

# 基于近红外胶体量子点阵列和光谱重构算法 检测多种化学物质的方法研究

王宿慧, 张旭, 孙栳坤, 杨杰, 郭腾霄\*, 丁学全\*

国民核生化灾害防护国家重点实验室, 北京 102205

**摘要** 在众多化学物质检测技术手段中, 红外检测技术由于具有非破坏性、灵敏度高、检测速度快、准确性好等特点, 广泛应用于化工、生物医学、食品安全等领域。量子点光谱仪是使用量子点代替光栅作为分光器件, 结合阵列探测器及光谱重构算法实现光谱检测的新型微型光谱仪, 具有体积小、成本低等优点。为了进一步提升现有量子点光谱仪和量子点器件检测化学物质的普适性, 为微小型近红外分光器件研制提供有效技术途径, 以危险化学品乙醇、化学战剂模拟剂甲基膦酸二甲酯、二氯甲烷为目标物, 通过将多种量子点材料与紫外固化胶混合后沉积在 RGB 点阵模块并固化, 制备了发射光谱波段为 900~1 600 nm 的近红外胶体量子点阵列。采用经验模态分解方法提取输入光谱的高频信号以减小随机噪声干扰, 并基于最小二乘法建立了相应光谱重构算法。实验结果表明, 近红外胶体量子点阵列制备方法简单, 成本低、稳定性较好。具有 144 条光谱通道的近红外胶体量子点阵列实现的重构光谱分辨率可以达到 4.861 nm, 与标准吸收光谱相比, 其特征峰最小偏差仅为 0.043%。因此, 使用近红外胶体量子点阵列结合光谱重构算法可以实现气态、液态目标物的光谱重构和检测识别。未来, 通过增加阵列数量可有效提升重构光谱的光谱分辨率; 通过增加所选量子点材料, 还可以实现从紫外到红外波段范围内的光谱检测; 通过优化检测光路和重构算法参数提高目标物检测信噪比。

**关键词** 近红外光谱; 量子点; 危险化学品; 化学战剂; 重构算法

**中图分类号:** O433.1 **文献标识码:** A **DOI:** 10.3964/j.issn.1000-0593(2021)11-3370-07

## 引言

危险化学品是生产建设中的常用物资材料, 作为化工大国, 我国源于危险化学品的事故时有发生, 造成人民生命财产的重大损失。由于化学武器和化学战剂难以消除, 且始终是人类共同的重大潜在威胁。危险化学品和化学战剂的检测是处理化学危害和实施防护的首要环节, 具有重要和迫切的现实需求和实际意义。当前, 在众多化学物质检测技术手段中, 红外检测技术由于具有无需预处理、非破坏性、灵敏度高、检测速度快、准确性好等特点, 广泛应用于化工、生物医学、航空航天、食品安全等领域。

量子点(quantum dot, QD)是一种半导体纳米材料。由于其具有量子限域效应, 即量子点的发射峰会随着量子点尺寸的增大而红移。因此可以通过控制量子点的形状、结构和

尺寸来改变量子点的发射和吸收特性。并通过制备分光器件, 结合相应的光谱重构算法实现光谱信息获取。具有快速、准确、结构简单紧凑、光通量大、抗震性能好等优点<sup>[1-4]</sup>。

2015年 Bao 等<sup>[5]</sup>实现了微型胶体量子点光谱仪的制作, 将胶体量子点材料与聚乙烯缩丁醛混合后作为滤波材料, 并使用移液枪将混合物沉积在电荷耦合元件(charge-coupled device, CCD)阵列上, 通过测量每个给定的胶体量子点滤波器的总透射强度, 计算重构原始(入射)光谱。2019年 Yang 等<sup>[6]</sup>通过在探测器上直接生长金属纳米线并作为分光器件, 由于光子能量吸收只发生在相应带隙的纳米线上, 从而实现了不同位置纳米线上点的特异性吸收, 研制出了微米级的微型光谱仪, 通过电子探测光电流, 对一系列点和线的响应函数进行预校准, 就可以计算重建入射光信号。2020年 Zhu 等<sup>[7]</sup>通过在光电探测器上沉积钙钛矿量子点, 并结合相应光

收稿日期: 2020-10-20, 修订日期: 2021-02-19

基金项目: 国家重点研发计划项目(2018YFC0809300)资助

作者简介: 王宿慧, 女, 1995年生, 国民核生化灾害防护国家重点实验室硕士研究生 e-mail: 1262286079@qq.com

\* 通讯作者 e-mail: guotengxiao@sklnbpc.cn; dingxuequan@sklnbpc.cn

谱重构算法实现了 250~1 000 nm 波段范围的检测。由于以上微型光谱仪检测波段范围有限,且均为量子点与探测器直接结合,属于被动探测,因此所要求的重构目标光谱必须为类似于太阳光、LED 光、白炽灯光等输入光信号,在黑暗条件下化学物质的检测信号较弱。Yan 等<sup>[8]</sup>将 3 种不同发射波长的 PbSe 量子点沉积在单个 LED 光源上,使用匹配气体吸收光谱的方法。虽然可以实现乙炔、甲烷及氮气在矿井中的检测,但是其适用环境较为单一,检测目标较为局限,普适性有待进一步提高。为了解决以上问题,研究中将发射峰不同的近红外胶体硫化铅量子点(PbS)、硫化铅/硫化镉(PbS/CdS)量子点材料与紫外固化胶混合后沉积在 RGB 点阵屏上,制备成近红外胶体量子点阵列,通过计算机编程实现对阵列的发光和显示控制,结合光谱重构算法实现了 900~1 600 nm 较宽波段范围内,气态乙醇( $C_2H_6O$ )样品、液态化学战剂模拟剂甲基膦酸二甲酯(dimethyl methylphosphonate, DMMP)、二氯甲烷( $CH_2Cl_2$ )样品的分析检测。结果表明,具有 64 条光谱通道的近红外量子点阵列结合光谱重构算法实现了危险化学品  $C_2H_6O$  气体样品的光谱重构,光谱分辨率为 13 nm,重建光谱吸收特征峰与标准光谱信号的偏差为 0.407%。具有 144 条光谱通道近红外量子点阵列结合光谱重构算法实现了 DMMP、 $CH_2Cl_2$  液体样品的光谱重构,光谱分辨率为 4.861 nm,重建光谱吸收特征峰与标准光谱信号的最小偏差仅为 0.043%,完全可以实现多种目标物的检测识别。为复杂环境下危化品泄露事故的应急检测和化学战剂快速检测提供了有效的技术手段和理论支撑。

## 1 实验部分

### 1.1 仪器与试剂

主要仪器为近红外光谱仪(美国 Ocean Optics 公司)。

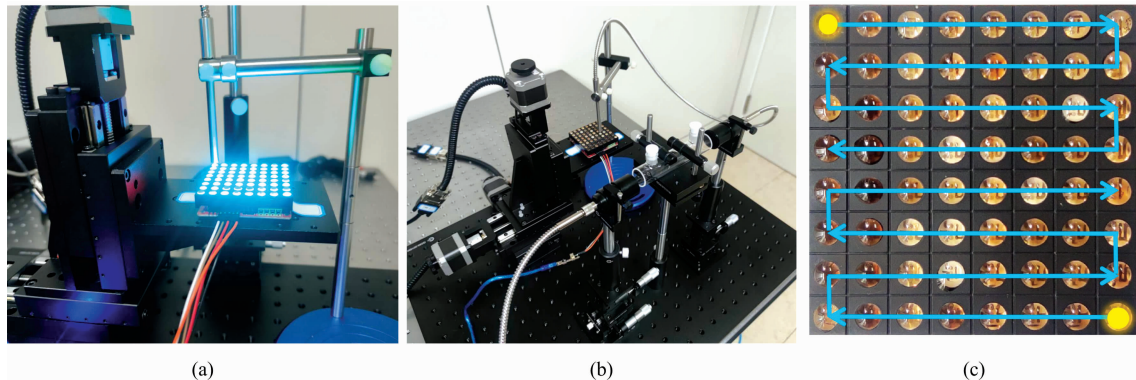


图 1 发射光谱测量系统、目标物检测系统及阵列扫描轨迹

(a): 发射光谱测量系统; (b): 目标物检测系统; (c): 阵列扫描轨迹

Fig. 1 PL spectrum measurement system, target detection system and array scanning track

(a): PL spectrum measurement system; (b): Target detection system; (c): Array scanning track

## 2 结果与讨论

### 2.1 近红外量子点阵列发射光谱特性

PbS 和 PbS/CdS 量子点材料的标称发射峰为  $950 \pm 50$ ,  $1 050 \pm 50$ ,  $1 150 \pm 50$ ,  $1 172 \pm 20$ ,  $1 250 \pm 20$ ,  $1 250 \pm 50$ ,  $1 300 \pm 20$ ,  $1 350 \pm 50$ ,  $1 400 \pm 20$ ,  $1 450 \pm 20$ ,  $1 450 \pm 50$  nm 等,均购自星紫新材料和星烁纳米;紫外固化胶为美国 Norland 公司的 NOA61 型;检测物包括  $C_2H_6O$ (AR), DMMP(AR),  $CH_2Cl_2$ (AR)均购自北京化工厂。

### 1.2 方法

#### 1.2.1 近红外胶体量子点阵列的制备

将溶剂为甲苯的  $50 \text{ mg} \cdot \text{mL}^{-1}$  的 PbS 和 PbS/CdS 胶体量子点溶液(具有不同标准发射峰)分别与紫外固化胶以 1:30, 1:50 和 1:70 的体积比混合,经搅拌和超声处理后制备成均匀的量子点墨水,使用移液枪将  $25 \mu\text{L}$  不同种类胶体量子点墨水依次沉积在 RGB 点阵模块上的各个灯点上,置于紫外灯下照射至完全固化,近红外胶体量子点阵列即制备完毕。

#### 1.2.2 系统构建

构建了用于检测近红外胶体量子点阵列的光致发射光谱(photoluminescence spectroscopy, PL spectrum)测量系统[图 1(a)],该系统主要由电控位移台、支架、光纤、近红外光谱仪以及计算机构成。通过在发射光谱测量系统中加入气室(比色皿)、准直镜、聚焦镜构建了用于检测样品的目标物检测系统[图 1(b)]。该系统的工作原理是,将近红外胶体量子点阵列固定在电控位移台上,将光纤固定于支架上,并对准所测近红外胶体量子点阵列的首个灯点,调节准直镜、聚焦镜的焦距确保系统光通量最大,通过对电控位移台编程,控制量子点阵列相对光纤做 X 和 Y 轴移动,以 S 形轨迹遍历所有近红外胶体量子点阵列中的灯点[图 1(c)],光纤另一端连接近红外光谱仪,每选定阵列中的一个灯点进行一次光谱采集,直到把阵列的全部发射光谱采集完毕。

当近红外胶体量子点阵列的激发光源和基底为 RGB 点阵显示模块时,由于该模块的颜色可通过编程控制,因此需要编写不同程序改变点阵屏显示模块的颜色,测量在不同激发光波长的条件下,近红外胶体量子点阵列的发射光谱,通

过比较光谱发射强度选择最适合激发近红外胶体量子点阵列的激发光波长。RGB 点阵模块用于描述颜色的模式为传统 RGB 色彩模式,即通过红(R)、绿(G)、蓝(B)三个颜色通道的变化及其相互之间的叠加得到不同颜色,本实验选取了 7 种不同叠加方案,当颜色数值为 255 时,发光强度值最大,选取颜色叠加方案如表 1 所示。

表 1 颜色叠加方案  
Table 1 Color overlay scheme

序号	R	G	B	颜色
1	255	0	0	红
2	0	255	0	绿
3	0	0	255	蓝
4	255	255	0	黄
5	0	255	255	青
6	255	0	255	洋红
7	255	255	255	白

实验随机选择了 8 个点,每个点经 7 种不同激发光激发,共 58 条发射光谱[图 2(a)],不同光谱对比如图 2(b)所示,图 2 中不同颜色的线分别对应相应颜色的激发光。

由图 3 可知,当 RGB 点阵显示模块颜色不同时,近红外胶体量子点阵列中相同灯点的发射光谱峰形一致,但强度不同,当 RGB 点阵显示模块为青色时,量子点经激发后的发光强度最大,白色次之,红色最弱。因此设置点阵模块 RGB 值为 0 255 255,采集近红外胶体量子点阵列的发射光谱[图 3(a)],为了验证近红外胶体量子点阵列的稳定性,在 RGB 点阵显示模块点亮后的 6h 内测量了 3 次近红外胶体量子点阵列的发射光谱,柱状图中共有 64 个矩形,矩形的高度对应光谱通道 3 次测量的光强平均值,矩形的中心位置对应光谱通道发射光谱的特征峰,纵向误差棒表示每条光谱通道光强差异,横向误差棒表示每条光谱通道发射光谱特征峰位差异[图 3(b)]。

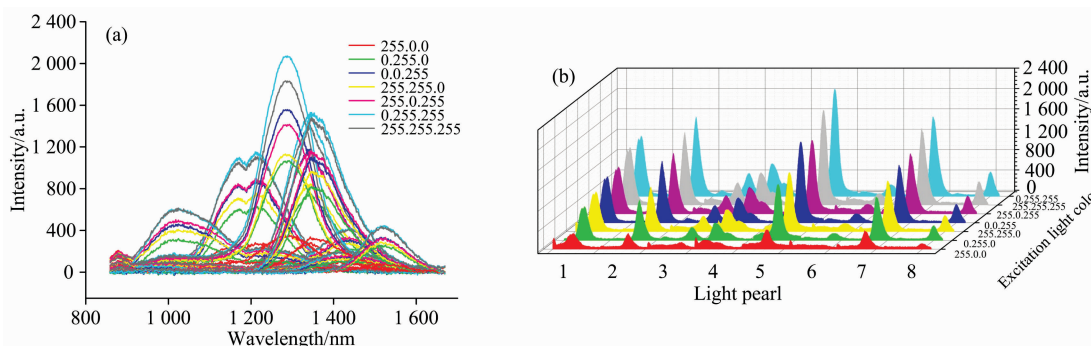


图 2 不同颜色激发光下近红外胶体量子点阵列发射光谱

(a): 原始光谱; (b): 不同选择点光谱对比

Fig. 2 Emission spectra of near-infrared colloidal quantum dot arrays under different excitation light color

(a): The original spectra; (b): Spectra of different selection points

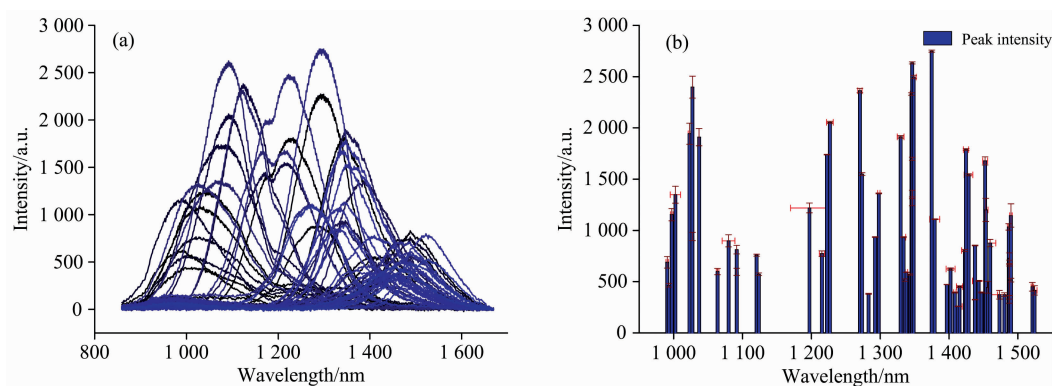


图 3 近红外胶体量子点阵列发射光谱及稳定性对比

(a): 近红外胶体量子点阵列发射光谱; (b): 近红外胶体量子点阵列发射光谱稳定性对比

Fig. 3 PL spectra of NIR colloidal QD array and comparison of stability

(a): PL spectra of NIR colloidal QD array; (b): Comparison of PL spectra stability

由图 3(b)中的误差棒可知,所测量的 3 次发射光谱峰位和强度基本吻合,光谱一致性较高,器件稳定性高。且光谱测量全程通过编程控制位移台移动,选择需要测量的量子点灯点,实时性较好。

## 2.2 目标物检测应用研究

### 2.2.1 近红外胶体量子点阵列光谱信号处理

为了提高标准光谱测量稳定性和一致性,采用经验模式分解方法(empirical mode decomposition, EMD)提取高频信

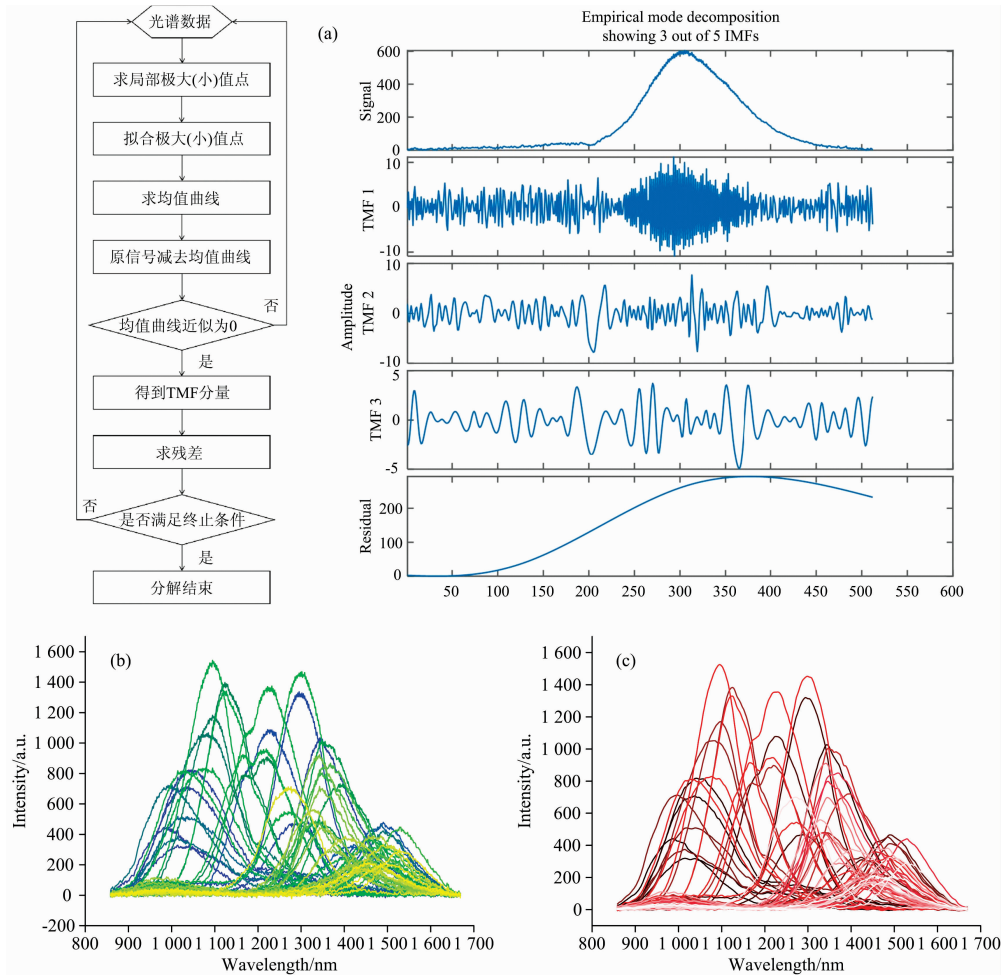


图 4 EMD 分解及近红外胶体量子点阵列发射光谱

(a): EMD 分解流程; (b): 原始近红外胶体量子点阵列; (c): EMD 分解后的近红外胶体量子点阵列

Fig. 4 EMD decomposition and the PL spectra of NIR colloidal QD array

(a): The process of EMD decomposition; (b): The original PL spectra of NIR colloidal QD array;

(c): The PL spectra of NIR colloidal QD array after EMD decomposition

号以减小随机噪声干扰。即将信号分解为一系列表征不同时间尺度的波动[本征模函数(intrinsic mode function, IMF)]和趋势项(残差),选择带有特征信息的波动并经过进一步处理,再与趋势项进行重组[图 4(a)]。所选原始光谱与 EMD 预处理后的近红外胶体量子点阵列发射光谱如图 4(b, c)所示。

由图 4(b, c)可知,与原始光谱相比,经 EMD 预处理后的近红外胶体量子点阵列发射光谱的随机高频噪声剔除效果良好,标准光谱的随机性大大降低,一致性得到提高。

### 2.2.2 光谱重构算法研究

将制备完成的近红外胶体量子点阵列放置在扫描平台上,随着扫描系统的推进,检测器将采集近红外胶体量子点阵列每条光谱通道的发射光谱  $P_i(\lambda)$  (其中  $\lambda$  为波长,  $i=1, 2, \dots, n_F$ , 为光源编号),当在含有样品室的目标物检测系统的光路中放入目标物后,再次开启扫描模式,采集被样品气体调制后的近红外胶体量子点阵列的发射光谱  $I_i(\lambda)$ ,若将待测目标气体的光谱记为  $\phi(\lambda)$ ,则可以列出方程组,见式(1)

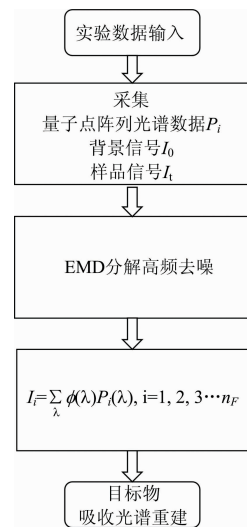


图 5 目标光谱重构流程图

Fig. 5 The flow diagram of reconstruction of target spectrum



$$I_i(\lambda) = \sum_{\lambda} \phi(\lambda) P_i(\lambda), i = 1, 2, \dots, n_F \quad (1)$$

假设有  $n_{\lambda}$  个离散变量  $\lambda$ , 当  $n_{\lambda} \leq n_F$  时方程组有解, 当  $n_{\lambda} = n_F$  时, 方程组有唯一解, 当  $n_{\lambda} > n_F$  时方程组无解, 但可以拟合出近似解, 即可通过解方程得到  $\phi(\lambda)$ , 实现目标光谱重建。在重构算法流程设计的基础上, 基于 MATLAB 编写了光谱重构程序。目标光谱重建的具体流程如图 5 所示。

### 2.2.3 目标物检测

光路调节好后, 保持其他光学元件固定, 将气室取出, 将红绿蓝色彩模式(RGB)点阵模块点亮, 采集近红外量子点阵列发射光谱。将气室固定, 采集近红外量子点阵列透过空气室时的光谱。使用移液枪向气室中注射 5 微升 97% 的乙醇

溶液, 待其挥发后, 采集近红外量子点阵列透过乙醇蒸汽样品后的光谱。经验模态分解法(EMD)分解后的发射光谱、透过气室光谱、透过样品光谱图分别如图 6(a, b, c)所示。

由图 6(c)可以看出, 经过  $C_2H_6O$  蒸汽的近红外胶体量子点阵列的部分发射光谱某一特定波长处出现了强度下降的现象, 其为  $C_2H_6O$  的吸收现象。通过最小二乘法 and 光谱重构算法, 拟合得到背景光谱和含样品光谱, 再将背景光谱和含样品光谱带入吸收光谱的计算公式中得到  $C_2H_6O$  的吸收光谱。拟合得到的背景光谱和含样品光谱、 $C_2H_6O$  重建吸收光谱和使用光谱仪测得的  $C_2H_6O$  的标准反射光谱分别如图 7(a, b, c)所示。

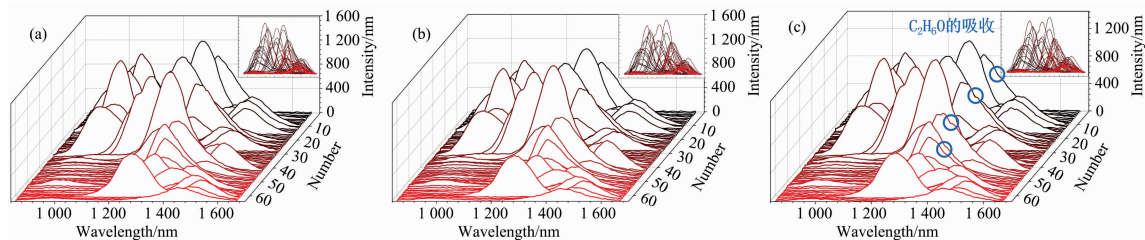


图 6 近红外胶体量子点阵列发射光谱、经过气室光谱及经过  $C_2H_6O$  光谱

(a): 阵列发射光谱; (b): 经过气室光谱; (c): 经过  $C_2H_6O$  蒸气光谱

Fig. 6 PL spectra of NIR colloidal QD array, PL spectra after passing through the chamber and PL spectra after absorbed by the ethanol gas

(a): PL spectra of NIR colloidal QD array; (b): PL spectra after passing through the chamber; (c): PL spectra after absorbed by the ethanol gas

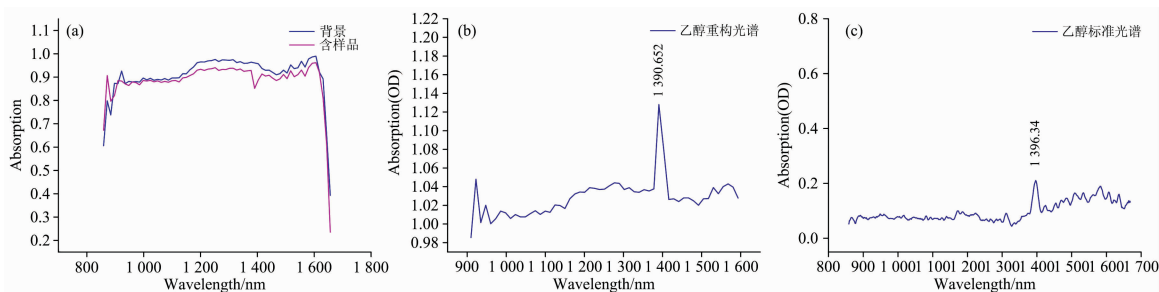


图 7 重建光谱及标准光谱

(a): 背景重建光谱及含  $C_2H_6O$  蒸气重建光谱; (b): 重建  $C_2H_6O$  蒸气吸收光谱; (c):  $C_2H_6O$  蒸气标准吸收光谱

Fig. 7 Reconstruction spectrum and standard spectrum

(a): Reconstruction spectrum with ethanol gas and background; (b): Reconstruction absorption spectrum of ethanol gas;

(c): Standard spectrum of ethanol gas

由图 7 可知, 64 条光谱通道近红外量子点阵列结合光谱重构算法实现了微量乙醇气体样品的光谱重构, 光谱分辨率为 13 nm, 重构的乙醇气体吸收光谱在 1390.652 nm 处有特征吸收峰, 使用近红外光谱仪测得的乙醇气体反射光谱的特征峰为 1396.34 nm。重构目标物的吸收光谱与标准近红外光谱仪测量的吸收光谱吸收特征峰偏差 0.407%, 基本可以实现目标物的识别。

为了进一步验证近红外胶体量子点阵列与光谱重构算法检测液体样品的可行性, 制备了  $12 \times 12$  面阵规模的具有 144 条光谱通道的近红外胶体量子点阵列, 将气室更换为微量比色皿, 采用同样的方法分别检测了战剂沙林、芥子气的模拟剂 DMMP 和  $CH_2Cl_2$ 。发射光谱、背景光谱、样品经 EMD 分

解后的光谱图分别如图 8(a, b, c)(DMMP), (d, e, f) ( $CH_2Cl_2$ ) 所示。重建光谱及标准光谱分别如图 9(a, b, c) (DMMP), (d, e, f) ( $CH_2Cl_2$ ) 所示。

由图 9(a—f) 分别可知, 144 条光谱通道近红外量子点阵列结合光谱重构算法实现了微量 DMMP 和  $CH_2Cl_2$  样品的的光谱重构, 光谱分辨率为 4.861 nm, 重构的 DMMP 吸收光谱在 1170 和 1385.08 nm 处有特征吸收峰, 使用近红外光谱仪测得的 DMMP 吸收光谱的特征峰为 1171.826 和 1384.487 nm, 偏差分别为 0.156% 和 0.043%。重构的  $CH_2Cl_2$  吸收光谱在 1153.02, 1368.1 和 1419.04 nm 处有特征吸收峰, 使用近红外光谱仪测得的  $CH_2Cl_2$  吸收光谱的特征峰为 1154.234, 1367.153 和 1417.513 nm, 偏差分别

为 0.105%, 0.069% 和 0.108%, 完全可以实现目标物的识别, 因此使用近红外胶体量子点阵列作为分光器件检测多种固态、液态化学物质是可行有效的。后续实验将通过增加有

效光谱通道提高重构光谱分辨率, 通过提高近红外胶体量子点阵列发光强度提高目标物检测信噪比。

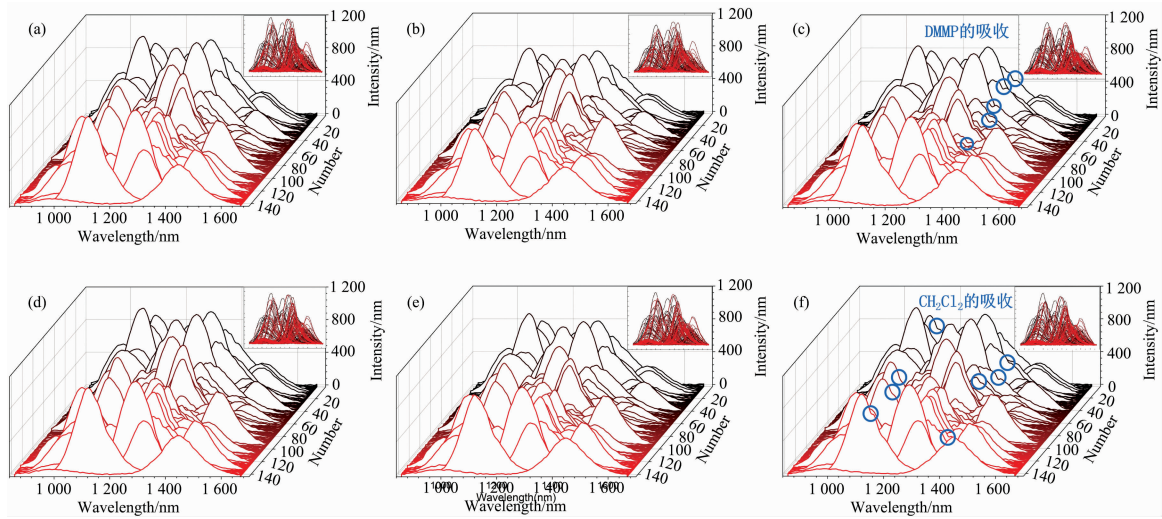


图 8 近红外胶体量子点阵列发射光谱、镜过气室光谱及经过样品光谱

(a): 阵列发射光谱; (b): 经过气室光谱; (c): 经过 DMMP 光谱; (d): 阵列发射光谱; (e): 经过气室光谱; (f): 经过 CH<sub>2</sub>Cl<sub>2</sub> 光谱

Fig. 8 PL spectra of NIR colloidal QD array, PL spectra after passing through the chamber and PL spectra after absorbed by the sample

(a): PL spectra of NIR colloidal QD array; (b): PL spectra after passing through the chamber;  
(c): PL spectra after absorbed by the DMMP; (d): PL spectra of NIR colloidal QD array;  
(e): PL spectra after passing through the chamber; (f): PL spectra after absorbed by the CH<sub>2</sub>Cl<sub>2</sub>

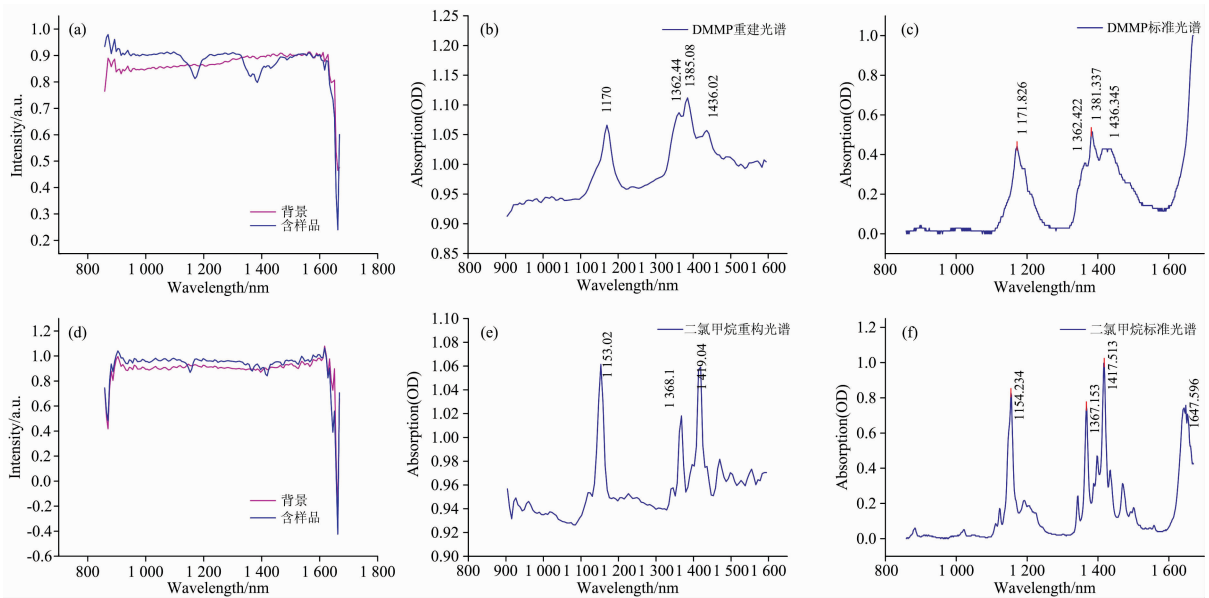


图 9 重建光谱及标准光谱

(a): 背景重建光谱及含 DMMP 重建光谱; (b): 重建 DMMP 吸收光谱; (c): DMMP 标准吸收光谱;  
(d): 背景重建光谱及含 CH<sub>2</sub>Cl<sub>2</sub> 重建光谱; (e): 重建 CH<sub>2</sub>Cl<sub>2</sub> 吸收光谱; (f): CH<sub>2</sub>Cl<sub>2</sub> 标准吸收光谱

Fig. 9 Reconstruction spectrum and standard spectrum

(a): Reconstruction spectrum with DMMP and background; (b): Reconstruction absorption spectrum of DMMP;  
(c): Standard spectrum of DMMP; (d): Reconstruction spectrum with CH<sub>2</sub>Cl<sub>2</sub> and background;  
(e): Reconstruction absorption spectrum of CH<sub>2</sub>Cl<sub>2</sub>; (f): Standard spectrum of CH<sub>2</sub>Cl<sub>2</sub>

### 3 结 论

以危险化学品  $C_2H_6O$ 、化学战剂沙林、芥子气的模拟剂 DMMP、 $CH_2Cl_2$  为目标物, 制备了近红外胶体量子点阵列, 结合 EMD 分解减小光谱信号的高频随机噪声, 基于最小二乘法建立相应光谱重构算法, 实现了上述目标物的检测识别。结果表明, 具有 64 条光谱通道的近红外胶体量子点阵列结合重构算法实现的重构光谱分辨率为 13 nm, 重构吸收光谱与标准吸收光谱的吸收特征峰偏差为 0.407%。具有 144

条光谱通道的近红外胶体量子点阵列实现的重构光谱分辨率可以达到 4.861 nm, 与标准吸收光谱相比, 其特征峰最小偏差仅为 0.043%, 完全可以实现 900~1 600 nm 波段范围内气体、液体目标物的检测识别。后续研究通过增加阵列数量可有效提升重构光谱的光谱分辨率; 通过增加所选量子点材料, 可以实现从紫外到红外波段范围内的光谱检测; 通过优化检测光路和重构算法参数, 提高目标物检测信噪比。本研究为复杂环境下危化品泄露事故的应急检测和化学战剂快速检测提供了有效的技术手段和理论支撑。

### References

- [1] Zhu X, Bian L, Fu H, et al. *Science & Applications*, 2020, 9(73): 1.
- [2] Saara A, Khan A B. *Clinical Chemistry*, 2016, 62(4): 1.
- [3] Wang M, Chen Y, Feng Y, et al. *Integrated Ferroelectrics*, 2020, 207(1): 166.
- [4] Brandon R, Seng F L, Raktim S, et al. *Nature Photonics*, 2013, 7(9): 746.
- [5] Bao J, Bawendi M. *Nature*, 2015, 2(3): 67.
- [6] Yang Z, Albrow O T, Cui H, et al. *Nano Photonics*, 2019, 9(6): 1017.
- [7] Zhu X X, Bian L H, Fu H, et al. *Light: Science & Applications*, 2020, 9(73): 1.
- [8] Yan L, Zhang Y, Zhang T, et al. *Anal. Chem.*, 2014, 11(86): 11312.

## Methods of Detecting Multiple Chemical Substances Based on Near-Infrared Colloidal Quantum Dot Array and Spectral Reconstruction Algorithm

WANG Su-hui, ZHANG Xu, SUN Zhi-shen, YANG Jie, GUO Teng-xiao\*, DING Xue-quan\*

State Key Laboratory of NBC Protection for Civilian, Beijing 102205, China

**Abstract** Infrared detection technology is widely used in the field of chemical engineering, bio-medicine, food safety, among the many chemical substance detection techniques due to its characteristics such as non-destructiveness, high sensitivity, fast detection speed, and good accuracy. Quantum dot (QD) spectrometer is a new type of micro spectrometer that uses QD instead of grating as a light splitting device and combines array detector with spectral reconstruction algorithm to realize spectrum detection. It has the advantages of small size and low cost. In order to improve the universality of existing QD spectrometers, QD devices for detecting chemical substances, and ultimately provide an effective technical approach for the development of micro-near infrared (NIR) spectroscopy devices. This article used hazardous chemicals Ethanol, simulants of chemical warfare agent sarin, mustard gas, including Dimethyl Methylphosphonate and Dichloromethane as the targets. A NIR colloidal quantum dot (CQD) array with an emission spectrum of 900~1 600 nm was prepared by mixing a variety of QD materials with UV curing glue and deposited on the RGB dot matrix. Extracted the high-frequency signal of the input spectrum and reduced the random noise interference with empirical mode decomposition method, established the corresponding spectrum reconstruction algorithm based on the least square method. The experimental results show that the preparation method of the NIR CQD array is simple, low-cost, and stable. The reconstructed spectral resolution achieved by the NIR CQD array with 144 spectral channels can reach 4.861nm. Compared with the standard absorption spectrum, the minimum deviation of its characteristic peak is only 0.043%. Therefore, detecting and identifying gas and liquid targets can be achieved by combing the NIR CQD arrays with spectral reconstruction algorithms. In the future, the spectral resolution of the reconstructed spectrum can be effectively improved by increasing the number of arrays; Spectral detection from UV to IR can also be achieved by increasing the QD materials selected; Target detection signal-to-noise ratio can be improved by optimizing the optical detection path and the reconstruction algorithm parameters.

**Keywords** Near infrared spectroscopy; Quantum dots; Hazardous chemicals; Chemical warfare agents; Reconstruction algorithms

\* Corresponding authors

(Received Oct. 20, 2020; accepted Feb. 19, 2021)