

高温条件下一氧化氮红外辐射物性参数的计算

周金伟 李吉成 石志广 陈小天 卢晓卫

(国防科学技术大学 ATR 重点实验室, 湖南 长沙 410073)

摘要 一氧化氮(NO)对高超声速飞行器本体和流场红外辐射传输有重要影响,而目前 HITEMP 数据库只能计算 70 K~3000 K 温度范围内的谱线参数,同时现有的高温条件下 NO 配分函数算法一般运算量大、且较少考虑电子基态双重分裂的影响,因此获取更为高效精准的 NO 辐射参数非常重要。根据乘积近似模型将 NO 配分函数分解成电子、振动、转动等配分函数,且在计算电子配分函数时考虑了 NO 电子基态中 2 个自旋分量的作用,以提高算法的准确性;对于 3000 K~8000 K 温度范围内,对振转配分函数乘积进行修正。实验结果表明,在 70 K~3000 K 温度范围内,本配分函数与 HITEMP 数据库的配分函数几乎完全相同,最大误差不超过 0.3%,但该算法还可用于计算非平衡态下配分函数;在 3000 K~8000 K 温度范围内,该方法取得了与现有的基于求和运算的配分函数计算方法以及实验相近的结果。

关键词 光谱学;红外辐射;一氧化氮;吸收系数;HITEMP 数据库;配分函数

中图分类号 TK124 **文献标识码** A **doi**: 10.3788/AOS201434.1130001

Calculation of Nitric Oxide's Infrared Radiative Parameters under High Temperature

Zhou Jinwei Li Jicheng Shi Zhiguang Chen Xiaotian Lu Xiaowei

(ATR Key Laboratory, National University of Defense Technology, Changsha, Hunan 410073, China)

Abstract Nitric oxide (NO) has significant influences on the infrared radiative transferring of hypersonic vehicle and its flow field, but the HITEMP database can calculate NO's parameters only for 70 K~3000 K and at present the available algorithms for calculating NO's partition function seldom take the effect of lambda-doubling in electronic ground into account. Therefore, calculation of NO's radiative parameters with higher efficiency and accuracy is rather significant. According to the product approximation, the total internal partition function is decomposed into electronic, vibration and rotation partition functions. The fact that NO's $X^2\Pi$ ground state splits into 2 spin components has been considered so as to improve the accuracy. With temperature between 3000 K and 8000 K, the rovibration partition function is rectified. Experiments show that the partition function of the proposed algorithm agrees with total internal partition sums (TIPS) of the HITEMP with temperature between 70 K and 3000 K, with the maximum error being no more than 0.3%. Moreover, the proposed algorithm can calculate partition functions under non local-thermal equilibrium. Besides when compared with the algorithms based on summation at high temperature as well as experiments, the proposed method has high accuracy.

Key words spectroscopy; infrared radiation; nitric oxide; absorption coefficient; HITEMP database; partition function

OCIS codes 300.1030; 300.6320; 300.6340; 300.6390

收稿日期: 2014-05-05; 收到修改稿日期: 2014-06-17

基金项目: 国家自然科学基金(61302145, 611101185)

作者简介: 周金伟(1983—), 男, 博士研究生, 主要从事光学成像、目标识别技术方面的研究。

E-mail: zhoujinwei863@sina.com.cn

导师简介: 李吉成(1970—), 男, 研究员, 博士生导师, 主要从事光学成像目标识别技术方面的研究。

E-mail: peter0516@126.com

1 引言

飞行器在临近空间高超声速飞行时,头部气流受到剧烈压缩,产生强烈的激波层辐射,同时高超声速拦截器导引头将产生强烈的气动光学效应^[1],将会对目标检测和识别产生重要影响。虽然此时的辐射能量主要集中在紫外和可见光部分,但考虑到大气中臭氧等对紫外的强烈吸收作用,对于目标探测识别来说,红外却是优先考虑的工作谱段。在临近空间高层,激波层气体组分主要由 N 和 O 化学反应的产物组成。由于 N₂ 和 O₂ 均为对称分子结构,自身振转跃迁辐射较小,此时 NO 将对飞行器本体和激波层红外辐射产生重要影响。目前,计算气体辐射参数的数据库主要有 HITRAN 和 HITEMP 数据库,Rothman^[2] 对这两数据库进行了简要介绍。HITRAN 和 HITEMP 数据库所采用的全内配分函数(TIPS)相同,但只适用于 70 K~3000 K 温度范围的平衡气体。对于更高温度气体,若对全内配分函数直接进行数学外推将导致误差,制约了这两数据库在更高温度气体上的应用。Faure^[3] 研究了非平衡等离子体中 NO 的配分函数,但其给出的平衡气体配分函数只是相对于最低振动态。Babou 等^[4] 计算了 1000 K~50000 K 范围内下 NO 的配分函数,并估计了忽略最高电子能态所产生的误差。但 Faure 和 Babou 均采用直接求和方法,计算量较大,且没有考虑 NO 的电子基态²Π 双重分裂对配分函数的影响,使得计算得到的全内配分函数在 70 K~3000 K 范围内与 TIPS 数据不一致,直接应用于 HITEMP 数据库将会导致较大误差。

本文试图将 HITEMP 数据库应用到 3000 K 以上温度的 NO 气体的红外辐射计算,为此,根据乘积近似模型,在计算电子配分函数时充分考虑了电子基态双重分裂影响以及高温态下振动-转动之间的耦合作用,进而得到了新的全内配分函数,在此基

础上应用 HITEMP 数据库计算 NO 的吸收系数,并与现有的算法以及相关国外实验进行对比验证。

2 NO 吸收系数的逐线计算模型

吸收系数表示辐射功率通过介质中单位距离时衰减的百分比,是辐射传输方程中的重要参数,单位为 cm⁻¹。吸收系数的计算与谱线分布密切相关,由于谱线间会产生部分重叠,故波数 ν 处的单色吸收系数 κ_ν 可表示为

$$\kappa_\nu = \sum_i \kappa_\nu^i = \sum_i S_i F(\nu - \nu_{0i}), \quad (1)$$

式中 κ_ν^i 表示谱线 i 在波数 ν 处的吸收系数(单位为 cm⁻¹), ν_{0i} 表示谱线 i 的中心波数(单位为 cm⁻¹), S_i 表示谱线 i 的线强(单位为 cm⁻²), F 表示归一化后的谱线线型函数,目前常见的线型函数包括洛伦兹线型、多普勒线型以及 Voigt 线型。

假定高低态能级 E' 和 E'' 下的粒子数分布均服从波尔兹曼分布,则在温度为 T 时的谱线线强 $S_\nu(T)$ (单位为 cm) 为

$$S_\nu(T) = \frac{g_U I_a}{Q(T)} \frac{A_{UL}}{8\pi c \nu_0^2} \exp(-c_2 E''/T) \times [1 - \exp(-c_2 \nu_0/T)], \quad (2)$$

式中 g_U 表示跃迁高态的统计权重, I_a 表示天然地球同位素丰度, $Q(T)$ 表示温度为 T 时的全内配分函数, A_{UL} 表示爱因斯坦自发发射系数(单位为 s⁻¹), 其可由波函数和电偶极矩函数计算得到, E'' 表示跃迁低态能量(单位为 cm⁻¹), ν_0 表示跃迁的中心波数(单位为 cm⁻¹, 即跃迁高低态间能量差), c 和 c_2 分别表示真空光速和第二辐射常量,且 $c = 2.998 \times 10^{10}$ cm/s 和 $c_2 = 1.438786$ cm·K。

根据 HITEMP 数据库给出的 $T_{\text{ref}} = 296$ K, $P_{\text{ref}} = 1.0$ atm 条件下单个分子每条谱线线强 $S_\nu(T_{\text{ref}})$, 得到温度为 T 时相应谱线线强 $S_\nu(T)$ 为^[5]

$$S_\nu(T) = S_\nu(T_{\text{ref}}) \frac{Q(T_{\text{ref}})}{Q(T)} \exp\left[-c_2 E'' \left(\frac{1}{T} - \frac{1}{T_{\text{ref}}}\right)\right] \frac{1 - \exp(-c_2 \nu_0/T)}{1 - \exp(-c_2 \nu_0/T_{\text{ref}})}, \quad (3)$$

式中 $Q(T_{\text{ref}})$ 表示参考温度 T_{ref} 时的全内配分函数。一般而言,随着温度升高,谱线的线强随之增大。

对于理想气体组分,压强 P 、温度 T 时的分子数密度 $N(P, T)$ (单位为 cm⁻³) 为

$$N(P, T) = N_0 \left(\frac{T_{\text{ref}}}{T}\right) \left(\frac{P}{P_{\text{ref}}}\right), \quad (4)$$

式中 N_0 表示参考状态下 ($T_{\text{ref}} = 296$ K, $P_{\text{ref}} =$

0.101 MPa) 时的数密度(单位为 cm⁻³), 且 $N_0 = 2.479 \times 10^{19}$ (单位为 cm⁻³)。在(1)式中,令 $S_i = S_\nu(T) N(P, T)$, 即可计算得到波数 ν 处的总吸收系数。

3 本文算法

要将 HITEMP 数据库应用到更高温度,需要解决的首要问题是计算该温度条件下的配分函数。

温度 T 时,分子配分函数可定义^[6]为

$$Q(T) = d_i \sum_s d_s \exp(-c_2 E_s/T), \quad (5)$$

式中 c_2 为第二辐射常数, d_s 表示状态依赖简并度, d_i 表示状态独立简并度, E_s 表示能级 s 的总能量(单位为 cm^{-1})。由于以上计算需要对分子的所有能态进行求和,因而需要已知该分子每个能级能量以及简并度^[7]。为了提高计算效率,需要对(5)式进行近似。目前得到广泛应用的是乘积近似,其假定总能量 E_s 等于核自旋能量 E_n 、电子能量 E_e 、振动能量 E_v 和转动能量 E_r 之和,且各能量之间具有可分性,即有 $E_s = E_e + E_v + E_r + E_n$ 。若不考虑电子、振动和转动三者之间的相互作用,则配分函数可表达为

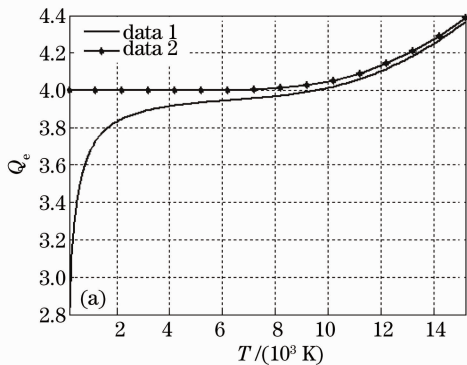
$$Q(T) = Q_n(T)Q_e(T)Q_v(T)Q_r(T), \quad (6)$$

式中 $Q_n(T)$ 、 $Q_e(T)$ 、 $Q_v(T)$ 、 $Q_r(T)$ 分别表示核配分函数、电子配分函数、振动配分函数以及转动配分函数。

由于通常情况下原子核都处于基态,故核配分函数等于原子核基态简并度。对于异核双原子分子 $^{14}\text{N}^{16}\text{O}$,其 $d_s=1$,且 $d_i = (2I_N + 1)(2I_O + 1)$,其中 I_N 和 I_O 分别表示 N 原子和 O 原子的核自旋量子数。

双原子分子的转动配分函数可根据 Müller 渐进展开式表达为^[8]

$$Q_r(T) = \frac{1}{\sigma} \left[\frac{T}{c_2 B} + \frac{1}{3} + \frac{1}{15} \frac{c_2 B}{T} + \frac{4}{315} \left(\frac{c_2 B}{T} \right)^2 + \frac{1}{315} \left(\frac{c_2 B}{T} \right)^3 + \dots \right], \quad (7)$$



式中 B 为转动常数, σ 为对称数,对于同核双原子分子 $\sigma = 2$,异核双原子分子 $\sigma = 1$ 。查阅相关文献^[9]可知,NO 的转动常数 B 取值为 1.6820。当温度 T 较大时,转动配分函数 $Q_r(T)$ 可简化为 $T/(\sigma c_2 B)$ 。

根据 Herzberg 谐振子近似^[8],得到 NO 的振动配分函数 $Q_v(T)$ 为

$$Q_v(T) = \frac{1}{1 - \exp(-c_2 v/T)}, \quad (8)$$

式中 v 为 NO 的振动基频,且 $v=1876 \text{ cm}^{-1}$ 。

电子配分函数可表示为

$$Q_e(T) = \sum_i g_e(i) \exp[-c_2 \cdot E_e(i)/T], \quad (9)$$

式中 $E_e(i)$ 表示第 i 个电子能级能量, $g_e(i)$ 表示电子能级 i 的简并度,通常取基态能量 $E_e = 0$ 。梅飞等^[10-11]在计算谱线线强时,均没考虑激发态对电子配分函数的影响,认为 $Q_e(T) = g_e(0)$,进而将配分函数比值 $Q(T_{\text{ref}})/Q(T)$ 简化为 $Q_r(T_{\text{ref}}) \cdot Q_v(T_{\text{ref}})/[Q_r(T) \cdot Q_v(T)]$ 。该简化对大部分分子在一定温度范围条件下成立,但不适用于 NO 和 OH。因为 NO 和 OH 电子基态均为 $X^2\Pi$ 型,分裂为 2 个分量即 $^2\Pi_{1/2}$ 和 $^2\Pi_{3/2}$,且其两分量间存在一能量差。Faure^[3]、Babou 等^[4]和高温气体等离子体辐射计算软件 SPECAIR^[12]均没有考虑电子基态 $^2\Pi$ 分裂,在温度不是太高时将会产生一定误差。计算得到 200 K~15000 K 时,不同模型的 NO 电子配分函数分布图[如图 1(a)所示]。

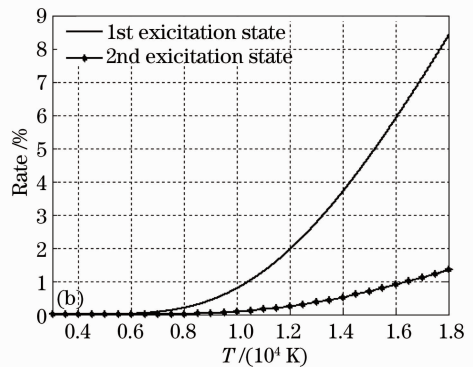


图 1 不同模型 NO 电子配分函数以及激发态影响

Fig. 1 Electronic partition function for different models and excited state's effect on $Q_e(T)$

图 1(a)中,“data 1”表示 $^2\Pi$ 分裂模型,“data 2”表示 Babou 模型。可见当温度 T 小于 2000 K 时,两模型电子配分函数相差较大,但当温度 T 高于 8000 K 时,两模型结果比较接近。当温度 T 在 10000 K~15000 K 时,将电子配分函数视作常量都

会产生一定的误差,最大相对误差达 10%,其中当温度 $T=14000 \text{ K}$ 时,计算得到第一激发项对电子配分函数的贡献为 3.73%,而当温度 $T=18000 \text{ K}$ 时,第一激发项对电子配分函数的贡献为 8.51%。当激波层气体最高温度在 15000 K 以下时,计算电

子配分函数最多只需考虑第一激发态的影响。

值得注意的是,当温度在 3000 K 以上时,振动和转动之间的耦合作用愈加明显,此时采用乘积近似方法计算振动和转动配分函数时将会产生一定误差,如 6000 K 时误差将超过 6%,为此需要进行修正。通过和 SPECAIR 等求和模型计算所得的 3000 K~6000 K 条件下 NO 振转配分函数进行比较发现,采用二次多项式 $f(T) = a_0 + a_1 T + a_2 T^2$ 修正即可到达理想的精度,采用最小二乘方法求解得到 $f(T)$ 表达式。

最终,70 K~8000 K 范围内 NO 配分函数可表示为

$$Q(T) = 3[1 + t_h(T)f(T)]Q_r(T)Q_v \times (T) \sum_{i=0}^2 g_c(i) \exp[-c_2 E_c(i)/T], \quad (10)$$

式中 $t_h(T)$ 表示阶跃函数,当 $T < 3000$ K 时, $t_h(T) =$

0; $T \geq 3000$ K 时,取值为 $t_h(T) = 1$ 。最后将(10)式代入(3)式,得到本文的谱线强修正公式。对于非平衡状态,分别将转动温度 T_r 、振动温度 T_v 以及电子温度 T_e 代入 $Q_r(T)$ 、 $Q_v(T)$ 和 $Q_e(T)$,最后代入(10)式即可得到非平衡态条件下 NO 配分函数。

4 实验结果与分析

首先,采用本文方法计算得到了 70 K~3000 K 范围内 NO 配分函数 $Q(T)$,并与 TIPS 数据 $Q_{TIPS}(T)$ 进行了比较[图 2(a)]。可见,本文算法结果 $Q(T)$ 与 TIPS 数据 $Q_{TIPS}(T)$ 几乎完全重合。若以 $Q_{TIPS}(T)$ 为参考值,定义相对误差函数为 $e_{rr} = [Q(T) - Q_{TIPS}(T)]/Q_{TIPS}(T) \times 100\%$,则相对误差分布曲线见图 2(b)。

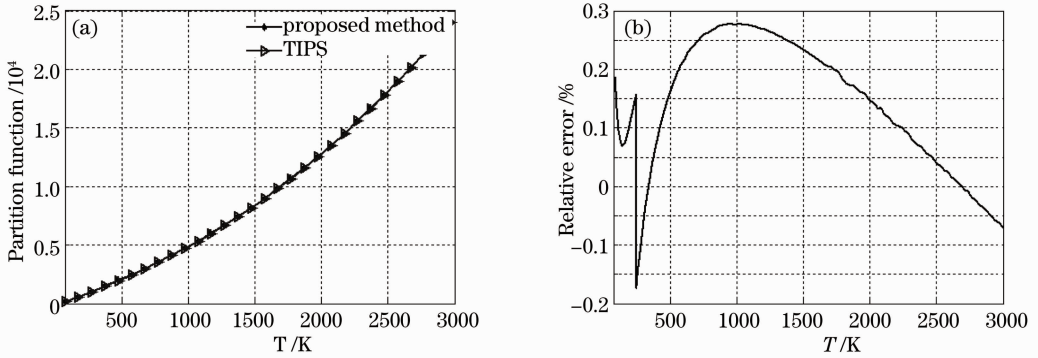


图 2 70 K~3000 K 范围内本文算法与 TIPS 数据比较

Fig. 2 Comparison of the proposed algorithms and TIPS between 70 K~3000 K

与 TIPS 数据相比,本文算法最大误差出现在 $T=1000$ K 左右,但最大相对误差不超过 0.3%,可见本文算法具有较高的精度。此外,将本文算法、Faure^[11]算法以及高温气体等离子辐射计算软件

SPECAIR 在典型温度条件下结果进行了比较。为了具有可比性,在 Faure 算法结果的基础上添加了核配分函数,且将参考能级设置为电子基态能级,比较结果如表 1 所示。

表 1 不同算法在典型温度下的 NO 配分函数以及相对误差

Table 1 NO Partition functions and relative error of different algorithms under different temperatures

Temperature /K	TIPS	Faure		SPECAIR		Proposed	
		$Q(T)$	$e_{rr}/\%$	$Q(T)$	$e_{rr}/\%$	$Q(T)$	$e_{rr}/\%$
1000	4877.72	5309.65	8.85	5328.00	9.23	4891.23	0.28
2000	12812.56	13405.42	4.63	13560.00	5.83	12831.39	0.22
3000	24382.24	25272.68	3.65	25560.00	4.83	24365.09	-0.07

可见当温度小于 3000 K 时,与 Faure 方法和 SPECAIR 相比,本文算法与 TIPS 数据的相对误差明显要小得多。其原因在于, Faure 算法和 SPECAIR 在计算 NO 配分函数时,没有考虑电子基态²Π 分裂以及由此产生的基态两分量之间的能

级差,使得电子配分函数大于 TIPS 中的电子配分函数,进而计算得到的 NO 配分函数要大于 TIPS。当温度较低时误差将会相对较大,但随着温度增加,该误差将逐渐减少。此外, Faure 算法和 SPECAIR 所考虑的振动能级数 v_{max} 和最大转动能级数 J_{max} 均

要大于 HITEMP^[13], 也会对结果产生一定影响。下面分别采用本文方法和 SPECAIR 计算得到

296 K 和 2000 K 时的 NO 配分函数, 并和 HITRAN 数据库在线计算工具进行比较(见图 3)。

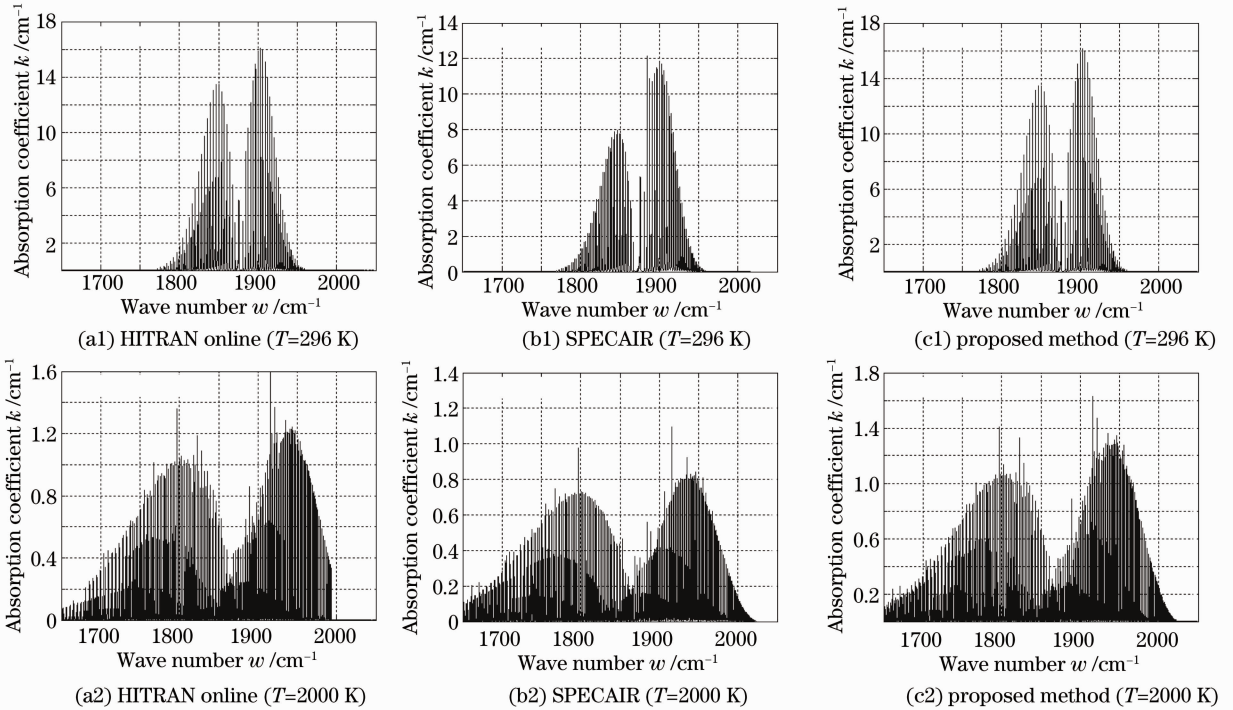


图 3 本文算法与 HITRAN online、SPECAIR 结果比较。(a1)~(c1) $T=296\text{ K}$; (a2)~(c2) $T=2000\text{ K}$

Fig. 3 Comparison among HITRAN online, SPECAIR and proposed algorithm. (a1)~(c1) $T=296\text{ K}$; (a2)~(c3) $T=2000\text{ K}$

图 3 中, 第一行和第二行分别表示温度为 296 K 和 2000 K, 每行从左到右分别表示 HITRAN online、SPECAIR 和本文算法计算结果。除了在 2000 K 时 HITRAN online 在 1994 cm^{-1} 左右吸收系数存在跳变现象外, 本文算法结果与 HITRAN online 结果几乎完全相同。SPECAIR 计算结果和本文算法结果形状基本相同, 但不少波数处的吸收系数数值明显偏小, 其原因与配分函数差异有关。此外, 由于 SPECAIR 没有考虑电子基态双重分裂, 亦使得其计算得到的爱因斯坦系数 A_{ul} 与 HITRAN/HITEMP 数据库不同, 进而会对计算得到的线强和吸收系数产生影响。

下面计算 3000 K~8000 K 温度范围内的 NO 配分函数。由于 HITRAN online 只能计算 70 K~3000 K 以内的气体辐射参数, 本文算法将主要与 Faure、SPECAIR 以及乘积近似模型进行对比。在采用 SPECAIR 计算配分函数时, 根据 NO 电子基态分裂以及两分量之间的能级差对算法结果进行了修正, 得到修正前后的配分函数。

从图 4 可知, 在 3000 K~8000 K 温度范围内, SPECAIR 校正前后配分函数相差不大, 符合图 1 的

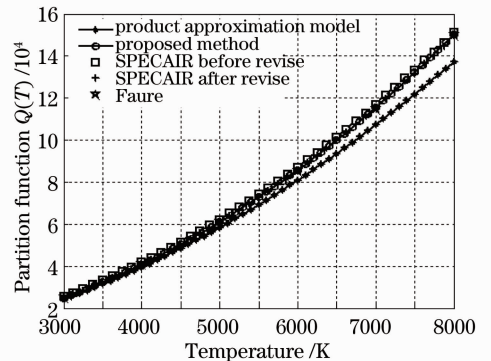


图 4 3000 K~8000 K 不同算法 NO 配分函数比较
Fig. 4 Comparison of NO's partition function among different algorithms between 3000 K and 8000 K

结论。若直接采用乘积近似模型计算配分函数, 由于忽略了振动-转动之间的耦合作用, 将会产生一定误差, 且该误差随着温度的升高而逐渐增大。而本文算法通过对乘积模型进行二次多项式修正, 取得了与基于直接求和的 Faure 和 SPECAIR 很接近的结果(见表 2)。

表 2 不同算法在典型温度下的 NO 配分函数

Table 2 NO Partition functions and relative error of different algorithms under typical temperatures

Temperature /K	Faure $Q(T)$	SPECAIR $Q(T)$		Proposed $Q(T)$	
		Before revise	After revise	Before revise	After revise
4000	41091.33	41760.24	40870.43	39556.49	40482.41
5000	61030.62	62165.92	61101.74	58418.27	61092.91
6000	85389.78	87173.52	85927.01	80966.37	85859.13
7000	114710.20	117029.79	115594.89	107247.34	115445.81
8000	149802.37	152133.81	150505.41	137366.43	150255.36

此外,与 Park^[14]所给的 NO 配分函数进行了比较。从表 3 可知,当温度在 3000 K 以下时,本文算法与 Park 所给出的结果相差相对较大,原因在于 Park 算法没有考虑电子基态分裂的影响而将电子基态视作整体;但当温度在 4000 K 以上时,本文算法与 Park 所给出的结果很吻合。

为了进一步验证本文算法的可靠性,与斯坦福大学高温气体动力学实验室对大气压空气等离子体红外辐射测量结果^[12]进行比较。该实验假定等离子体处于局部热平衡,且考虑了 NO、CO、OH、CO₂ 以及 H₂O 等五组分,等离子体的径向温度分布见图 5(a),其中最高温度为 3400 K。在此只考虑光谱

范围为 4.9~5.6 μm ,该谱段对应为 NO 振动基带,且 NO 物质的量浓度见图 5(b)。

表 3 本文算法与 Park 结果比较

Table 3 Comparison between proposed method and Park

Temperature /K	TIPS	Park	Proposed $Q(T)$
500	2120.78	2521.80	2124.23
1000	4877.72	5385.00	4891.23
2000	12812.56	13629.00	12831.39
4000	—	41850.00	40482.41
6000	—	86790.00	85859.13
8000	—	150540.00	150255.36

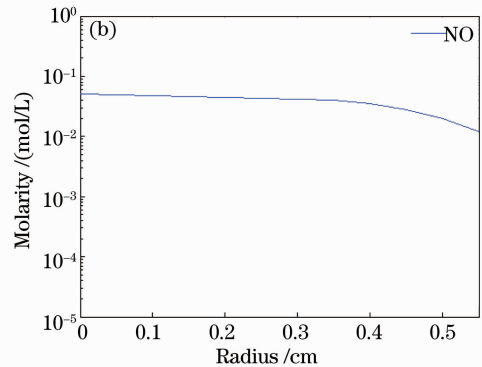
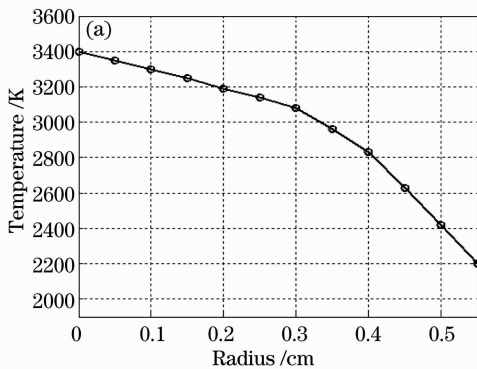


图 5 实验条件

Fig. 5 Experimental condition

考虑到红外辐射传输过程中等离子体和探测器之间的气体吸收作用,取环境气体温度为 298 K、压强为 0.101 MPa,传输距离为 600 cm,且气体中 H₂O 和 CO₂ 组分的体积分数分别为 1.4% 和 0.033。由于 CO₂ 在该谱段范围内吸收作用较弱,故只需考虑 H₂O 的吸收。查阅 HITRAN2012 数据库获取 H₂O 谱线参数,由此计算得到气体的辐射吸收曲线以及最终辐射强度如图 6 所示。

图 6(a)没有考虑传输过程中 H₂O 吸收作用,

而图 6(b)则考虑了传输过程中 H₂O 吸收作用。考虑到等离子体中各组分的吸收具有明显的带状特征以及具体谱带分布,认为斯坦福大学实验中 4.9~5.54 μm 范围内的辐射主要是由 NO 产生的。由图 6 可知,本文算法与实验结果较为吻合,而计算得到的数值略小,这主要是由于 HITEMP 数据库基于其所考虑温度范围内的实验测量结果,忽略了小于截止线强的部分谱线^[13]。由此,采用本文算法计算 3000 K 以上的 NO 辐射物性参数是可行的。

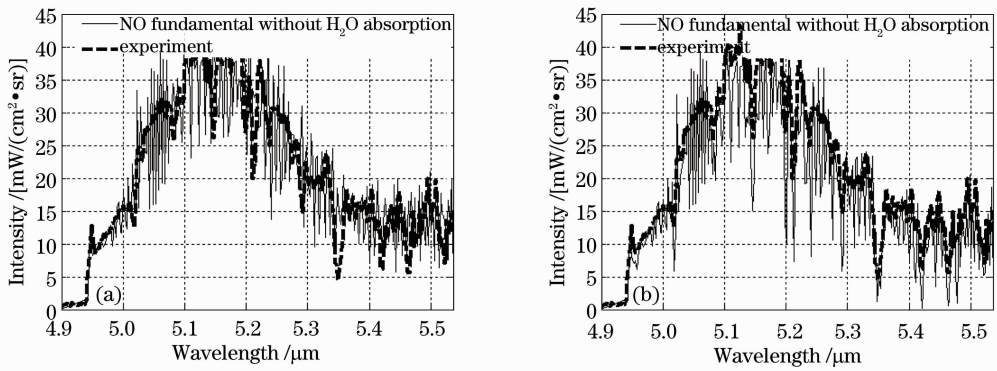


图6 本文算法与斯坦福大学实验结果比较

Fig. 6 Comparison of the proposed algorithm and Stanford experiment

5 结 论

本文在计算 NO 配分函数时,考虑了电子基态的双重分裂影响,采用乘积近似模型得到了新的配分函数,在 70 K ~ 3000 K 范围内取得了与 HITRAN/HITEMP 数据库中 TIPS 数据极其吻合的结果,误差不超过 0.3%,然后将温度范围推广到 3000 K ~ 8000 K,得到的配分函数与了现有求和模型很接近,从而在一定程度上扩大了 HITEMP 数据库的应用范围,且可用于非平衡状态下 NO 配分函数的计算。本文思路在一定程度上也可应用到流场其它组分配分函数等参数的快速计算。值得注意的是,随着温度升高,HITEMP 数据库中忽略的谱线将对辐射产生重要影响,由此 HITEMP 计算得到的特定谱段辐射强度偏小^[13],且当温度达到一定程度时该现象愈加明显,此时将需要对 HITEMP 数据库进行进一步修正完善。

参 考 文 献

- Jiang Tao, Ding Mingsong, Gao Tiesuo, *et al.*. Numerical simulation of IR seeker high-speed flow field and its influence on ray transmission [J]. *Acta Optica Sinica*, 2012, 32(8): 0801002.
- 江涛,丁明松,高铁锁,等. 红外导引头高速流场及其对光线传输影响的数值模拟[J]. *光学学报*, 2012, 32(8): 0801002.
- L S Rothman. The evolution and impact of the HITRAN molecular spectroscopic database [J]. *Journal of Quantitative Spectroscopy & Radiative Transfer*, 2010, 111(11): 1565 - 1567.
- G Faure. Partition functions for diatomic molecules in plasmas out of thermal equilibrium [J]. *Plasma Science and Technology*, 2012, 14(3): 192-200.
- Y Babou, P Riviere, M Y Perrin, *et al.*. High-temperature and

nonequilibrium partition function and thermodynamic data of diatomic molecules [J]. *Int J Thermophys*, 2009, 30(2): 416-438.

- J T Pearson, B W Webb, U P Solovjov, *et al.*. Effect of representation of the absorption line blackbody distribution function for H₂O, CO₂, and CO at variable temperature, mole fraction, and total pressure [J]. *Journal of Quantitative Spectroscopy & Radiative Transfer*, 2014, 138: 82-96.
- M Šimečková, D Jacquemart, I S Rothman, *et al.*. Einstein A-coefficients and statistical weights for molecular absorption transitions in the HITRAN database [J]. *Journal of Quantitative Spectroscopy & Radiative Transfer*, 2006, 98(1): 130-155.
- A L Laraia, R R Gamache, J Lamouroux, *et al.*. Total internal partition sums to support planetary remote sensing [J]. *Icarus*, 2011, 215(1): 391-400.
- G Herzberg. *Molecular Spectra and Molecular Structure (II): Infrared and Raman Spectra of Polyatomic Molecules* [M]. New York: Van Nostrand, 1945.
- I N Levine. *Molecular Spectroscopy* [M]. New York: John Wiley & Son, 1975.
- Mei Fei, Jiang Yong, Chen Shiguo, *et al.*. Experimental verification for line by line prediction mode of gas absorption [J]. *Acta Optica Sinica*, 2012, 32(3): 0330002
- 梅飞,江勇,陈世国,等. 一种气体吸收的逐线计算模型及其实验验证[J]. *光学学报*, 2012, 32(3): 0330002.
- Dai Congming, Wei Heli, Hu Shunxing. Analysis on upper atmospheric radiance transfer characteristic to different HITRAN databases [J]. *Acta Optica Sinica*, 2013, 33(5): 0501001.
- 戴聪明,魏合理,胡顺星. 不同版本 HITRAN 数据库对高层大气辐射传输影响特性[J]. *光学学报*, 2013, 33(5): 0501001.
- D Packan, C O Laux, R J Gessman, *et al.*. Measurement and modeling of OH, NO, and CO₂ infrared radiation at 3400 K [J]. *Journal of Thermophysics and Heat Transfer*, 2003, 17(4): 450-457.
- L S Rothman, I E Gordon, R J Barber, *et al.*. HITEMP, the high-temperature molecular spectroscopic database [J]. *Journal of Quantitative Spectroscopy & Radiative Transfer*, 2010, 111(15): 2139-2150.
- C Park. *Nonequilibrium Hypersonic Aerothermodynamics* [M]. New York: John Wiley & Sons, 1989.

栏目编辑:何卓铭