

1.5 μm 处 CO_2 与 CO 高温线强的实验分析与理论计算

王敏锐 蔡廷栋

Theoretical and experimental study on line intensities of CO_2 and CO transitions near 1.5 μm at high temperatures

Wang Min-Rui Cai Ting-Dong

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 64, 213301 (2015) DOI: 10.7498/aps.64.213301

在线阅读 View online: <http://dx.doi.org/10.7498/aps.64.213301>

当期内容 View table of contents: <http://wulixb.iphy.ac.cn/CN/Y2015/V64/I21>

您可能感兴趣的其他文章

Articles you may be interested in

$^{13}\text{CH}_4$ 分子 ν_3 振动带空气和氮气加宽系数温度依赖性研究

Temperature dependence of air- and N_2 -broadening coefficients in the ν_3 band of $^{13}\text{CH}_4$

物理学报.2015, 64(15): 153301 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.64.153301>

近三相点氮分子固体的低温红外吸收特性研究

Infrared absorption characteristics of solid nitrogen at near-triple point temperatures

物理学报.2015, 64(7): 073301 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.64.073301>

基于波长调制光谱技术的线宽测量理论及其应用研究

Theoretical and applied researches on measuring line width in wavelength modulation spectroscopy

物理学报.2015, 64(5): 053301 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.64.053301>

可调谐二极管激光吸收光谱测量真空环境下气体温度的理论与实验研究

Theoretical and experimental study of measuring gas temperature in vacuum environment using tunable diode laser absorption spectroscopy

物理学报.2014, 63(8): 083301 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.63.083301>

基于可调谐半导体激光吸收光谱的酒精蒸汽检测方法

Ethanol vapor measurement based on tunable diode laser absorption spectroscopy

物理学报.2014, 63(4): 043301 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.63.043301>

1.5 μm 处 CO_2 与 CO 高温线强的实验分析与理论计算*

王敏锐 蔡廷栋†

(江苏省先进激光材料与器件重点实验室, 江苏师范大学物理与电子工程学院, 徐州 221116)

(2015年4月1日收到; 2015年7月10日收到修改稿)

本文在采用乘积近似方法计算二氧化碳、一氧化碳分子总的配分函数(其中分子的振动配分函数采用谐振子近似, 转动配分函数采用非刚性转子模型, 并考虑了离心扭曲修正)的基础上, 利用所得配分函数和振动跃迁矩平方的实验值以及Herman-Wallis系数, 计算了1.5 μm 附近二氧化碳30012—00001跃迁带和一氧化碳3—0跃迁带在300—6000 K温度范围内部分温度下的吸收线强; 为验证计算方法和结果的准确性, 在基于可调谐二极管激光吸收光谱技术搭建的高温测量系统中, 对300—800 K温度范围内部分谱线线强进行了测量, 并把计算结果、测量结果及HITRAN数据库中对应数据进行了对比, 发现相对偏差小于3%, 证明了本方法的有效性, 同时计算及测量所得高温线强数据可对HITRAN数据库进行有效的校正和补充.

关键词: 二氧化碳和一氧化碳, 配分函数, 高温光谱, 可调谐二极管激光吸收光谱

PACS: 33.20.Ea, 33.70.-w, 42.62.-b

DOI: 10.7498/aps.64.213301

1 引言

分子光谱不仅是研究和认知分子的能级和结构的重要手段, 而且被广泛应用于环境监测、高分子新材料研制、生物分子与生物学、燃烧诊断以及天体物理等领域^[1]. 在分子光谱的发展历程中, 特别是近几十年来随着各种新的光谱手段的出现, 使得研究人员能够系统地记录下所关心的分子、离子的高分辨光谱. 迄今为止已经有几十种分子或离子的光谱数据被不同的数据库所收录, 至今其内容仍在不断丰富中. 气体分子的红外吸收光谱数据是研究分子结构以及许多应用领域的基本参照数据.

二氧化碳作为大气中重要的温室气体, 被认为是导致近年来全球气候变化的重要因素, 其主要来源为含碳燃料的燃烧; 一氧化碳在原始的大气成分中的含量虽然较低, 但它是含碳燃料不完全燃烧的重要产物; 因此, 对于红外区域二氧化碳和一

氧化碳分子光谱特性的准确认知是燃烧诊断的基础. 目前一氧化碳和二氧化碳分子的近红外光谱特性研究已有大量的报道^[2-14], 有关一氧化碳3—0跃迁带和二氧化碳30012—00001跃迁带线强的研究也取得了较新的进展^[3-5,10,11], 其中Picqué^[3]和Chackerian等^[4]使用傅里叶变换红外光谱技术对 $^{12}\text{C}^{16}\text{O}$ 分子3—0跃迁带的部分谱线线强、振动跃迁矩等光谱参数进行了准确测量, Boudjaadar等^[10]使用相同的方法获得了二氧化碳1.6 μm 附近的线强参数, 但大多数的理论计算和实验测量都是在常温下进行的, 对二氧化碳高温线强的理论研究也仅涉及到00011—00001跃迁带^[14]即使在目前常用的HITRAN数据库中最高温度也只好推至3000 K^[16]. 因此, 极端高温下光谱参数的精确计算对于超高温燃烧诊断及数据库的补充与矫正均有重要意义.

为寻找高温下的谱线线强计算方法, 本文首先计算了分子的配分函数, 在此基础上利用所得配

* 国家自然科学基金(批准号: 61475068, 11104237)和江苏高校优势学科建设工程项目资助的课题.

† 通信作者. E-mail: caitingdong@126.com

分函数和振动跃迁矩平方的实验值以及Herman-Wallis系数, 计算了二氧化碳30012—00001跃迁带和一氧化碳3—0跃迁带在300—3000 K温度范围内的谱线强度; 为验证计算方法的正确性, 实验中搭建了基于可调谐二极管激光吸收光谱技术(TD-LAS)的高温测量系统, 可调谐二极管激光吸收光谱技术目前发展已较成熟, 被广泛应用于对大气中痕量气体的探测以及高温气体分子的光谱参数的测量中^[16-19]. 利用直接吸收光谱技术对300—800 K温度范围内二氧化碳30012—00001跃迁带和一氧化碳3—0跃迁带内6353 cm⁻¹—6364 cm⁻¹间部分谱线线强进行测量; 通过计算结果与HITRAN数据库以及实验测量值间的对比, 验证了本计算方法的准确性, 并在此基础上进一步计算了两种分子在4000 K, 5000 K和6000 K等超高温下的谱线线强.

2 理论研究

2.1 分子配分函数的计算

首先对于二氧化碳分子的总配分函数 $Q(T)$, 本文使用乘积近似的方法^[20]:

$$Q(T) = Q_{\text{elec}} \times Q_{\text{vib}} \times Q_{\text{rot}}. \quad (1)$$

实际进行计算时, 由于电子运动的能级间隔很大, 这里认为分子处于电子基态, 即 $Q_{\text{elec}} = 1$, 其中, Q_{vib} 是振动配分函数, 在谐振子近似下表示为^[21]

$$Q_{\text{vib}}^{(\text{谐})} = \prod_{i=1}^N \left[1 - e^{-v_i hc / (k_B T)} \right]^{-d_i}, \quad (2)$$

式中, h 是普朗克常数; c 是真空中的光速; k_B 是玻尔兹曼常数; T 是温度; v_i 是分子的第 i 个振动基频, 分子的振动基频取自文献^[22]; d_i 是对应振动基频的简并度. 对于线性分子转动配分函数 Q_{rot} 我们使用McDowell的计算方法^[23,24]:

$$Q_{\text{rot}} \approx \sigma^{-1} I^2 e^{\frac{\beta}{3}} \beta^{-1} \times \left[1 + \frac{\beta^2}{90} + \frac{8\beta^3}{2835} + \frac{5\beta^4}{4536} + \frac{148\beta^5}{280665} + \dots + kI^{-1} \pi^{\frac{3}{2}} e^{-\frac{\beta}{12}} e^{\frac{\pi^2}{4\beta}} \beta^{-\frac{1}{2}} \right] f_c, \quad (3)$$

其中 $\beta = hcB/KT$, σ 是分子的点群对称数; I 是核自旋多重度; $d = D/B$, $h = H/B$, B , D 和 H 是

分子转动常数. $f_c = 1 + 2d(3 - \beta)/3\beta + 6(2d^2 - h)/\beta^2 + 120d(d^2 - h)/\beta^3$ 是离心扭曲修正因子, 并且, 对于大部分分子, 在提供足够精确的离心扭曲常数 D 和 H 的前提下, 都可以通过(3)式计算得5000 K以上具有相当准确度的转动配分函数, 宋晓书等^[25]在计算中发现, 在高温下 f_c 因子具有显著的修正效果.

2.2 线强计算

对于特定跃迁带的线强, 使用无转动跃迁偶极矩 R_v 和Herman-Wallis因子可求得^[12,13]:

$$S_{b \leftarrow a}(T) = \frac{8\pi^3 I_x}{3hc} v_{b \leftarrow a} \frac{g_a e^{-(hcE_a)/(k_B T)}}{Q(T)} \times \left[1 - \exp\left(-\frac{hc v_{b \leftarrow a}}{k_B T}\right) \right] \times R_v^2 F(m) L(J) \times 10^{-36}, \quad (4)$$

式中, 分子的同位素丰度 I_x 以及跃迁波数 $v_{b \leftarrow a}$ (单位: cm⁻¹)均取自HITRAN数据库^[16]; h 是普朗克常数; c 是真空中的光速; g_a 是核自旋简并因子; 低能级的能量 $E_a = G + BJ(J+1) - DJ^2(J+1)^2 + HJ^3(J+1)^3$ 其中 B , D , H 的值取自^[11]; k_B 是玻尔兹曼常数; R_v^2 是无转动跃迁矩平方(单位: Debye²); Herman-Wallis因子 $F(m)$, 它引入了振转之间的相互作用, 对于一个线性分子可表示为^[25,26]

$$F(m) = (1 + A_1 m + A_2 m^2)^2. \quad (5)$$

(5)式中 A_1 和 A_2 为Herman-Wallis参数, 取自文献^[14], R_v^2 的值通过常温下HITRAN数据库中的线强值推算得, 并应用于更高温度的计算.

本文计算的二氧化碳30012—00001跃迁, 属于 $\Sigma-\Sigma$ 振动跃迁, 其转动量子数的选择定则为 $\Delta J = \pm 1$, 只有P支、R支, 没有Q支, $m = -J$ 和 $J+1$ 分别对应P支和R支. 在式中, $L(J)$ 是Honl-London因子, 对于P支和R支分别有 $L(J) = J$ 和 $J+1$. 我们在HITRAN数据库提供的跃迁波数范围的基础上, 主要计算了转动量子数 $J \leq 68$ 的跃迁线强度.

类似的, 我们计算了一氧化碳3—0跃迁带中转动量子数 $J \leq 58$ 的谱线强度, 其中光谱常数 B , D , H 的取值来自文献^[2], A_1 , A_2 及 R_v^2 取自文献^[3].

3 实验研究

为验证计算方法的正确性, 搭建了基于TD-LAS的高温测量系统, 利用直接吸收光谱技术对300—800 K温度范围内二氧化碳30012—00001跃迁带和一氧化碳3—0跃迁带内6353 cm⁻¹—6364 cm⁻¹间部分谱线线强进行测量, 便于和计算值进行对比.

3.1 实验装置

图1为搭建的实验室高温测量装置, 样品池的主体部分由不锈钢制成, 长380 mm, 两侧窗口与垂直方向具有1.5°的倾角, 样品池温度由电加热调温系统控制. 样品池主体上平均分布着4台K型热电偶温度传感器, 对样品池中的温度进行测量, 池内压力由油规和压力表控制. 利用1×3的光纤分

束器把激光分成三束, 其中90%一路经光纤准直器准直后通过吸收池, 通过光电探测器接收. 8%一路接入到标准具中用于激光相对波长校准, 标准具的自由光谱范围由两条吸收谱线进行标定, 通过向样品池中充入了一定量的CO₂和CO的混合气体, 同时测量位于6361.2504 cm⁻¹处的CO₂谱线和6361.3435 cm⁻¹处的CO谱线, 根据两谱线吸收峰之间的频率间隔得到标准具的自由光谱范围为0.00601 cm⁻¹. 2%一路接入到波长计(Burleigh WA-4500)中, 结合由其得到的已知较强CO₂谱线所处的位置对绝对波长进行校准. 实验中首先将激光控制器的温度和电流设定在吸收信号的对应位置, 利用周期为10 Hz的三角波信号来控制激光器的波长输出, 依次对所要研究的谱线的直接吸收光谱信号进行记录, 所有测量的光谱数据均进行了1000次平均.

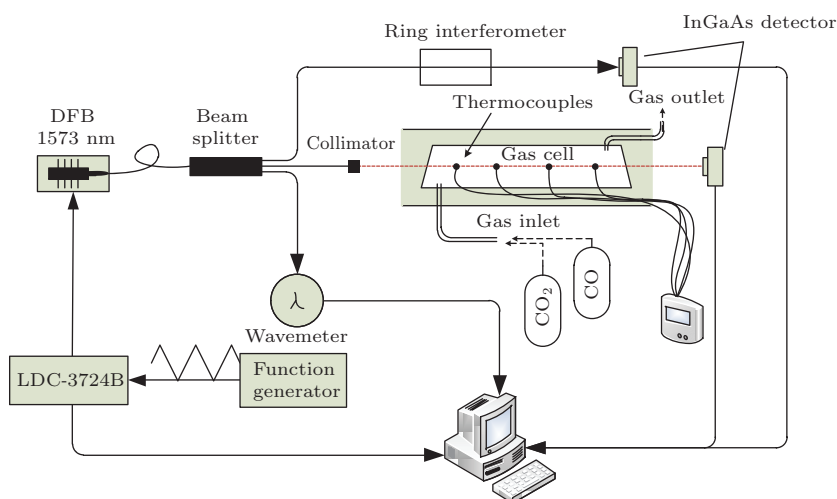


图1 (网刊彩色) 实验装置示意图

Fig. 1. (color online) Schematic of the experimental setup.

3.2 线强测量

实验中首先通过电加热调温系统把样品池加热到待测温度, 等温度稳定后向池内充入一定压力的纯CO₂或CO气体, 放置一段时间使气体压力和温度充分稳定后开始测量. 在300—800 K温度范围内以100 K的温度间隔对各温度下所选吸收谱线的信号进行记录, 每个温度下分别采集了5—40 Torr (1 Torr = 1.33 × 10² Pa)间6组不同CO₂或者CO气体压力下的吸收光谱信号, 并对各个压强下的分子吸收光谱Voigt线型拟合得出积分吸收面积, 如图2所示. 本文中, 对于两组跃迁带均

使用相同方法进行测量.

根据比尔-朗伯定律, 谱线的吸收积分面积A可以表示为压强P、组分浓度C、线强S以及程长L的关系式, 从而线强可由积分吸收面积与压强间线性拟合的斜率中得出^[17]

$$S = \frac{A}{P} \times \frac{P_0 T}{N_L T_0 L C_{\text{ppm}}} \times 10^6, \quad (6)$$

其中, N_L是T₀ = 273.15 K, P₀ = 760 Torr时的洛施密特数. 根据上式, 对各温度下6组不同压力的吸收光谱信号拟合所得积分吸收面积与对应的压强进行线性拟合, 所得斜率即为该谱线在该温度下的线强值, 谱线线强反演过程示意如图3所示.

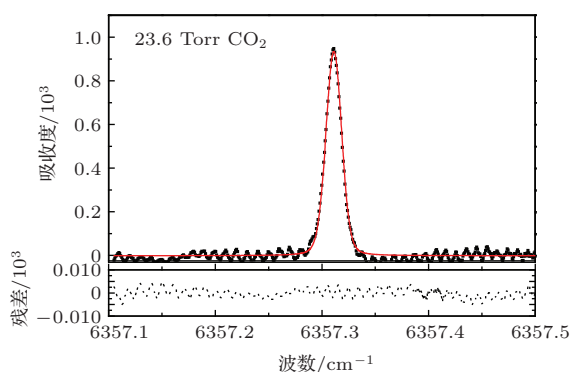


图2 (网刊彩色) $T = 500$ K, $P = 23.6$ Torr 时, CO_2 吸收谱线的 Voigt 线型拟合及其残差

Fig. 2. (color online) Absorption spectrum of 23.6 Torr pure CO_2 along with a Voigt fit and residual at 500 K.

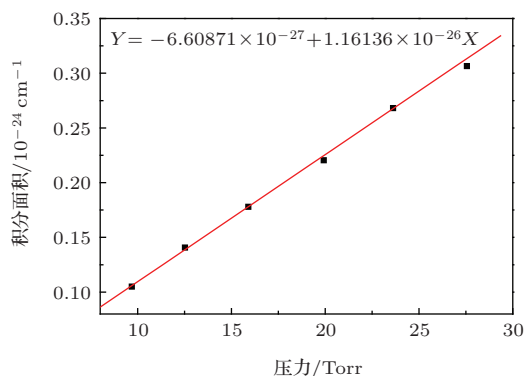


图3 (网刊彩色) $T = 500$ K 时 6357.312 cm^{-1} 处谱线线强反演过程示意

Fig. 3. (color online) Retrieval of CO_2 line intensity at 6357.312 cm^{-1} , $T = 500$ K.

通过上述方法我们测得了所有 11 条谱线在各温度下的线强, 分列于表 1、表 2 中, 比较实验值与 HITRAN 数据库值, 两者偏差基本在 3% 以内, 个别偏差较大的达到 6.8% 偏差产生的原因除去数据库自身存在的误差外, 实验中的误差主要存在于信号基线选取处理, 热电偶、压强计的读数误差, 多次测量求平均的标准偏差以及路径长度的测量误差。

另外, 实验过程中因为 DFB 型半导体激光器的波长调谐范围只有 6—7 nm, 且受样品池的长度所限, 故实验数据不多, 并且实验是为了对理论方法进行验证, 所以只测了线强较强的部分数据作为校验标准。

4 结果与讨论

为验证计算结果的准确性, 将各温度下计算所得二氧化碳 30012—00001 跃迁带和一氧化碳 3—0 跃迁带的分子谱线强度与实验测量值及 HITRAN

数据库提供的数值分别在表 1、表 2 中进行了比较, 为了方便跟实验数据对比, 表中仅列出部分数据。由表 1 可以看出, 计算所得二氧化碳分子 30012—00001 跃迁带在 300—800 K 温度范围内的线强度与实验测量值和 HITRAN 数据库值均符合较好, 说明了本方法的准确性。同时发现随着温度的升高, 线强度计算值与 HITRAN 数据库值之间的误差在整体逐渐增大, 当温度高达 3000 K 时, 其最大偏差为 2.6%, 这是由于使用乘积近似的方法计算配分函数时忽略了分子振转间的相互作用, 而这种作用会随着温度升高而增强, 因此会导致误差的整体性增大, 计算值与 HITRAN 数据库值的比较见图 4。

3000 K 高温下 2.6% 的最大偏差显示了线强计算值和数据库值间的良好一致性, 同时证明了高温条件下分子配分函数和线强度的计算方法的可靠性。因而在此进一步计算了更高温度下的线强值, 图 5 给出了二氧化碳在 5000 和 6000 K 高温下的模拟光谱, 图 6 以二氧化碳 6353.103 cm^{-1} 处的吸收线强为例给出实验值、HITRAN 数据值和计算值随温度改变在 300—6000 K 范围间的变化趋势以及对比, 可以发现实验与 HITRAN 数据库的外推值和计算值所构成的曲线有很好的相关性, 这说明用理论计算的方法对 HITRAN 数据库外推值进行理论修正是可行的。结合图 4、图 5、图 6 可以看出, 从 300 到 6000 K 二氧化碳 30012—00001 跃迁带的线强度总体随着温度升高是逐渐减弱的, 并且其减弱幅度基本趋于一致, 而部分转动量子数 J 较大的跃迁线强度呈现先增强后减弱的趋势, 这是由于跃迁能态上的粒子数的布居改变所造成的, 谱线的线强 S 依赖于低能态能级上的粒子数布局以及能级上粒子的跃迁概率, 当随着温度 T 上升时, 粒子向较高的上能态分布, 即向较高的转动量子数 J 分布, 而转动角动量 J 也反映了谱线的能级的高低, 因此, 不同谱线的线强随温度 T 变化的趋势的不同, 跃迁带中转动量子数 J 较小的吸收谱线, 在大于 300 K 时随着温度升高而减弱, 而部分转动量子数 J 较大的吸收谱线, 随着温度升高先增强, 在温度 T 升至一定程度后逐渐减弱。通常, 非吸收状态下平衡分子布居随温度的变化关系是由下能级能量 E'' 所决定的, 所以同时 E'' 也决定了该跃迁谱线的线强随温度的变化情况 [27]。

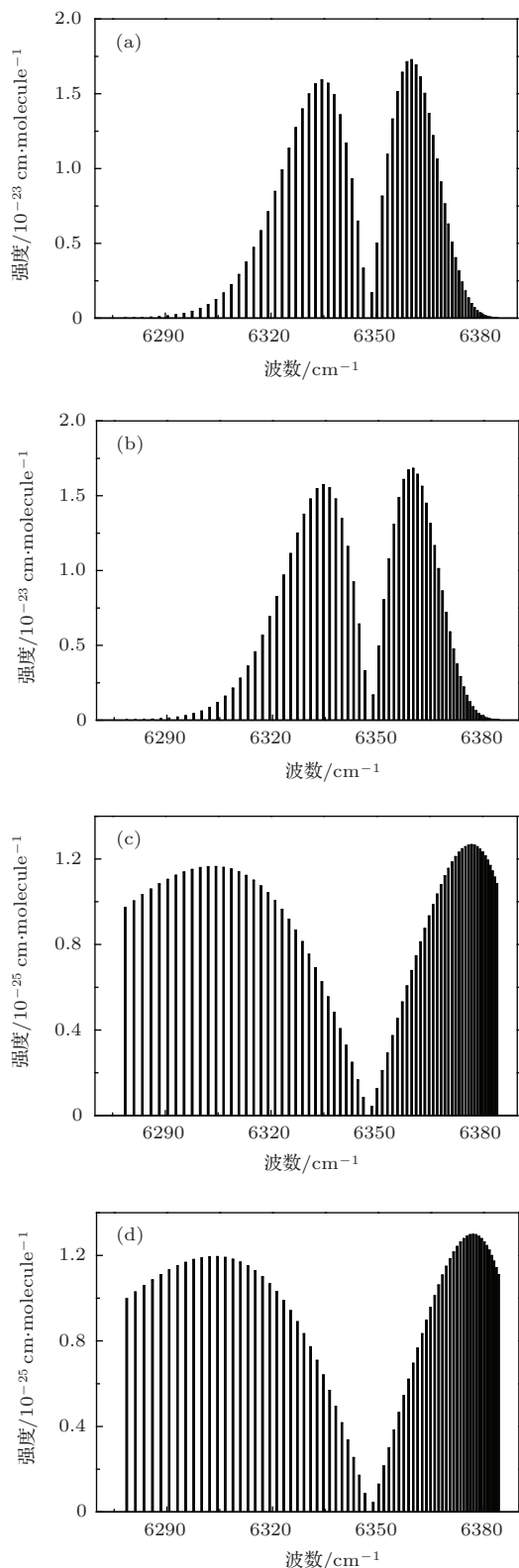


图4 二氧化碳 30012—00001 跃迁带线强在 300 K 下 HITRAN 值 (a) 与计算值 (b) 以及在 3000 K 下 HITRAN 值 (c) 与计算值 (d) 的比较

Fig. 4. Comparison of line intensities of the 30012-00001 band of CO₂ from HITRAN with calculated spectra: (a) 300 K, HITRAN; (b) 300 K, calculation; (c) 3000 K, HITRAN; (d) 3000 K, calculation.

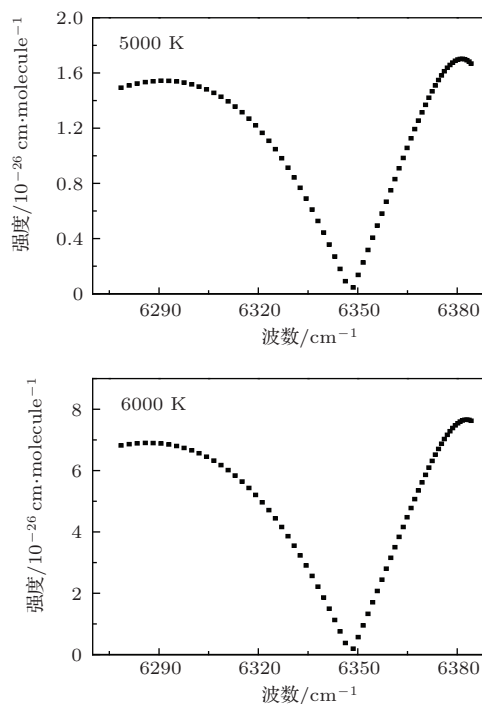


图5 二氧化碳跃迁在 5000 K 和 6000 K 下的模拟谱线
Fig. 5. The simulated spectra of the 30012-00001 band of CO₂ at 5000 K and 6000 K.

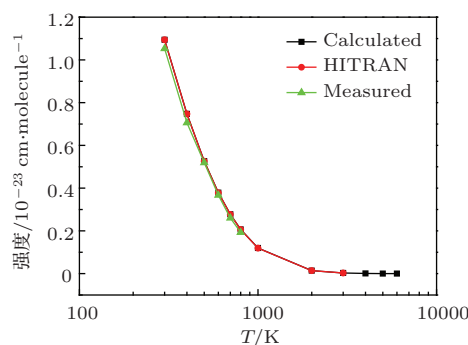


图6 (网刊彩色) 二氧化碳分子 6353.103 cm⁻¹ 处线强随温度 (300—6000 K) 的变化趋势
Fig. 6. (color online) The varying trend of carbon dioxide line intensity at 6353.103 cm⁻¹ in the temperature range of 300-6000 K.

相同地, 表 2 中列出了一氧化碳 3—0 跃迁带在不同温度下的线强度的计算值与实验值, 图 7 是 300 K 和 3000 K 下谱线强度的计算值与 HITRAN 数据库数据的比较, 并进一步给出了更高温度 5000, 6000 K 下的模拟谱线强度, 如图 8 所示. 由图 7、图 8 可见, CO 分子 3—0 跃迁线强度同样随着温度的升高逐渐变小. 值得注意的是 R 支上, 转动量子数 $J > 34$ 部分的跃迁线强度在 800 K 以下远小于 $J \leq 34$ 跃迁的线强, 但在达到 4000 K 高温后, 转动量子数 $J > 34$ 部分的跃迁线强逐渐超越后者, 谱线形状的变化更加明显.

表 1 二氧化碳分子 30012-00001 跃迁带线强度(单位: cm/molecule)

Table 1. Line intensities (cm/molecule) of the 30012-00001 band of carbon dioxide.

Line	300 K		400 K		500 K		600 K	
	S_{HITRAN}	$S_{\text{exp.}}$	S_{HITRAN}	$S_{\text{exp.}}$	S_{HITRAN}	$S_{\text{exp.}}$	S_{HITRAN}	$S_{\text{exp.}}$
P68e	1.47×10^{-26}	1.469×10^{-26}	8.806×10^{-26}	8.812×10^{-26}	2.28×10^{-25}	2.284×10^{-25}	3.909×10^{-25}	3.918×10^{-25}
P58e	1.408×10^{-25}	1.408×10^{-25}	4.666×10^{-25}	4.669×10^{-25}	8.466×10^{-25}	8.48×10^{-25}	1.145×10^{-24}	1.148×10^{-24}
P48e	8.961×10^{-25}	8.961×10^{-25}	1.801×10^{-24}	1.803×10^{-24}	2.422×10^{-24}	2.426×10^{-24}	2.683×10^{-24}	2.69×10^{-24}
P38e	3.732×10^{-24}	3.732×10^{-24}	4.996×10^{-24}	5.001×10^{-24}	5.264×10^{-24}	5.273×10^{-24}	4.955×10^{-24}	4.968×10^{-24}
P28e	9.895×10^{-24}	9.895×10^{-24}	9.685×10^{-24}	9.693×10^{-24}	8.455×10^{-24}	8.47×10^{-24}	7.023×10^{-24}	7.04×10^{-24}
P18e	1.565×10^{-23}	1.565×10^{-23}	1.229×10^{-23}	1.23×10^{-23}	9.405×10^{-24}	9.423×10^{-24}	7.154×10^{-24}	7.174×10^{-24}
P8e	1.17×10^{-23}	1.170×10^{-23}	8.101×10^{-24}	8.106×10^{-24}	5.746×10^{-24}	5.754×10^{-24}	4.155×10^{-24}	4.165×10^{-24}
P6e	9.3×10^{-24}	9.299×10^{-24}	6.35×10^{-24}	6.355×10^{-24}	4.466×10^{-24}	4.473×10^{-24}	3.212×10^{-24}	3.22×10^{-24}
P4e	6.473×10^{-24}	6.473×10^{-24}	4.375×10^{-24}	4.378×10^{-24}	3.058×10^{-24}	3.063×10^{-24}	2.19×10^{-24}	2.195×10^{-24}
P2e	3.328×10^{-24}	3.328×10^{-24}	2.234×10^{-24}	2.236×10^{-24}	1.556×10^{-24}	1.558×10^{-24}	1.111×10^{-24}	1.114×10^{-24}
R0e	1.686×10^{-24}	1.686×10^{-24}	1.129×10^{-24}	1.13×10^{-24}	7.845×10^{-25}	7.86×10^{-25}	5.597×10^{-25}	5.613×10^{-25}
R2e	5.007×10^{-24}	5.007×10^{-24}	3.362×10^{-24}	3.365×10^{-24}	2.341×10^{-24}	2.345×10^{-24}	1.672×10^{-24}	1.676×10^{-24}
R4e	8.136×10^{-24}	8.136×10^{-24}	5.498×10^{-24}	5.503×10^{-24}	3.843×10^{-24}	3.85×10^{-24}	2.753×10^{-24}	2.76×10^{-24}
R6e	1.094×10^{-23}	1.094×10^{-23}	7.471×10^{-24}	7.474×10^{-24}	5.255×10^{-24}	5.19×10^{-24}	3.779×10^{-24}	3.67×10^{-24}
R8e	1.329×10^{-23}	1.235×10^{-23}	9.205×10^{-24}	9.216×10^{-24}	6.529×10^{-24}	6.38×10^{-24}	4.722×10^{-24}	4.84×10^{-24}
R10e	1.514×10^{-23}	1.510×10^{-23}	1.067×10^{-23}	1.045×10^{-23}	7.651×10^{-24}	7.54×10^{-24}	5.572×10^{-24}	5.30×10^{-24}
R12e	1.641×10^{-23}	1.625×10^{-23}	1.182×10^{-23}	1.183×10^{-23}	8.583×10^{-24}	8.58×10^{-24}	6.305×10^{-24}	6.39×10^{-24}
R14e	1.712×10^{-23}	1.699×10^{-23}	1.264×10^{-23}	1.264×10^{-23}	9.321×10^{-24}	9.24×10^{-24}	6.917×10^{-24}	6.80×10^{-24}
R16e	1.726×10^{-23}	1.594×10^{-23}	1.312×10^{-23}	1.317×10^{-23}	9.847×10^{-24}	9.27×10^{-24}	7.392×10^{-24}	7.31×10^{-24}
R18e	1.691×10^{-23}	1.676×10^{-23}	1.328×10^{-23}	1.329×10^{-23}	1.016×10^{-23}	1.016×10^{-23}	7.73×10^{-24}	7.65×10^{-24}
R20e	1.612×10^{-23}	1.556×10^{-23}	1.314×10^{-23}	1.299×10^{-23}	1.028×10^{-23}	1.03×10^{-23}	7.931×10^{-24}	7.69×10^{-24}
R22e	1.501×10^{-23}	1.486×10^{-23}	1.274×10^{-23}	1.28×10^{-23}	1.02×10^{-23}	1.054×10^{-23}	8.003×10^{-24}	8.27×10^{-24}
R28e	1.063×10^{-23}	1.062×10^{-23}	1.04×10^{-23}	1.041×10^{-23}	9.08×10^{-24}	9.091×10^{-24}	7.541×10^{-24}	7.557×10^{-24}
R38e	4.022×10^{-24}	4.022×10^{-24}	5.384×10^{-24}	5.389×10^{-24}	5.673×10^{-24}	5.682×10^{-24}	5.34×10^{-24}	5.354×10^{-24}
R48e	9.733×10^{-25}	9.734×10^{-25}	1.957×10^{-24}	1.958×10^{-24}	2.631×10^{-24}	2.635×10^{-24}	2.914×10^{-24}	2.921×10^{-24}
R58e	1.545×10^{-25}	1.545×10^{-25}	5.12×10^{-25}	5.124×10^{-25}	9.291×10^{-25}	9.306×10^{-25}	1.257×10^{-24}	1.26×10^{-24}
R68e	1.632×10^{-26}	1.632×10^{-26}	9.781×10^{-26}	9.787×10^{-26}	2.532×10^{-25}	2.536×10^{-25}	4.342×10^{-25}	4.352×10^{-25}

表 1 二氧化碳分子 30012-00001 跃迁带线强度 (单位: cm/molecule) (续 1)
Table 1. Line intensities (cm/molecule) of the 30012-00001 band of carbon dioxide.

	700 K		800 K		3000 K		4000 K		5000 K		6000 K	
	S_{HITRAN}	$S_{\text{exp.}}$	S_{HITRAN}	$S_{\text{exp.}}$	S_{HITRAN}	$S_{\text{calc.}}$	S_{HITRAN}	$S_{\text{calc.}}$	S_{HITRAN}	$S_{\text{calc.}}$	S_{HITRAN}	$S_{\text{calc.}}$
P68e	5.326×10^{-25}	5.344×10^{-25}	6.316×10^{-25}	6.342×10^{-25}	9.725×10^{-26}	9.971×10^{-26}	3.628×10^{-26}	3.628×10^{-26}	1.493×10^{-26}	1.493×10^{-26}	6.817×10^{-27}	6.817×10^{-27}
P58e	1.317×10^{-24}	1.322×10^{-24}	1.376×10^{-24}	1.382×10^{-24}	1.104×10^{-25}	1.132×10^{-25}	3.884×10^{-26}	3.884×10^{-26}	1.543×10^{-26}	1.543×10^{-26}	6.88×10^{-27}	6.88×10^{-27}
P48e	2.676×10^{-24}	2.685×10^{-24}	2.511×10^{-24}	2.522×10^{-24}	1.163×10^{-25}	1.193×10^{-25}	3.894×10^{-26}	3.894×10^{-26}	1.501×10^{-26}	1.501×10^{-26}	6.563×10^{-27}	6.563×10^{-27}
P38e	4.4×10^{-24}	4.416×10^{-24}	3.784×10^{-24}	3.801×10^{-24}	1.122×10^{-25}	1.15×10^{-25}	3.605×10^{-26}	3.605×10^{-26}	1.357×10^{-26}	1.357×10^{-26}	5.837×10^{-27}	5.837×10^{-27}
P28e	5.702×10^{-24}	5.721×10^{-24}	4.586×10^{-24}	4.606×10^{-24}	9.632×10^{-26}	9.878×10^{-26}	3.001×10^{-26}	3.001×10^{-26}	1.108×10^{-26}	1.108×10^{-26}	4.71×10^{-27}	4.71×10^{-27}
P18e	5.455×10^{-24}	5.475×10^{-24}	4.185×10^{-24}	4.204×10^{-24}	6.905×10^{-26}	7.082×10^{-26}	2.105×10^{-26}	2.105×10^{-26}	7.674×10^{-27}	7.674×10^{-27}	3.233×10^{-27}	3.233×10^{-27}
P8e	3.056×10^{-24}	3.066×10^{-24}	2.282×10^{-24}	2.292×10^{-24}	3.277×10^{-26}	3.36×10^{-26}	9.865×10^{-27}	9.865×10^{-27}	3.569×10^{-27}	3.569×10^{-27}	1.496×10^{-27}	1.496×10^{-27}
P6e	2.353×10^{-24}	2.361×10^{-24}	1.752×10^{-24}	1.759×10^{-24}	2.477×10^{-26}	2.54×10^{-26}	7.446×10^{-27}	7.446×10^{-27}	2.692×10^{-27}	2.692×10^{-27}	1.128×10^{-27}	1.128×10^{-27}
P4e	1.6×10^{-24}	1.605×10^{-24}	1.188×10^{-24}	1.193×10^{-24}	1.661×10^{-26}	1.704×10^{-26}	4.989×10^{-27}	4.989×10^{-27}	1.803×10^{-27}	1.803×10^{-27}	7.55×10^{-28}	7.55×10^{-28}
P2e	8.101×10^{-25}	8.128×10^{-25}	6.009×10^{-25}	6.035×10^{-25}	8.343×10^{-27}	8.555×10^{-27}	2.504×10^{-27}	2.504×10^{-27}	9.044×10^{-28}	9.044×10^{-28}	3.787×10^{-28}	3.787×10^{-28}
R0e	4.077×10^{-25}	4.092×10^{-25}	3.023×10^{-25}	3.037×10^{-25}	4.184×10^{-27}	4.291×10^{-27}	1.256×10^{-27}	1.256×10^{-27}	4.535×10^{-28}	4.535×10^{-28}	1.898×10^{-28}	1.898×10^{-28}
R2e	1.219×10^{-24}	1.223×10^{-24}	9.042×10^{-25}	9.081×10^{-25}	1.255×10^{-26}	1.287×10^{-26}	3.768×10^{-27}	3.768×10^{-27}	1.361×10^{-27}	1.361×10^{-27}	5.699×10^{-28}	5.699×10^{-28}
R4e	2.01×10^{-24}	2.017×10^{-24}	1.493×10^{-24}	1.5×10^{-24}	2.089×10^{-26}	2.142×10^{-26}	6.274×10^{-27}	6.274×10^{-27}	2.267×10^{-27}	2.267×10^{-27}	9.494×10^{-28}	9.494×10^{-28}
R6e	2.768×10^{-24}	2.776×10^{-24}	2.061×10^{-24}	2.069×10^{-24}	2.915×10^{-26}	2.988×10^{-26}	8.761×10^{-27}	8.761×10^{-27}	3.168×10^{-27}	3.168×10^{-27}	1.327×10^{-27}	1.327×10^{-27}
R8e	3.473×10^{-24}	3.486×10^{-24}	2.593×10^{-24}	2.605×10^{-24}	3.725×10^{-26}	3.822×10^{-26}	1.122×10^{-26}	1.122×10^{-26}	4.061×10^{-27}	4.061×10^{-27}	1.703×10^{-27}	1.703×10^{-27}
R10e	4.119×10^{-24}	4.133×10^{-24}	3.088×10^{-24}	3.101×10^{-24}	4.523×10^{-26}	4.638×10^{-26}	1.364×10^{-26}	1.364×10^{-26}	4.943×10^{-27}	4.943×10^{-27}	2.074×10^{-27}	2.074×10^{-27}
R12e	4.69×10^{-24}	4.707×10^{-24}	3.532×10^{-24}	3.548×10^{-24}	5.298×10^{-26}	5.434×10^{-26}	1.602×10^{-26}	1.602×10^{-26}	5.811×10^{-27}	5.811×10^{-27}	2.44×10^{-27}	2.44×10^{-27}
R14e	5.182×10^{-24}	5.198×10^{-24}	3.924×10^{-24}	3.94×10^{-24}	6.052×10^{-26}	6.204×10^{-26}	1.834×10^{-26}	1.834×10^{-26}	6.662×10^{-27}	6.662×10^{-27}	2.8×10^{-27}	2.8×10^{-27}
R16e	5.584×10^{-24}	5.602×10^{-24}	4.254×10^{-24}	4.272×10^{-24}	6.775×10^{-26}	6.946×10^{-26}	2.059×10^{-26}	2.059×10^{-26}	7.493×10^{-27}	7.493×10^{-27}	3.154×10^{-27}	3.154×10^{-27}
R18e	5.894×10^{-24}	5.914×10^{-24}	4.522×10^{-24}	4.542×10^{-24}	7.466×10^{-26}	7.655×10^{-26}	2.277×10^{-26}	2.277×10^{-26}	8.302×10^{-27}	8.302×10^{-27}	3.499×10^{-27}	3.499×10^{-27}
R20e	6.111×10^{-24}	6.133×10^{-24}	4.725×10^{-24}	4.747×10^{-24}	8.12×10^{-26}	8.329×10^{-26}	2.486×10^{-26}	2.486×10^{-26}	9.087×10^{-27}	9.087×10^{-27}	3.835×10^{-27}	3.835×10^{-27}
R22e	6.238×10^{-24}	6.261×10^{-24}	4.865×10^{-24}	4.888×10^{-24}	8.74×10^{-26}	8.964×10^{-26}	2.687×10^{-26}	2.687×10^{-26}	9.843×10^{-27}	9.843×10^{-27}	4.161×10^{-27}	4.161×10^{-27}
R28e	6.123×10^{-24}	6.142×10^{-24}	4.924×10^{-24}	4.944×10^{-24}	1.035×10^{-25}	1.061×10^{-25}	3.227×10^{-26}	3.227×10^{-26}	1.193×10^{-26}	1.193×10^{-26}	5.07×10^{-27}	5.07×10^{-27}
R38e	4.742×10^{-24}	4.758×10^{-24}	4.078×10^{-24}	4.096×10^{-24}	1.21×10^{-25}	1.241×10^{-25}	3.895×10^{-26}	3.895×10^{-26}	1.467×10^{-26}	1.467×10^{-26}	6.314×10^{-27}	6.314×10^{-27}
R48e	2.906×10^{-24}	2.916×10^{-24}	2.727×10^{-24}	2.739×10^{-24}	1.266×10^{-25}	1.298×10^{-25}	4.242×10^{-26}	4.242×10^{-26}	1.637×10^{-26}	1.637×10^{-26}	7.165×10^{-27}	7.165×10^{-27}
R58e	1.446×10^{-24}	1.451×10^{-24}	1.51×10^{-24}	1.516×10^{-24}	1.214×10^{-25}	1.245×10^{-25}	4.278×10^{-26}	4.278×10^{-26}	1.701×10^{-26}	1.701×10^{-26}	7.596×10^{-27}	7.596×10^{-27}
R68e	5.916×10^{-25}	5.935×10^{-25}	7.015×10^{-25}	7.044×10^{-25}	1.083×10^{-25}	1.11×10^{-25}	4.047×10^{-26}	4.047×10^{-26}	1.668×10^{-26}	1.668×10^{-26}	7.625×10^{-27}	7.625×10^{-27}

S_{HITRAN} : values from HITRAN; $S_{\text{exp.}}$: experimental values; $S_{\text{calc.}}$: values from calculation; $\sigma = 100 \times (S_{\text{calc.}} - S_{\text{HITRAN}}) / S_{\text{HITRAN}}$.

表2 一氧化碳分子 3-0 跃迁带线强度 (单位: cm/molecule)
Table 2. Line intensities (cm/molecule) of the 3-0 band of carbon monoxide.

Line	300 K		400 K		500 K		600 K	
	S_{HITRAN}	$S_{\text{exp.}}$	S_{HITRAN}	$S_{\text{exp.}}$	S_{HITRAN}	$S_{\text{exp.}}$	S_{HITRAN}	$S_{\text{exp.}}$
P58	4.075×10^{-36}	4.05×10^{-36}	7.474×10^{-33}	7.533×10^{-33}	6.44×10^{-31}	6.494×10^{-31}	1.211×10^{-29}	1.222×10^{-29}
P53	5.945×10^{-34}	5.884×10^{-34}	3.077×10^{-31}	3.088×10^{-31}	1.24×10^{-29}	1.246×10^{-29}	1.407×10^{-28}	1.414×10^{-28}
P48	5.597×10^{-32}	5.52×10^{-32}	9.116×10^{-30}	9.118×10^{-30}	1.838×10^{-28}	1.839×10^{-28}	1.312×10^{-27}	1.314×10^{-27}
P43	3.38×10^{-30}	3.322×10^{-30}	1.934×10^{-28}	1.928×10^{-28}	2.081×10^{-27}	2.076×10^{-27}	9.78×10^{-27}	9.76×10^{-27}
P38	1.3×10^{-28}	1.274×10^{-28}	2.919×10^{-27}	2.902×10^{-27}	1.793×10^{-26}	1.783×10^{-26}	5.796×10^{-26}	5.768×10^{-26}
P33	3.154×10^{-27}	3.087×10^{-27}	3.111×10^{-26}	3.088×10^{-26}	1.166×10^{-25}	1.158×10^{-25}	2.713×10^{-25}	2.695×10^{-25}
P28	4.791×10^{-26}	4.682×10^{-26}	2.323×10^{-25}	2.302×10^{-25}	5.687×10^{-25}	5.638×10^{-25}	9.957×10^{-25}	9.877×10^{-25}
P23	4.497×10^{-25}	4.389×10^{-25}	1.201×10^{-24}	1.189×10^{-24}	2.054×10^{-24}	2.034×10^{-24}	2.833×10^{-24}	2.807×10^{-24}
P18	2.557×10^{-24}	2.496×10^{-24}	4.214×10^{-24}	4.17×10^{-24}	5.397×10^{-24}	5.344×10^{-24}	6.137×10^{-24}	6.079×10^{-24}
P13	8.521×10^{-24}	8.314×10^{-24}	9.716×10^{-24}	9.614×10^{-24}	9.977×10^{-24}	9.877×10^{-24}	9.791×10^{-24}	9.698×10^{-24}
P8	1.532×10^{-23}	1.495×10^{-23}	1.356×10^{-23}	1.342×10^{-23}	1.196×10^{-23}	1.184×10^{-23}	1.061×10^{-23}	1.051×10^{-23}
P3	1.061×10^{-23}	1.037×10^{-23}	8.179×10^{-24}	8.102×10^{-24}	6.64×10^{-24}	6.581×10^{-24}	5.571×10^{-24}	5.524×10^{-24}
P2	7.57×10^{-24}	7.395×10^{-24}	5.754×10^{-24}	5.701×10^{-24}	4.632×10^{-24}	4.592×10^{-24}	3.865×10^{-24}	3.834×10^{-24}
P1	3.976×10^{-24}	3.885×10^{-24}	2.995×10^{-24}	2.967×10^{-24}	2.398×10^{-24}	2.377×10^{-24}	1.993×10^{-24}	1.977×10^{-24}
R0	4.152×10^{-24}	4.058×10^{-24}	3.113×10^{-24}	3.086×10^{-24}	2.485×10^{-24}	2.465×10^{-24}	2.062×10^{-24}	2.047×10^{-24}
R1	8.255×10^{-24}	8.07×10^{-24}	6.217×10^{-24}	6.165×10^{-24}	4.978×10^{-24}	4.938×10^{-24}	4.138×10^{-24}	4.108×10^{-24}
R2	1.209×10^{-23}	1.182×10^{-23}	9.187×10^{-24}	9.11×10^{-24}	7.396×10^{-24}	7.338×10^{-24}	6.172×10^{-24}	6.126×10^{-24}
R3	1.543×10^{-23}	1.51×10^{-23}	1.19×10^{-23}	1.18×10^{-23}	9.657×10^{-24}	9.587×10^{-24}	8.103×10^{-24}	8.048×10^{-24}
R8	2.129×10^{-23}	2.084×10^{-23}	1.884×10^{-23}	1.871×10^{-23}	1.662×10^{-23}	1.651×10^{-23}	1.473×10^{-23}	1.465×10^{-23}
R13	1.281×10^{-23}	1.256×10^{-23}	1.46×10^{-23}	1.452×10^{-23}	1.5×10^{-23}	1.492×10^{-23}	1.472×10^{-23}	1.465×10^{-23}
R18	4.248×10^{-24}	4.171×10^{-24}	7×10^{-24}	6.97×10^{-24}	8.964×10^{-24}	8.932×10^{-24}	1.019×10^{-23}	1.016×10^{-23}
R23	8.293×10^{-25}	8.154×10^{-25}	2.214×10^{-24}	2.208×10^{-24}	3.788×10^{-24}	3.78×10^{-24}	5.225×10^{-24}	5.216×10^{-24}
R28	9.809×10^{-26}	9.659×10^{-26}	4.756×10^{-25}	4.75×10^{-25}	1.164×10^{-24}	1.163×10^{-24}	2.038×10^{-24}	2.038×10^{-24}
R33	7.145×10^{-27}	7.047×10^{-27}	7.049×10^{-26}	7.05×10^{-26}	2.642×10^{-25}	2.643×10^{-25}	6.145×10^{-25}	6.153×10^{-25}

表 2 一氧化碳分子 3-0 跃迁带线强度 (单位: cm/molecule) 续
Table 2. Line intensities (cm/molecule) of the 3-0 band of carbon monoxide.

Line	700 K		800 K		3000 K		4000 K		5000 K		6000 K	
	S_{HITRAN}	$S_{\text{exp.}}$	S_{HITRAN}	$S_{\text{exp.}}$	S_{HITRAN}	$S_{\text{calc.}}$	$S_{\text{calc.}}$	$S_{\text{calc.}}$	$S_{\text{calc.}}$	$S_{\text{calc.}}$	$S_{\text{calc.}}$	
P58	9.582×10^{-29}	9.673×10^{-29}	4.419×10^{-28}	4.463×10^{-28}	3.83×10^{-25}	3.859×10^{-25}	5.005×10^{-25}	5.076×10^{-25}	5.076×10^{-25}	4.668×10^{-25}		
P53	7.756×10^{-28}	7.796×10^{-28}	2.728×10^{-27}	2.743×10^{-27}	5.886×10^{-25}	5.906×10^{-25}	6.755×10^{-25}	6.354×10^{-25}	6.354×10^{-25}	5.558×10^{-25}		
P48	5.197×10^{-27}	5.206×10^{-27}	1.427×10^{-26}	1.43×10^{-26}	8.64×10^{-25}	8.641×10^{-25}	8.811×10^{-25}	7.738×10^{-25}	7.738×10^{-25}	6.466×10^{-25}		
P43	2.873×10^{-26}	2.868×10^{-26}	6.302×10^{-26}	6.296×10^{-26}	1.209×10^{-24}	1.205×10^{-24}	1.108×10^{-24}	9.143×10^{-24}	9.143×10^{-24}	7.331×10^{-24}		
P38	1.303×10^{-25}	1.298×10^{-25}	2.34×10^{-25}	2.331×10^{-25}	1.607×10^{-24}	1.598×10^{-24}	1.338×10^{-24}	1.045×10^{-24}	1.045×10^{-24}	8.074×10^{-24}		
P33	4.822×10^{-25}	4.793×10^{-25}	7.258×10^{-25}	7.218×10^{-25}	2.018×10^{-24}	2.003×10^{-24}	1.546×10^{-24}	1.15×10^{-24}	1.15×10^{-24}	8.6×10^{-24}		
P28	1.445×10^{-24}	1.434×10^{-24}	1.868×10^{-24}	1.855×10^{-24}	2.38×10^{-24}	2.358×10^{-24}	1.697×10^{-24}	1.21×10^{-24}	1.21×10^{-24}	8.799×10^{-24}		
P23	3.467×10^{-24}	3.437×10^{-24}	3.943×10^{-24}	3.912×10^{-24}	2.609×10^{-24}	2.582×10^{-24}	1.751×10^{-24}	1.205×10^{-24}	1.205×10^{-24}	8.563×10^{-24}		
P18	6.541×10^{-24}	6.484×10^{-24}	6.71×10^{-24}	6.655×10^{-24}	2.612×10^{-24}	2.585×10^{-24}	1.671×10^{-24}	1.118×10^{-24}	1.118×10^{-24}	7.793×10^{-24}		
P13	9.394×10^{-24}	9.31×10^{-24}	8.905×10^{-24}	8.831×10^{-24}	2.314×10^{-24}	2.289×10^{-24}	1.427×10^{-24}	9.341×10^{-24}	9.341×10^{-24}	6.42×10^{-24}		
P8	9.466×10^{-24}	9.384×10^{-24}	8.499×10^{-24}	8.43×10^{-24}	1.672×10^{-24}	1.655×10^{-24}	1.006×10^{-24}	6.489×10^{-24}	6.489×10^{-24}	4.416×10^{-24}		
P3	4.78×10^{-24}	4.742×10^{-24}	4.166×10^{-24}	4.136×10^{-24}	7.044×10^{-25}	6.977×10^{-25}	4.186×10^{-25}	2.678×10^{-25}	2.678×10^{-25}	1.813×10^{-25}		
P2	3.303×10^{-24}	3.278×10^{-24}	2.871×10^{-24}	2.85×10^{-24}	4.781×10^{-25}	4.736×10^{-25}	2.838×10^{-25}	1.814×10^{-25}	1.814×10^{-25}	1.227×10^{-25}		
P1	1.699×10^{-24}	1.686×10^{-24}	1.474×10^{-24}	1.463×10^{-24}	2.429×10^{-25}	2.407×10^{-25}	1.441×10^{-25}	9.207×10^{-26}	9.207×10^{-26}	6.228×10^{-26}		
R0	1.755×10^{-24}	1.743×10^{-24}	1.521×10^{-24}	1.511×10^{-24}	2.495×10^{-25}	2.474×10^{-25}	1.481×10^{-25}	9.457×10^{-26}	9.457×10^{-26}	6.396×10^{-26}		
R1	3.527×10^{-24}	3.503×10^{-24}	3.059×10^{-24}	3.04×10^{-24}	5.045×10^{-25}	5.002×10^{-25}	2.996×10^{-25}	1.914×10^{-25}	1.914×10^{-25}	1.295×10^{-25}		
R2	5.274×10^{-24}	5.238×10^{-24}	4.584×10^{-24}	4.555×10^{-24}	7.636×10^{-25}	7.572×10^{-25}	4.539×10^{-25}	2.902×10^{-25}	2.902×10^{-25}	1.964×10^{-25}		
R3	6.952×10^{-24}	6.909×10^{-24}	6.06×10^{-24}	6.025×10^{-24}	1.025×10^{-24}	1.017×10^{-24}	6.106×10^{-25}	3.907×10^{-25}	3.907×10^{-25}	2.645×10^{-25}		
R8	1.315×10^{-23}	1.308×10^{-23}	1.181×10^{-23}	1.175×10^{-23}	2.326×10^{-24}	2.31×10^{-24}	1.407×10^{-24}	9.078×10^{-25}	9.078×10^{-25}	6.182×10^{-25}		
R13	1.412×10^{-23}	1.406×10^{-23}	1.338×10^{-23}	1.334×10^{-23}	3.486×10^{-24}	3.467×10^{-24}	2.165×10^{-24}	1.419×10^{-24}	1.419×10^{-24}	9.764×10^{-24}		
R18	1.087×10^{-23}	1.084×10^{-23}	1.115×10^{-23}	1.112×10^{-23}	4.353×10^{-24}	4.335×10^{-24}	2.809×10^{-24}	1.883×10^{-24}	1.883×10^{-24}	1.315×10^{-24}		
R23	6.393×10^{-24}	6.385×10^{-24}	7.272×10^{-24}	7.268×10^{-24}	4.831×10^{-24}	4.818×10^{-24}	3.277×10^{-24}	2.261×10^{-24}	2.261×10^{-24}	1.61×10^{-24}		
R28	2.958×10^{-24}	2.959×10^{-24}	3.824×10^{-24}	3.827×10^{-24}	4.897×10^{-24}	4.891×10^{-24}	3.532×10^{-24}	2.525×10^{-24}	2.525×10^{-24}	1.842×10^{-24}		
R33	1.092×10^{-24}	1.094×10^{-24}	1.644×10^{-24}	1.648×10^{-24}	4.6×10^{-24}	4.6×10^{-24}	3.567×10^{-24}	2.661×10^{-24}	2.661×10^{-24}	1.997×10^{-24}		

S_{HITRAN} : values from HITRAN; $S_{\text{exp.}}$: experimental values; $S_{\text{calc.}}$: values from calculation; $\sigma = 100 \times (S_{\text{calc.}} - S_{\text{HITRAN}}) / S_{\text{HITRAN}}$.

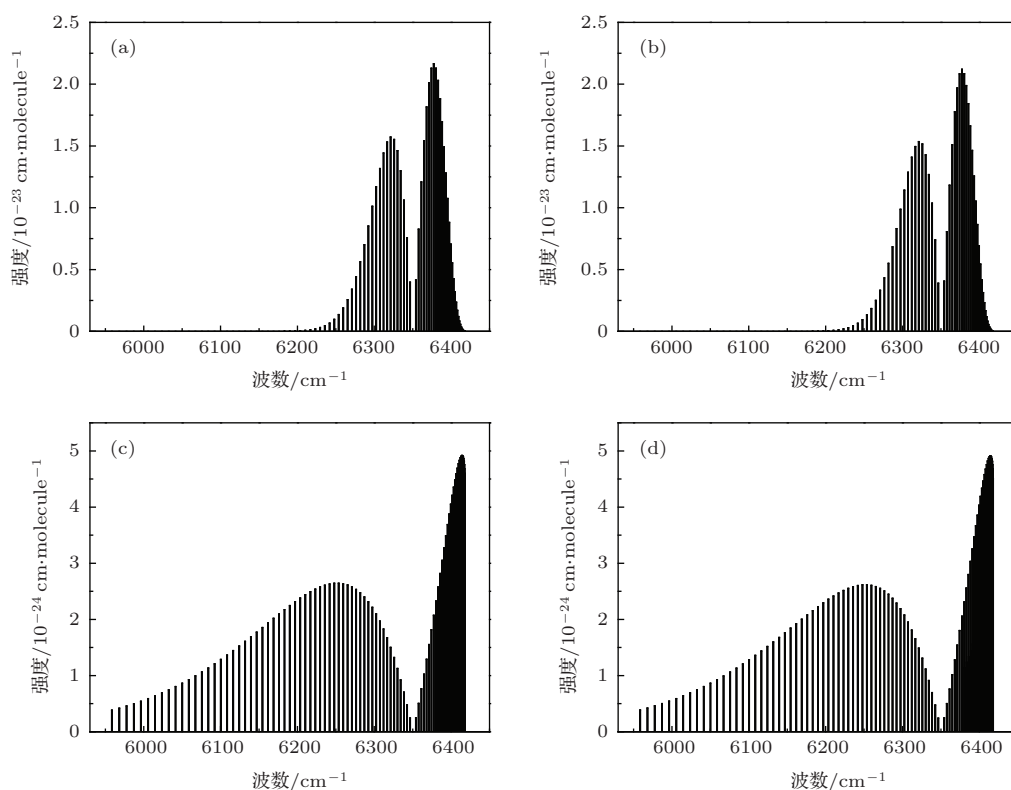


图7 一氧化碳3—0跃迁带线强在300 K下HITRAN值(a)与计算值(b)以及在3000 K下HITRAN值(c)与计算值(d)的比较

Fig. 7. Comparison of line intensities of the 3—0 band of CO from HITRAN with calculated spectra: (a) 300 K, HITRAN; (b) 300 K, calculation; (c) 3000 K, HITRAN; (d) 3000 K, calculation.

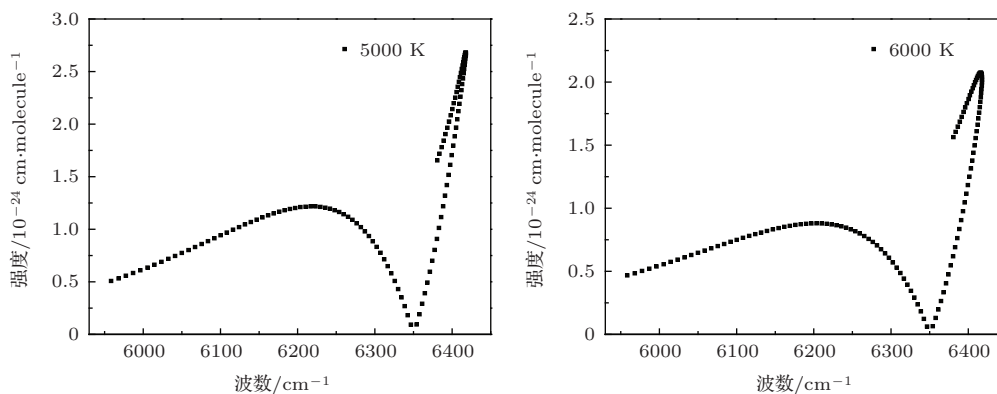


图8 一氧化碳3—0跃迁在5000 K和6000 K下的模拟谱线

Fig. 8. The simulated spectra of the 3—0 band of CO at 5000 K and 6000 K.

5 结 论

本文采用乘积近似的算法计算了二氧化碳和一氧化碳分子高温下的总配分函数, 其中主要对转动配分函数使用了McDowell的非刚性转子模型, 代入了离心扭曲修正因子, 在此基础上计算了二氧化碳分子30012—00001和一氧化碳分子

3—0跃迁带从300 K至6000 K的线强度. 为验证计算方法的准确性, 利用窄线宽的DFB光源, 结合实验室搭建的高温测量系统, 对300—800 K温度范围内1.5 μm附近的11条谱线(9条CO₂分子30012—00001跃迁带、2条CO分子3—0跃迁带上的谱线)的线强值进行了测量. 通过将计算值与实验测量值及HITRAN数据库数值进行对比, 验证了理论计算方法的可靠性, 同时计算及测量所得高

温线强数据可起到对 HITRAN 数据库进行有效的校正和补充的作用. 本极端高温下光谱线强的精确计算方法对于超高温燃烧诊断具有重要意义.

参考文献

- [1] Banwell C N, Mccash E M 1994 *Fundamentals of Molecular Spectroscopy* (4th edition)(New York: McGraw-Hill Higher Education) p21
- [2] Guelachvili G 1979 *J. Mol. Spectrosc.* **75** 251
- [3] Picqué N, Guelachvili G, Dana V, Mandin J Y 2000 *J. Mol. Struct.* **517** 427
- [4] Chackerian C, Freedman R., Giver L P, Brown L R 2001 *J. Mol. Spectrosc.* **210** 119
- [5] Ogilvie J F, Cheah S L, Lee Y P, Sauer S P 2002 *Theor. Chem. Acc.* **108** 85
- [6] Campargue A, Karlovets E V, Kassi S 2015 *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer* **154** 113
- [7] Lamouroux J, Gamache RR, Laraia A L, Hartmann J, Boulet C 2012 *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer* **113** 991
- [8] Predoi-Cross A, Liu W, Murphy R, Povey C, Gamache RR, Laraia A L, McKellar A RW, Hurtmans D R, Devi V M 2010 *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer* **111** 1065
- [9] Toth RA, Hunt RH, Plyler E K 1971 *J. Mol. Spectrosc.* **38** 107
- [10] Boudjaadar D, Mandin J Y, Dana V, Picqué N, Guelachvili G 2006 *J. Mol. Spectrosc.* **236** 158
- [11] Miller C E, Brown L R 2004 *J. Mol. Spectrosc.* **228** 329
- [12] Teffo J L, Claveau C, Valentin A 1998 *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer* **59** 151
- [13] Claveau C, Teffo J L, Hurtmans D, Valentin A 1998 *J. Mol. Spectrosc.* **189** 153
- [14] Toth RA, Brown L R, Miller C E, Devi V M, Benner D C 2006 *J. Mol. Spectrosc.* **239** 221
- [15] Song X S, Yang X D, Guo Y D, Wang J, Cheng X L, Ling-Hu L F 2007 *Commun. Theor. Phys.* **47** 892
- [16] Rothman L S, Gordon I E, Babikov Y, Barbe A, Benner D C, Bernath PF, Birk M, Bizzocchi L, Boudon V, Brown L R, Campargue A, Chance K, Cohen E A, Coudert L H, Devi V M, Drouin B J, Fayt A, Flaud J M, Gamache RR, Harrison J J, Hartmann J, Hill C, Hodges J T, Jacquemart D, Jolly A, Lamouroux J, Roy R J L, Li G, Long D A, Lyulin O M, Mackie C J, Massie S T, Mikhailenko S, Müller H S P, Naumenko O V, Nikitin A V, Orphal J, Perevalov V, Perrin A, Polovtseva E R, Richard C, Smith M A H, Starikova E, Sung K, Tashkun S, Tennyson J, Toon G C, Tyuterev V G, Wagner G 2013 *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer* **130** 4
- [17] Chen W D, Kosterev A A, Tittel F K, Gao X M, Zhao W X 2008 *Appl. Phys. B* **90** 311
- [18] Xia H, Dong F Z, Wu B, Zhang Z R, Pang T, Sun PS, Cui X J, Han L, Wang Y 2015 *Chin. Phys. B* **24** 034204
- [19] Che L, Ding Y J, Peng Z M, Li X H 2012 *Chin. Phys. B* **21** 127803
- [20] Gamache RR, Kennedy S, Hawkins R, Rothman L S 2000 *J. Mol. Struct.* **517** 407
- [21] Herzberg G 1947 *Molecular Spectra and Molecular Structure II. Infrared and Raman Spectra of Polyatomic Molecules* (New York: Van Nostrand) p76
- [22] Norton RH, Rinsland C P 1991 *Appl. Opt.* **30** 389
- [23] McDowell RS 1988 *J. Chem. Phys.* **88** 356
- [24] Song X S, Ling-Hu RF, Li D H, Yan A Y 2007 *Chin. J. At. Mol. Phys.* **24** 647
- [25] Song X S, Cheng X L, Yang X D, Ling-Hu RF 2007 *Acta Phys. Sin.* **56** 4428 (in Chinese) [宋晓书, 程新路, 杨向东, 令狐荣锋 2007 物理学报 **56** 4428]
- [26] Rachet F, Margottinmaclou M, Elazizi M, Henry A, Valentin A 1994 *J. Mol. Spectrosc.* **164** 196
- [27] Liu X 2006 *Ph. D. Dissertation* (California: Stanford University)

Theoretical and experimental study on line intensities of CO₂ and CO transitions near 1.5 μm at high temperatures*

Wang Min-Rui Cai Ting-Dong[†]

(Jiangsu Key Laboratory of Advanced Laser Materials and Devices, School of Physics and Electronic Engineering, Jiangsu Normal University, Xuzhou 221116, China)

(Received 1 April 2015; revised manuscript received 10 July 2015)

Abstract

Accurate spectroscopic parameters of probed species, especially the line strengths at high temperatures, are important for combustion diagnosis based on tunable diode laser absorption spectroscopy (TDLAS). However, most of the line strengths in databases are measured at normal atmospheric temperature and calculated at high temperatures. For example, the mostly used HITRAN database focuses on atmospheric conditions where the temperature ranging from 200–350 K. The high-temperature parameters in HITRAN database are obtained by calculation and the temperatures are limited to 3000 K. In this paper the line strengths of 30012–00001 transition band of CO₂ and 3–0 transition band of CO at normal temperature (300 K) and some high temperatures (400–6000 K) are calculated using our calculated partition function and experimental transition moment squared and Herman-Waills factor coefficients. The total internal partition sums (TIPS) are calculated for CO₂ and CO with the product approximation of the vibrational and the rotational partition functions. The vibrational partition function is calculated in harmonic oscillator approximation. For rotational partition sums, the centrifugal distortion corrections are taken into consideration. In order to validate the calculation, a high-temperature measurement system based on TDLAS is developed using a DFB diode laser near 1.573 μm. High-resolution absorption spectra of CO₂ and CO can be recorded in a heated cell as a function of temperature and pressure. The 9 lines of CO₂ 30012–00001 band and 2 lines of CO 3–0 band have been measured by means of direct absorption spectroscopy in the temperature range of 300–800 K. The corresponding line strengths are inferred from the measured direct absorption spectrum. The calculated result and experimental data are compared with the HITRAN values. The calculated and measured data agree well with the existing databases (HITRAN 2012), the discrepancies being less than 3% for most of the probed transitions. All the results confirm the validity of the calculation of total partition function and the line strengths calculated. The variation of the line strength as a function of temperature for a certain transition is also discussed. While the lower state energy determines the equilibrium molecular population in the unabsorbing state as a function of temperature, how the line strength of a particular transition varies with temperature can also be controlled.

Keywords: CO₂ and CO, partition function, high temperature spectrum, tunable diode laser absorption spectroscopy (TDLAS)

PACS: 33.20.Ea, 33.70.–w, 42.62.–b

DOI: 10.7498/aps.64.213301

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 61475068, 11104237), and the Project Funded by the Priority Academic Program Development of Jiangsu Higher Education Institutions (PAPD), China.

† Corresponding author. E-mail: caitingdong@126.com