通过测量同一扫描范围内 N₂O 的高分辨吸收光谱, 结合数据库中 N₂O 已知谱线的中心波长等参数以及同步测量的铯标准具干涉信号, 对未知 CS₂ 吸收谱线的中心波长进行精确标定. N₂O 吸收光谱和铯标准具干涉信号测量结果如图 3 所示. 实验中, N₂O 的浓度为 3988 ppm, N₂O 压力控制在 1968 Pa. 激光器在周期性起始时间段内处于出光阈值以下, 以此作为背景光辐射、电子学噪声和探测器等造成直流偏移量的本底参考^[20, 21].

本文采用基于非线性最小二乘的多项式拟合

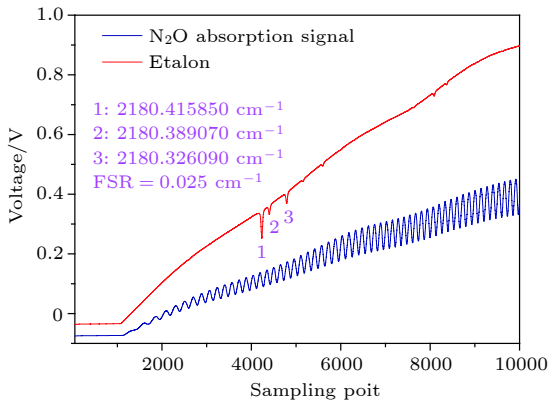


图 3 N₂O 吸收光谱信号和标准具干涉条纹

Fig. 3. The measured N₂O absorption spectrum signal and obtained interference fringes by optical etalon.

算法对无吸收部分信号进行拟合, 获得激光器的出光背景, 得到 CS₂ 吸收光谱信号的归一化背景. 不同压力下纯样品浓度的 CS₂ 吸收光谱信号如图 4 所示. 通过多元线性回归算法并结合 Voigt 线型函数对以上吸收信号进行拟合, 得到的残差整体小于 0.06 (图 4). 图 5 为对 CS₂ 四条吸收谱线在不同压力下的积分吸光度进行线性拟合的结果, 线性相关系数分别为 0.98768 (2180.54844 cm⁻¹), 0.99859 (2180.55578 cm⁻¹), 0.99716 (2180.65676 cm⁻¹), 0.99736 (2180.69443 cm⁻¹). 根据 (3) 式得到了温度为 296 K 条件下四条 CS₂ 的谱线线强参数 (2180.54844 cm⁻¹, 2180.55578 cm⁻¹, 2180.65676 cm⁻¹, 2180.69443 cm⁻¹), 记录在表 1 中.

空气中的 CS₂ 浓度大约在 ppb 量级, 结合 (4) 式, 在实际测量中自展宽对光谱信号线宽所起的作用可以忽略不计, 因此本文主要对 CS₂ 的空气展宽系数进行了测量. 实验中, 首先用高纯氮气 (≥99.999%) 多次冲洗气体吸收池, 随后用空气稀释至一个大气压, 使得 CS₂ 的体积分数只占到 1%, 再对吸收池进行抽气得到 CS₂ 的混合气体吸收光谱 (图 6). 对吸收光谱信号选用标准 Voigt 线性函数进行拟合, 计算得到对应压力下洛伦兹展宽半峰全宽值, 由 (5) 式可知在室温温度 (296 K), 对不同压力下的洛伦兹展宽值进行线性拟合即可获得空

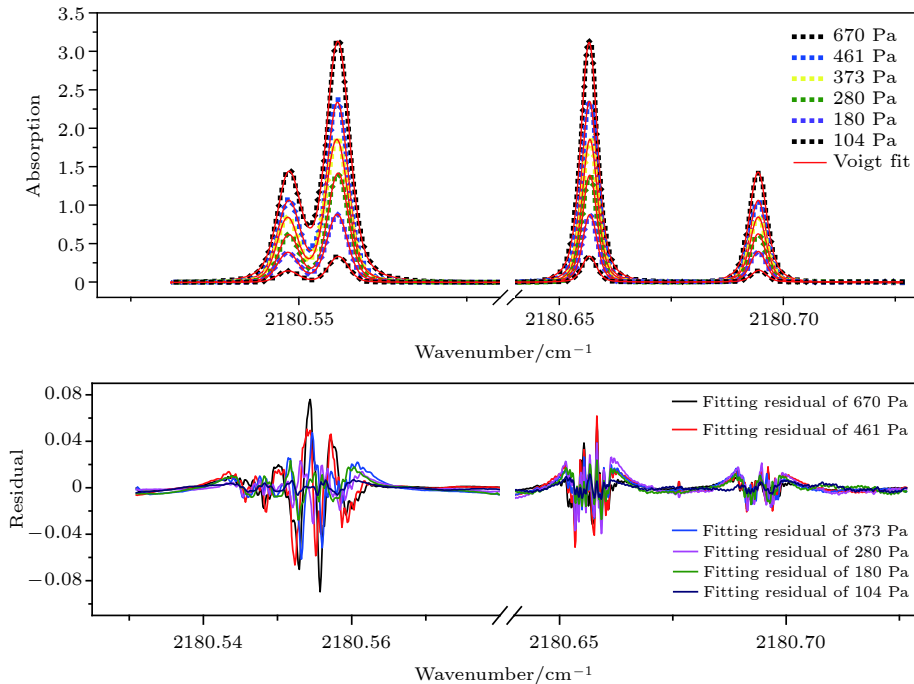


图 4 2180.65676, 2180.69443, 2180.54844 和 2180.55578 cm⁻¹ 处 CS₂ Voigt 线性拟合结果及残差

Fig. 4. Voigt fitted line and residual of the CS₂ spectrum at 2180.65676, 2180.69443, 2180.54844, and 2180.55578 cm⁻¹, respectively.

表 1 计算得到线强值、不确定度以及空气展宽值和不确定度

Table 1. The calculated spectroscopic parameters including line-strengths, air broadening coefficients, and the corresponding uncertainty.

ν_0/cm^{-1}	$S(T_0)/\text{cm}\cdot\text{molecule}^{-1}$	Uncertainty/%	Air broadening/ $\text{cm}^{-1}\cdot\text{atm}^{-1}$	Uncertainty/%
2180.54844	9.19×10^{-22}	1.792	0.087	0.336
2180.55578	1.97×10^{-21}	4.055	0.092	3.384
2180.65676	2.24×10^{-21}	4.537	0.103	7.098
2180.69443	1.11×10^{-21}	2.232	0.086	14.687

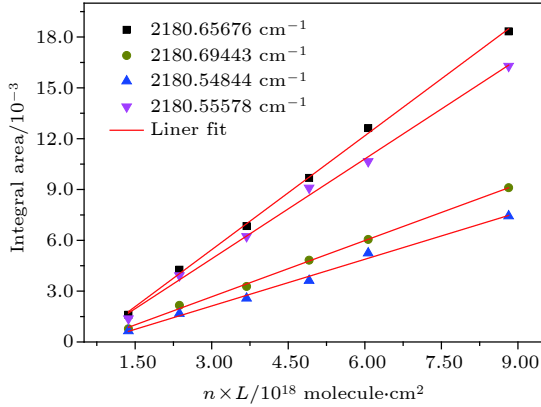

 图 5 2180.65676, 2180.69443, 2180.54844 和 2180.55578 cm^{-1} 处 CS_2 线强线性拟合结果

 Fig. 5. The linear fitted results of line-strength of the CS_2 at 2180.65676, 2180.69443, 2180.54844, and 2180.55578 cm^{-1} .

气展宽系数值 (图 7).

为了进一步验证谱线线强与空气展宽系数等光谱参数测量的准确性, 本文将对四条谱线对应线强以及空气展宽系数的不确定度进行计算. 由于

(3) 式、(5) 式中各变量是相互独立的, 线强、空气展宽的不确定度可分别表示为^[20]

$$\Delta S = \left[\left(\frac{\partial S}{\partial A} \right)^2 \Delta^2 A + \left(\frac{\partial S}{\partial P} \right)^2 \Delta^2 P + \left(\frac{\partial S}{\partial L} \right)^2 \Delta^2 L + \left(\frac{\partial S}{\partial X} \right)^2 \Delta^2 X + \left(\frac{\partial S}{\partial T} \right)^2 \Delta^2 T \right]^{1/2}, \quad (6)$$

$$\Delta \nu_{\text{air}} = \left[\left(\frac{\partial \nu_{\text{air}}}{\partial \nu_L (\text{HWHM})} \right)^2 \Delta^2 \nu_L (\text{HWHM}) + \left(\frac{\partial \nu_{\text{air}}}{\partial P_{\text{air}}} \right)^2 \Delta^2 P_{\text{air}} \right]^{1/2}, \quad (7)$$

其中 ΔA , ΔP , ΔL , ΔX , ΔT , $\nu_L (\text{HWHM})$, ΔP_{air} 分别为 A , P , L , X , T , $\nu_L (\text{HWHM})$, P_{air} 的不确定度. 对于 (5) 式, 积分吸光度的不确定度是光谱数据在拟合过程中的标准差, 由于不同压强

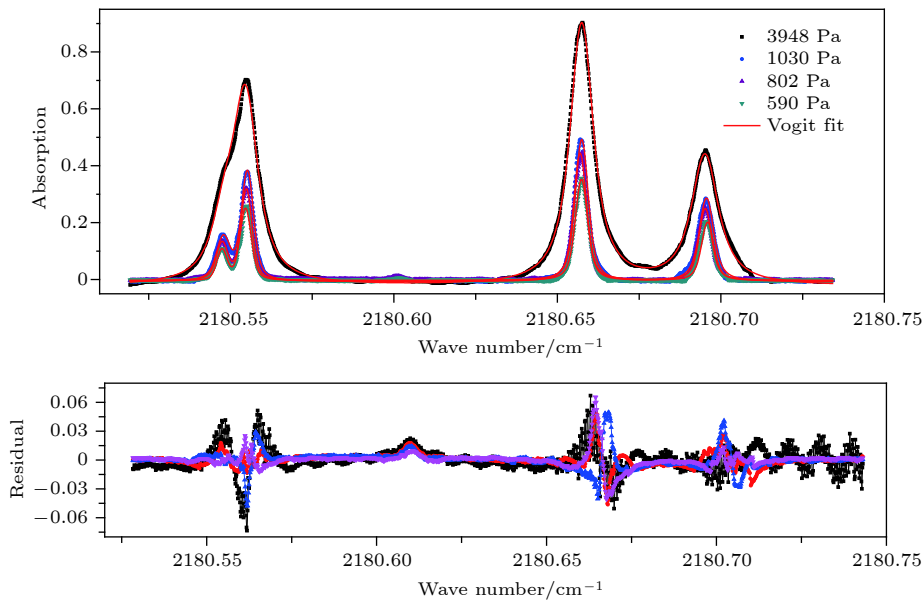

 图 6 2180.65676, 2180.69443, 2180.54844 和 2180.55578 cm^{-1} 处含 1% CS_2 的混合气体的拟合结果

 Fig. 6. The Voigt fitted results of mixed gas containing 1% CS_2 spectrum at 2180.65676, 2180.69443, 2180.54844, and 2180.55578 cm^{-1} , respectively.

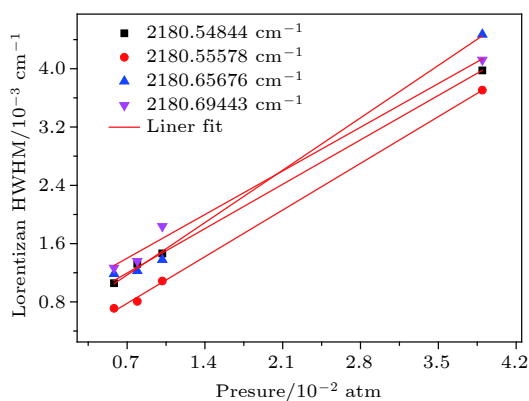


图7 2180.65676, 2180.69443, 2180.54844 和 2180.55578 cm^{-1} 处不同压力的洛伦兹线宽

Fig. 7. Linear fit of Lorentz linewidth for different pressures at 2180.65676, 2180.69443, 2180.54844, and 2180.55578 cm^{-1} , respectively.

下的光谱数据拟合得到的标准差不同, 我们将同一波数不同压力下的标准差值取平均作为积分吸收度的不确定度. 压强的不确定度 ($\Delta P = 0.25\%$) 来自于真空计 (Pfeiffer-CMR361) 的测量误差. 有效光程的不确定度 ($\Delta L = 0.25\%$) 主要来自于对气体吸收池机械测量带来的测量误差 (本文忽略入射光经窗片的折射引起的光程变化); CS_2 的浓度不确定度 ($\Delta X = 0.396\%$) 主要来自于 CS_2 纯气浓度精度 (99.95%)、实验所用的真空泵无法抽至绝对真空以及气体池漏气带来的误差; 温度的不确定度主要来自于温度传感器的测量误差. 前四项偏导数值可以通过 (5) 式求得, 第五项由于没有光谱数据库可以提供参数作为参考, 所以暂且忽略第五项温度测量误差的不确定度. 对于公式 (6), 洛伦兹展宽的不确定度是光谱数据在拟合过程的标准差, 本文将同一波数不同压力下的标准差值取平均作为洛伦兹展宽的不确定度, 压强的不确定度 ($\Delta P = 0.25\%$) 来自于真空计 (Pfeiffer-CMR361) 的测量误差. 所以, 得到 296 K 温度下四条 CS_2 吸收线的线强值、空气展宽值以及对应的不确定度.

5 结论

搭建了一套中红外 CS_2 吸收光谱测量系统, 测量了温度在 296 K 条件下, 光谱范围为 2178.99—2180.79 cm^{-1} 的 CS_2 吸收光谱, 重点研究了中心波长分别为 2180.54844, 2180.55578, 2180.65676, 2180.69443 cm^{-1} 的四条吸收谱线的线强以及空气展宽等光谱参数. 经计算, 线强不确定度在

1.79%—4.54% 内, 空气展宽的不确定度在 0.34%—14.69% 内. 结果显示本次测量的 CS_2 四条谱线的光谱参数的可靠性较高, 可以作为免标定 CS_2 红外光谱探测的基础光谱参数, 这对今后环境监测及工业等领域中 CS_2 气体的精确测量具有重要的意义. 此外, 以后我们还将深入开展 2170—2200 cm^{-1} 内其他 CS_2 吸收光谱的研究, 完善包括吸收谱线中心波长、线强、空气展宽系数以及自展宽系数的测量.

参考文献

- [1] Wang B, Sivret E C, Parcsi G, Stuetz R M 2015 *Talanta* **137** 71
- [2] Du Z, Li J, Cao X, Gao H, Ma Y 2017 *Sens. Actu. B: Chem.* **247** 384
- [3] Kilo S, Zonnur N, Uter W, Göen T, Drexler H 2015 *Ann. Occup. Hyg.* **59** 972
- [4] Wang L, Zhang Y, Zhou X, Zhang Z 2018 *Appl. Opt.* **57** 21
- [5] Kamboures M A, Blake D R, Cooper D M, Newcomb R L, Barker M, Larson J K, Rowland F S 2005 *PANS* **102** 15762
- [6] Rochette P, Jackson M, Aubourg C 1992 *Rev. Geophys.* **30** 209
- [7] Chen X 2018 *Ph. D. Dissertation* (Hefei: University of Science and Technology of China) (in Chinese) [陈祥 2018 博士学位论文 (合肥: 中国科学技术大学)]
- [8] Waclawek J P, Moser H, Lendl B 2016 *Opt. Express* **24** 6559
- [9] Jia H, Zhao W, Cai T, Chen W, Zhang W, Gao X 2009 *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer.* **110** 347
- [10] Buchholz B, Böse N, Ebert V 2014 *Appl. Phys. B* **116** 883
- [11] Nwaboh J A, Werhahn O, Ortwein P, Schiel D, Ebert V 2012 *Meas. Sci. Technol.* **24** 015202
- [12] Sehnert S S, Jiang L, Burdick J F, Risby T H 2002 *Biomarkers* **7** 174
- [13] Blanquet G, Daoust L, Walrand J, Bredohl H, Dubois I, Fayt A 2006 *J. Mol. Struct.* **780** 171
- [14] Sirgy M J, Grzeskowiak S, Rahtz D 2007 *Soc. Indic. Res.* **80** 343
- [15] Wei M 2017 *Ph. D. Dissertation* (Hefei: University of Science and Technology of China) (in Chinese) [魏敏 2017 博士学位论文 (合肥: 中国科学技术大学)]
- [16] Faist J, Capasso F, Sivco D L, Sirtori C, Hutchinson A L, Cho A Y 1994 *Science* **264** 553
- [17] Chin M, Davis D D 1993 *Global Biogeochem. Cy.* **7** 321
- [18] Zumkehr A, Hilton T W, Whelan M, Smith S, Kuai L, Worden J, Campbell J E 2018 *Atmos. Environ.* **183** 11
- [19] Sharpe S W, Johnson T J, Sams R L, Chu P M, Rhoderick G C, Johnson P A 2004 *Appl. Spectrosc.* **58** 1452
- [20] Nie W, Kan R F, Xu Z Y, Yao L, Xia H H, Peng Y Q, Zhang B Q, He Y B 2017 *Acta Phys. Sin.* **66** 204204 (in Chinese) [聂伟, 阚瑞峰, 许振宇, 姚路, 夏辉辉, 彭于权, 张步强, 何亚柏 2017 物理学报 **66** 204204]
- [21] Nie W, Kan R F, Xu Z Y, Yang C G, Chen B, Xia H H, Wei M, Chen X, Yao L, Li H, Fan X L, Hu J Y 2017 *Acta Phys. Sin.* **66** 054207 (in Chinese) [聂伟, 阚瑞峰, 许振宇, 杨晨光, 陈兵, 夏辉辉, 魏敏, 陈祥, 姚路, 李杭, 范雪丽, 胡佳屹 2017 物理学报 **66** 054207]

Measurement of middle infrared spectroscopic parameters of carbon disulfide based on tunable diode laser absorption spectroscopy*

Guan Lin-Qiang¹⁾²⁾ Deng Hao¹⁾²⁾ Yao Lu¹⁾ Nie Wei¹⁾²⁾ Xu Zhen-Yu¹⁾
 Li Xiang¹⁾²⁾ Zang Yi-Peng¹⁾²⁾ Hu Mai¹⁾²⁾ Fan Xue-Li¹⁾
 Yang Chen-Guang^{1)†} Kan Rui-Feng^{1)3)‡}

1) (*Key Laboratory of Environmental Optics and Technology, Anhui Institute of Optics and Fine Mechanics,*

Hefei Institute of Physical Science, China Academy of Sciences, Hefei 230031, China)

2) (*University of Science and Technology of China, Hefei 230026, China)*

3) (*Changchun Institute of Optics, Fine Mechanics and Physics, Chinese Academy of Sciences, Changchun 130000, China)*

(Received 5 December 2018; revised manuscript received 22 January 2019)

Abstract

Carbon disulfide (CS_2) is a toxic volatile sulfur compound with flammability and harmfulness, which can seriously harm the human health and threaten the industrial production safety. Therefore, it is of high importance for monitoring CS_2 concentration in the air. Tunable diode laser absorption spectroscopy is very suitable for the detection of trace gas for it possesses high sensitivity and fast response. And the precise knowledge of spectroscopic parameters is essential for deducing the CS_2 concentration. However, primary database including HITRAN and GEISA lacks spectroscopic parameters of CS_2 . Thus, to address this issue, a measurement system of absorption spectrum is built for determining spectroscopic parameters by using a quantum cascade laser with narrow linewidth and high output power operating near 4.6 μm as a light source. In this paper, direct absorption spectroscopy is used to measure the CS_2 absorption spectra under different sample pressures and the environment temperature is controlled at 296 K, which is adjusted by an air conditioner. We intensively study the absorption spectra of CS_2 in a range between 2178.99 and 2180.79 cm^{-1} . According to the relevant reports and the need of actual measurement, four absorption lines are mainly measured in a range of 2180.5–2180.74 cm^{-1} . Combining with the multiple linear regression algorithm based on the nonlinear least-square method and Beer-Lambert law, the integrated area and Lorentz line width of measured CS_2 absorption spectrum can be determined. Then the spectroscopic parameters including absorption line intensity and air broadening coefficient are precisely obtained by linearly fitting the integrated areas and Lorentz line widths of CS_2 absorption spectra at different pressures. Moreover, nitrous oxide (N_2O) absorption spectrum with high spectral resolution is measured to calibrate the central position of carbon disulfide absorption line according to its known line position extracted from HITRAN database and the results obtained by etalon. The calculated results show that the uncertainty of line intensity and air broadening coefficient are less than 5% and 15%, respectively. It demonstrates that the measured spectroscopic parameters of four absorption lines for this study can be recorded in the database of HITRAN, which is very important for trace gas sensing of CS_2 . In the future, we will further improve the system for measuring CS_2 absorption line parameters to fill in the gaps in their spectral parameters in HITRAN and GEISA databases.

Keywords: carbon disulfide (CS_2), quantum cascade laser, tunable diode laser absorption spectroscopy, spectroscopic parameters

PACS: 42.62.Fi, 33.20.Ea, 42.55.Px

DOI: 10.7498/aps.68.20182140

* Project supported by the National Key Research and Development Program of China (Grant No. 2016YFC0201100).

† Corresponding author. E-mail: cgyang@aiofm.ac.cn

‡ Corresponding author. E-mail: kanruiheng@aiofm.ac.cn