

УДК 539.534, 539.194

# Измерения и анализ спектра перекрывающихся линий поглощения чистого NH<sub>3</sub> в области 6611,6–6613,5 см<sup>-1</sup>

В.А. Капитанов<sup>1</sup>, Я.Я. Понуровский<sup>2</sup>, К.Ю. Осипов<sup>1✉</sup>, Ю.Н. Пономарев<sup>1\*</sup>

<sup>1</sup>Институт оптики атмосферы им. В.Е. Зуева СО РАН  
634055, г. Томск, пл. Академика Зуева, 1

<sup>2</sup>Институт общей физики им. А.М. Прохорова РАН  
119991, ГСП-1, г. Москва, ул. Вавилова, 38

Поступила в редакцию 22.07.2022 г.;  
после доработки 25.08.2022 г.;  
принята к печати 15.09.2022 г.

Представлены результаты экспериментальных исследований спектров поглощения чистого NH<sub>3</sub> в областях 6604,3–6606,3 и 6611,6–6613,5 см<sup>-1</sup> при комнатной температуре и давлении NH<sub>3</sub> 0,002–0,04 атм. Измерения проводились в отделе диодной лазерной спектроскопии Института общей физики им. А.М. Прохорова РАН на высокочувствительном диодном лазерном спектрометре высокого разрешения с отношением сигнал/шум ~ 1400. Спектры анализировались с использованием контура Фойгта. Представлены результаты восстановления параметров спектральных линий поглощения: положения центров, интенсивностей, коэффициентов стоклоновательных самоуширений и сдвигов. Проведено сравнение с параметрами из базы данных HITRAN. Обнаружено двукратное отличие измеренных значений интенсивностей линий от значений, приведенных в HITRAN.

**Ключевые слова:** NH<sub>3</sub>, диодная лазерная спектроскопия, спектральные линии, форма контура, параметры линии, HITRAN; NH<sub>3</sub>, diode laser spectroscopy, spectral line, lineshape, line parameters, HITRAN.

## Введение

Аммиак является одним из наиболее распространенных химических веществ в жизнедеятельности человека и одним из важнейших продуктов химической промышленности. Он применяется для производства азотной кислоты, азотных удобрений, взрывчатых веществ и т.д. Аммиак входит в список загрязнителей окружающей среды и наряду с такими молекулами, как CO, NO, CH<sub>4</sub>, <sup>13</sup>CO<sub>2</sub>, является молекулой-биомаркером [1, 2]. В связи с этим необходимы непрерывный мониторинг NH<sub>3</sub> и разработка надежных, дешевых средств его измерения в окружающей среде, промышленности и медицине [3, 4].

На сегодняшний день один из наиболее высокочувствительных и высокоселективных методов газового анализа – диодная лазерная спектроскопия. Однако преимущества этого метода во многом определяются качеством спектральных данных, представленных в базе данных HITRAN. Одним из перспективных спектральных диапазонов для мониторинга NH<sub>3</sub> является область 6604–6613 см<sup>-1</sup> [2]. В настоящей работе приводятся результаты экспериментальных исследований и анализа спектров

поглощения чистого NH<sub>3</sub> в области 6604–6613 см<sup>-1</sup> при комнатной температуре и диапазоне давлений NH<sub>3</sub> 0,001–0,04 атм.

Цель настоящей работы – экспериментальные исследования и анализ спектра чистого NH<sub>3</sub> для создания приборов непрерывного мониторинга NH<sub>3</sub> в атмосфере.

## Эксперимент

Экспериментальная установка (рис. 1) включает в себя двухканальный диодный лазерный спектрометр и вакуумную систему для приготовления газовых смесей. Основа измерительного комплекса – DFB-лазер фирмы NEL с длиной волны  $\lambda = 1,512 \text{ мкм}$  и два оптических канала: измерительный и референтный.

В референтном канале находится ячейка длиной 20 см с чистым ацетиленом при низком давлении (13,3322 мбар) для стабилизации и калибровки длины волны по линии поглощения C<sub>2</sub>H<sub>2</sub>. Управление накачкой и перестройка длины волны излучения DFB-лазера обеспечиваются периодическими импульсами тока трапециевидной формы с частотой повторений 250 Гц и длительностью импульса 3 мс. Длина волны диодного лазера в каждом импульсе перестраивается в диапазоне 1,2–1,5 см<sup>-1</sup>. Температура кристалла лазера стабилизируется с точностью  $2 \cdot 10^{-4} \text{ }^{\circ}\text{C}$  при изменении его температуры от 0

\* Венедикт Андреевич Капитанов (venedikt@iao.ru); Яков Яковлевич Понуровский (ponur1960@yandex.ru); Константин Юрьевич Осипов (osipov@iao.ru); Юрий Николаевич Пономарев (yuron@iao.ru).

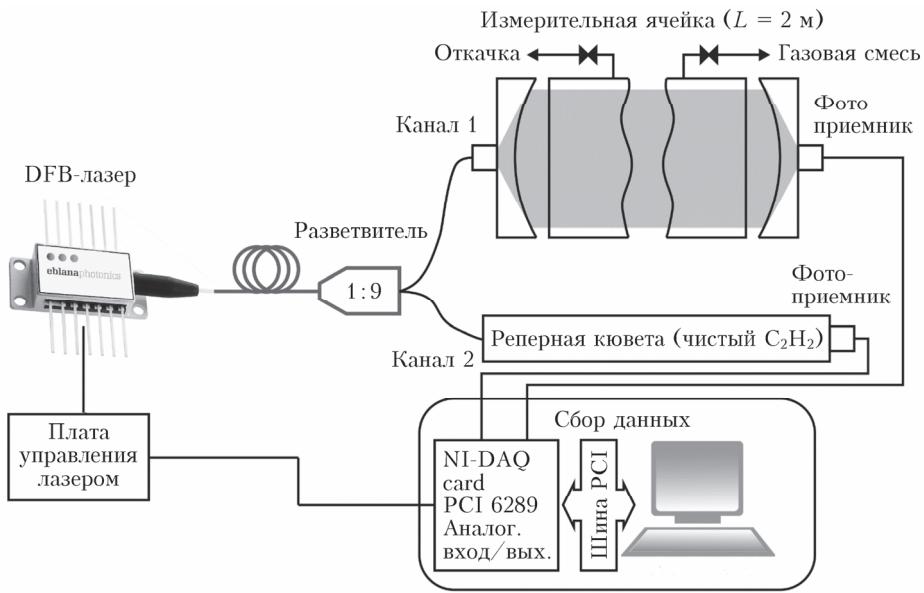


Рис. 1. Блок-схема диодного лазерного спектрометра высокого разрешения

до 55 °C. При средней величине тока накачки  $\approx 60$  мА мощность лазера не превышает 10 мВт, а полуширина линии генерации  $\approx 5$  МГц ( $0,00016$  см $^{-1}$ ).

Система сбора и обработки данных спектрометра обеспечивает стабилизацию и калибровку длины волны лазера, регистрацию пропускания кюветы с  $C_2H_2$  ( $I_{C_2H_2}$ ), пустой кюветы ( $I_0$ ) и с чистым  $NH_3$  ( $I_{NH_3}$ ), пропускания интерферометра Фабри–Поро (ИФП) для линеаризации шкалы длин волн, а также определяет логарифмы отношений  $I_{C_2H_2}/I_0$  и  $I_{NH_3}/I_0$ . Сигналы давления и температуры в ячейке также регистрируются системой сбора данных. На рис. 2 (цв. вкладка) приведен пример выходных данных системы сбора и обработки спектрометра.

Стабилизация и калибровка длины волны лазера осуществляются по максимуму логарифма отношения  $I_{C_2H_2}/I_0$ . Обработка спектра поглощения  $C_2H_2$  и анализ положения центра линии ( $v_0 = 6605,13800(1)$  см) позволили определить погрешность стабилизации и калибровки длины волны лазерного излучения, которая составила  $\sim 1e-5$  см $^{-1}$ .

Аммиак обладает очень высокими адсорбционными и десорбционными свойствами. Особое внимание при регистрации спектра уделялось стабильности его давления и температуры. До измерений ячейка с аммиаком, вакуумная система напуска, откачки и контроля давления  $NH_3$  предварительно пассивировались чистым аммиаком при давлении 0,0066 атм не менее шести дней. Во время измерений сигналы давления и температуры в ячейке регистрировались системой сбора данных. Давление в ячейке в диапазоне 0  $\div$  0,01 атм (погрешность 1e-4 атм) контролировалось с помощью датчика Sensor, а в диапазоне 0  $\div$  1 атм (погрешность 0,1 атм) – датчиком «Элемер» АИР-20/M2. Благодаря короткому времени регистрации спектра (2,016 с) и скорости десорбции аммиака  $\approx 1,3e-4$  атм/ч давление и температура в измерительной ячейке практически постоянны. Это касается и измерений базовой линии.

Высокочистый  $NH_3$  ( $C = 99,9999\%$ ) был синтезирован в АО НПП «Салют» (г. Нижний Новгород). Вакуумируемая измерительная ячейка изготовлена из трубы из нержавеющей стали марки AISI 304, отличающейся высокими коррозионной стойкостью и устойчивостью к агрессивным средам. Диаметр трубы 40 мм, толщина 2 мм. Ячейка выполнена по четырехходовой оптической схеме: базовая длина 50 см, полная оптическая длина 199,83 см, объем 0,5 л. Покрытие поворотного и сферического зеркал, размещенных в полости кюветы, было из золота. Диаметр сферического зеркала 35 мм, размер поворотного – 10  $\times$  10 мм. В дальнейшем отработанный аммиак замораживался в азотной ловушке, а затем утилизировался химическим поглотителем паров аммиака ХПА-Н (<https://aquaventure.ru/>).

### Анализ экспериментальных спектров и восстановление спектральных параметров

Сечение поглощения аммиака определялось в соответствии с законом Бугера–Ламберта–Бера:

$$\sigma_v = \frac{1}{l \cdot n} \ln \frac{I_{NH_3}}{I_0},$$

где  $l$  – длина оптического хода;  $n = L(T_0/P_0)(P/T)$  – концентрация молекул  $NH_3$ ;  $L = 2,6867774e^{19}$  см $^{-3}$  – число Лошмидта при температуре  $T_0 = 273,15$  К и давлении  $P_0 = 1013,25$  мбар.

На рис. 3 представлен экспериментальный спектр аммиака в сравнении со спектром, смоделированным на основе данных HITRAN из [5] при давлении  $NH_3$  0,003 атм.

В первую очередь обращает на себя внимание значительное отличие (более чем в два раза) экспериментальных сечений поглощений линий от данных HITRAN. Давление в ячейке контролировалось

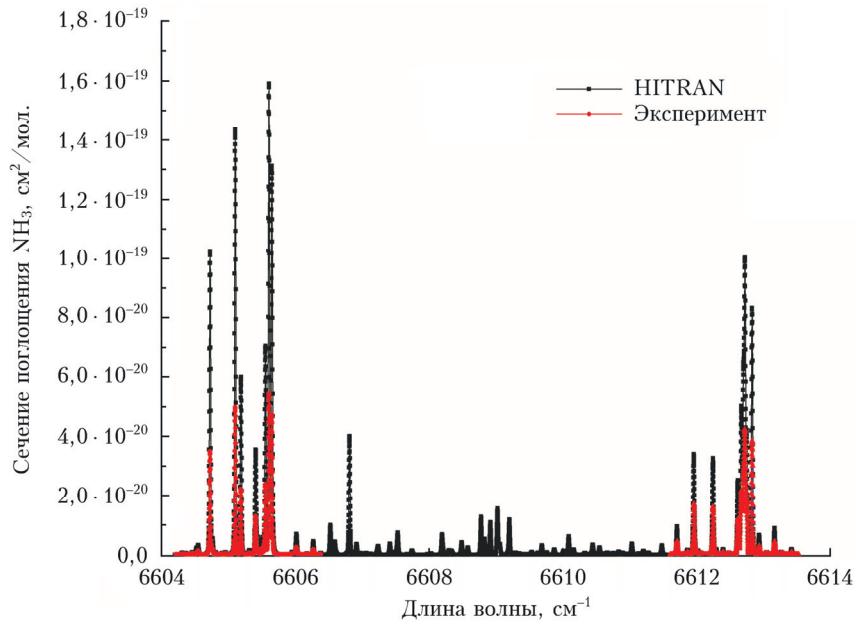


Рис. 3. Экспериментальный спектр  $\text{NH}_3$  в сравнении со спектром, смоделированным на основе HITRAN [5] (см. цветной рисунок на сайте [iao.ru/content/vol.35-2022/iss.11](http://iao.ru/content/vol.35-2022/iss.11))

емкостными датчиками Sensor и «Элемер» АИР-20/M2, чувствительными к измеряемому газу. Аммиак – агрессивный газ, и возможное различие в интенсивностях связано с ошибкой измерения давления (концентрации) емкостным датчиком. Была проведена калибровка датчика Sensor ртутно-масленым манометром (погрешность  $\approx 4\text{e-}5$  атм) и обнаружено смещение «нуля» датчика  $\approx 7\text{e-}4$  атм, что тем не менее не объясняет такое значительное различие в интенсивностях.

Первоначально анализ спектров проводился с использованием учитывающего «нефойгтовские» эффекты контура Хартмана–Трана [6], при этом достоверных данных о влиянии эффектов Дике и столкновительного сужения зарегистрировать не удалось. Это связано в первую очередь с тем, что отношение сигнал/шум составляет в среднем всего  $\sim 1000$ . Кроме того, спектр  $\text{NH}_3$  характеризуется большой плотностью, наличием перекрывающихся линий поглощения, а также большими значениями коэффициентов столкновительного самоширения, что во многом

затрудняет регистрацию «нефойгтовских» эффектов. В связи с этим анализ экспериментальных спектров и восстановление спектральных параметров  $\text{NH}_3$  – положения центров при нулевом давлении, коэффициентов столкновительных уширений ( $\Gamma_0/P_{\text{self}}$ ) и сдвигов ( $\Delta_0/P_{\text{self}}$ ) – проводились с использованием контура Фойгта и программы обработки экспериментальных данных [6].

На рис. 4 (цв. вкладка) приведен пример экспериментального и рассчитанного спектров поглощения  $\text{NH}_3$  для перекрывающихся линий и соответствующая разность между ними при давлении 0,002 атм.

В диапазоне длин волн 6604,3–6606,3 и при давлениях 0,002–0,04 линии хорошо разрешаются. Восстановленные параметры спектральных линий  $\text{NH}_3$  в сравнении с данными HITRAN в диапазоне 6604,3–6606,3  $\text{cm}^{-1}$  представлены в табл. 1.

Восстановленные интенсивности линий в 2,3 раза меньше значений в HITRAN. Следует отметить хорошее совпадение в центрах линий, отличие

Таблица 1

**Параметры спектральных линий  $\text{NH}_3$  в сравнении с данными HITRAN  
в диапазоне 6604,3–6606,3  $\text{cm}^{-1}$ . В скобках указаны стандартные отклонения**

Волновое число, $\text{cm}^{-1}$	HITRAN			Наша работа			
	Интенсивность, $\text{см}/\text{мол.}$	$\Gamma_0/P_{\text{self}},$ $\text{см}^{-1}/\text{атм}$	Волновое число, $\text{cm}^{-1}$	Интенсивность, $\text{см}/\text{мол.}$	$\Gamma_0/P_{\text{self}},$ $\text{см}^{-1}/\text{атм}$	$\Delta_0/P_{\text{self}},$ $\text{см}^{-1}/\text{атм}$	
1	2	3	4	5	6	7	
6604,309900	1,557e-23	0,500	6604,30985(5)	6,5(6)e-24	0,383(7)*	0,012(4)	
6604,364800	1,331e-23	0,345	6604,36444(6)	5,5(5)e-24	0,389(6)	-0,028(5)	
6604,429500	8,711e-24	0,521	6604,42934(7)	3,3(3)e-24	0,186(7)	0,070(7)	
6604,461400	1,791e-23	0,521	6604,46167(7)	8,6(9)e-24	0,217(2)	-0,006(6)	
6604,524800	4,880e-23	0,277	6604,52396(9)	2,1(3)e-23	0,427(3)*	0,072(9)	
6604,551300	7,501e-23	0,360	6604,55119(8)	3,1(3)e-23	0,234(3)	0,016(8)	
6604,727500	2,384e-21	0,364	6604,72789(3)	1,0(1)e-22	0,457(2)	-0,039(4)	
6604,765700	1,137e-22	0,448	6604,76600(4)	5,3(8)e-23	0,569(6)	-0,058(5)	
6604,811900	1,541e-23	0,591	6604,81239(4)	5,4(8)e-24	0**	0**	

Окончание табл. 1

1	2	3	4	5	6	7
6604,909200	1,097e-23	0,521	6604,90915(5)	3,3(3)e-24	0**	0,042(5)
6604,958900	1,823e-23	0,573	6604,95995(6)	5,9(6)e-24	0**	-0,022(6)
6605,019800	5,727e-24	0,521	6605,0168(5)	1,2(5)e-24	0**	0**
6605,038000	6,493e-24	0,521	6605,0369(7)	1,9(7)e-24	0**	0**
6605,104200	3,307e-21	0,331	6605,10412(1)	1,4(1)e-21	0,348(3)	0,0181(9)
6605,190100	1,452e-21	0,518	6605,18987(2)	6,0(6)e-22	0,251(2)	0,013(2)
6605,316400	3,263e-23	0,375	6605,31636(6)	1,12(7)e-23	0**	-0,002(2)
6605,410400	8,469e-22	0,501	6605,41030(4)	3,4(3)e-22	0,216(2)	-0,006(1)
6605,440600	1,262e-22	0,521	6605,43998(7)	5,0(5)e-23	0,50(1)	0,062(7)
6605,513000	1,315e-22	0,510	6605,51352(4)	5,7(9)e-23	0,56(1)	0,042(4)
6605,556000	1,577e-21	0,255	6605,55603(2)	6,5(2)e-22	0,303(2)	0,014(2)
6605,608800	3,606e-21	0,302	6605,60877(1)	1,5(2)e-21	0,330(3)	0,026(1)
6605,651800	3,146e-21	0,510	6605,65214(2)	1,3(1)e-21	0,302(2)	-0,018(2)
6605,678600	4,396e-23	0,510	6605,67917(6)	1,3(3)e-23	0**	0,345(6)
			6605,7445(2)	1,6(2)e-24	0**	0,23(2)
			6605,8187(2)	5,0(3)e-25	0**	0,12(6)
6605,912000	4,880e-24	0,521	6605,9123(6)	3,0(1)e-24	0,6(1)*	0**
6605,957600	2,049e-23	0,375	6605,9577(1)	8,6(9)e-24	0,18(1)*	0**
6606,018400	1,400e-22	0,435	6606,0206(1)	7,9(8)e-23	0,520(5)*	-0,045(1)
6606,027800	4,040e-23	0,521				
			6606,0636(5)	4,3(7)e-25	0**	-0,57(6)
6606,176100	9,236e-24	0,328	6606,1756(1)	3,2(4)e-24	0,28(4)*	-0,08(1)
6606,272200	1,045e-22	0,295	6606,2720(2)	4,4(4)e-23	0,150(3)	0**

\* Оценка ударной полуширины при интерполяции к нулевому давлению порядка 30% от доплеровской полуширины (перекрывающиеся линии).

\*\* Относительная погрешность оценки параметров контура превышает 100%.

от данных HITRAN составляет от 3e-5 до 8e-4 см<sup>-1</sup>. Коэффициенты самоуширения отличаются в два и более раз, наблюдаются линии с ударной полушириной (при давлении, близком к нулю), значительно большей нуля  $\Gamma_0(0) = 0,00206(3)$  см<sup>-1</sup> (рис. 5), что свидетельствует, на наш взгляд, о наличии двух неразрешенных линий. Примеры таких зависимостей приведены на рис. 5, 6.

Вместо двух разрешенных линий 6606,0184 и 606,0278 см<sup>-1</sup> наблюдается линия с центром 6606,0206(1) и ударной полушириной значительно больше нуля (0,00118(4) см<sup>-1</sup>) при давлении, близком к нулевому (рис. 6).

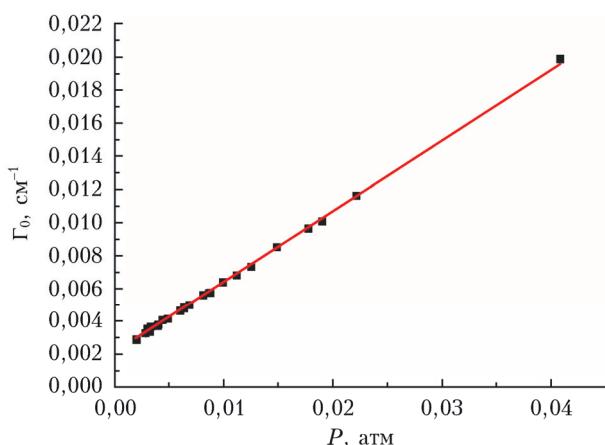


Рис. 5. Зависимость ударной полуширины линии поглощения с центром 6604,52396(9) см<sup>-1</sup> от давления NH<sub>3</sub>

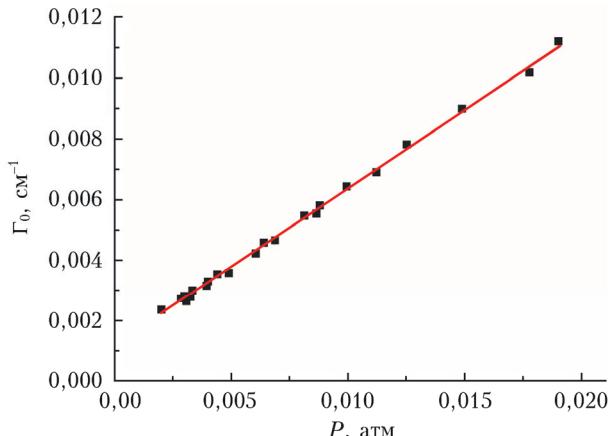


Рис. 6. Зависимость ударной полуширины линии поглощения с центром 6606,0206(1) см<sup>-1</sup> от давления NH<sub>3</sub>

В табл. 1, впервые приведены оценки коэффициентов самосдвига линий поглощения аммиака, имеющие положительное и отрицательное значения.

Восстановленные параметры спектральных линий NH<sub>3</sub> в диапазоне 6611,6–6613,5 см<sup>-1</sup> представлены в табл. 2 в сравнении с данными HITRAN.

По сравнению с диапазоном 6604,3–6606,3 см<sup>-1</sup> погрешность восстановления спектральных параметров возросла. Восстановленные интенсивности линий также в 2,3 раза меньше значений, приведенных в базе данных HITRAN из [5]. Отличие центров линий от данных HITRAN составляет уже от 3e-5 до 5e-3 см<sup>-1</sup>. Коэффициенты самоуширения

Таблица 2

Параметры спектральных линий NH<sub>3</sub> в сравнении с данными HITRAN в диапазоне 6611,6–6613,5 см<sup>-1</sup>

HITRAN			Наша работа			
Волновое число, см <sup>-1</sup>	Интенсивность, см/мол.	$\Gamma_0/P_{\text{self}}$ , см <sup>-1</sup> /атм	Волновое число, см <sup>-1</sup>	Интенсивность, см/мол.	$\Gamma_0/P_{\text{self}}$ , см <sup>-1</sup> /атм	$\Delta_0/P_{\text{self}}$ , см <sup>-1</sup> /атм
6611,661600	1,114e-23	0,510	6611,66319(4)	6,8(4)e-24	0,51(5)*	0,014(5)
6611,710300	2,306e-22	0,486	6611,71163(1)	1,11(8)e-22	0,511(2)*	-0,0096(7)
6611,813800	9,637e-24	0,521	6611,81446(6)	5,8(4)e-24	0,25(2)*	-0,015(7)
6611,867200	3,784e-23	0,448	6611,86814(1)	1,91(5)e-23	0,293(3)*	0,0042(8)
6611,906900	6,935e-24	0,521	6611,90891(4)	3,5(9)e-24	**	-0,151(5)
6611,961700	8,526e-22	0,664	6611,96210(1)	3,9(2)e-22	0,564(2)	0,020(1)
6611,985100	5,160e-23	0,425	6611,98326(2)	3,4(5)e-23	0,392(7)*	-0,005(3)
6612,019600	2,401e-23	0,425	6612,02384(2)	1,9(3)e-23	0,79(1)*	-0,008(2)
6612,032200	1,049e-23	0,585		9,3(6)e-24	0,11(5)*	0,01(2)
6612,067500	1,460e-23	0,271	6612,0708(1)	2,4(4)e-24	**	0,20(2)
6612,090000	5,928e-24	0,521	6612,0867(2)	6,0(1)e-24	0,9(2)*	0,82(2)
			6612,19973(7)	6,0(2)e-25	**	-0,39(9)
6612,248500	8,202e-22	0,664	6612,24860(1)	3,74(1)e-22	0,577(2)	-0,048(3)
6612,297100	3,548e-23	0,255	6612,29660(2)	1,7(1)e-23	0,173(9)*	0,016(3)
			6612,3716(4)	6,0(2)e-25	**	-0,39(9)
6612,399400	3,981e-23	0,239	6612,39935(2)	1,8(1)e-23	0,344(7)	**
			6612,44528(5)	3,0(1)e-24	1,36(7)*	-0,05(1)
6612,488500	1,402e-23	0,375	6612,48975(2)	7,3(6)e-24	0,40(1)	-0,020(5)
6612,618600	5,930e-22	0,481	6612,61937(1)	2,7(1)e-22	0,434(7)*	0,036(3)
6612,652600	2,047e-23	0,299	6612,66075(7)	1,82(4)e-22	**	-0,13(2)
6612,672500	1,052e-21	0,360	6612,67475(4)	3,6(2)e-22	0,17(3)	-0,04(1)
6612,679800	1,116e-22	0,211				
6612,703700	6,683e-22	0,481	6612,7021(3)	5,9(5)e-22	0,50 (3)*	-0,7(5)
6612,703700	6,653e-22	0,327		7,5(9)e-22	**	-0,21(3)
6612,725800	2,270e-21	0,437	6612,72214(8)	5,0(1)e-22	0,8(1)	-0,43(6)
			6612,7376(2)	2,4(2)e-22	**	0,18(1)
6612,752400	8,914e-22	0,327	6612,75514(4)	8,6(3)e-22	0,270(1)*	-0,015(1)
6612,832800	9,720e-22	0,396	6612,83299(1)	6612,9315(1)	1,7(2)e-23	-0,32(2)
6612,832800	9,733e-22	0,360		5,4(4)e-23	0,32(2)	-0,056(6)
			6612,94121(3)	2,4(8)e-24	0,10(2)	-0,02(2)
6613,038900	5,202e-24	0,521	6613,0376(1)	7,3(2)e-24	0,19(2)	0,016(9)
6613,054800	1,718e-23	0,521	6613,05475(5)	6,0(1)e-25	**	0,05(1)
6613,169200	2,017e-22	0,274	6613,169530(6)	9,2(3)e-23	0,216(4)	-0,001(1)
			6613,2161(3)	1,9(1)e-24	0,80(7)	-0,07(6)
			6613,2536(3)	1,6(9)e-24	**	0,03(5)
6613,267700	1,959e-23	0,452	6613,27110(6)	9,2(4)e-24	0,31(2)	-0,04(1)
6613,287000	8,709e-24	0,360	6613,2921(6)	5,4(4)e-24	0,50(4)	0,2(1)
6613,302000	5,319e-24	0,521	6613,314(1)	1,5(4)e-24	**	0,2(2)
			6613,394(1)	1,3(2)e-24	0,63(6)	**
6613,423100	4,181e-23	0,295	6613,42431(3)	1,8(4)e-23	0,23(1)	0,003(7)
			6613,4706(3)	2,3(6)e-24	**	-0,12(6)
			6613,499(1)	5,7(6)e-25	**	-0,7(2)

отличаются почти в два раза. Наблюдаются много «двойных» и новых линий. Впервые приведены данные о самосдвиге спектральных линий.

## Заключение

В настоящей работе представлены результаты экспериментальных исследований и анализа спектров поглощения чистого NH<sub>3</sub> в двух спектральных диапазонах 6604,3–6606,3 и 6611,6–6613,5 см<sup>-1</sup> при комнатной температуре и давлении NH<sub>3</sub> 0,002–

0,04 атм. Восстановлены спектральные параметры NH<sub>3</sub>: положения центров при нулевом давлении, интенсивности, коэффициенты столкновительных самошироки и самосдвигов. Анализ осуществлялся с использованием контура Фойгта и программы обработки экспериментальных данных [6]. Проведено сравнение с параметрами, приведенными в базе данных HITRAN.

Обнаружены новые линии поглощения, установлено значительное различие (в 2,3 раза) измеренных интенсивностей линий поглощения от дан-

ных [5]. Восстановленные центры линий поглощения при давлении, близком к нулевому, различаются в пределах от 1e-5 до 1e-3 см<sup>-1</sup>, а коэффициенты самоуширения отличаются почти в два раза. Впервые приведены данные о коэффициентах самосдвига.

**Финансирование.** Работа выполнена в рамках государственного задания ИОА.

## Список литературы

1. Aneja V.P., Roelle P.A., Murray G.C., Southerland J., Erisman J.W., Fowler D., Hasman W.A., Patni N. Atmospheric nitrogen compounds II: Emissions, transport, transformation, deposition and assessment // Atmos. Environ. 2001. V. 35, N 11. P. 1903–1911.
2. Ponurovskii Ya.Ya., Zaslavskii V.Ya., Nadezhinskii A.I., Spiridonov M.V., Stavrovskii D.B., Shapovalov Yu.P., Karabinenko A.A., Petrenko Yu.M. Diode laser spectroscopy for creating effective measuring systems and their use in biological and medical research // Biophysics. 2019. V. 64, N 6. P. 870–884.
3. Bobrutzki K., Braban C.F., Famulari D., Jones S.K., Blackall T., Smith T.E.L., Blom M., Coe H., Gallagher M., Ghalaiey M., McGillen M.R., Percival C.J., Whitehead J.D., Ellis R., Murphy J., Mohacs A., Pogany A., Junninen H., Rantanen S., Sutton M.A., Neimetz E. Field inter-comparison of eleven atmospheric ammonia measurement techniques // Atmos. Meas. Tech. 2010. V. 3, N 1. P. 91–112.
4. Ricci P.P., Gregory O.J. Sensors for the detection of ammonia as a potential biomarker for health screening // Sci. Rep. 2021. V. 11, N 1. P. 7185.
5. Sung K., Brown L.R., Huang X., Schwenke D.W., Lee T.J., Coy S.L., Lehmann K.K. Extended line positions, intensities, empirical lower state energies and quantum assignments of NH<sub>3</sub> from 6300 to 7000 cm<sup>-1</sup> // J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer. 2012. V. 113, N 11. P. 1066–1083.
6. Капитанов В.А., Осипов К.Ю., Протасевич А.Е., Пономарев Ю.Н., Понуровский Я.Я. Эффект Дике, столкновительное сужение и интерференция при самоуширении линий поглощения CO<sub>2</sub> в полосе 30013 ← 00001. Измерения и тестирование моделей контура // Оптика атмосф. и океана. 2021. Т. 34, № 5. С. 334–342; Kapitanov V.A., Osipov K.Yu., Protasevich A.E., Ponomarev Yu.N., Ponurovskii Ya.Ya. Dicke narrowing, pressure dependence, and mixing of self-broadened CO<sub>2</sub> absorption lines in the 30013 ← 00001 band: Measurements and line profile testing // Atmos. Ocean. Opt. 2021. V. 34, N 5. P. 381–389.

### V.A. Kapitanov, Ya.Ya. Ponurovskii, K.Yu. Osipov, Yu.N. Ponomarev. Pure NH<sub>3</sub> spectrum measurements and analysis of overlapping absorption lines in 6611.6–6613.5 cm<sup>-1</sup> region.

The results of experimental studies of absorption spectra of pure NH<sub>3</sub> at room temperature in the ranges 6604.3–6606.3 and 6611.6–6613.5 cm<sup>-1</sup> and pressure of up to 0.04 atm are presented. The measurements were carried out at the Department of Diode Laser Spectroscopy of the Institute of General Physics at a high-sensitivity high-resolution diode laser spectrometer with a signal-to-noise ratio of ~1400. The spectra were analyzed using a Voigt contour. The results of retrieving the parameters of spectral absorption lines are presented: the positions of centers, intensities, and coefficients of collisional self-broadening and shifts. A comparison was made with the parameters from HITRAN database. A two-fold difference between the measured intensities of a number of lines and the HITRAN values was found.

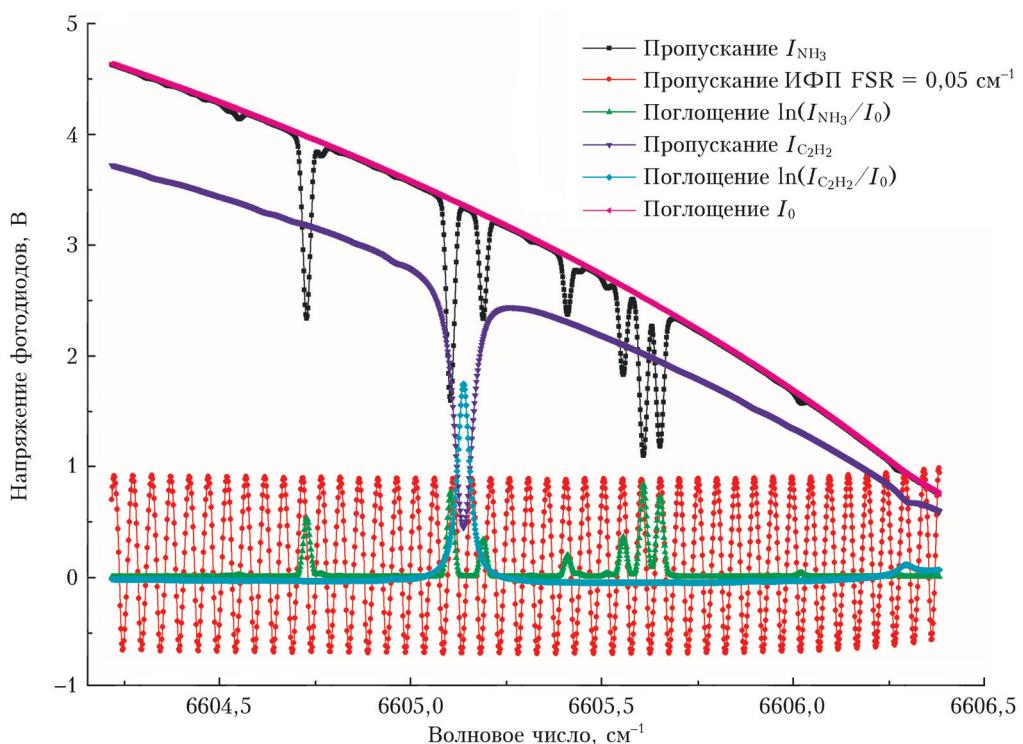


Рис. 2. Выходные данные системы сбора и обработки информации спектрометра; FSR (Free spectral range)

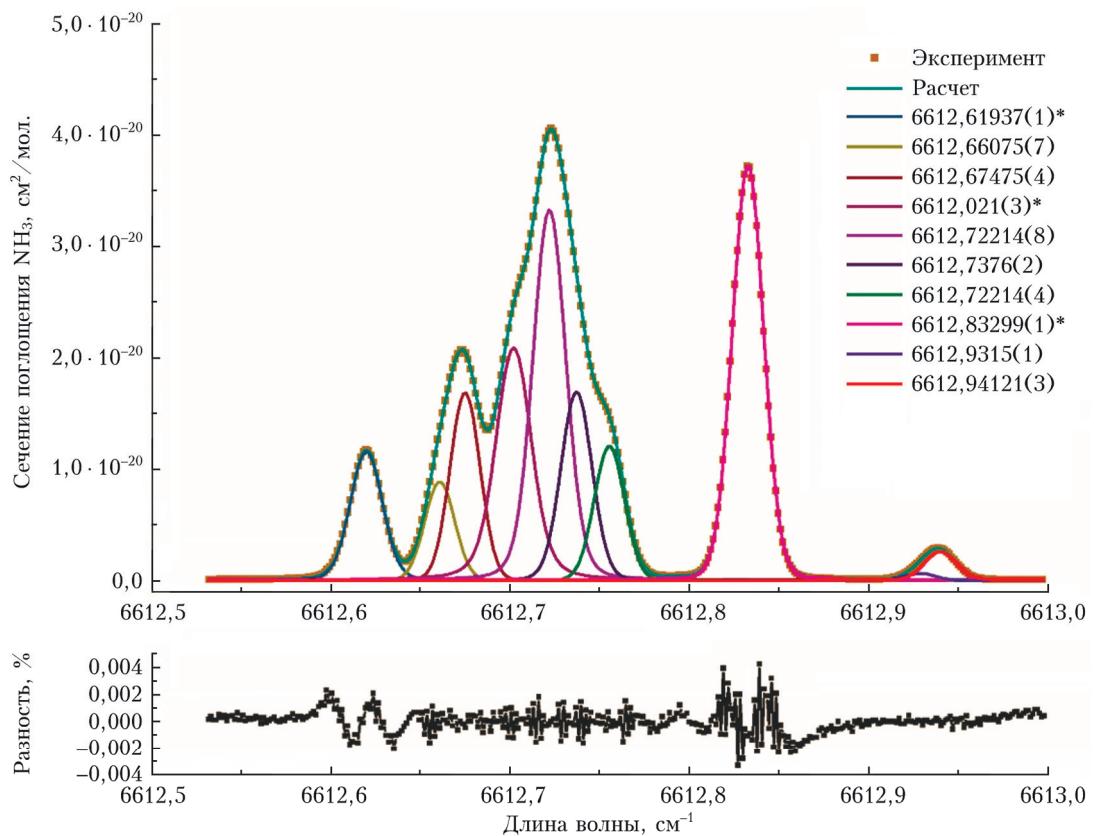


Рис. 4. Экспериментальный и рассчитанный спектры поглощения NH<sub>3</sub> и разность между ними при давлении NH<sub>3</sub> 0,002 атм. Указаны положения центров при нулевом давлении и стандартное отклонение (в скобках); \* — «двойная линия»