# 基于火焰发射光谱的转动温度和振动温度的测量

彭志敏 丁艳军\* 翟晓东

(清华大学热能系,电力系统与发电设备控制与仿真国家重点实验室,北京 100084) (2010年12月15日收到;2011年1月19日收到修改稿)

利用光学多通道分析仪(OMA)对酒精和煤油在大气中燃烧时的火焰发射光谱进行了分析. 实验发现上述火焰 发射光谱在 275—600 nm 波段范围内存在多支辐射强度很大的带状分子光谱,其中以 OH 自由基  $A^2 \Sigma^+ \to X^2 \Pi_r$ (300—330 nm), CH 自由基  $A^2 \Delta \to X^2 \Pi$ (410—440 nm)和 C<sub>2</sub> 自由基  $A^3 \Pi_g \to X^3 \Pi_u$ (500—520 nm)电子带系的发射光 谱最为强烈. 实验中采用高分辨率光栅对 OH 自由基  $A^2 \Sigma^+ \to X^2 \Pi_r$ 和 CH 自由基  $A^2 \Delta \to X^2 \Pi$  电子带系发射光谱的 精细结构进行了分析. 与此同时,本文基于分子光谱理论计算了不同转动温度和振动温度条件下 OH 自由基  $A^2 \Sigma^+ \to X^2 \Pi_r$ 和 CH 自由基  $A^2 \Delta \to X^2 \Pi$  电子带系发射光谱的强度分布,同时通过理论计算光谱和实验光谱进行比较 确定了酒精燃烧火焰的转动温度和振动温度.

关键词:火焰发射光谱,谱线强度,转动温度,振动温度 PACS: 47.80.Fg, 47.70.Pq, 33.70.-w

### 1. 引 言

燃烧是一个相当复杂的、剧烈的、发光发热的 化学过程,对燃烧机理和过程的研究有利于燃烧的 控制、污染物的抑制以及燃烧效率的提高,其中燃 烧场温度、组分浓度以及相关参数的测量成为上述 研究的关键技术,同时也是国内外燃烧诊断技术所 关注的热点问题<sup>[1-3]</sup>.随着燃烧科学技术研究的深 入,燃烧过程向着瞬态以及高温方向发展,从而对 燃烧诊断技术提出了更高的要求.近些年来,随着 高性能激光器和光谱测试系统的出现,国内外科研 工作者基于光谱理论提出并建立了多种燃烧光谱 诊断技术,主要包括激光诱导荧光技术、拉曼光谱 技术、吸收光谱技术、发射光谱技术等.由于光谱诊 断技术具有响应速度快、非接触测量以及高灵敏度 等优点,因此在燃烧场温度、组分浓度以及相关参 数测量中得到广泛的应用<sup>[4-9]</sup>.

相对于其他光谱技术而言,发射光谱技术是一 种相对较为传统的光谱技术,其测量方法比较简 单,只需要一台光谱测试仪器即可,在实验中比较 容易实现,同时也是研究高温辐射现象最直接、最 有效的方法.而其他光谱技术一般都需要高性能激 光器等设备,不仅投资大、实验周期长,而且光路复杂、对环境要求也较高.

尽管发射光谱技术在实验中最容易实现,但要 通过实验采集到的发射光谱定量得到燃烧场的温 度和组分浓度等信息还存在着很大的困难,其难点 主要在于:相对于其他光谱技术有目的的、有针对 性的对某种粒子或某个波长的光谱进行研究不同, 发射光谱实验中采集到的光谱是多种粒子、多种跃 迁相互叠加的结果,同时也是温度、组分浓度、测量 光路以及仪器性能等多种因素影响的结果,因此不 能简单地以某个波长的光强来对应某种测量信息, 往往需要通过整个波段的理论计算光谱和实验光 谱进行比较以确定燃烧场的温度、组分浓度等参 数<sup>[10-12]</sup>.另外由于燃烧过程异常复杂,目前对燃烧 过程中各种自由基等粒子的研究也不完善.

自上世纪 90 年代以来,随着计算机科学技术和 分子光谱理论的发展,以 NASA 和 Stanford 大学为 首的科研机构通过理论计算光谱和实验光谱进行 比较,对燃烧、等离子体等高温领域中气体的辐射 特性进行了比较深入地研究<sup>[13-16]</sup>,尤其是在温度测 量方面取得了重要的进展,如 Laux 等通过等离子体 实验获得了 180—780 nm 波段范围内高温空气的发 射光谱,再通过理论计算光谱与实验光谱进行拟合

<sup>†</sup>通讯联系人. E-mail: dyj@tsinghua.edu.cn

<sup>©2011</sup> 中国物理学会 Chinese Physical Society

得到等离子体的转动温度和振动温度在 7500 K 左 右<sup>[13,14]</sup>;Chun 等通过发射光谱技术测量了火箭发 动机尾焰的转动温度和振动温度在 3000 K 左 右<sup>[15]</sup>.尽管发射光谱技术在欧美等发达国家取得了 重要的进展,但目前在国内还处于刚刚起步的状态<sup>[17-22]</sup>,其主要制约因素在于光谱的理论计算方法 和计算程序掌握在少数科研工作者手中,另外国内 所使用的高性能光谱测试系统都依靠进口.

基于上述原因,本文首先通过光学多通道分析 仪(OMA)采集酒精和煤油在大气中燃烧时的火焰 发射光谱,再利用高分辨率光栅对火焰中最常见 的、强度最大的 OH 和 CH 自由基相关电子带系发 射光谱进行研究,同时根据分子光谱理论计算出不 同转动温度、振动温度以及不同仪器展宽条件下 OH 和 CH 自由基相关电子带系的理论计算光谱,最 后通过理论计算光谱和实验光谱进行拟合确定火 焰的转动温度和振动温度.

2. 火焰发射光谱分析

火焰发射光谱采集方案如图 1 所示,实验中根 据需要选取酒精或煤油作为燃料,通过聚焦透镜将 火焰的光线会聚到 OMA 的狭缝处,再通过光栅衍 射作用将不同波长的光线会聚到 ICCD 上,最后通 过计算机读取 ICCD 所记录的光谱数据,同时通过 ICCD 的光谱强度响应系数对光谱数据进行修正,即 可得到火焰发射光谱的强度分布.为了测量火焰不 同位置 Y 处的发射光谱,实验中采用挡板来消除火 焰其他位置处的光谱影响.OMA 的延时时间和曝光 时间均可自由调节,最小延时时间和最短曝光时间 均可达到 1 μs 以下.另外,在实验中通过选取不同 刻线的光栅(300 线/mm 或 1200 线/mm)和调整狭 缝大小(最小可达 10 μm)来改变 OMA 的光谱分辨 率.实验中需要扣除背景光谱以获得高质量的实验



图 1 OMA 采集火焰发射光谱的实验方案

光谱,酒精和煤油在大气中燃烧时的火焰高度约为 35 mm.

图 2 为通过 300 线/mm 光栅采集到的酒精和 煤油在大气中燃烧时的火焰发射光谱(Y = 20 mm, OMA 分辨率约为 1. 20 nm),将图中谱线强度最大 值定义为 1000. 由图 2 可知,在 275—600 nm 波段范 围内存在多支辐射强度很大的带状分子光谱,其中 以 OH 自由基  $A^2 \Sigma^+ \rightarrow X^2 \Pi_r$ (300—330 nm),CH 自 由基  $B^2 \Sigma^- \rightarrow X^2 \Pi$ (380—410 nm)和  $A^2 \Delta \rightarrow X^2 \Pi$ (410—440 nm)以及 C<sub>2</sub>自由基  $A^3 \Pi_g \rightarrow X^3 \Pi_u$ (500— 520 nm)电子带系的发射光谱最为强烈. 另外,酒精 燃烧火焰中 Na 原子的 589.0 和 589.6 nm 谱线也非 常明显.

通过比较图 2(a) 和(b)可知,实验中采集到的 酒精燃烧火焰发射光谱质量很高(图 2(a) 所示), 其中 OH,CH,C<sub>2</sub> 等自由基相关电子带系的发射光 谱非常明显;而由图 2(b)可知,煤油燃烧火焰发射 光谱中 OH,CH,C<sub>2</sub> 等自由基相关电子带系发射光 谱与酒精相似,但由于煤油中含碳量较高,在燃烧 过程中有很多的碳颗粒产生,而这些碳颗粒在高温 下类似于黑体对外产生强烈的辐射作用,其波长主 要集中在可见—近红外波段,碳颗粒的发射光谱对 上述自由基相关电子带系发射光谱的分析带来了 不利的影响.



图 2 酒精和煤油在大气中燃烧时的火焰发射光谱

为得到 OH 自由基  $A^2 \Sigma^* \rightarrow X^2 \Pi$ ,和 CH 自由基  $A^2 \Delta \rightarrow X^2 \Pi$  电子带系发射光谱的精细结构,试验中

采用 1200 线/mm 光栅对其进行分析,当 OMA 的狭 缝宽度调小至 10 µm 时,其光谱分辨率达到 0.3 nm,单次采集的光谱范围约为 30 nm. 实验采集到的 酒精燃烧火焰中 OH 和 CH 自由基相关电子带系的 发射光谱如图 3 所示(煤油燃烧火焰发射光谱具有 相似的特征).由图 3 可知,OH 自由基  $A^2\Sigma^+ \rightarrow X^2\Pi_r$ 和 CH 自由基  $A^2\Delta \rightarrow X^2\Pi$  电子带系发射光谱的强度 分布明显不同,如图 3(a)中  $G_0$ 和  $G_1$ 两个峰值强度 都很大,而图 3(b)中  $G_1$ 峰值强度远小于  $G_0$ 峰值强 度;其次,由于分子结构的差异,与 CH 自由基  $A^2\Delta \rightarrow X^2\Pi$  电子带系发射光谱相比,OH 自由基  $A^2\Sigma^+ \rightarrow$  $X^2\Pi_r$ 电子带系发射光谱相比,OH 自由基  $A^2\Sigma^+$ 



图 3 酒精燃烧火焰中 OH 自由基  $A^2 \Sigma^+ \rightarrow X^2 \Pi_r$  和 CH 自由基  $A^2 \Delta \rightarrow X^2 \Pi$  电子带系发射光谱

3. 分子发射光谱测温原理

在高温环境下,粒子间的高速碰撞不仅使得粒 子的平动自由度被激发,其转动、振动和电子自由 度也被激发,同时由于处于高能级粒子寿命很短, 当其从高能级跃迁到低能级时产生相应频率的发 射光谱.每一种粒子、每一个能级间跃迁都有其特 定标识的发射光谱,因此通过该特定标识的发射光 谱不仅可以证明该粒子的存在,还可以通过其分析 粒子数在能级间的布局情况,进而得到粒子的各自 由度温度(转动、振动和电子温度),这也是分子发 射光谱测温技术的理论依据所在.

分子发射光谱测温原理可以表述为:分子发射 光谱的强度分布是由分子结构本身和各自由度温 度决定的,对于选定的分子而言,分子发射光谱的 强度分布仅由各自由度温度决定,因此通过分析分 子发射光谱的强度分布在理论上可以得到分子的 转动、振动和电子温度.分子发射光谱测温方法为: 通过理论计算光谱和实验光谱进行比较以确定分 子的各自由度温度.

分子中不同能级间的跃迁产生相应频率的光 谱谱线,其谱线强度  $\Gamma_{vT}^{U}$  定义为辐射源每秒所发射 出的能量,其计算公式为<sup>[22-26]</sup>(说明:高能级均采 用单撇"<sup>1</sup>"表示,低能级均采用双撇"<sup>1</sup>"表示;频率 和能量单位均使用 cm<sup>-1</sup>)

$$I_{v'J'}^{v'J'} = N_{v'J'}A_{v'J'}^{v'J'}hcv_{v'J'}^{v'J'}, \qquad (1)$$

式中h为普朗克常数,c为光速,v为振动能级,J为转动能级, $v_{v'T}^{v'T}$ 为既迁波数, $N_{v'T}$ 为高能级分子数, $A_{v'T}^{v'T}$ 为自发发射爱因斯坦跃迁概率, $N_{v'T}$ 和 $A_{v'T}^{v'T}$ 的表达式如下:

$$N_{v'J'} = \frac{N_0 g_e}{Q_e Q_v Q_r} \exp\left(-\frac{E_e}{kT_e}\right) \cdot \exp\left(-\frac{E_v}{kT_v}\right) \\ \times (2J'+1) \cdot \exp\left(-\frac{E_r}{kT_r}\right), \qquad (2)$$

$$A_{\nu'J'}^{\nu'J'} = \frac{64\pi^4}{3h} \frac{S_{J''}^{J'}}{2J'+1} p_{\nu'J'}^{\nu'J'} (v_{\nu'J'}^{\nu'J'})^3, \qquad (3)$$

式中 $N_0$ 为分子总数,k为波尔兹曼常数, $g_e$ 为电子态 简并度, $T_r$ , $T_v$ 和 $T_e$ 分别为转动、振动和电子温度,  $E_r$ , $E_v$ 和 $E_e$ 分别为转动态、振动态和电子态能量,  $Q_r$ , $Q_v$ 和 $Q_e$ 分别为转动态、振动态和电子态配分函 数; $S_{f'}^{J'}$ 为伦敦亨尔因子, $p_{v'J'}^{v'J'}$ 为振转跃迁概率且 $p_{v'J'}^{v'J'}$ =  $\left[\int_{-\pi}^{+\pi} \Psi_{v'J'}(r)R_e(r)\Psi_{v'J''}(r)dr\right]^2$ ,其中 $\Psi_{vJ}(r)$ 为振 转波函数, $R_e(r)$ 为电偶极矩函数.

在上述分析的基础上,通过(1)—(3)式,再根 据相关分子光谱常数即可计算出相关电子带系的 谱线强度及其分布情况.在此需要说明的是:在光 谱测量实验中,由于谱线受到各种展宽因素的影 响,实验所得到光谱谱线在频率坐标上并不是无限 狭窄的,而是具有一定的频率宽度,主要包括自然 展宽、碰撞展宽、多普勒展宽和仪器展宽,其中自然 展宽、碰撞展宽、多普勒展宽是谱线所固有的属性, 而仪器展宽是光谱测试系统所固有的属性.本文实 验所采用的 OMA 最小展宽约为 0.3 nm,远大于其 他类型的展宽,仪器展宽在实验中可通过汞灯或单 色激光器进行拟合确定,在大多数情况下,采用高 斯线型函数拟合具有很高的精度,其表达式如下式 所示<sup>[27]</sup>:

$$G(\lambda) = \frac{2}{\Delta \sqrt{\pi}} \exp\left(-\frac{(\lambda - \lambda_0)^2}{\left(\frac{\Delta}{2}\right)^2}\right), \quad (4)$$

式中, $\lambda$ 为谱线波长, $\lambda_0$ 为谱线中心波长, $\Delta$ 为谱线 强度最大值 1/e 处的宽度.

通过上述分析可以计算出任意转动、振动以 及电子温度在谱线展宽  $\Delta = 0.3$  nm 条件下 OH 自由基  $A^2 \Sigma^+ \rightarrow X^2 \Pi_r$ 和 CH 自由基  $A^2 \Delta \rightarrow X^2 \Pi$ 电 子带系发射光谱的强度分布<sup>[22-27]</sup>,计算结果如 图 4 所示. 由图 4 可知,随着转动温度和振动温度 的升高, OH 自由基  $A^2 \Sigma^+ \rightarrow X^2 \Pi_r$ 和 CH 自由基  $A^2 \Delta \rightarrow X^2 \Pi$ 电子带系发射光谱的强度分布发生明 显的变化.



图 4 OH 自由基 $A^2 \Sigma^+ \rightarrow X^2 \Pi_r$ 和 CH 自由基 $A^2 \Delta \rightarrow X^2 \Pi$ 电子带 系发射光谱强度分布与温度的关系

在图 4(a)中,当将 G<sub>0</sub>峰值强度定义为1000时, G<sub>1</sub>峰值强度随着转动温度和振动温度的升高逐渐 增大,但是当温度超过 3000 K时,G<sub>1</sub>峰值强度与温 度的关系不再敏感;另外,随着温度的升高,低频 (长波)处的光谱强度增大非常明显.与图 4(a)相 比,图 4(b)中 CH 自由基发射光谱强度分布具有相 似的变化特征,但有所不同的是,在图 4(b)中,当转 动温度和振动温度低于 3000 K时,G<sub>1</sub>峰值强度与温 度的关系并不敏感,但随着温度的进一步升高,*G*<sub>1</sub> 峰值强度与温度的关系变的非常敏感;另外,随着 温度的升高,高频(短波)处的光谱强度增大并不 明显.

图 4 中 OH 自由基  $A^2 \Sigma^+ \rightarrow X^2 \Pi_r$ 和 CH 自由基  $A^2 \Delta \rightarrow X^2 \Pi$  电子带系发射光谱强度分布随温度的变 化特征是测量火焰转动温度和振动温度的一个重 要判断依据.由于碳氢燃料燃烧火焰的转动温度和 振动温度一般都在 3000 K 以下,因此利用 OH 自由 基  $A^2 \Sigma^+ \rightarrow X^2 \Pi_r$  电子带系的理论计算光谱和实验光 谱进行拟合确定火焰的转动温度和振动温度具有 较高的精度.在实际测量实验中,当光谱拟合效果 达到最佳时,即可认为理论计算所采用的温度就是 实验测量得到的温度.

由于采用光谱拟合的方法确定酒精燃烧火焰 的转动温度和振动温度,因此引起温度测量误差的 主要原因有:理论计算光谱的准确性、实验光谱的 质量以及数据拟合误差等.考虑到国内外科研工作 者对 OH 自由基  $A^2 \Sigma^+ \to X^2 \Pi_{\mu}$  电子带系发射光谱进 行了众多的研究,因此可以忽略理论计算光谱所带 来的误差,而认为温度测量误差主要是由实验光谱 和数据拟合引起的. OH自由基 $A^2\Sigma^+ \rightarrow X^2\Pi_*$ 电子带 系的理论计算光谱和实验光谱在数据拟合时主要 通过 G1 和 G0 峰的拟合效果确定火焰的转动温度和 振动温度,图 5(a) 给出了  $G_1$  和  $G_0$  峰强度(采用多 点的平均强度)的比值与温度的关系.在数据拟合 过程中,由于实验光谱的非理想特性使得  $(G_1/G_0)_{H \neq a} = (G_1/G_0)_{S \oplus a}$  (定义为 A) 的值不  $(G_1/G_0)_{\text{ssd}}$ 可能为零,因此本文在数据拟合时,当A值小于 2.0% 时即可认为满足实验要求, 而此时温度的测 量误差如图5(b)所示,如在2500K左右时,温度的 测量误差约为 ± 80 K.

#### 4. 火焰转动温度和振动温度测量

在上述内容的基础上,本节通过 OH 自由基  $A^2 \Sigma^+ \rightarrow X^2 \Pi_r$ 和 CH 自由基 $A^2 \Delta \rightarrow X^2 \Pi$ 电子带系的 理论计算光谱和实验光谱进行拟合以确定酒精燃 烧火焰的转动温度和振动温度.图 6 为酒精在大气 中燃烧时火焰中 OH 自由基 $A^2 \Sigma^+ \rightarrow X^2 \Pi_r$ 和 CH 自由 基 $A^2 \Delta \rightarrow X^2 \Pi$ 电子带系的发射光谱(Y = 20mm),其 中黑色曲线为实验采集到的光谱,虚线为理论



图 5 (a)  $G_1$  和  $G_0$  峰强度的比值与温度的关系曲线;(b) OH 自由基  $A^2 \Sigma^+ \rightarrow X^2 \Pi_r$  电子带系发射光谱测量转动温度和振动 温度的误差

计算光谱. 由图 6 可知, OH 自由基  $A^2 \Sigma^+ \rightarrow X^2 \Pi_r$  和 CH 自由基  $A^2 \Delta \rightarrow X^2 \Pi$  电子带系的理论计算光谱与 实验光谱拟合的效果很好, 因此通过其可确定酒精 在大气中燃烧时火焰的转动温度和振动温度在 2500 ± 80 K 左右(Y = 20 mm).



图 6 OH 自由基  $A^2 \Sigma^+ \rightarrow X^2 \Pi_r$ 和 CH 自由基  $A^2 \Delta \rightarrow X^2 \Pi$  电子带 系发射光谱测量酒精燃烧火焰的转动温度和振动温度

为测量酒精燃烧火焰不同位置处的转动温度 和振动温度,将挡板的空隙位置调至 Y = 10 mm 和 30 mm 处,图 7 给出了 Y = 10 mm 和 30 mm 处火焰 中 OH 自由基  $A^2 \Sigma^+ \rightarrow X^2 \Pi_r$  电子带系的发射光 谱, 其中黑色曲线为实验采集到的光谱,虚线为理论计 算光谱. 通过理论计算光谱和实验光谱拟合可得 到,在 Y = 10 mm 处,火焰的转动温度和振动温度约 为 2100 ± 60 K 左右,而在 Y = 30 mm 处约为 2300 ± 70 K. 实验表明:当 Y 值达到 40 mm 时,实验中难以 采集到有效的实验光谱,其主要是因为 OH 自由基 主要存在于燃烧反应区内,而反应区外含量很少.

煤油燃烧火焰转动温度和振动温度的测量方法与酒精相似,本文不再赘述.为验证 OH 自由基



图 7 OH 自由基 $A^2 \Sigma^+ \rightarrow X^2 \Pi_r$ 电子带系发射光谱测量不同位置处火焰的转动温度和振动温度

 $A^2 \Sigma^+ \to X^2 \Pi_r$ 和 CH 自由基  $A^2 \Delta \to X^2 \Pi$  电子带系发 射光谱测量酒精燃烧火焰转动温度和振动温度的 可靠性,本文采用 GASEQ 热力学计算软件计算得到 的酒精在大气中燃烧时最高火焰温度在 2650 K 左 右<sup>[28]</sup>. 另外,有科研工作者采用激光诱导荧光技术 对酒精在大气中燃烧时火焰的转动温度和振动温 度进行了测量并得到与本文相似的结果<sup>[10,11,29,30]</sup>.

#### 5. 结 论

本文利用 OMA 对酒精和煤油在大气中燃烧 时的火焰发射光谱进行了比较全面地分析,实验 结果表明:在酒精和煤油燃烧火焰发射光谱中, OH 自由基  $A^2 \Sigma^+ \rightarrow X^2 \Pi_r$ 和 CH 自由基  $A^2 \Delta \rightarrow X^2 \Pi$ 电子带系的发射光谱非常强烈,但由于煤油中含 碳量较高,燃烧过程中产生的碳颗粒在高温下类 似于黑体对外产生强烈的辐射作用,对 OH,CH 等自由基相关电子带系的发射光谱分析产生不

- [1] Zhang P, Cheng X L 1998 Journal of Solid Rocket Technology 21
   66 (in Chinese) [张 平、程雪玲 1998 固体火箭技术 21 66]
- [2] Hu Z Y, Liu J R, Guan X W, Zhang Z R, Huang M S, Liu J S, Yuan X, Ye X S 2002 *High Power Laser and Particle Beams* 14 702 (in Chinese) [胡志云、刘晶儒、关小伟、张振荣、黄梅生、 刘建胜、袁 孝、叶锡生 2002 强激光与粒子束 14 702]
- [3] Anderson M G, Mcamis R W, Brasier C W 1996 AIAA paper 2613 1
- [4] Bryant R A, Ratner A, Driscoll J F 1999 AIAA paper 0774 1
- [5] Jeong E, Jeung I S, Byrne S O, Houwing A F 2008 J. Propul Power. 24 1258
- [6] Yang S R, Zhao J R, Sung C J 1998 AIAA paper 0727 1
- [7] Konstantin A V, Valery V S, Oleg M S, Victor I F, Vladimir A S, Vladimir V I, Walter C, Michael O 2001 *Aerosp Sci Technol.* 5 347
- [8] Griffiths A D, Houwing A F P 2005 Appl. Opt. 44 6653
- [9] Rieker G B, Jeffries J B, Hanson R K, Gruber M R, Carter C D 2009 Proc. Combust Inst. 32 831
- [10] Boyarshinov B F, Fedorov S Y 2003 Combust Explo Shock 39 243
- [11] Boyarshinov B F, Fedorov S Y 2004 Combust Explo Shock 40 511
- [12] Kawahara N, Tomita E, Takemoto S, Ikeda Y 2009 Spectrochimica Acta B 64 1085
- [13] Laux C O, Kruger C H, Zare R N 2003 Plasma Sources Sci. T 12 125
- [14] Laux C O, Gessman R J, Kruger C H, Roux F, Michaud F, Davis S P 2001 J. Quant Spectrosc RA 68 473
- [15] Chun F S, Tracy M, Fang Y Y 2003 AIAA paper 3750 1

利的影响,但在实验中通过高分辨率光栅以及扣除背景光谱的方法仍可以得到较高质量的 OH 自由基  $A^2\Sigma^+ \rightarrow X^2\Pi_r$ 和 CH 自由基  $A^2\Delta \rightarrow X^2\Pi$  电子带系发射光谱.

为测量火焰发射光谱的转动温度和振动温度, 本文基于分子光谱理论分析和计算了 OH 自由基  $A^2 \Sigma^+ \rightarrow X^2 \Pi_r$ 和 CH 自由基  $A^2 \Delta \rightarrow X^2 \Pi$  电子带系发 射光谱强度分布与转动温度和振动温度的关系.计 算结果表明:当转动温度和振动温度低于 3000 K 时,OH 自由基  $A^2 \Sigma^+ \rightarrow X^2 \Pi_r$  电子带系发射光谱的强 度分布与转动温度和振动温度的关系非常敏感,因 此非常适合测量燃烧火焰的转动温度和振动温度; 而 CH 自由基  $A^2 \Delta \rightarrow X^2 \Pi$  电子带系发射光谱则比较 适合于测量 3000 K 以上的温度.最后,本文通过 OH 自由基  $A^2 \Sigma^+ \rightarrow X^2 \Pi_r$ 和 CH 自由基  $A^2 \Delta \rightarrow X^2 \Pi$  电子 带系的理论计算光谱和实验光谱进行拟合,测量了 酒精在大气中燃烧时火焰不同位置处的转动温度 和振动温度以及测量误差.

- [16] James S, Serguei Z U. S. Patent 6914246b2 [2005 06]
- [17] Yang Q S, Yu X L, Jiang N B, Zhu N Y, Lin Z B 2001 Experiments and Measurements in Fluid Mechanics 14 57 (in Chinese) [杨乾锁、余西龙、姜乃波、竺乃宜、林贞彬 2001 流 体力学实验与测量 14 57]
- [18] Liu D B, Yang D, Jiang R G, Li Y, Wang J D 2002 Spectrosc Spect Anal. 23 670 (in Chinese) [刘大斌、杨 栋、蒋荣光、李 燕、王俊德 2002 光谱学与光谱分析 23 670]
- [19] Liu L Y, Zhang J L, Ma T C, Deng X L 2002 Spectrosc Spect Anal. 22 1013 (in Chinese) [刘莉莹、张家良、马腾才、邓新 绿 2002 光谱学与光谱分析 22 1013]
- [20] Tu X, Lu S Y, Yan J H, Ma Z Y, Pan X C, Cen K F 2002 Spectrosc Spect Anal. 22 1013 (in Chinese) [屠 昕、陆胜勇、 严建华、马增益、潘新潮、岑可法 2006 光谱学与光谱分析 26 1785]
- [21] Dong L F, Li Y H, Chen W J, Li X C 2007 Spectrosc Spect Anal. 27 2406 (in Chinese) [董丽芳、李永辉、陈文军、李雪 辰 2007 光谱学与光谱分析 27 2406]
- [22] Peng Z M, Ding Y J, Yang Q S, Jiang Z L 2011 Acta Phys Sin.
  60 053302 (in Chinese) [彭志敏、丁艳军、杨乾锁、姜宗林 2011 物理学报 60 053302]
- [23] Jorge L, David R C 1998 J. Chem. Phys. 109 439
- [24] Jorge L, David R C 1996 SRI Report. No MP 96-001
- [25] Jorge L, David R C 1996 J. Chem. Phys. 104 2146
- [26] Peng Z M 2010 Ph. D. Thesis (Beijing: Institute of Mechanics, Chinese Academy of Sciences) (in Chinese) [彭志敏 2010 博 士学位论文(中国科学院力学研究所)]

- [27] Charles D I 2000 J. Phys. D: Appl. Phys. 33 1697
- [28] Chris M http://www.gaseq.co.uk. 2010
- [29] Carla S T M, Leila R dos Santos, Maria E S, Luiz G B 2009

Quim Nova. 32 2073

[30] Dermeval C J, Luiz G B, Celso A B, Alberto M dos Santos 2010 J. Braz Chem Soc. 00 1

## Measurements of rotational and vibrational temperatures based on flame emission spectroscopy

Peng Zhi-Min Ding Yan-Jun<sup>†</sup> Zhai Xiao-Dong

(State Key Laboratory of Power Systems, Dept of Thermal Engineering, Tsinghua University, Beijing 100084, China) (Received 15 December 2010; revised manuscript received 19 January 2011)

#### Abstract

This study addresses emission spectra of Air-ethanol and Air-kerosene flames by using optical multichannel analysis system (OMA). Experimental results show that there are several bands of molecular spectrum in a range from 275 to 600nm. Among them, the OH  $A^2 \Sigma^+ \rightarrow X^2 \Pi_r$  (300—330 nm), the CH  $A^2 \Delta \rightarrow X^2 \Pi$  (410—440 nm), and  $C_2 A^3 \Pi_g \rightarrow X^3 \Pi_u$  (500— 520 nm) emissions have the strongest intensity. In turn, the fine structures of OH  $(A^2 \Sigma^+ \rightarrow X^2 \Pi_r)$  and CH  $(A^2 \Delta \rightarrow X^2 \Pi)$  emission are studied by using a high resolution grating in experiment, and the distributions of spectra intensity are calculated at different rotational and vibrational temperatures based on the molecular spectroscopy. Moreover, by comparing the simulated spectra with the experimental spectra of OH  $(A^2 \Sigma^+ \rightarrow X^2 \Pi_r)$  and CH  $(A^2 \Delta \rightarrow X^2 \Pi)$  emissions, the rotational and the vibrational temperatures of Air-ethanol flame are determined in this paper.

**Keywords**: flame emission spectroscopy, line intensity, rotational temperature, vibrational temperature **PACS**: 47. 80. Fg, 47. 70. Pq, 33. 70. – w

<sup>†</sup> Corresponding author. E-mail: dyj@tsinghua.edu.cn