

6611---6618 cm^{-1} 之间氨气光谱线强的测量

聂伟 阚瑞峰 许振宇 杨晨光 陈兵 夏晖晖 魏敏 陈祥 姚路 李杭 范雪丽 胡佳屹

Measurements of line strengths for some lines of ammonia in 6611--6618 cm^{-1}

Nie Wei Kan Rui-Feng Xu Zhen-Yu Yang Chen-Guang Chen Bing Xia Hui-Hui Wei Min Chen Xiang Yao Lu Li Hang Fan Xue-Li Hu Jia-Yi

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, **66**, 054207 (2017) DOI: 10.7498/aps.66.054207

在线阅读 View online: <http://dx.doi.org/10.7498/aps.66.054207>

当期内容 View table of contents: <http://wulixb.iphy.ac.cn/CN/Y2017/V66/I5>

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 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.65.084202>

基于多层介质膜光栅的谱合成系统光束特性分析

Analysis of characteristics of combined beam in spectral beam combining system based on multilayer dielectric grating

物理学报.2016, 65(5): 054205 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.65.054205>

气雾化辅助激光诱导击穿光谱检测水中的痕量金属元素

Detection of metal element in water using laser-induced breakdown spectroscopy assisted by nebulizer

物理学报.2015, 64(2): 024212 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.64.024212>

2 μm 波段高灵敏度离轴积分腔装置实际大气 CO_2 测量

High-sensitive off-axis integrated cavity output spectroscopy and its measurement of ambient CO_2 at 2 μm

物理学报.2016, 65(5): 053301 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.65.053301>

1.5 μm 处 CO_2 与 CO 高温线强的实验分析与理论计算

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

物理学报.2015, 64(21): 213301 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.64.213301>

6611—6618 cm^{-1} 之间氨气光谱线强的测量*

聂伟¹⁾²⁾ 阚瑞峰^{1)†} 许振宇¹⁾ 杨晨光¹⁾ 陈兵¹⁾ 夏晖晖¹⁾²⁾ 魏敏¹⁾²⁾
 陈祥¹⁾²⁾ 姚路¹⁾ 李杭¹⁾²⁾ 范雪丽¹⁾ 胡佳屹¹⁾

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)

(2016年8月21日收到; 2016年11月30日收到修改稿)

在可调谐半导体激光吸收光谱(TDLAS)技术中, 目标气体分子的吸收光谱参数, 尤其是线强对温度、浓度的精确反演测量具有重要作用. HITRAN/GEISA/HITEMP等数据库中的光谱参数包含理论计算的结果, 与实际情况存在相当的误差. 本文采用TDLAS-波长扫描直接吸收技术测量了室温下氨气在6611—6618 cm^{-1} 之间的吸收光谱, 利用Voigt线型多峰拟合方法获得了20条谱线在不同压强下的积分吸光度值, 将获得的在不同压强下的积分吸光度值进行线性拟合计算测量温度下的线强值, 同时通过不确定度分析及误差传递计算了实验线强值的不确定度. 通过与HITRAN 2012数据库中值进行对比, 得出氨气在6611—6618 cm^{-1} 波段实验线强值与数据库中值相差0.51%—17.28%, 且实验线强值的不确定度在0.81%—3.3%范围, 小于HITRAN2012中线强的不确定度5%—10%范围.

关键词: 氨气, 可调谐半导体激光吸收光谱技术, 线强, 不确定度

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

DOI: 10.7498/aps.66.054207

1 引言

氨气是一种无色、有刺激性气味、有毒有害、易溶于水的气体, 广泛应用于化工、轻工、化肥、制药、合成纤维等领域^[1]. 尽管氨气在大气中的含量小于10 bbpv, 但其在大气的基本组成成分之一, 也是污染大气的重要成分之一. 氨气泄漏对人类健康安全构成威胁, 同时, 监测人体呼出气中氨气浓度是判断人体健康的一个重要手段^[2,3]. 所以, 氨气的精确测量, 对如化学分析、环境监测、工业、安全等领域有重要作用. 当前氨气测量常需使用数据库中的光谱参数(例如HITRAN^[4], GEISA^[5]和HITEMP^[6]), 这些光谱参数包含有理论计算的结果, 相对实际应用环境而言, 存在一定的误差, 所以修正数据库中氨气光谱参数的实验测量对氨气的精确测量具有重要作用.

近年来, 氨气光谱参数的测量研究在国内外有大量的报道, 其中测量技术主要有腔衰荡光谱(CRDS)技术^[7,8]、腔增强吸收光谱(CEAS)技术^[9]、傅里叶变换光谱(FTS)技术^[10,11]、激光腔内吸收光谱(ICLAS)技术^[12]、光声光谱(PSA)技术^[2,13,14]以及基于激光技术而发展起来的非线性光谱技术^[15,16]等, 这些技术都具有极高的分辨率和探测灵敏度, 通常应用于光谱线位置及弱线测量. 可调谐半导体激光吸收光谱(TDLAS)技术相对上述技术来说, 其探测灵敏度较低, 但是其装置简单, 便于操作, 数据处理较简单, 国内外有很多学者利用TDLAS技术进行光谱参数测量. 例如Michael等^[17]选择了适用于环境监测和燃烧产物监测的1.5 μm 附近(6528.9, 6548.7, 6568.4, 6596.4, 6600.0, 6678.4 cm^{-1})的六条 NH_3 较强吸收线, 利用TDLAS技术测量了这些吸收线的线强、中心频率及低态能级, 并与其他文献中的测量值进行了

* 国家重大科学仪器设备开发专项(批准号: 2014YQ060537)资助的课题.

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

对比; Xu等^[18]利用外腔可调谐二极管激光器测量了6460—6522 cm⁻¹的NH₃光谱参数,其中包含很多弱线吸收,并与傅里叶变换红外光谱技术对比得出其灵敏度更高的结论; Jia等^[19]利用直接可调谐二极管吸收光谱(dTDLAS)技术,测量了1.5 μm(6526—6538 cm⁻¹)附近20条NH₃强吸收线,同时利用离轴积分腔输出光谱(OA-ICOS)技术测量了132条弱线吸收光谱,得到了152条吸收线的线强、自展宽和空气展宽系数; Gibb等^[20]利用直接可调谐二极管吸收光谱(dTDLAS技术)及波长调制的可调谐二极管吸收光谱(2f-TDLAS)技术分别测量了室温下, NH₃在1.51 μm(6595—6600.2 cm⁻¹)附近的六条ν₁+ν₃泛频谱线的氮气、氧气、空气展宽系数和自展宽系数,并将两种方法结果进行了对比. 最近, Sur等^[21]利用TDLAS技术,采用两个量子级联激光器,测量了10.4 μm附近的NH₃的ν₂谱带的Q支跃迁,得到了吸收线的线强及温度依赖线宽系数; Romh等^[22]在室温下测量得到了6369—6578 cm⁻¹波长范围的氨气同位素(¹⁵NH₃)的吸收光谱参数.

在之前的报道中,很少对氨气光谱参数实验结果的不确定度大小进行详细评估,并且NH₃在6611—6618 cm⁻¹附近的吸收线的测量的报道也很少,而6611—6618 cm⁻¹范围的部分吸收线强度较强,其他气体吸收线对其干扰影响较小,比较适用于NH₃测量^[23,24],所以,对氨气在6611—6618 cm⁻¹波段范围内光谱参数的精确测量,对氨气测量精度的提高具有重要的意义.

2 线强测量原理与不确定度计算方法

根据朗伯-比尔定律有

$$\frac{I_t(\nu)}{I_0(\nu)} = \exp(-k_\nu L), \quad (1)$$

其中, $I_0(\nu)$ 为经目标气体的入射光强(单位为mW), $I_t(\nu)$ 为出射光强(单位为mW), ν 为入射激光的频率(单位为cm⁻¹), L 为有效吸收光程(单位为cm), k_ν 为吸收系数. 对于某单一跃迁 i , 吸收系数 k_ν 为

$$k_\nu = PX_{\text{abs}}S_i(T)\phi_\nu(\nu - \nu_0), \quad (2)$$

其中, P 为气体池内气体总压(单位为atm), X_{abs} 为目标气体的体积分数, $S_i(T)$ 为吸收线 i 的在

温度 T (单位为K)的线强(单位为cm⁻²·atm⁻¹), $\phi_\nu(\nu - \nu_0)$ 为归一化的线型函数, 其在整个频域上的积分值为1^[25].

根据(1)式和(2)式, 可得到吸光度 $\alpha(\nu)$ 和积分吸光度 A 分别为:

$$\alpha(\nu) = \ln\left(\frac{I_0}{I_t}\right) = PX_{\text{abs}}S_i(T)L\phi_\nu(\nu - \nu_0), \quad (3)$$

$$A = \int_{-\infty}^{+\infty} \alpha(\nu) d\nu = PX_{\text{abs}}S_i(T)L. \quad (4)$$

根据(3)式和(4)式可得到线强计算公式为

$$S_i(T) = \frac{A}{PX_{\text{abs}}L} = \frac{\Delta A}{\Delta(PX_{\text{abs}})L}. \quad (5)$$

通过Voigt线型拟合方法获得各个吸收峰的积分吸光度值, 根据(5)式即可计算得出该吸收线在相应压强下线强值, 再对不同压强下线强值进行线性拟合, 即可得到相应温度下的线强值.

假设(5)式中的所有变量之间是互相独立的, 此时, 实验线强值的不确定度可表示为

$$\begin{aligned} \Delta_S &= \left[\left(\frac{\partial S}{\partial A} \right)^2 \Delta_A^2 + \left(\frac{\partial S}{\partial P} \right)^2 \Delta_P^2 + \left(\frac{\partial S}{\partial X_{\text{abs}}} \right)^2 \Delta_{X_{\text{abs}}}^2 \right. \\ &\quad \left. + \left(\frac{\partial S}{\partial L} \right)^2 \Delta_L^2 + \left(\frac{\partial S}{\partial T} \right)^2 \Delta_T^2 \right]^{1/2}, \quad (6) \end{aligned}$$

其中, Δ_A , Δ_P , Δ_X , Δ_L , Δ_T 分别为 A , P , X , L , T 的不确定度. 大括号内前四项偏导数值可以通过(5)式求得. 第五项根据线强与温度的依赖关系求得, 如(7)式所示.

$$\begin{aligned} \frac{\partial S}{\partial T} &= \frac{S(T_0)Q(T_0)T_0}{1 - \exp\left(-\frac{hc\nu_0}{kT_0}\right)} \\ &\quad \times \frac{\exp\left[-\frac{hcE''}{k}\left(\frac{1}{T} - \frac{1}{T_0}\right)\right]}{aT + bT^2 + cT^3 + dT^4} \\ &\quad \times \left\{ \left(\frac{hcE''}{kT^2} - \frac{a + 2bT + 3cT^2 + 4dT^3}{aT + bT^2 + cT^3 + dT^4} \right) \right. \\ &\quad \times \left[1 - \exp\left(-\frac{hc\nu_0}{kT}\right) \right] \\ &\quad \left. - \frac{hc\nu_0}{kT^2} \exp\left(-\frac{hc\nu_0}{kT}\right) \right\}, \quad (7) \end{aligned}$$

其中 h 为普朗克常数(单位为J·s), k 为玻尔兹曼系数(单位为J/K), E'' 为吸收线的低态能级值(单位为cm⁻¹), c 为真空光速(单位为cm/s), ν_0 为吸收线的中心频率(单位为cm⁻¹), $S(T_0)$ 为参考温度($T_0 = 296$ K)下的线强(单位为cm⁻²/atm), $Q(T_0)$

和 $Q(T)$ 分别是参考温度和实验温度下的配分函数,配分函数的计算采用三阶多项式的形式,其中系数 a, b, c, d 的值可参考HITRAN 2012中值.

3 实验过程

基于TDLAS-波长扫描直接吸收(dTDLAS)技术对氨气光谱参数测量,实验系统如图1所示.

实验所使用的激光器为蝶形封装的1512 nm的DFB二极管激光器(NEL electronics corporation),由耦合的单模非保偏光纤输出,出光功率最大约为10 mW,线宽约为2 MHz,激光器置于通用蝶形底座上(Thorlabs LM14S2),为激光器提供温度和电流驱动,激光器出光波长由电流和温度模块(Thorlabs OEM controllers ITC102)控制,控制器典型的温度稳定性为 $<0.004\text{ }^{\circ}\text{C}$.通过温度和电流调节,能够获得激光器在 $6611\text{--}6618\text{ cm}^{-1}$ 波段的激光输出.激光器工作时,固定激光器的温度,通过电流调谐实现波长扫描,扫描频率为1 kHz,电流调谐采用函数发生器输出的锯齿波来实现,并使周期内起始时间段激光器处于出光阈值以下,用作背景光辐射、探测器和电子学噪声等造成直流偏移量的本底参考.出射激光通过分束器分成

两束,一束经准直器后通过标准具由InGaAs探测器1(Thorlabs DET10C)接收形成干涉信号用于波长标定,另一束经准直器后由单模光纤传输到充满氨气的吸收池(单程不锈钢吸收池),由InGaAs探测器2(Thorlabs DET10C)接收,两探测器信号经放大和转换后,由上位机控制采集卡进行采集和后处理.

由于氨气具有很强的吸附性,所以实验选用纯氨气($>99.6\%$)为目标气体,以保证测量浓度的精确.实验中,采用温度传感器(DT-670-CU)测量室温,采用电容式真空计(Pfeiffer CMR361)测量压强.具体实验步骤如下:

- 1) 用高纯氨气(99.99%)对气体池进行流洗,流洗几次后对气体池抽真空;
- 2) 向气体池内充入纯氨气对气体池进行流洗,避免氨气管道里空气的影响,最大限度地减小杂质气体对实验的干扰;
- 3) 向气体池充入纯氨气;
- 4) 由于氨气具有很强的吸附性,在每次充入纯氨气后,都应将氨气在气体池内保持几个小时,使其吸附稳定,保证压强值测量的精度;
- 5) 记录温度、压力值,采集光谱及后处理.

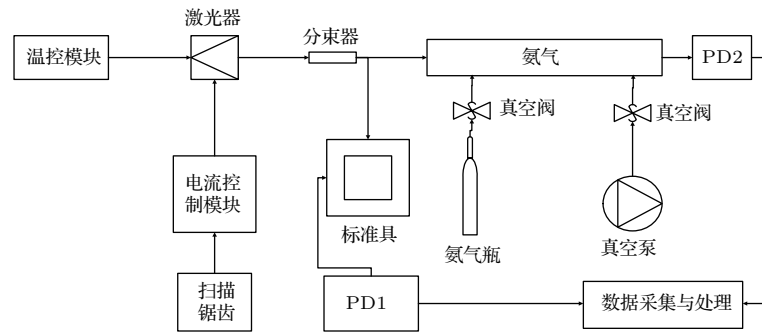


图1 基于TDLAS技术的实验装置结构图

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

4 实验结果与不确定分析

实验采用固定温度,锯齿波电流扫描的方式实现DFB激光器的波长调谐输出,由于输入激光器电流大小的限制,导致这种方式获得的光谱范围有限,我们采用改变温度,多段采集的方法,获得 $6611\text{--}6618\text{ cm}^{-1}$ 范围内的吸收线.由于氨气在

$6611\text{--}6618\text{ cm}^{-1}$ 波段范围吸收线较多,基线获取中常用的三阶多项式拟合的方法^[26,27]不再适用,加上各吸收线间隔较小,容易因压力展宽而使谱线重叠,所以我们采用无吸收线做基线,低压下测量的方法.同时,为减小随机误差,提高信噪比,所有测量光谱都经过100次平均.在室温(301.5 K)下采集干涉计的干涉信号、无吸收基线及纯氨气直接吸收信号,结果如图2所示.

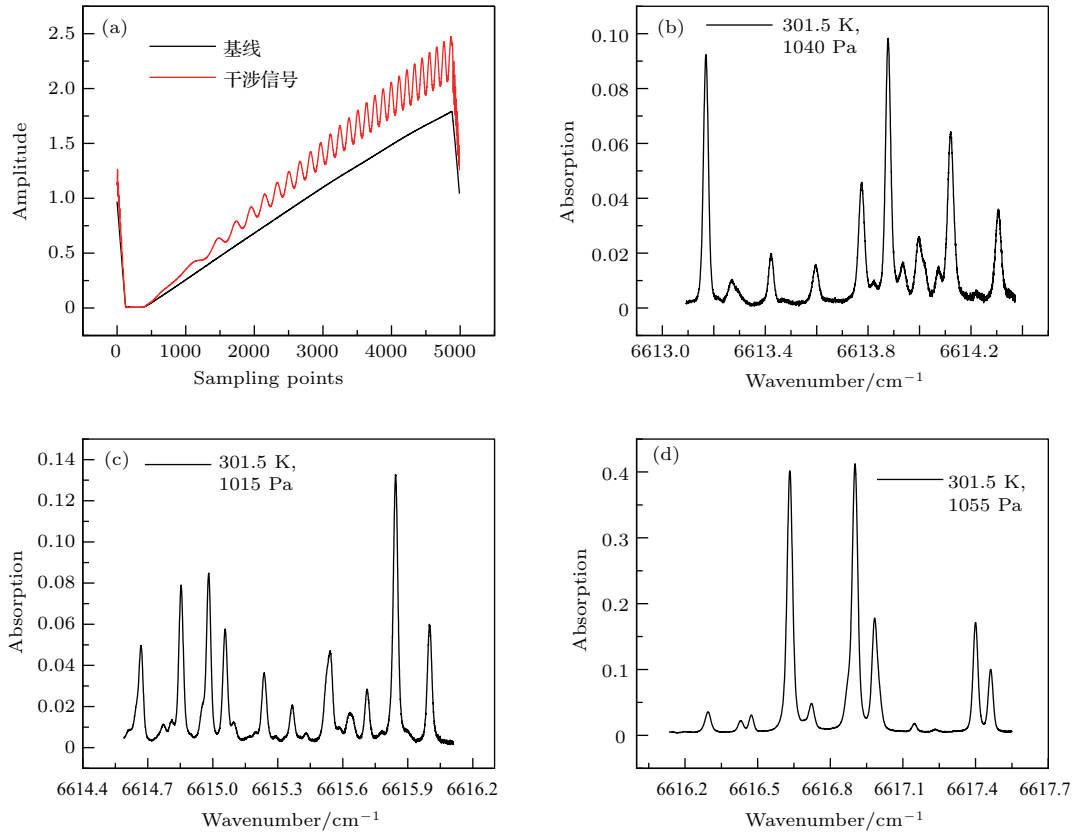


图2 (a) 无吸收的基线及经干涉计的干涉信号; (b), (c), (d) 室温及相应压强下不同波段的实验光谱
 Fig. 2. (a) The baseline and interference signal; (b), (c), (d) spectrum of different bands and pressures at room temperature.

关于光谱线型拟合方法的研究很多^[28,29]. 对我们的实验环境(常温低压), 较适合用Voigt线型对原始光谱进行拟合^[25], 得到各吸收线在不同压强下的积分吸光度值(如图3所示), 根据(5)式对积分吸光度值进行线性拟合即可得到吸收线在该温度下的线强值.

同理, 我们对6611—6618 cm⁻¹范围的其他吸收线进行处理, 得到相应的线强值.

实验测量过程中, 误差主要来源于: ①向气体池充纯氮气之前, 无法将气体池抽至绝对真空带来的氮气浓度误差; ②无吸收信号(基线)测量误差; ③压强测量误差; ④温度测量误差; ⑤光程测量误差; ⑥原始光谱信号拟合误差. 误差大小分析过程如下.

1) 实验之前, 对气体池进行高纯氮气流洗, 再用干泵(安捷伦Varian TriScroll 300)进行抽真空, 抽至10 Pa后, 向气体池内充入5000 Pa的纯氮气, 然后再不断减小压强以测量不同压强下的光谱信号, 由于干泵无法将气体池抽至绝对真空, 这样引入的浓度值误差为10/5000 = 0.2%. 对于气体池,

实验之前用氦质谱检漏仪进行漏率测量, 整个气体池及阀的漏率为10⁻⁹ Pa·m³/s, 这样, 在整个实验过程中, 系统压强变化小于2.45 × 10⁻³ Pa, 所以, 泄漏导致的浓度误差可忽略不计.

2) 由于采用无吸收的锯齿波作为基线. 首先在实验之前对气体池进行抽真空或充入高纯氮气, 测量出光信号作为基线, 由于无法将气体池抽至绝对真空, 气体池内必然会存在少量氮气, 所以基线并不是理想的无吸收, 这样带来的误差值小于0.1%^[30].

3) 压强测量误差主要来源于压强测量仪器及气体池泄漏. 过程1)中分析已确定了气体池泄漏对压强大小的影响可忽略不计, 实验中压强测量使用电容式真空计(Pfeiffer-CMR361), 其测量值的不确定度为读数的0.25%.

4) 温度测量的误差主要因为温度传感器(DT-670-CU)的读数(室温)可能与气体池内气体微小的不相等以及气体池内气体温度可能存在非均匀性, 而且测量压强不同, 根据分子碰撞理论, 温度值可能也不同. 我们参考文献^[30]的结果, 温度测量

的不确定度为0.14%.

5) 实验采用单程不锈钢气体池, 两端窗片材料是氟化钙, 并带 1.5° 斜角以防止干涉现象的产生, 气体池长度采用机械测量的结果为 (500 ± 2) mm, 这里忽略由于充入氨气后导致气体池内的折射率的变化以及窗片的折射导致光程微小变化.

6) 由于噪声及展宽的影响, 原始光谱的拟合误差是误差的主要来源之一, 拟合误差大小根据实际拟合残差来评估. 不同吸收线在不同压强下的光谱

拟合残差都不同, 我们取各个压强下拟合的相对误差的平均值作为该吸收线的积分吸光度值的不确定度.

根据以上各物理量的不确定度分析及线强和误差传递公式, 我们计算得到了 $6611\text{--}6618\text{ cm}^{-1}$ 范围内的 20 条氨气吸收线的线强值及相应的不确定度, 并将其与 HITRAN 2012 数据库^[4] 中的值进行对比, 对比结果如表 1 所列.

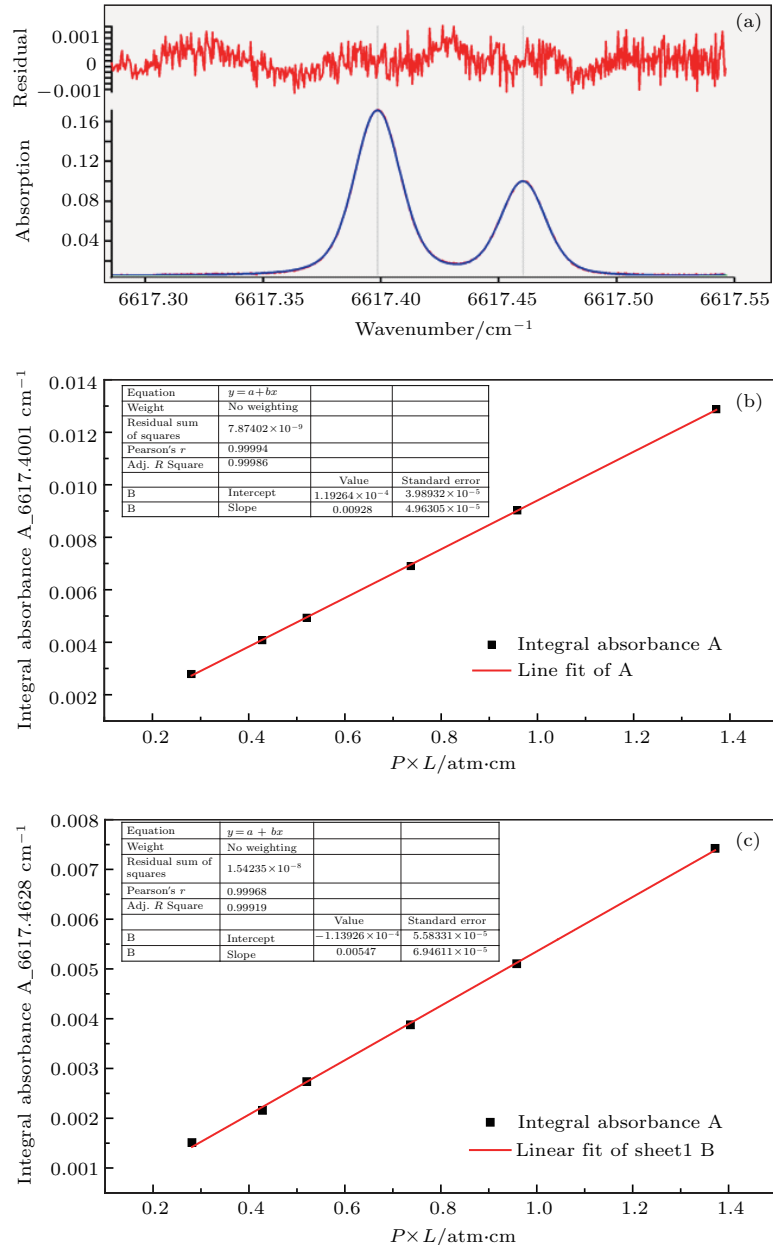


图3 (a) 两条吸收线 Voigt 线型多峰拟合的结果; (b), (c) 两条吸收线在不同压强下的积分吸光度线性拟合的结果
Fig. 3. (a) The result of Voigt multi-peak Fit for two lines; (b), (c) the result of integral absorbance line fitting for the two lines.

表1 实验线强值及不确定度与 HITRAN 2012 数据库中的值进行对比

Table 1. Summary of all measured values and comparison to the values in the HITRAN 2012 database.

ν_0/cm^{-1}	S-experiment data/ $\text{cm}^{-2}\cdot\text{atm}^{-1}$	Uncertainty of experiment	S-HITRAN 2012(301.5 K)/ $\text{cm}^{-2}\cdot\text{atm}^{-1}$	Uncertainty of HITRAN2012	Deviation of the measured and HITRAN2012
6611.7103	0.00554	1.71%	0.005599	<5%	1.05%
6611.9617	0.0211	1.45%	0.02076	5%—10%	-1.49%
6612.2485	0.0203	0.93%	0.01997	5%—10%	-1.65%
6613.1692	0.00416	1.18%	0.005029	5%—10%	17.28%
6613.4231	9.829×10^{-4}	2.52%	0.001104	5%—10%	10.96%
6613.7749	0.00267	2.03%	0.003043	5%—10%	12.25%
6613.8778	0.0046	1.82%	0.005453	5%—10%	15.64%
6614.1211	0.00435	1.67%	0.004328	5%—10%	-0.51%
6614.3054	0.00214	3.25%	0.002080	5%—10%	-2.88%
6614.8541	0.00379	1.98%	0.004372	5%—10%	13.31%
6614.9812	0.00419	3.18%	0.004389	5%—10%	4.53%
6615.0573	0.00294	3.29%	0.003072	5%—10%	4.30%
6615.2373	0.00173	2.41%	0.002020	5%—10%	14.36%
6615.8434	0.0084	1.36%	0.007777	5%—10%	-8.01%
6616.0007	0.00325	1.87%	0.003388	5%—10%	4.07%
6616.2953	0.00234	3.33%	0.002018	5%—10%	-15.96%
6616.6329	0.0244	0.92%	0.02575	5%—10%	5.24%
6616.9021	0.0242	0.89%	0.02556	5%—10%	5.32%
6617.4001	0.00928	0.81%	0.009206	5%—10%	-0.80%
6617.4628	0.00547	1.14%	0.005027	5%—10%	-8.81%

5 结 论

本文基于波长扫描直接吸收可调谐二极管激光吸收光谱 (dTDLAS) 技术, 测量了氦气在 6611—6618 cm^{-1} 区间的吸收线, 计算得到了其中 20 条较强吸收线的线强, 并对各吸收线的线强实验结果及其不确定度进行了较详细的分析. 分析结果表明, 实验线强值与 HITRAN 2012 数据库中值相差 0.51%—17.28%, 证明了数据库中值确实存在相当的误差. 同时, 实验线强值的不确定度在 0.81%—3.3% 范围, 小于 HITRAN 2012 数据库中的线强的不确定度 (5%—10%), 说明我们实验数据的可靠性较高. 这对于今后环境监测或流场诊断等领域中氦气测量精度的提高具有重要意义.

参考文献

[1] Wang F, Huang Q X, Li N, Yan J H, Chi Y, Cen K F 2007 *Acta Phys. Sin.* **56** 3867 (in Chinese) [王飞, 黄群

星, 李宁, 严建华, 池涌, 岑可法 2007 物理学报 **56** 3867]
 [2] Yury A B, Anatoliy A K, Gerard W, Frank K T, Terence H R, John D B 2008 *LACSEA LMB4*
 [3] Rafał L, Anatoliy A K, David M T, Terence H R, Steven S, Timothy B S, Frank K T 2011 *SPIE* 7945K1
 [4] Rothman L S, Gordon I E, Babikov Y, et al. 2013 *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer* **130** 4
 [5] Jacquinet-Husso N, Scott N A, Chédin A, et al. 2008 *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer* **109** 1043
 [6] Rothman L S, Gordon I E, Barber R J, Dothe H, Gamache R R, Goldman A, Perevalov V I, Tashkun S A, Tennyson J 2010 *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer* **111** 2139
 [7] Paldus B A, Harb C C, Spence T G, Zare R N, Gmachl C, Capasso F, Sivco D L, Baillargeon J N, Hutchinson A L, Cho A Y 2000 *Opt. Lett.* **25** 666
 [8] Manne J, Sukhorukov O, Jäger W, Tulip J 2006 *Appl. Opt.* **45** 9230
 [9] O'Leary D M, Orphal J, Ruth A A, Heitmann U, Chelin P, Fellows C E 2008 *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer* **109** 1004
 [10] Barton E J, Yurchenko S N, Tennyson J, Clausen S, Fateev A 2015 *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer* **167** 126

- [11] Guinet M, Jeseck P, Mondelain D, Pepin I, Janssen C, Camy-Peyret C, Mandin J Y 2011 *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer* **112** 1950
- [12] Naumenko O V, Béguier S, Leshchishina O M, Campargue A 2010 *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer* **111** 36
- [13] Webber M E, MacDonald T, Pushkarsky M B, Patel C K N, Zhao Y, Marcillac N, Mitloehner F M 2005 *Meas. Sci. Technol.* **16** 1547
- [14] Milton B, da Marcelo G S, Marcelo S S, Delson U S, Helion V, Andras M, Peter H 2006 *Appl. Opt.* **45** 4966
- [15] Maddaloni P, Gagliardi G, Malara P, de Natale P 2005 *Appl. Phys. B* **80** 141
- [16] Tiwari V B, Singh S, Mishra S R, Rawat H S, Mehendale S C 2006 *Appl. Phys. B* **83** 93
- [17] Michael E W, Douglas S B, Ronald K H 2001 *Appl. Opt.* **40** 2031
- [18] Xu L H, Liu Z, Yakovlev I, Tretyakov M Y, Lees R M 2004 *Infrared Phys. Technol.* **45** 31
- [19] Jia H, Zhao W, Cai T, Chen W, Zhang W, Gao X 2009 *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer* **110** 347
- [20] Gibb J S, Hancock G, Peverall R, Ritchie G A D, Russell L J 2004 *Eur. Phys. J. D* **28** 59
- [21] Sur R, Spearrin R M, Peng W Y, Strand C L, Jeffries J B, Enns G M, Hanson R K 2016 *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer* **175** 90
- [22] Romh J E, Cacciani P, Taher F, Čermák P, Cosléou J, Khelkhal M A 2016 *J. Mol. Spectrosc.* **4** 1
- [23] He Y, Zhang Y J, Wang L M, You K 2012 *Opt. Technol.* **38** 421 (in Chinese) [何莹, 张玉钧, 王立明, 尤坤 2012 光学技术 **38** 421]
- [24] Schilt S 2010 *Appl. Phys. B* **100** 1
- [25] Zhou X 2005 *Ph. D. Dissertation* (California: Stanford University)
- [26] Chen J Y, Liu J G, He Y B, Wang L, Jiang Q, Xu Z Y, Yao L, Yuan S, Ruan J, He J F, Dai Y H, Kan R F 2013 *Acta Phys. Sin.* **62** 224206 (in Chinese) [陈玖英, 刘建国, 何亚柏, 王辽, 江强, 许振宇, 姚路, 袁松, 阮俊, 何俊峰, 戴云海, 阚瑞峰 2013 物理学报 **62** 224206]
- [27] Xu Z Y, Liu W Q, Liu J G, He J F, Yao L, Ruan J, Chen J Y, Li Han, Yuan S, Geng H, Kan R F 2012 *Acta Phys. Sin.* **61** 234204 (in Chinese) [许振宇, 刘文清, 刘建国, 何俊峰, 姚路, 阮俊, 陈玖英, 李晗, 袁松, 耿辉, 阚瑞峰 2012 物理学报 **61** 234204]
- [28] Goldenstein C S, Hanson R K 2015 *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer* **15** 127
- [29] Goldenstein C S, Jeffries J B, Hanson R K 2013 *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer* **130** 100
- [30] Pogány A, Klein A, Ebert V 2015 *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer* **165** 108

Measurements of line strengths for some lines of ammonia in 6611–6618 cm^{-1} *

Nie Wei¹⁾²⁾ Kan Rui-Feng^{1)†} Xu Zhen-Yu¹⁾ Yang Chen-Guang¹⁾ Chen Bing¹⁾
 Xia Hui-Hui¹⁾²⁾ Wei Min¹⁾²⁾ Chen Xiang¹⁾²⁾ Yao Lu¹⁾ Li Hang¹⁾²⁾
 Fan Xue-Li¹⁾ Hu Jia-Yi¹⁾

1) (Key Laboratory of Environmental Optics and Technology, Anhui Institute of Optics and Fine Mechanics, Chinese Academy of Sciences, Hefei 230031, China)

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

(Received 21 August 2016; revised manuscript received 30 November 2016)

Abstract

The target gas molecular absorption spectrum parameters especially line strengths are very important for measuring temperature and concentration with tunable diode laser absorption spectroscopy (TDLAS) technique. Usually, researchers use line strengths which come from spectrum database, like HITRAN and GEISA and HITEMP spectra database, but those database include values from the theoretical computation, as is well known, there is a big error between the theoretical value and the actual value. In order to modify the line strengths of the database, 20 ammonia spectrum absorption lines in a wavenumber range between 6611 and 6618 cm^{-1} are measured at different pressures by using direct tunable diode laser absorption spectroscopy (dTDLAS) technique. The measurement procedure is repeated at least 10 times at each pressure, and then average value is calculated. Voigt fitting is used to obtain all line integral area, and then the line integral area is obtained by linear fitting. The slope of the fitting straight line equals line strength. Uncertainty analysis is given for the measurements. The measured linestrength is a function of integrated area, temperature, pressure, species mole fraction and effective path length. So, the calculated linestrength uncertainties based on those parameters uncertainties, and the uncertainties of pressure, species mole fraction and effective path length are similar for all transitions with $\Delta_P = 0.25\%$, $\Delta_x = 0.2\%$, and $\Delta_L = 0.4\%$. The uncertainties of the integrated area and temperature are related to different lines, and their values come from the actual measurement. In the end, uncertainty propagation formula is used to calculate linestrength uncertainty. Uncertainties of our measured line strengths are in a 0.81%–3.33% range. Our measured line strength values are different from line strengths in the HITRAN 2012 database, and the deviations are in 0.51%–17.28% range.

Keywords: ammonia, tunable diode laser absorption spectroscopy, line strengths, uncertainties

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

DOI: 10.7498/aps.66.054207

* Project supported by the National Key Scientific Instrument and Equipment Development Project of China (Grant No. 2014YQ060537).

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