

氧化亚氮 3000—0200 和 1001—0110 跃迁带 在高温下的线强度*

宋晓书^{1)†} 程新路²⁾ 杨向东²⁾ 令狐荣锋¹⁾

1) 贵州师范大学理学院, 贵阳 550001)

2) 四川大学原子与分子物理研究所, 成都 610065)

(2006 年 11 月 10 日收到, 2007 年 1 月 12 日收到修改稿)

采用乘积近似法计算了氧化亚氮分子的总配分函数, 其中转动配分函数考虑了离心扭曲修正, 振动配分函数采用谐振子近似. 利用计算所得的配分函数和实验振动跃迁矩平方及 Herman-Wallis 因子系数, 计算了氧化亚氮 3000—0200 和 1001—0110 跃迁带在常温和高温下的线强度. 结果显示, 当温度高达 3000 K 时, 计算所得线强度与实验值及 HITRAN 数据库提供的结果仍符合较好. 这表明高温下的分子配分函数和线强度的计算是可靠的. 还进一步计算了氧化亚氮 3000—0200 和 1001—0110 跃迁带在更高温度(4000 和 5000 K)下的线强度及模拟光谱.

关键词: 氧化亚氮, 配分函数, 线强度, 高温

PACC: 3310, 3320E

1. 引 言

氧化亚氮是地球大气中含量较少但却很重要的一种组成部分. 它涉及到气象化学并且在控制地球热平衡方面有重要作用, 其分子光谱在遥感技术、目标特性识别及大气辐射传输等领域有重要应用. 大气的气象特性(压力、温度、密度及成分等)和大气传输特性的研究需要大气分子精确的线强度和带强度. 有关氧化亚氮带强度的实验测量已有大量报道^[1-20], 其中 Toth^[5-8]对氧化亚氮进行了广泛的研究, 他对氧化亚氮分子光谱的测量覆盖了 900—7800 cm^{-1} 的波数范围. 直到最近, 大量分子光谱的实验测量及理论计算主要是在常温下^[21-26], HITRAN 数据库中最高温度也只能外推到 3000 K^[27, 28]. 随着航空技术及天体物理、激光物理和大气物理等学科快速发展, 对大气分子光谱的研究提出了更高的要求, 需要更高温度下的跃迁线强度和带强度.

对氧化亚氮, 3000—0200 和 1001—0110 跃迁是其分子光谱较弱的两个带, 带心分别位于 2668.24

和 2892.05 cm^{-1} . Rachtel 等^[12, 43]已对其进行了深入的研究, 但其强度测量和理论计算均在常温下(296 K). 本文的工作将这两个跃迁带的线强度计算扩展到 5000 K. 结果显示: 在 296 K, 我们计算的线强度与文献 [13] 的实验值及 HITRAN 数据库提供的结果符合很好, 当温度高达 3000 K 时, 计算值与 HITRAN 数据库提供的值仍符合较好. 这表明我们对氧化亚氮光谱线强度的计算是可靠的. 因此, 我们进一步计算了氧化亚氮 3000—0200 和 1001—0110 跃迁在更高温度(4000 和 5000 K)的线强度. 这对于大气传输特性的研究具有重要意义.

2. 计算方法

2.1. 分子配分函数的计算

分子总的配分函数用广泛采用的乘积近似^[29], 即

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

振动配分函数 Q_{vib} 用谐振子近似^[30], 即

* 国家安全重大基础研究计划(批准号: 5134202-04) 国家自然科学基金(批准号: 10574096) 高等学校博士学科点专项科研基金(批准号: 20050610010) 和贵州省教育厅自然科学基金(批准号: 2006204) 资助的课题.

† 通讯联系人. E-mail: xdyang@scu.edu.cn

$$Q_{\text{vib}}(T) = \prod_{\nu_i} \frac{1}{1 - \exp(-hc\nu_i/(k_B T))}. \quad (2)$$

这里 h 是普朗克常数, c 是真空中光速, ν_i 是分子的第 i 个振动基频(单位为 cm^{-1}), k_B 是玻尔兹曼常数, T 是温度. 转动配分函数用 McDowell 的研究结果^[31] 即

$$Q_{\text{rot}} \approx \sigma^{-1} I^2 e^{\beta/3} \beta^{-1} \left[1 + \frac{\beta^2}{90} + \frac{8\beta^2}{2835} + \dots \right. \\ \left. + \kappa I^{-1} \pi^{3/2} e^{-\beta/12} e^{-\pi^2/4\beta} \beta^{-1/2} \right] f_c. \quad (3)$$

这里 f_c 为离心扭曲修正因子, 即(3)式用的是非刚性转子模型, 考虑了离心扭曲修正, 对高温应用是比较合适的,

$$f_c = 1 + 2d(3 - \beta)(3\beta) + \alpha(2d^2 - h')\beta^2 \\ + 120d(d^2 - h')\beta^2.$$

这里

$$\beta = hcB/(k_B T),$$

$$d = D/B,$$

$$h' = H/B,$$

其中 B , D 和 H 是分子的转动常数. McDowell 的计算结果表明, 只要转动常数达到足够的精度, 通过(3)式可得到高达 5000 K 的足够精确的分子转动配分函数^[31].

2.2. 线强度的计算

一旦计算了配分函数 $Q(T)$, 我们再利用实验跃迁矩平方 R_v^2 和 Herman-Wallis 因子系数 A_1, A_2 通过下式计算线强度 $S_{b \leftarrow a}(T)$ ^[32]:

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

式中 I_x 是样品中对应分子的同位素丰度, $\nu_{b \leftarrow a}$ 是从低态到高态的跃迁波数(单位为 cm^{-1}); g_a 是核自旋简并因子, E_a 是低能级的能量, R_v^2 是无转动跃迁矩平方(单位为 Deb^2 , $1 \text{ Deb} = 0.33356 \times 10^{-29} \text{ Cm}$); $Q(T)$ 是配分函数; $L(J)$ 是 Honl-London 因子, 对 $\Sigma-\Sigma$ 的振动跃迁, $L(J) = J$ 和 $J+1$ 分别对应 P 支和 R 支, 对于 $\Sigma-\Pi$ 的振动跃迁, $L(J) = (J+1)/2$, $(2J+1)/2$ 和 $J/2$ 分别对应 P 支、Q 支和 R 支; $F(m)$ 是 Herman-Wallis 因子, 该项因子是考虑振转相互作用的影响, 对于一个线形分子, 可用 Herman-Wallis 参数 A_1 和 A_2 来表示^[12], 对 P 支和 R 支,

$$F(m) = (1 + A_1 m)^2,$$

对 Q 支,

$$F(m) = (1 + A_2 m(m+1))^2,$$

对于 $\Sigma-\Sigma$ 的振动跃迁, $m = -J$ 和 $J+1$ 分别对应 P 支和 R 支, 对于 $\Sigma-\Pi$ 的振动跃迁, $m = -J, J$ 和 $J+1$ 分别对应 P 支、Q 支和 R 支.

对氧化亚氮 3000—0200 跃迁, $\Delta l = 0$ 且 $l = 0$, 为一平行谱带(属于 $\Sigma-\Sigma$ 的振动跃迁), 其转动量子数的跃迁选择定则为 $\Delta J = \pm 1$, 即只有 P 支和 R 支, 没有 Q 支. 根据 HITRAN 数据库提供的跃迁波数范围 2625.971—2692.991 cm^{-1} , 我们计算了转动量子数 $J \leq 40$ 的跃迁谱线强度.

对氧化亚氮 1001—0110 跃迁, $\Delta l = -1$, 属于 $\Sigma-\Pi$ 的振动跃迁, 产生一垂直谱带, 转动量子数的选择定则为 $\Delta J = 0, \pm 1$, 因而有 P, Q 和 R 三个支, 且 Q 支较强. 我们也只计算了转动量子数 $J \leq 40$ 的跃迁谱线强度.

这里, 同位素丰度 I_x 和跃迁波数 $\nu_{b \leftarrow a}$ 的值均取自 HITRAN 数据库^[28]. 氧化亚氮的核自旋简并因子 $g_a = 1$. R_v^2 和 Herman-Wallis 参数 A_1, A_2 的值取自参考文献[13]. $Q(T)$ 采用(1)式乘积近似进行计算. 低态能级能量 E_a 由下式求解:

$$E_{(v, J)} = G_v + B(J+1) - DJ^2(J+1)^2 \\ + HJ^3(J+1)^3, \quad (5)$$

式中光谱项 G_v 的值来自 HITRAN 数据库, 转动常数 B, D 和 H 的值取自文献[6].

3. 结果及讨论

我们将计算所得各温度下氧化亚氮 3000—0200 跃迁带的分子谱线强度列于表 1, 并与实验值及 HITRAN 数据库的数据进行比较. 为了与 Ratchet 等^[13] 的实验值和计算值进行比较, 表 1 中只列出转动量子数 $J \leq 32$ 即波数范围为 2635.783—2689.585 cm^{-1} 的部分谱线强度.

由表 1 可以看出, 在 296 K, 我们的计算值与文献[13] 的实验值和计算值以及 HITRAN 数据库提供的实验值均符合相当好. 当温度高达 3000 K 时, 我们的计算值与 HITRAN 数据库的外推值仍符合较好, 其误差 R 支较大, 最大为 5.166%, P 支误差较小, 最大为 2.244%, 其模拟光谱的比较见图 1. 如此好的符合表明高温下分子配分函数和线强度的计算是可靠的. 进一步计算 4000 和 5000 K 高温下的线

强度 结果也列于表 1. 图 2 给出了氧化亚氮 3000—0200 跃迁带在 4000 和 5000 K 高温下的模拟光谱.

表 1 氧化亚氮在常温和高温下 3000—0200 跃迁带的分子谱线强度(单位: 10^{-24} cm^{-1})

谱线	296 K				3000 K			4000 K	5000 K
	本文计算值	实验值 ^[13]	计算值 ^[13]	实验值 ^[28]	本文计算值	外推值 ^[28]	误差/%	本文计算值	本文计算值
P32e	0.566	0.570	0.561	0.565	0.950	0.929	2.244	0.299	0.111
P31e	0.621	0.628	0.616	0.621	0.927	0.908	2.057	0.291	0.108
P29e	0.737	0.749	0.732	0.738	0.880	0.863	1.959	0.275	0.102
P27e	0.857	0.848	0.852	0.859	0.831	0.815	1.929	0.258	0.095
P26e	0.917	0.926	0.911	0.919	0.805	0.790	1.919	0.249	0.092
P25e	0.976	0.973	0.970	0.980	0.779	0.765	1.802	0.241	0.089
P24e	1.033	1.00	1.027	1.036	0.753	0.738	1.929	0.232	0.085
P23e	1.087	1.068	1.082	1.089	0.726	0.711	2.080	0.223	0.082
P21e	1.184	1.157	1.178	1.189	0.670	0.658	1.847	0.205	0.075
P20e	1.224	1.208	1.219	1.230	0.642	0.630	1.826	0.196	0.072
P19e	1.258	1.236	1.252	1.262	0.613	0.601	1.977	0.187	0.068
P18e	1.284	1.285	1.278	1.290	0.584	0.573	1.865	0.178	0.065
P17e	1.301	1.309	1.296	1.306	0.554	0.543	1.991	0.168	0.061
P15e	1.307	1.324	1.302	1.314	0.493	0.484	1.872	0.149	0.054
P14e	1.294	1.272	1.290	1.298	0.462	0.452	2.124	0.140	0.051
P13e	1.270	1.275	1.266	1.274	0.431	0.422	2.124	0.130	0.047
P12e	1.234	1.231	1.230	1.242	0.399	0.392	1.815	0.120	0.044
P10e	1.127	1.113	1.124	1.133	0.335	0.329	1.908	0.101	0.037
P9e	1.055	1.045	1.052	1.060	0.303	0.297	2.008	0.091	0.033
P8e	0.972	0.969	0.970	0.976	0.270	0.264	2.146	0.081	0.029
P7e	0.879	0.898	0.876	0.883	0.237	0.232	2.007	0.071	0.026
P5e	0.662	0.657	0.660	0.665	0.170	0.167	1.932	0.051	0.018
P4e	0.540	—	—	0.540	0.136	0.133	2.489	0.041	0.015
P3e	0.412	—	—	0.411	0.103	0.100	2.665	0.031	0.011
P2e	0.278	—	—	0.279	0.068	0.067	2.375	0.021	0.007
R1e	0.282	—	—	0.282	0.069	0.067	2.531	0.021	0.007
R2e	0.420	—	—	0.419	0.103	0.101	2.690	0.031	0.011
R3e	0.554	—	—	0.552	0.138	0.134	2.826	0.041	0.015
R4e	0.683	0.681	0.682	0.681	0.173	0.168	2.751	0.052	0.019
R6e	0.919	0.913	0.917	0.915	0.242	0.235	2.918	0.073	0.026
R7e	1.024	1.038	1.021	1.020	0.277	0.269	2.850	0.083	0.030
R8e	1.119	1.131	1.116	1.113	0.311	0.302	2.942	0.094	0.034
R9e	1.202	1.217	1.199	1.193	0.346	0.335	3.199	0.104	0.038
R11e	1.334	1.294	1.330	1.322	0.414	0.401	3.301	0.125	0.045
R12e	1.381	1.350	1.377	1.371	0.449	0.435	3.156	0.135	0.049
R13e	1.417	1.422	1.412	1.403	0.483	0.467	3.353	0.146	0.053
R14e	1.440	1.401	1.435	1.423	0.517	0.498	3.550	0.156	0.057
R16e	1.452	1.511	1.446	1.435	0.584	0.563	3.505	0.177	0.064
R17e	1.441	1.445	1.436	1.423	0.617	0.595	3.611	0.188	0.068
R18e	1.421	1.432	1.415	1.399	0.650	0.625	3.869	0.198	0.072
R19e	1.392	1.358	1.386	1.371	0.683	0.657	3.815	0.208	0.076
R21e	1.310	1.274	1.340	1.286	0.747	0.716	4.126	0.229	0.084
R22e	1.260	1.274	1.254	1.234	0.779	0.745	4.298	0.239	0.088
R23e	1.205	1.197	1.199	1.181	0.810	0.776	4.181	0.250	0.092
R24e	1.145	1.164	1.139	1.121	0.841	0.805	4.314	0.260	0.095
R26e	1.018	0.974	1.013	0.992	0.902	0.859	4.737	0.280	0.103
R27e	0.953	0.953	0.947	0.927	0.932	0.887	4.776	0.290	0.107
R28e	0.887	0.886	0.881	0.863	0.961	0.915	4.788	0.300	0.111
R29e	0.821	0.805	0.816	0.798	0.990	0.942	4.845	0.310	0.115
R31e	0.694	0.694	0.689	0.673	1.046	0.994	4.947	0.329	0.123
R32e	0.633	0.634	0.628	0.613	1.073	1.018	5.166	0.339	0.126

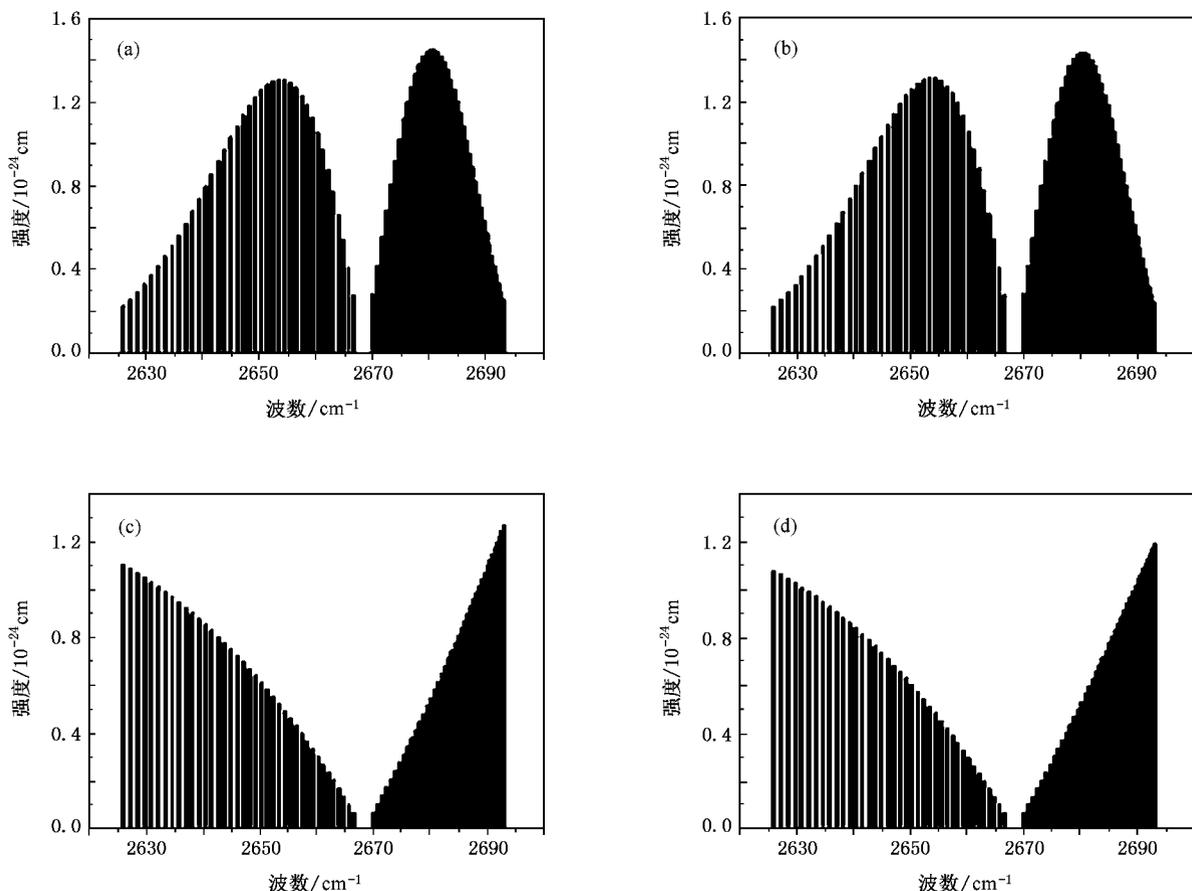


图 1 氧化亚氮 3000—0200 跃迁带在 296 和 3000 K 的分子模拟光谱的比较 (a) 296 K, 本文计算; (b) 296 K, HITRAN 数据库; (c) 3000 K, 本文计算; (d) 3000 K, HITRAN 数据库

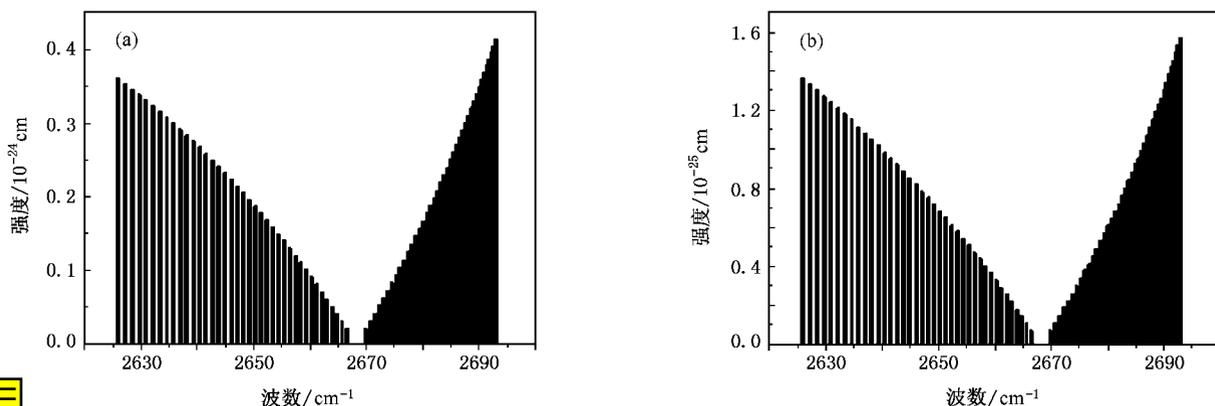


图 2 氧化亚氮 3000—0200 跃迁带在 4000 和 5000 K 的分子模拟光谱 (a) 4000 K (b) 5000 K

比较氧化亚氮 3000—0200 跃迁带的线强度从 296 到 3000 K 的变化可以看出,对于转动量子数 $J > 27$ (包括 P 支和 R 支) 的跃迁,线强度在 3000 K 比在 296 K 下强,且 J 值越大,增强的幅度也大.而 $J \leq 27$ 即跃迁波数范围为 2640.449—2687.637 cm^{-1} 的跃迁,其线强度在 3000 K 比在 296 K 下弱,且 J 值

越小减弱的幅度反而越大.这就使得模拟光谱图的形状从 296 到 3000 K 发生很大变化,最强的跃迁谱线(包括 P 支和 R 支)均向 J 值增大的方向移动,见图 1.当温度从 3000 K 继续升高,达到 4000 和 5000 K 时,所有跃迁谱线的线强度均迅速减弱,且减弱的幅度基本一致.所以,从 3000 K 一直到 5000 K,虽然

线强度很快减弱但其模拟光谱图的形状却不再发生改变,如图 1 和图 2 所示.

对于氧化亚氮 1001—0110 跃迁带在上述不同温度下的线强度,这里只给出本文计算得到的不同温度下的模拟光谱,如图 3 所示.

由图 3 可以看出,当温度从 296 K 升高到 3000 K 时,我们所计算的转动量子数范围内($J \leq 40$)

的所有谱线(包括 P 支、Q 支和 R 支)的线强度均减弱,但减弱的幅度不一致,从而导致模拟光谱的形状发生改变.当温度从 3000 K 继续升高到 4000 和 5000 K 时,谱线强度迅速减弱,且减弱的幅度基本一致,模拟光谱的形状不再发生改变.显然,在任何温度下,Q 支的强度都较 P 支和 R 支强.

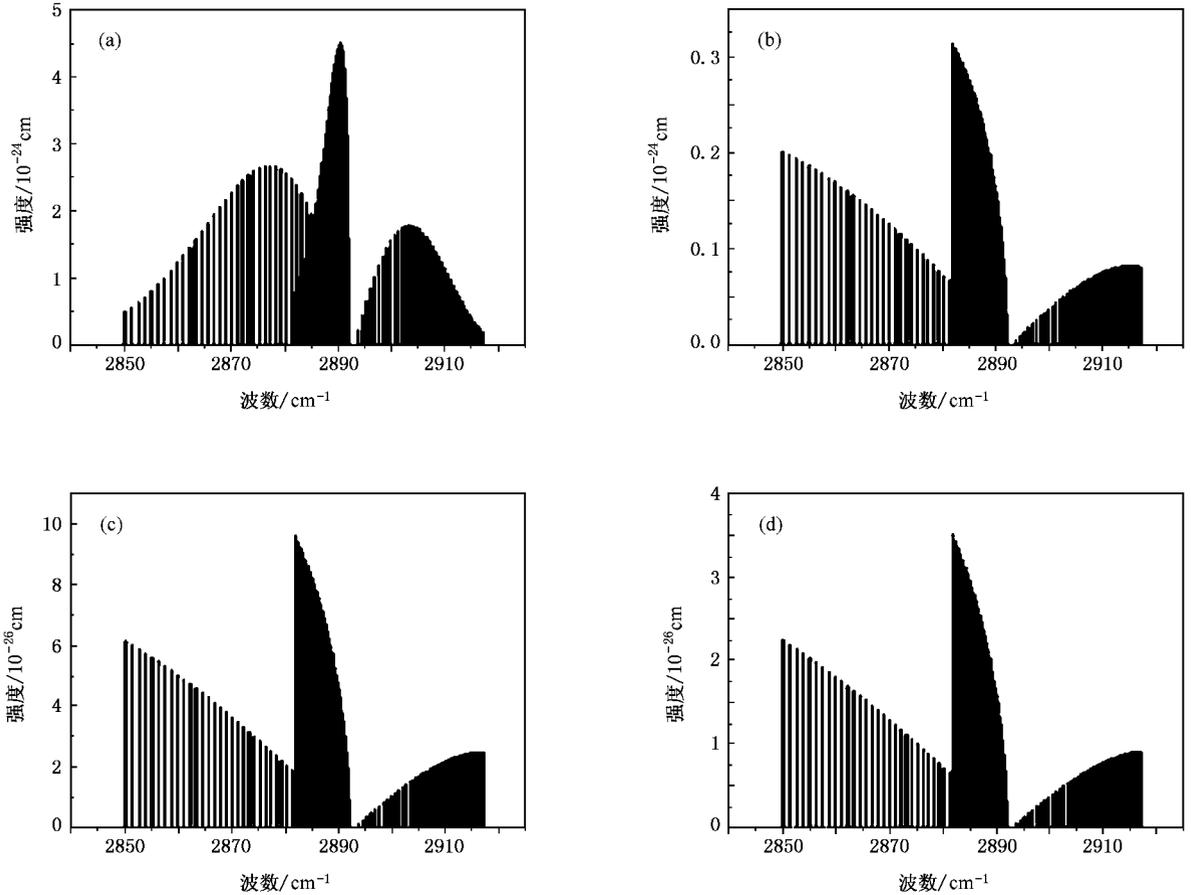


图 3 氧化亚氮 1001—0110 跃迁带在不同温度下的分子模拟光谱 (a) 296 K (b) 3000 K (c) 4000 K (d) 5000 K

4. 结 论

本文采用乘积近似法计算了氧化亚氮在高温下的分子配分函数,其中转动配分函数用 McDowell 的非刚性转子模型,振动配分函数用谐振子模型.通过计算的分子配分函数和 Rachtel 等从实验获得的振动跃迁矩平方及 Herman-Wallis 因子系数,计算了氧化亚氮 3000—0200 和 1001—0110 跃迁带的线强

度.计算结果在 296 K 时和已有实验值及 HITRAN 数据库的结果符合相当好.在温度高达 3000 K 时与 HITRAN 数据库的结果仍符合较好,这表明高温下的分子配分函数和线强度的计算结果是可靠的.在此基础上,还给出了氧化亚氮 3000—0200 和 1001—0110 跃迁带在更高温度(4000 和 5000 K)的线强度及模拟光谱.这对于从实验上获取氧化亚氮的高温分子光谱信息及对大气传输特性的研究具有重要的参考价值.

- [1] Lacombe N , Levy A 1978 *J. Mol. Spectrosc.* **71** 175
- [2] Lacombe N , Levy A 1981 *J. Mol. Spectrosc.* **85** 205
- [3] Kagann R H 1982 *J. Mol. Spectrosc.* **95** 297
- [4] Levy A , Lacombe N , Guelachvili G 1984 *J. Mol. Spectrosc.* **103** 160
- [5] Toth R A 1984 *Appl. Opt.* **23** 1825
- [6] Toth R A 1986 *J. Opt. Soc. Am. B* **3** 1263
- [7] Toth R A 1993 *Appl. Opt.* **32** 7326
- [8] Toth R A 1999 *J. Mol. Spectrosc.* **197** 158
- [9] Loewenstein M , Podolske J R , Blackburn T E , Varanasi P 1986 *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer* **35** 231
- [10] Tang L W , Nadler S , Daunt S J 1989 *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer* **41** 97
- [11] El Azizi M , Rachet F , Henry A , Margottin-Maclou M , Valentin A 1994 *J. Mol. Spectrosc.* **164** 180
- [12] Rachet F , Margottin-Maclou M , El Azizi M , Henry A , Valentin A 1994 *J. Mol. Spectrosc.* **164** 196
- [13] Rachet F , Margottin-Maclou M , El Azizi M , Henry A , Valentin A 1994 *J. Mol. Spectrosc.* **166** 79
- [14] Iyulin O M , Perevalov V I , Teffo J L 1995 *J. Mol. Spectrosc.* **174** 566
- [15] Johns J M C , Lu Z , Weber M , Sirota J M , Reuter D C 1996 *J. Mol. Spectrosc.* **177** 203
- [16] Weber M , Sirota J M , Reuter D C 1996 *J. Mol. Spectrosc.* **177** 211
- [17] Iyulin O M , Perevalov V I , Teffo J L 1996 *J. Mol. Spectrosc.* **180** 72
- [18] Weirauch G , Kachanov A A , Campargue A , Bach M , Herman M , Auwera J V 2000 *J. Mol. Spectrosc.* **202** 98
- [19] Daumont L , Auwera J V , Teffo J L , Perevalov V I , Tashkun S A 2001 *J. Mol. Spectrosc.* **208** 281
- [20] Daumont L , Claveau C , Debacker-Barilly M R , Hamdouni A , Régalia-Jarlot L , Teffo J L , Tashkun S , Perevalov V I 2002 *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer* **72** 37
- [21] Liu A W , Hu S M , Ding Y , Zhu Q S 2005 *Chin. Phys.* **14** 1946
- [22] Xu C Y , Yang X H , Guo Y C , Wu L , Li W , Chen Y Q 2005 *Chin. Phys.* **14** 1954
- [23] Chen P , Zhu H , Hao L Y , Hu S M , Liu A W , Zheng J J , Ding Y 2005 *Chin. Phys.* **14** 634
- [24] Han H X , Peng Q , Wen Z Y , Wang Y B 2005 *Acta Phys. Sin.* **54** 78 (in Chinese) [韩慧仙、彭 谦、文振翼、王育彬 2005 物理学报 **54** 78]
- [25] Ma S H , Shi Y L , Xu X L , Yan W , Yang Y P , Wang L 2006 *Acta Phys. Sin.* **55** 4091 (in Chinese) [马士华、施宇蕾、徐新龙、严伟、杨玉平、汪 力 2006 物理学报 **55** 4091]
- [26] Zeng X H , Zhao G J , Zhang L H , He X M , Hang Y , Li H J , Xu J 2005 *Acta Phys. Sin.* **54** 612 (in Chinese) [曾雄辉、赵广军、张连翰、何晓明、杭 寅、李红军、徐 军 2005 物理学报 **54** 612]
- [27] Rothman L S , Barbe A , Benner D C , Brown L R , Camy-Peyret C , Carleer M R , Chance K , Clerbaux C , Dana V , Devi V M , Fayt A , Flaud J M , Gamache R R , Goldman A , Jacquemart D , Jucks K W , Lafferty W J , Mandin J Y , Massie S T , Nemtchinov V , Newnham D A , Perrin A , Rinsland C P , Schroeder J , Smith K M , Smith M A H , Tang K , Toth R A , Auwera J V , Varanasi P , Yoshino K 2003 *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer* **82** 5
- [28] Rothman L S , Jacquemart D , Barbe A , Benner D C , Birk M , Brown L R , Carleer M R , Chackerian C Jr , Chance K , Coudert L H , Dana V , Devi V M , Flaud J M , Gamache R R , Goldman A , Hartmann J M , Jucks K W , Maki A G , Mandin J Y , Massie S T , Orphal J , Perrin A , Rinsland C P , Smith M A H , Tennyson J , Tolchenov R N , Toth R A , Auwera J V , Varanasi P , Wagner G 2005 *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer* **96** 139
- [29] Gamache R R , Kennedy S , Hawkins R L , Rothman L S 2000 *J. Mol. Struct.* **517—518** 407
- [30] Herzberg G 1947 *Molecular Spectra and Molecular Structure (II) : Infrared and Raman Spectra of Polyatomic Molecules* (New York : Van Nostrand) p76
- [31] McDowell R S 1988 *J. Chem. Phys.* **88** 356
- [32] Claveau C , Teffo J L , Hurtmans D , Valentin A , Gamache R R 1999 *J. Mol. Spectrosc.* **193** 15

Line intensities of 3000—0200 and 1001—0110 transition bands of $^{14}\text{N}_2^{16}\text{O}$ at high temperature^{*}

Song Xiao-Shu^{1,2)} Cheng Xin-Lu²⁾ Yang Xiang-Dong^{2)†} Linghu Rong-Feng¹⁾

¹⁾ *School of Physics and Chemistry, Guizhou Normal University, Guiyang 550001, China*

²⁾ *Institute of Atomic and Molecular Physics, Sichuan University, Chengdu 610065, China*

(Received 10 November 2006; revised manuscript received 12 January 2007)

Abstract

The total internal partition sums (TIPS) were calculated for nitrous oxide with the product approximation. For rotational partition sums Q_{rot} , the centrifugal distortion corrections are under consideration. The calculation method for the vibrational partition sums Q_{vib} used is the harmonic oscillator approximation. Using experimental transition moment squared and Herman-Wallis factor coefficients and the calculated partition functions, we computed the line intensities of 3000—0200 and 1001—0110 transitions of nitrous oxide at several temperatures. The agreement between the calculated line intensities and experimental results and those extrapolated from HITRAN database is fairly good at temperatures up to 3000 K, which shows that the calculation of partition function and line intensity at high temperature is reliable. Furthermore, the line intensities and spectral simulations at the higher temperatures of 4000 and 5000 K are also presented.

Keywords: nitrous oxide, partition sums, line intensities, high temperature

PACC: 3310, 3320E

^{*} Project supported by the Major Program for Basic Research of National Security, China (Grant No. 5134202-04), the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 10574096), the Doctoral Program Foundation of Institution of Higher Education of China (Grant No. 20050610010) and the Natural Science Foundation of the Education Bureau of Guizhou Province, China (Grant No. 2006204).

[†] Corresponding author. E-mail: xdyang@scu.edu.cn