

## 2 $\mu\text{m}$ 附近 $\text{CO}_2$ 谱线参数测量及应用

孙明国<sup>1,2</sup>, 马宏亮<sup>1</sup>, 曹振松<sup>1\*</sup>, 刘 强<sup>1</sup>, 王贵师<sup>1,2</sup>, 陈卫东<sup>2,3</sup>, 高晓明<sup>1,2\*</sup>

1. 中国科学院安徽光学精密机械研究所, 中国科学院大气成分与光学重点实验室, 安徽 合肥 230031
2. 中国科学院安徽光学精密机械研究所, 大气物理化学研究室, 安徽 合肥 230031
3. Laboratoire de Physicochimie de l'Atmosphère, Université du Littoral Côte d'Opale, 189A, Av. Maurice Schumann, 59140 Dunkerque, France

**摘 要** 吸收光谱技术用于痕量气体浓度监测, 特别是在气体分子稳定同位素丰度探测中, 吸收谱线参数的准确性非常重要, 目前普遍使用的 HITRAN 数据库中给出的各项参数具有一定的不确定性。为利用 2.0  $\mu\text{m}$  激光波段进行  $\text{CO}_2$  浓度及其同位素丰度探测, 需要对该波段的  $\text{CO}_2$  吸收谱线参数进行校准, 采用窄线宽分布反馈式二极管激光器作为光源, 结合自行搭建的谱线参数测量系统, 采集了 2.0  $\mu\text{m}$  波段 10 条  $\text{CO}_2$  吸收谱线, 获得了各谱线的位置、强度、自加宽系数和  $\text{N}_2$  加宽系数, 并与 HITRAN2012 数据库中相应的数据进行对比发现两者之间吻合较好,  $\text{CO}_2$  谱线强度和自加宽系数相对偏差均小于 2%。实测实验室大气的  $\text{CO}_2$  浓度为 440 ppm,  $^{13}\text{CO}_2$  的丰度值  $\delta$  为 -9‰。测量结果为该波段应用于  $\text{CO}_2$  浓度及  $^{13}\text{CO}_2$  同位素丰度的实时在线探测提供了重要参考依据。

**关键词** 激光吸收光谱; 谱线参数测量; 同位素丰度

**中图分类号:** P427.1 **文献标识码:** A **DOI:** 10.3964/j.issn.1000-0593(2014)11-2881-06

### 引 言

随着经济的发展及工业化程度的提高, 大气中  $\text{CO}_2$  的含量较工业化初期增加了近 25%, 浓度由原来的 280 ppmv 增加至约 380 ppmv, 成为大气中首要的温室气体; 据预测, 至本世纪末, 大气中  $\text{CO}_2$  浓度若增加一倍引起的地表温度升高将给地球气候系统带来灾难性的冲击<sup>[1]</sup>。通过建立星载遥感仪器及地基探测仪器相结合的立体探测网络系统来监测大气中  $\text{CO}_2$  浓度随地域及时间的变化, 是当前对自然界中  $\text{CO}_2$  循环进行研究的主要手段。另外, 通过对  $\text{CO}_2$  分子同位素丰度的研究, 可以用来监测火山的活动<sup>[2]</sup>, 还可用于人体胃肠道疾病的诊断<sup>[3]</sup>。

$\text{CO}_2$  分子的近红外光谱是振转跃迁形成的, 该波段处有良好的半导体光源, 适宜于吸收光谱法监测大气中  $\text{CO}_2$  的浓度<sup>[4-6]</sup>及其同位素丰度<sup>[7,8]</sup>。应用吸收光谱技术对  $\text{CO}_2$  气体浓度进行测量时需要精确的光谱参数, 如谱线的强度、谱线加宽系数等, 这些谱线参数的准确性直接影响探测结果的准确度与精确度。在 2.0  $\mu\text{m}$  波段, Valero 等<sup>[9]</sup>对该谱带线强

进行了研究, 实验值相对理论值的误差约为 5%。Arcas 等<sup>[10]</sup>理论计算了  $\text{CO}_2$  的 20012←00001 带内谱线的位置。Miller 等<sup>[11]</sup>实验上测量了该谱带谱线的位置, 并将结果与理论值进行了比较。Toth 等<sup>[12]</sup>理论计算并实验测量了谱线的强度, 线强的不确定度小于 2%, 实验值和理论值之间的相对误差小于 1%, 大量实验和理论数据被用来更新 HITRAN 数据库中 2.0  $\mu\text{m}$  波段的数据。Toth 等<sup>[13,14]</sup>还在压力加宽系数方面做了较细致的工作, 实验测得的自加宽系数及空气加宽系数的不确定度约为 2%。尽管目前 HITRAN 数据库在 2.0  $\mu\text{m}$  附近的光谱参数值已基本满足实测  $\text{CO}_2$  浓度的需要, 但仍需进一步的完善。

在波长 2.0  $\mu\text{m}$  附近, 涵盖了  $^{12}\text{CO}_2$  的 20012←00001 带及  $^{13}\text{CO}_2$  的 20011←00001 带的部分谱线, 是采用吸收光谱法进行  $\text{CO}_2$  同位素丰度探测的谱线可选区域。尽管对于  $\text{CO}_2$  谱线参数的研究已有大量报道, 但对于波数 5003~5011  $\text{cm}^{-1}$  范围内交叉带谱线参数的研究不多, 特别是对该范围内压力加宽系数的研究相对较少。同时考虑到目前普遍使用的 HITRAN 数据库中给出的部分参数还存在一定的误差, 为对该波段内可用于  $\text{CO}_2$  浓度及同位素丰度探测的吸收谱线

收稿日期: 2013-12-14, 修订日期: 2014-05-06

基金项目: 国家自然科学基金项目(41205021, 41175036)资助

作者简介: 孙明国, 1981 年生, 中国科学院安徽光学精密机械研究所博士研究生 e-mail: sunmguo@ahpu.edu.cn

\*通讯联系人 e-mail: xmgao@aiofm.ac.cn; zsciao@aiofm.ac.cn

参数进行校准,采用分布反馈式半导体二极管激光器作为光源,测量了 2.0 μm 处所选 CO<sub>2</sub> 气体的吸收谱线,获得了相应的谱线强度、自加宽系数及 N<sub>2</sub> 加宽系数等谱线参数,并把所得结果与 HITRAN2012 数据库及其他研究结果进行了对比。此外,实测了实验室大气的 CO<sub>2</sub> 浓度及其同位素丰度。

### 1 测量及分析原理

频率为 ν 的单色光通过光程程长为 L 的样品时,其吸收遵循比尔-朗伯定律

$$I_t = I_0 e^{-\alpha(\nu)L} = I_0 e^{-S(T)\phi NL} = I_0 e^{-S(T)\phi PL/kT} \quad (1)$$

其积分吸收可表示为

$$A = \int_{-\infty}^{+\infty} \alpha(\nu)L d\nu = S(T)PL/kT \quad (2)$$

其中 α(ν) 为吸收系数, N 为吸收池内总分子数密度, P 为吸收池内总压力, φ 为吸收谱线的线型函数, S(T) 为温度 T 时的线强, L 是样品的光学路径长度,从而得到线强 S(T) 的计算公式

$$S(T) = AkT/PL \quad (3)$$

通常情况下,吸收谱线的宽度包括洛伦兹加宽和多普勒加宽。洛伦兹加宽半宽度 Δν<sub>L</sub> 可以通过固定多普勒加宽 Δν<sub>D</sub> 拟合吸收谱线得到,多普勒半宽度为

$$\Delta\nu_D = 3.58117 \times 10^{-7} \nu_{0,i} \sqrt{T/M} \quad (4)$$

式中 M 为吸收气体的分子量, T 为测量时的温度。分子的压力加宽半宽度(自加宽、N<sub>2</sub> 加宽和空气加宽)要通过纯气体及纯气体加外加宽气体的测量和计算得到,他们与洛伦兹半宽度 Δν<sub>L</sub> 及气压 P 的关系为

$$\Delta\nu_L = \Delta\nu_{\text{foreign}} + \Delta\nu_{\text{self}} = \gamma_{\text{foreign}} P_{\text{foreign}} + \gamma_{\text{self}} P_{\text{self}} \quad (5)$$

式中 P<sub>self</sub> 和 P<sub>foreign</sub> 为所测气体自身的分压强和外加宽气体的压强, γ<sub>foreign</sub> 和 γ<sub>self</sub> 分别为温度 T 时的外加宽气体的加宽系数和自加宽系数,它们与温度的关系为

$$\gamma(T) = \gamma(T_0)(T_0/T)^n \quad (6)$$

其中 T<sub>0</sub> 为参考温度, n 为温度依赖指数。

同位素的 δ 值定义,

$$\delta = \left( \frac{R_{\text{Sa}}}{R_{\text{Sd}}} - 1 \right) \times 1000\% \quad (7)$$

式中 R<sub>Sa</sub> 为待测样品的同位素比值, R<sub>Sd</sub> 为标准物质的同位素比值,碳同位素国际分析标准为 PDB(Pee Dee Belemnite),其绝对碳同位素比值 R<sub>Sd</sub> = <sup>13</sup>C/<sup>12</sup>C = 11 237.2 × 10<sup>-6</sup>。在直接吸收光谱法中,

$$R_{\text{Sa}} = \frac{{}^{13}\text{C}}{{}^{12}\text{C}} = \frac{A_{13} \cdot S_{12}}{A_{12} \cdot S_{13}} \quad (8)$$

其中 A<sub>13</sub> 和 S<sub>13</sub> 为 <sup>13</sup>CO<sub>2</sub> 的积分吸收与线强, A<sub>12</sub> 和 S<sub>12</sub> 为 <sup>12</sup>CO<sub>2</sub> 的积分吸收与线强。

### 2 实验部分

实验装置如图 1 所示。采用连续可调谐分布反馈式(DFB)二极管激光器作为光源,光源的中心波长为 1.998 μm,典型输出功率为 2.0 mW。激光器的输出波长由 LDC-

3724B 温度电流控制器(ILX Lightwave)控制。激光器注入电流变化可以通过外部的信号发生器控制,实验中选用了锯齿波信号,扫描频率为 4 Hz,扫描电压为 ±1.5 V。激光器的调谐范围为 5 003.18~5 011.20 cm<sup>-1</sup>。激光光束利用 1×2 光束分束器分成 2 束,其中 90% 一束经光纤准直透镜后穿过样品池,后经透镜汇聚到探测器(Thorlabs PDA10DT),输出的电信号经数据采集卡结合自编的 Labview 程序采集作后续处理。10% 一路接入到一标准具中,用于激光波长的校准。测量吸收线位置及实际大气 CO<sub>2</sub> 浓度和同位素丰度时,采用了光程为 100 m 的 Herriott 型(Aerodyne, AMAC-100)光学多通池,线强及压力加宽系数的测量采用了光程为 30.0 cm 的玻璃吸收池。压力由油规结合真空压力计控制。

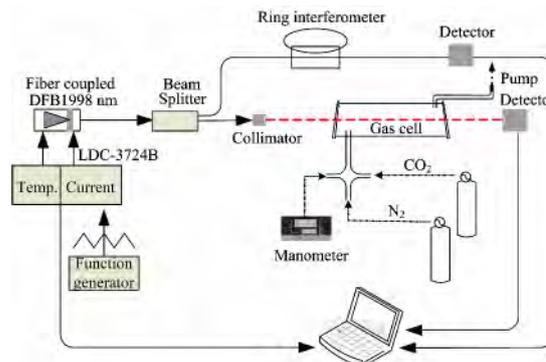


Fig 1 Schematic diagram of the experimental setup

### 3 结果与讨论

#### 3.1 谱线的吸收位置

实验中,先将吸收池抽至 1.6 × 10<sup>-3</sup> Pa 的极低压力,然后往池中充入纯度为 99.99% 的 CO<sub>2</sub> 气体,反复多次,以除去吸收池内的杂质气体。为了使探测器探测到的光功率信号能归一化,在吸收池抽至极低压力时,测量记录一组本底数据。最后,再往吸收池内冲入 100 Pa 的高纯 CO<sub>2</sub> 气体,测量记录 CO<sub>2</sub> 的吸收信号。激光控制器的中心电流设置在 70 mA,锯齿波的扫描电压为 ±1.5 V。每隔 1 °C 的(激光器的温度可操作范围 10~42 °C)扫描一条谱线,每条谱线数据平均 100 次。在激光器可调谐范围内共扫描到 10 条 <sup>12</sup>CO<sub>2</sub> 吸收谱线,7 条 <sup>13</sup>CO<sub>2</sub> 吸收谱线。光谱合成后得到吸收谱如图 2 所

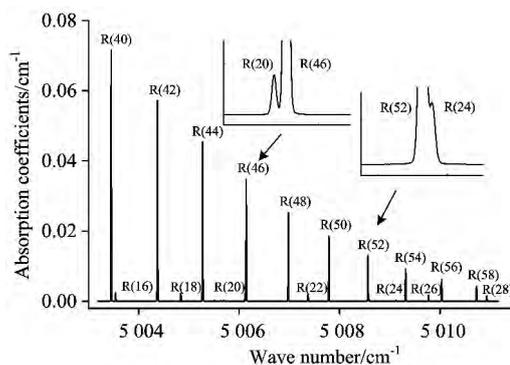


Fig 2 Absorption spectrum of CO<sub>2</sub> at 5 003.18~5 011.20 cm<sup>-1</sup> at the pressure of 100 Pa

示。与 HITRAN2012 数据库值相比，实验测得的谱线位置误差约为  $\pm 0.01 \text{ cm}^{-1}$ 。

### 3.2 吸收谱线强度 S

为了避免吸收过大给数据处理带来不确定性，同时满足压力计处于最佳读数区间的要求，30 cm 程长的吸收池被用来测量  $\text{CO}_2$  分子吸收谱线的线强和加宽系数。吸收池被反复抽至极低真空  $2.5 \times 10^{-4} \text{ Pa}$  净化后，充入一定压力的高纯  $\text{CO}_2$  气体，放置一段时间使气体压力充分稳定后开始测量。在室温 300 K 下，记录了 1.25~11.56 kPa 间 10 组不同压强的  $\text{CO}_2$  气体吸收光谱。图 3 给出了不同压力下位于  $5\,006.978\,702 \text{ cm}^{-1}$  处的吸收信号。

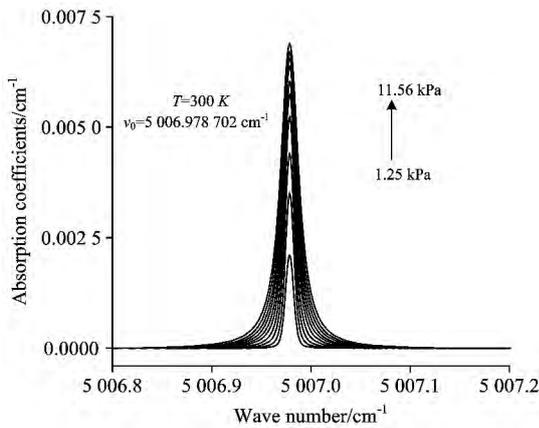


Fig 3 Absorption signals of  $\text{CO}_2$  at  $5\,006.978\,702 \text{ cm}^{-1}$  in the pressure range of 1.42~11.56 kPa,  $T=300 \text{ K}$

在光谱拟合过程中，把 300 K 下的信号的多普勒半宽度固定为由式(4)得到的数值，然后采用 Voigt 线型对所得光谱数据进行拟合得到积分吸收面积和谱线的宽度，并由此分别计算出谱线的强度和加宽系数。图 4 给出了室温 300 K 时，11.56 kPa 的  $\text{CO}_2$  在  $5\,006.978\,702 \text{ cm}^{-1}$  处的吸收光谱，Voigt 线型拟合谱及对应的拟合残差。

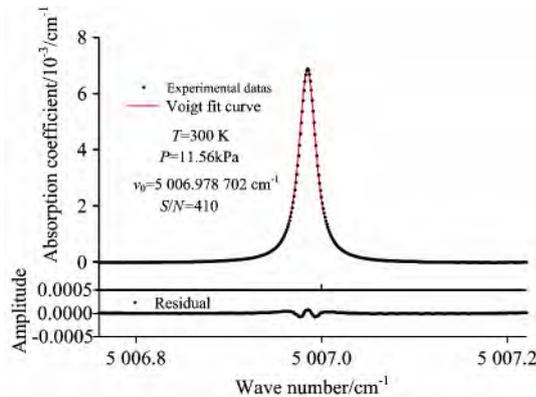


Fig 4 Voigt fitting and residual of the  $\text{CO}_2$  spectrum at  $5\,006.978\,702 \text{ cm}^{-1}$

谱线线强由式(2)通过对各积分吸收和相应压强间的线性拟合所得斜率确定，如图 5(a)所示。图 5(b)对比了测量线强值与数据库值。实验中所测得的各谱线在 300 K 下的线强

汇总在表 1 中，表中同时列出了 HITRAN2012 数据库中给出的对应数据及与实验测量数据间的偏差。

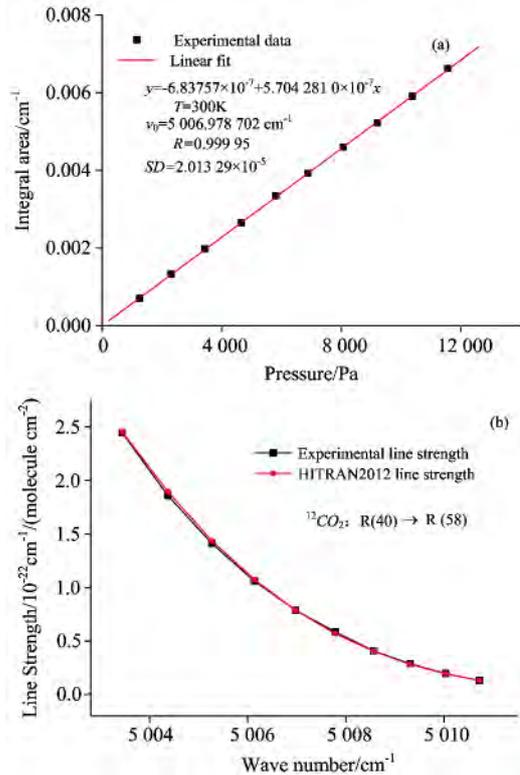


Fig 5 Line strength measurement for the  $\text{CO}_2$  transitions at  $T=300 \text{ K}$

(a): Intensity values at  $5\,006.978\,702 \text{ cm}^{-1}$  as a function of pressure; (b): Comparison between experimental and HITRAN2012 strength values

由表 1 及图 5(b)中可以看出，实验测量值与数据库中给出的数值吻合较好，大部分偏差位于 2% 以内。偏差产生的原因除数据库自身存在的不确定性外，还来自于光谱基线扣除的不确定度，室温的微小波动，压力计的准确性以及实验系统中的电子噪声影响等。

### 3.3 自加宽系数 $\gamma_{\text{self}}$ 及 $\text{N}_2$ 加宽系数 $\gamma_{\text{N}_2}$

经 Voigt 线型拟合不同压力的纯  $\text{CO}_2$  吸收谱线得到其碰撞(洛伦兹)加宽半宽度即谱线的自加宽，然后线性拟合谱线的自加宽与压力间的关系，拟合直线的斜率即为谱线在 300 K 时的自加宽系数，如图 6(a)所示。为了与 HITRAN 数据库值进行比较，采用(6)式将 300 K 时测得的自加宽系数换算至 296 K 的值。对于式中的温度依赖指数  $n$ ，钢球模型计算<sup>[15]</sup>的典型值为 0.5，Radu 等<sup>[16]</sup>实验测量的  $5\,010.034\,711 \text{ cm}^{-1}$  处的  $R(56)$  吸收线的值为 0.48。因而， $n$  取 0.5 用于不同温度的自加宽系数换算是合适的。图 6(b)对测量的自加宽系数数值与数据库值进行了比较。表 1 中给出了所测得的各谱线在 300 K 下的自加宽系数，并与 HITRAN 数据库中的结果进行了对比。

为了得到所选谱线的  $\text{N}_2$  加宽系数，首先测量得到  $6.6 \times 10^3 \text{ Pa}$  的高纯  $\text{CO}_2$  气体吸收谱，然后往吸收池中注入 1.8

$\times 10^3$  Pa 的  $N_2$ ，采集数据。依次进行，共获得 6 组不同  $N_2$  压力下的吸收谱数据。每组数据经 Voigt 线型拟合得到其压力加宽的半宽度，去除自加宽半宽度后得到其  $N_2$  加宽半宽度，根

据(5)式通过对  $N_2$  加宽半宽度和对应压力间的线性拟合所得斜率确定其  $N_2$  加宽系数  $\gamma_{N_2}$ ，所得结果列于表 1 中。表 1 中同时列出了 Corsi 等<sup>[17]</sup>测得的部分谱线的  $N_2$  加宽系数值。

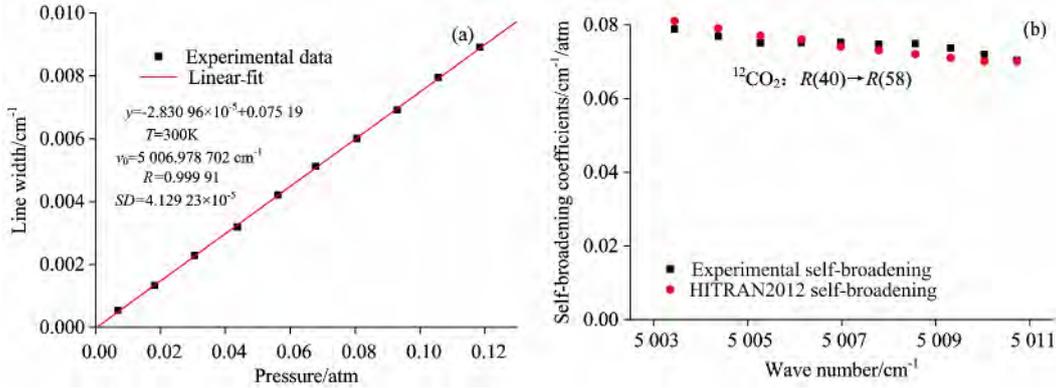


Fig 6 Self-broadening coefficient measurement for the CO<sub>2</sub> transition

- (a): Collisional HWHM versus CO<sub>2</sub> pressure at 5 006. 978 702 cm<sup>-1</sup>, T=300 K;
- (b): Comparison between experimental and HITRAN self-broadening coefficients at 296 K

Table 1 Comparison of line strength, self-broadening coefficients between measurements and HITRAN database at 300 and 296 K respectively; N<sub>2</sub>-broadening coefficients are also listed at 300 K

N	M(S)	H(S)	$\sigma$ (S)	M( $\gamma_{self}$ )	H( $\gamma_{self}$ )	$\sigma$ ( $\gamma_{self}$ )	M( $\gamma_{N_2}$ )	$\gamma_{N_2}$ <sup>[18]</sup>
R(40)	$2.444 \times 10^{-22}$	$2.454 \times 10^{-22}$	-0.408	0.0796	0.081	-1.724	0.0704	0.0696
R(42)	$1.856 \times 10^{-22}$	$1.893 \times 10^{-22}$	-1.955	0.0776	0.079	-1.772	0.0703	
R(44)	$1.409 \times 10^{-22}$	$1.435 \times 10^{-22}$	-1.811	0.0759	0.077	-1.428	0.0699	0.0687
R(46)	$1.057 \times 10^{-22}$	$1.071 \times 10^{-22}$	-1.307	0.0756	0.076	-0.526	0.0698	0.0688
R(48)	$7.869 \times 10^{-23}$	$7.856 \times 10^{-23}$	0.165	0.0756	0.074	2.162	0.0697	0.0696
R(50)	$5.833 \times 10^{-23}$	$5.670 \times 10^{-23}$	2.875	0.0746	0.073	2.191	0.0693	
R(52)	$4.070 \times 10^{-23}$	$4.025 \times 10^{-23}$	1.118	0.0734	0.072	1.944	0.0687	
R(54)	$2.864 \times 10^{-23}$	$2.811 \times 10^{-23}$	1.885	0.0724	0.071	1.972	0.0678	
R(56)	$1.957 \times 10^{-23}$	$1.933 \times 10^{-23}$	1.242	0.0712	0.070	1.714	0.0663	
R(58)	$1.296 \times 10^{-23}$	$1.300 \times 10^{-23}$	-0.308	0.0708	0.070	1.143	0.0638	

Note: S(cm<sup>-1</sup> · (molecule · cm<sup>-2</sup>)<sup>-1</sup>): line strength;  $\sigma$ : (M-H)/H%;  $\gamma_{self}$ (cm<sup>-1</sup> · atm<sup>-1</sup>): self-broadening coefficient;  $\gamma_{N_2}$ (cm<sup>-1</sup> · atm<sup>-1</sup>): N<sub>2</sub>-broadening coefficient; M: measured data; H: HITRAN2012 data

通过对比可以看出，CO<sub>2</sub> 自加宽系数的测量值与数据库值的偏差较小。这些偏差的产生除 3.2 中所述的原因外，空气中 CO<sub>2</sub> 的含量对线宽测量会有一定的影响，尽管在测量过程中尽量缩短光源及探测器与吸收池间的距离以便减少池外光程。

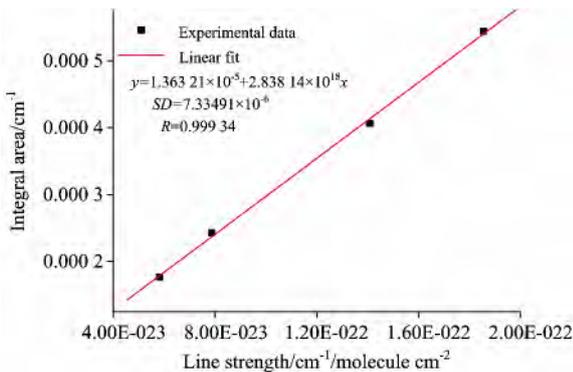


Fig 7 Integral area versus line strength

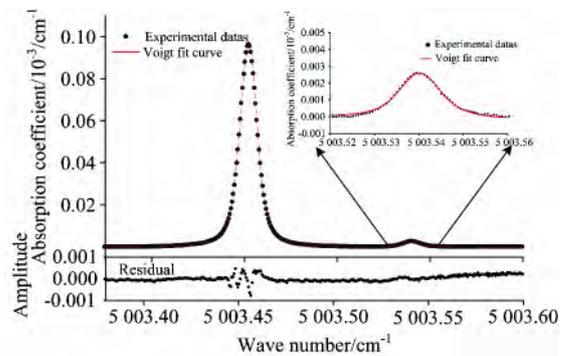


Fig 8 Voigt fitting and residual of the CO<sub>2</sub> spectrums at 5 003. 445 152 and 5 003. 541 749 cm<sup>-1</sup>

### 3.4 实测大气中 CO<sub>2</sub> 浓度及<sup>13</sup>CO<sub>2</sub> 同位素丰度

在程长为 100 m 的多通池中冲入  $2.7 \times 10^3$  Pa 的实验室大气，待稳定后，室温 300 K 下，采集了 CO<sub>2</sub> 的 R(42), R(44), R(48)和 R(50)四条不受其他谱线干扰的吸收线。由

Voigt 线型拟合得谱线的积分吸收, 式(2)线性拟合积分吸收与线强的关系, 如图 7 所示。利用拟合得到的斜率值计算实验室内大气中 CO<sub>2</sub> 的浓度为 440 ppm。与室外大气 CO<sub>2</sub> 浓度相比, 测量值明显偏高, 这主要是由于实验室的封闭所造成的。

吸收光谱法用于大气分子稳定同位素测量时, 同位素吸收线的选取非常重要。一般要求同一元素的不同同位素吸收线具有适当的间隔, 谱线之间及与其他分子谱线不重叠, 并且具有相近的低态能级的两条谱线要处于激光器一次调谐扫描范围内, 以把温度对测量结果的影响降至最低。按照以上标准, 选取了<sup>12</sup>CO<sub>2</sub> 的 R(40)(5 003. 445 152 cm<sup>-1</sup>)和<sup>13</sup>CO<sub>2</sub> 的 R(16)(5 003. 541 749 cm<sup>-1</sup>)吸收线对, 室温 300 K 下采集了 50 Torr 的实验室大气中 CO<sub>2</sub> 的这两条吸收谱线, Voigt

线型拟合如图 8 所示。利用式(7)计算得实际大气中 δ(<sup>13</sup>CO<sub>2</sub>) 的值为 -9‰, 与 Matthias Cuntz 报道<sup>[18]</sup>的结果相近。

## 4 结 论

采用 2.0 μm 波段分布反馈式二极管激光器作为光源, 测量了激光器调谐范围内 CO<sub>2</sub> 的 10 条吸收谱线的位置、线强、自加宽系数及 N<sub>2</sub> 加宽系数。测量结果与 HITRAN2012 数据库的结果吻合较好。实际测量实验室内 CO<sub>2</sub> 的浓度为 440 ppm, 大气中 δ(<sup>13</sup>CO<sub>2</sub>) 的值为 -9‰。这些测量结果为利用该波段进行 CO<sub>2</sub> 浓度及<sup>13</sup>CO<sub>2</sub> 同位素丰度的实时在线探测提供了可靠的依据。

## References

- [1] Regalia J L, Zeninari V, Parvitte B, et al. *J. Quant. Spectrosc. Rad. Transfer*, 2006, 101: 325.
- [2] Castrillo A, Casa G, Van Burgel M, et al. *Optics Express*, 2004, 12: 6515.
- [3] Andreev S N, Mironchuk E S, Nikolaev I V, et al. *Appl. Phys. B*, 2011, 104: 73.
- [4] Dufour E, Breon F M. *Appl. Opt.*, 2003, 42: 3595.
- [5] Tolton B T, Plouffe D. *Appl. Opt.*, 2001, 40: 1305.
- [6] Durry G, Amarouche N, Zeninari V, et al. *Spectrochim. Acta A*, 2004, 60: 3371.
- [7] Tanaka K, Tonolura K. *Appl. Phys. B*, 2011, 105: 463.
- [8] Mironchuk E S, Nikolaev I V, Ochkin V N, et al. *Quant. Electronics*, 2009, 39: 388.
- [9] Valero F P J, Suarez C B, Boese R W. *J. Quant. Spectrosc. Rad. Transfer*, 1980, 23: 337.
- [10] Arcas P, Arie E, Cuisenier M, et al. *J. Phys.*, 1983, 61: 857.
- [11] Miller C E, Brown L R. *J. Mol. Spectrosc.*, 2004, 228: 329.
- [12] Toth R A, Brown L R, Miller C E, et al. *J. Mol. Spectrosc.*, 2006, 239: 221.
- [13] Toth R A, Brown L R, Miller C E, et al. *J. Mol. Spectrosc.*, 2006, 239: 243.
- [14] Toth R A, Miller C E, Malathy V, et al. *J. Mol. Spectrosc.*, 2007, 133.
- [15] Brownsword R A, Salh J S, Smith Ian W M. *J. Chem. Soc. Faraday Trans.*, 1995, 91: 191.
- [16] Mihalcea R M, Baer D S, Hanson R K. *Appl. Opt.*, 1998, 37: 8341.
- [17] Corsi C, Amato F D, De Rosa M, et al. *Eur. Phys. J. D*, 1999, 6: 327.
- [18] Matthias Cuntz. *Nature*, 2011, 477: 547.

# Measurement and Application of CO<sub>2</sub> Spectroscopic Parameters near 2.0 μm

SUN Ming-guo<sup>1, 2</sup>, MA Hong-liang<sup>1</sup>, CAO Zhen-song<sup>1\*</sup>, LIU Qiang<sup>1</sup>, WANG Gui-shi<sup>1, 2</sup>, CHEN Wei-dong<sup>2, 3</sup>, GAO Xiao-ming<sup>1, 2\*</sup>

1. Key Laboratory of Atmospheric Composition and Optical Radiation, Chinese Academy of Sciences, Hefei 230031, China
2. Laboratory of Atmospheric Physico-Chemistry, Anhui Institute of Optics & Fine Mechanics, Chinese Academy of Sciences, Hefei 230031, China
3. Laboratoire de Physicochimie de l'Atmosphère, Université du Littoral Côte d'Opale, 189A, Av. Maurice Schumann, 59140 Dunkerque, France

**Abstract** The accuracy of absorption spectral parameters is very important for the trace gas measurement based on absorption spectroscopy techniques, especially for the isotopic abundance measurement of gas molecules. For some of the applications, spectral parameters listed in HITRAN database were used to retrieve the trace gas concentration. However, these parameters have uncertainty, in order to validate spectroscopic parameters near 2.0 μm of CO<sub>2</sub> lines, which are to be used in detecting the

CO<sub>2</sub> concentration and isotopic abundance, spectra of those lines were recorded at room temperature using a distributed feed-back (DFB) diode laser. The recorded absorption spectra were fitted to Voigt profile. Line position, intensity, self-broadening coefficient and N<sub>2</sub>-broadening coefficient were deduced from those data. The results show a good consistency in comparison with those listed in HITRAN2012 database. The discrepancy of most line intensities and self-broadening coefficients are less than 2%. The CO<sub>2</sub> concentration and  $\delta(^{13}\text{CO}_2)$  in real atmosphere inside laboratory are 440 ppm and -9‰ respectively. These results provide a reliable basis for real time and on line detecting the CO<sub>2</sub> concentration and  $\delta(^{13}\text{CO}_2)$  in the wavelength range.

**Keywords** Tunable diode laser absorption spectroscopy; Measurement of absorption parameters; Isotope abundance

(Received Dec. 14, 2013; accepted May 5, 2014)

\* Corresponding authors

欢迎投稿

欢迎订阅

欢迎刊登广告

## 《光谱学与光谱分析》2015年征订启事

国内邮发代码: 82-68

国外发行代码: M905

《光谱学与光谱分析》1981年创刊,国内统一刊号:CN 11-2200/O4,国际标准刊号:ISSN 1000-0593, CODEN 码:GYGFED,国内外公开发刊,大16开本,292页,月刊;是中国科协主管,中国光学学会主办,钢铁研究总院、中国科学院物理研究所、北京大学、清华大学共同承办的学术性刊物。北京大学出版社出版,每期售价50.00元,全年600元。刊登主要内容:激光光谱测量、红外、拉曼、紫外、可见光谱、发射光谱、吸收光谱、X射线荧光光谱、激光显微光谱、光谱化学分析、国内外光谱化学分析领域内的最新研究成果、开创性研究论文、学科发展前沿和最新进展、综合评述、研究简报、问题讨论、书刊评述。

《光谱学与光谱分析》适用于冶金、地质、机械、环境保护、国防、天文、医药、农林、化学化工、商检等各个领域的科学研究单位、高等院校、制造厂家、从事光谱学与光谱分析的研究人员、高校有关专业的师生、管理干部。

《光谱学与光谱分析》为我国首批自然科学核心期刊,中国科协优秀科技期刊,中国科协择优支持基础性、高科技学术期刊,中国科技论文统计源刊,“中国科学引文数据库”,“中国物理文摘”,“中国学术期刊文摘”,同时被国内外的CSCD,SCI,AA,CA,Ei,PJK,MEDLINE,Scopus等文献机构收录。根据国家科技部信息研究所发布信息,中国科技期刊物理类影响因子及引文量《光谱学与光谱分析》都居前几位。欢迎国内外厂商在《光谱学与光谱分析》发布广告(广告经营许可证:京海工商广字第8094号)。

《光谱学与光谱分析》的主编为高松院士。

欢迎新老客户到全国各地邮局订阅,若有漏订者可直接与《光谱学与光谱分析》期刊社联系。

联系地址:北京市海淀区学院南路76号(南院),《光谱学与光谱分析》期刊社 邮政编码:100081

联系电话:010-62181070,62182998

电子信箱:chnghxygpx@vip.sina.com;修改稿专用邮箱:gp2008@vip.sina.com

网 址: <http://www.gpxygpfx.com>