

Study on the Partition Function of the Ideal Air*

Xuefen Huang¹, Yongfei Xue², Yunchong Tu¹, Keqi Wu¹

¹The State Key Laboratory of Coal Combustion, Huazhong University of Science and Technology, Wuhan

²Department of Civil Engineering, Henan Institute of Engineering, Zhengzhou

Email: huangfen201@163.com

Received: Sep. 16th, 2011; revised: Oct. 24th, 2011; accepted: Oct. 26th, 2011.

Abstract: The partition function of the air and its calculation method are studied in this paper. Statistical method and the quantum method which is based on the density functional theory (DFT) are used to calculate the partition functions of the oxygen molecule and nitrogen molecule. Further approximation and simplification was made here on the basis of the partition function decomposition theorem, the linear expressions of the total internal partition functions of the oxygen and nitrogen molecules were obtained. The results showed that the calculation results of these two methods were very consistent. The results of the simplified linear expressions were compared with the HITRAN database and existing results at home and abroad, the value of error was about 1%. Finally the calculation result of the partition function of the air was given.

Keywords: Ideal Air; Oxygen and Nitrogen Molecules; Partition Function; the Total Internal Partition Functions; DFT Quantum Computing

理想空气的配分函数研究*

黄雪芬¹, 薛永飞², 涂运冲¹, 吴克启¹

¹华中科技大学煤燃烧国家重点实验室, 武汉

²河南工程学院土木工程系, 郑州

Email: huangfen201@163.com

收稿日期: 2011年9月16日; 修回日期: 2011年10月24日; 录用日期: 2011年10月26日

摘要: 本文研究了空气的配分函数及其计算方法, 文中分别采用统计方法和基于密度泛函理论(DFT)的量子计算方法来计算氧氮分子的配分函数, 在配分函数分解定理的基础上进一步近似简化, 得到氧氮分子总的内部配分函数的线性表达式。结果表明, 2种方法的计算结果十分一致, 简化计算结果与HITRAN数据库及国内外已有的结果进比较, 误差约为1.0%。最后计算了空气的配分函数, 得到结果。

关键词: 理想空气; 氧氮分子; 配分函数; 内部配分函数; DFT量子计算

1. 引言

在射流的宏观气动声场中, 声在空气中传播的微观性质要涉及其配分函数的计算问题。配分函数将宏观和微观现象相关联, 起着特征函数的作用, 一切热力学函数都可以由配分函数求算^[1]。空气 21%的氧气 O₂ 与 78%的氮气 N₂, 混合在一起组成空气体积的 99%。因此, 研究空气粒子的配分函数, 可以从研究

氧、氮分子的配分函数入手。

一直以来, 国内外针对空气配分函数的计算很少见, 早期的教材和文献部分的给出了氧分子和氮分子的转动、振动配分函数值, 以及总的内部配分函数值, 文献[1]给出了 O₂ 分子全配分函数的计算例。而目前对配分函数的研究大都在于单分子配分函数的精确计算^[2]或者单分子总的内部配分函数在更高温度范围的拟合计算式^[3-7], 并未涉及到混合气体。本文从统计热力学与密度泛函理论 2 个方面, 研究 O₂, N₂ 分子配

*基金项目: 国家自然科学基金资助(50976044); 煤燃烧国家重点实验室基金项目资助。

分函数不同的计算方法, 并将内部配分函数与 HITRAN 数据库中的结果进行比较, 在此基础上, 提出了一般温度下空气配分函数的近似计算关系式及其计算结果。

2. 分子配分函数

根据 Boltzmann 分布定律, 定义^[8]

$$q = \sum_{i=0} g_i \exp(-\varepsilon_i/kT) \quad (1)$$

q 叫做分子配分函数。其中 $\exp(-\varepsilon_i/kT)$ 为 Boltzmann 因子; ε_i 为分子的能级; g_i 为分子能级 ε_i 上的简并度, k 为 Boltzmann 常数, 约等于 $1.381 \times 10^{-23} \text{ J} \cdot \text{K}^{-1}$; T 为开尔文温度。

对于分子的 5 种运动形式: 平动(t)、转动(r)、振动(v)、电子运动(e)以及核运动(n)。假定这些运动是相互独立的^[1], 气体分子的能量可以表示为两个独立项的和^[9]

$$\varepsilon = \varepsilon_t + \varepsilon_{in} \quad (2)$$

式中 ε_t 表示分子的平动能, 与分子质心在空间运动相联系; ε_{in} 表示分子内部运动能量, 它与分子内部的转动、振动等相联系, 定义为当质心静止时分子的总能量。 ε_t 和 ε_{in} 都是量子化的。分子配分函数析因子性质可以表示为

$$q = q_t q_{in} \quad (3)$$

分子内部能量 $\varepsilon_{in} = \varepsilon_r + \varepsilon_v + \varepsilon_e + \varepsilon_n$, 则(2)式可写为

$$\varepsilon = \varepsilon_t + \varepsilon_r + \varepsilon_v + \varepsilon_e + \varepsilon_n \quad (4)$$

由配分函数分解定理^[1], 分子配分函数即可表示成以下形式

$$q = q_t q_{in} = q_t q_r q_v q_e q_n \quad (5)$$

式(5)与配分函数析因子性质是等价的, 可以将分子总的配分函数分解为各个独立运动形式的配分函数之积, 计算得到简化。

2.1. 分子内部配分函数

分子的内部运动与外部运动(平动)是相互独立的^[9], HITRAN 数据库^[10]中给出的分子内部配分函数表达式为:

$$Q(T) = d_i \sum d_s e^{-E_s/kT} \quad (6)$$

式中, d_s 是依赖态简并因子, d_i 是独立态简并因子, E_s 为电子运动、振动、转动及扭转等状态的能量。一种计算分子内部配分函数的方法是直接对所有态求和, 这种方法是最准确的, 但适用于较低或者中等温度。另一种计算分子内部配分函数的方法是乘积近似, 假定电子运动、振动与转动能量相互独立, 忽略它们之间的相互作用, 这种方法对高温也适用。本文采用乘积近似方法, 这时分子内部总配分函数可写成:

$$Q(T)_{in} = Q_e \times Q_v \times Q_r \times \dots \quad (7)$$

这与上面配分函数分解定理或析因子性质的表达是一致的。

3. 配分函数的计算方法

3.1. 统计计算方法

3.1.1. 转动配分函数

考虑双原子分子为刚性直线分子, 同核双原子分子的转动配分函数为^[1]

$$q_r = 8\pi^2 I k T / 2h^2 \quad (8)$$

引入转动特征温度 $\theta_r = h^2 / 8\pi^2 I k$, 对于温度 $T \gg \theta_r$ 的情况, 量子态求和所得转动配分函数与式(8)式完全一致。此时, 转动配分函数为

$$q_r = T / 2\theta_r \quad (9)$$

3.1.2. 振动配分函数

双原子分子作一维谐振子近似, 能级非简并, $g_v = 1$ 。当选取基态为能量零点时, 振动配分函数^[1]即为

$$q_v = \frac{1}{1 - e^{-h\nu/kT}} \quad (10)$$

其中 ν 为一维谐振子频率, 由振子的固有属性: 质量 m 和弹性常量 f 决定, 它与振动波数的关系为 $\nu = \tilde{\nu} \cdot c$, c 为光速。

引入振动特征温度 $\theta_v = h\nu/k$, 则一维谐振子的振动配分函数可表为

$$q_v = \frac{1}{1 - e^{-\theta_v/T}} \quad (11)$$

3.1.3. 电子配分函数

由于绝大多数分子及原子中的电子一般处于基态或少数低能级态上, 处于室温下的 $e^{-\varepsilon_e/kT}$ 项非常小,

可以忽略。在分子内部配分函数的计算中,来自电子激发态的项常常是可以忽略的^[9]。因此

$$q_e^0 = g_{e,0} = \text{常数} \quad (12)$$

$g_{e,0}$ 为最低电子能级简并度,对于绝大多数分子和稳定离子,最低能级几乎总是非简并的,即 $g_{e,0} = 1$ 。但是氧气分子 O_2 是一种例外情况,它的 $g_{e,0} = 3$,在计算总配分函数时不可忽略。故 $q_e^0(O_2) = g_{e,0} = 3$ 。

N_2 分子的电子配分函数为 1,即 $q_e^0(N_2) = 1$

3.1.4. 核配分函数

就核激发态而言,它的 ε_n 值是极其大的,从而在地球上任何温度下相应的 $e^{-\varepsilon_n/KT}$ 都是可以忽略的,因此只需要考虑基态^[9],

$$q_n^0 = g_{n,0} = \text{常数} \quad (13)$$

同核双原子分子的核配分函数为 $q_n^0 = (2I+1)^2$, I 为核自旋量子数。

查分子光谱数据^[11],知 ^{16}O 的核自旋量子数 $I(O) = 0$,故 O_2 分子的核配分函数恒等于 1,即 $q_n^0(O_2) = (2I+1)^2 = 1$ 。而 ^{14}N 的核自旋量子数 $I(N) = 1$,所以 N_2 分子的核配分函数为 $q_n^0(N_2) = (2I+1)^2 = 3^2 = 9$ 。

3.1.5. 总的内部配分函数

查 HITRAN 数据库可得到 O_2 分子和 N_2 分子的波数分别为 1556 cm^{-1} 和 2330 cm^{-1} 。计算二者的振动特征温度

对于 O_2 分子:

$$\theta_v(O_2) = \frac{hv}{k} = \frac{h\tilde{\nu}_{O_2}c}{k} = 2238.75 \text{ K}$$

对于 N_2 分子:

$$\theta_v(N_2) = \frac{hv}{k} = \frac{h\tilde{\nu}_{N_2}c}{k} = 3352.38 \text{ K}$$

在 $200 \text{ K} \sim 400 \text{ K}$ 温度范围内用式(10)计算 O_2 和 N_2 分子的振动配分函数,结果见表 1。

从表中可以看出,在常温范围内氧气与氮气分子的振动配分函数都约等于 1,于是,可以将 O_2 分子和 N_2 分子的振动配分函数在一般温度范围内近似等于一个常数,即 $q_v(O_2) = 1.0005$, $q_v(N_2) = 1$ (高温范围另当别论,这里不作考虑)。

Table 1. The vibrational partition functions of O_2 and N_2 (200 K~400 K)

表 1. O_2 和 N_2 分子振动配分函数(200 K~400 K)

温度/K	$q_v(O_2)$	$q_v(N_2)$
200	1.0000138	1.0000001
270	1.0002507	1.0000041
290	1.0004441	1.0000095
292	1.0004683	1.0000103
294	1.0004933	1.0000112
296	1.0005194	1.0000121
298	1.0005465	1.000013
300	1.0005745	1.000014
350	1.0016703	1.0000692
400	1.0037232	1.0002292

O_2 和 N_2 分子的平衡核间距 r_e 分别为 $1.2074 \times 10^{-10} \text{ m}$ 和 $1.098 \times 10^{-10} \text{ m}$ ^[12]。计算它们的转动惯量分别得:

$$I(O_2) = 1.937 \times 10^{-46} \text{ kg} \cdot \text{m}^2,$$

$$I(N_2) = 1.3912 \times 10^{-46} \text{ kg} \cdot \text{m}^2.$$

以及转动特征温度为

$$\theta_r(O_2) = \frac{h^2}{8\pi^2Ik} = 2.0796 \text{ K},$$

$$\theta_r(N_2) = \frac{h^2}{8\pi^2Ik} = 2.873 \text{ K}.$$

由式(9),计算得到 $200 \text{ K} \sim 400 \text{ K}$ 温度范围内氧气分子与氮气分子的转动配分函数,如图 1,可以看出,转动配分函数值与温度成线性关系。

根据配分函数分解定理,得到 O_2 , N_2 分子内部总的配分函数分别为

$$q_{in}(O_2) = 3.0015q_r(O_2) \quad (14)$$

$$q_{in}(N_2) = 9q_r(N_2) \quad (15)$$

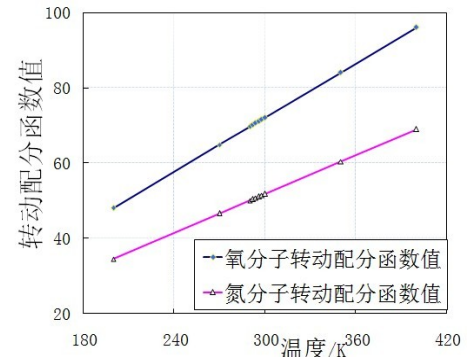


Figure 1. Rotational partition functions of oxygen and nitrogen molecules
图 1. 氧氮分子转动配分函数

由此可见, 在一般温度下, 计算 O_2 和 N_2 分子总的内部配分函数, 只需要计算它们各个温度下的转动配分函数。在温度 $T \gg \theta_r$ 的情况下, 转动配分函数与温度成线性关系, 氧氮分子的转动特征温度只与它们自身的转动惯量有关, 也是一个常数, 代入式(14)、(15)可得

$$q_{in}(O_2) = 3.0015q_r(O_2) = \frac{3.0015T}{2 \times 2.0796} = 0.72165T \quad (16)$$

$$q_{in}(N_2) = 9q_r(N_2) = \frac{9T}{2 \times 2.873} = 1.5663T \quad (17)$$

式(16)、(17)是温度 T 的正比例关系式, 运用起来非常简便, 使得一般温度下氧氮分子的内部配分计算大为简化。作为示例, 用公式(16)和(17)的计算结果与 HITRAN 数据库^[10]及文献[13,14]的现有的结果比较, 如表 2 所示。

从表 2 中可以看出, 计算结果与 HITRAN 数据库提供的值及参考文献的计算结果差别很小, 约为 1.0%。所以, 除了在超低温范围, 在常温下, 运用公式(16)和(17)来近似计算 O_2 和 N_2 分子的总的内部配分函数是十分简便和可行的。

3.1.6. 分子平动配分函数

分子平动配分函数的计算表达式为

$$q_t = \left(\frac{2\pi mkT}{h^2} \right)^{\frac{3}{2}} V \quad (18)$$

式中, m 为分子实际质量, h 为 Planck 数 $6.626068 \times 10^{-34} \text{ J}\cdot\text{s}$, V 为气体体积。

由于在所有实际意义的温度下, 分子的平动都表现为经典运动^[9], 故平动分子配分函数常称为外部配分函数. 对所有的的气体分子平动配分函数都可以用(18)式计算。

Table 2. The approximate calculation results and comparison of the total internal partition functions of oxygen and nitrogen molecule
表 2. O_2 和 N_2 分子内部配分函数的近似计算结果与比较

温度 /K	$q_{in}(O_2)$			$q_{in}(N_2)$		
	计算值	HITRAN ^[10]	文献 [13] [14]	计算值	HITRAN ^[10]	文献 [13] [14]
294	212.17		214.26	460.47		
296	213.62	215.77		215.73	463.60	465.98
298	215.06			466.74		470.28
300	216.51		218.65	218.675	469.86	

1 mol 的理想气体体积 $V = 24.45 \times 10^{-3} \text{ m}^3$, O_2 与 N_2 分子摩尔质量分别为 0.032 kg 与 0.028 kg。用式(18)计算常温 298 K 下的平动配分函数得:

$$q_t(O_2) = \left[\frac{2\pi m(O_2)kT}{h^2} \right]^{3/2} V = 4.279 \times 10^{30}$$

$$q_t(N_2) = \left[\frac{2\pi m(N_2)kT}{h^2} \right]^{3/2} V = 3.502 \times 10^{30}$$

故可得常温 298 K 下的氧氮分子完全配分函数分别为

$$q(O_2) = q_t(O_2)q_{in}(O_2) = 4.279 \times 10^{30} \times 215.06 = 9.20 \times 10^{32}$$

$$q(N_2) = q_t(N_2)q_{in}(N_2) = 3.502 \times 10^{30} \times 466.74 = 1.635 \times 10^{33}$$

与常规的氧分子配分函数值^[1](9.21×10^{32})相比, 非常一致, 证实了本计算方法的可靠性。计算结果也表明, O_2 , N_2 双原子分子的完全配分函数, 一般温度下, 绝大多数表现为分子平动的贡献。

3.2. 基于 DFT 的量子计算

密度泛函理论(DFT)的原型是适用于原子的 Thomas-Fermi 模型, 但被认为过于简单, 不适用于分子。1964 年, Hohenberg 和 Kohn 提出了严格的密度泛函理论, 他们提出的两个定理表明可用电子密度 $\rho(r)$ 代替 N 电子体系的 N 和外部势能 $V(r)$ 决定体系基态的性质。即, 体系的基态电子密度唯一地确定了基态性质(基态非简并)。之后随着 Kohn, Sham, Becke, Parr, Yang, Levy 等学者发展起来的各种近似, 密度泛函理论在化学和固体物理中得到了广泛的应用。尤其是近年来, DFT 与分子动力学相结合, 在量子化学计算领域起着核心作用, 应用十分广泛^[15]。

基于量子化学的第一性原理(或从头算)理论的 DFT 在研究分子基态能量以及基态各种性质上已经取得了很好的成果。而 Gaussian 软件中借 Becke 杂化密度泛函思想构造的 B3LYP 泛函被广泛应用在分子体系的计算中。

文中使用 GAUSSIAN 计算机程序, 采用密度泛函理论(DFT), 计算了氧氮分子的各种运动形式在一般温度内不同温度下的配分函数, 得出总的内部配分

函数，平动配分函数以及分子全配分函数。其中，计算方法选用交换和相关泛函的组合形式 B3LYP 方法，对 O₂ 分子采用 6-311 + G(2d) 基组，对 N₂ 分子采用 6-311 + G(d) 基组。

氧分子的轨道式为： $(\sigma_1s)^2(\sigma^*_{1s})^2(\sigma_2s)^2(\sigma^*_{2s})^2(\sigma_{2px})^2(\pi_{2py})^2(\pi_{2pz})^2(\pi_{2py})^1(\pi_{2pz})^1$ ，键级为 2，由一个 σ 键和两个三电子 π 键组成，电子基态简并度为 3。氮分子除 $(\sigma_2s)^2$ 与 $(\sigma^*_{2s})^2$ 能量大致相互抵消外， $(\pi_{2py})^2$ 和 $(\pi_{2pz})^2$ 为两个 π 键， $(\sigma_{2p})^2$ 为一 σ 键，键级为 3，电子基态简并度为 1。

选取不同基组对基态几何构型进行优化和频率计算，表 3 列出了氧氮分子的几何构型参数：键长(Å)、振动频率(cm^{-1})及实验值。对于氧分子(图 2)，用 6-311 + G(2d) 基组优化的键长为(1.2083Å)，最为接近实验值，对于氮分子(图 3)，6-311 + G(d) 基组的优化键长为(1.0956 Å)，与实验值最相符。

配分函数的计算采用配分函数析因子性质，分子总的配分函数可分解为各个独立运动形式的配分函数之积。

298 K 下各独立运动形式配分函数的计算结果如表 4，其他常温附近的几种温度下的计算结果与统计方法结果的比较如表 5 和表 6。

从表 5 和表 6 中可以看出，在内部配分函数的计算上，基于 DFT 的量子计算与简化表达式(16)和(17)的结果十分的一致，表明了文中给出的基于 DFT 的量子计算方法，用于计算常温范围内双原子分子内部配分函数的妥当性。而全配分函数的计算结果，二者也是非常一致，进一步说明了所选择的 DFT 方法计算双原子分子热力学特性配分函数的正确性。

4. 空气的配分函数

理想混合气体体系配分函数定义为^[1]：

$$\Phi \equiv \Omega \exp(-E/kT) = \frac{q_A^N q_B^M}{N! M!} \quad (19)$$

Table 3. Geometry parameters, experimental values^[16] and the vibration frequency
表 3. 几何构型参数、实验值^[16]及振动频率

分子类型	键长 Å	实验值 Å	频率 cm^{-1}
O ₂	1.2172	1.207	2047(s=3)
N ₂	1.1127	1.098	2790(s=1)

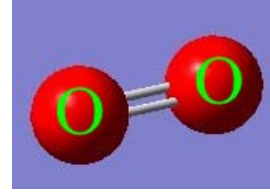


Figure 2. Molecular structure of oxygen
图 2. 氧分子结构

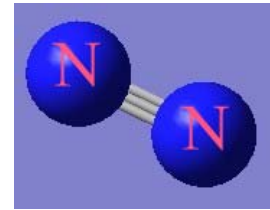


Figure 3. Molecular structure of nitrogen
图 3. 氮分子结构

Table 4. The results of quantum computing
表 4. 量子计算结果

配分函数	氧分子	氮分子
	量子计算值	量子计算值
q_r	71.684	51.869
q_v	1.0005	1
q_e	3	1
q_n	1	9
q_{in}	215.160	466.821

Table 5. The comparison between the values of quantum computing and the values of statistical calculations for the partition function of oxygen molecule
表 5. 氧分子配分函数量子计算值与统计计算值比较

温度/K	内部配分函数		全配分函数	
	量子计算值	式(16)计算值	量子计算值	统计计算值
273.15	197.28	197.08	6.79E+32	6.78E+31
292	210.93	210.72	8.57E+32	8.57E+32
294	212.37	212.17	8.78E+32	8.77E+32
296	213.82	213.62	8.99E+32	8.98E+32
298	215.27	215.06	9.21E+32	9.20E+32
300	216.72	216.51	9.43E+32	9.42E+32
320	231.23	231.03	1.18E+33	1.18E+33

Table 6. The comparison between the values of quantum computing and the values of statistical calculations for the partition function of nitrogen molecule
表 6. 氮分子配分函数量子计算值与统计计算值比较

温度/K	内部配分函数		全配分函数	
	量子计算值	式(17)计算值	量子计算值	统计计算值
273.15	425.88	427.82	1.20E+33	1.21E+33
292	455.27	457.34	1.52E+33	1.52E+33
294	458.39	460.47	1.55E+33	1.56E+33
296	461.51	463.60	1.59E+33	1.60E+33
298	464.63	466.74	1.63E+33	1.635E+33
300	467.75	469.87	1.67E+33	1.67E+33
320	498.93	501.20	2.09E+33	2.10E+33

式中, Ω 为总的微观状态数, A、B 代表体系中粒子, N 和 M 分别代表 A 和 B 的粒子数。

空气是一种由 O_2 、 N_2 、Ar 以及 CO_2 等组成的混合气体, 已知氧气占空气体积的 21%, 氮气占空气体积的 78%。假设忽略那 1% 的 Ar 和 CO_2 , 则空气就只有氧气和氮气两种成分。氧气与氮气所占摩尔分数分别为

$$n_i/n(O_2) = 0.21/0.99 = 0.212121$$

$$n_i/n(N_2) = 0.78/0.99 = 0.787879$$

1 mol 空气含有 $N_A = 6.022 \times 10^{23}$ 个粒子, 故氧气与氮气的粒子数分别为

$$N = 1.2774 \times 10^{23}$$

$$M = 4.7446 \times 10^{23}$$

取空气配分函数的自然对数:

$$\ln \Phi = N \ln \left(\frac{q_{O_2} e}{N} \right) + M \ln \left(\frac{q_{N_2} e}{M} \right)$$

298 K 温度下, 1 mol 的理想气体体积 $V = 24.45 \times 10^{-3} \text{ m}^3$, O_2 与 N_2 分子摩尔质量分别为 0.032 kg 与 0.028 kg。1 mol 氧分子和 1 mol 氮分子的配分函数值分别为

$$q(O_2) = 9.20 \times 10^{32}$$

$$q(N_2) = 1.622 \times 10^{33}$$

故, 1 mol 空气配分函数取自然对数之后的值为

$$\begin{aligned} n\Phi_{\text{空气}} &= N \ln \left(\frac{q_{O_2} e}{N} \right) + M \ln \left(\frac{q_{N_2} e}{M} \right) \\ &= 3.02714 \times 10^{24} + 1.089 \times 10^{25} \\ &= 1.39172 \times 10^{25} \end{aligned}$$

5. 结论

本文根据统计热力学的配分函数分解定理, 讨论了氧氮一类双原子分子的配分函数在不同温度范围内的表达式。同时在一般温度条件下, 首次对氧氮分子的配分函数用统计方法与基于密度泛函理论的量子方法作了计算及分析, 计算结果与 HITRAN 数据库提供的数值及参考文献的计算结果非常接近, 误差约为 1%。证实了本文给出的基于统计热力学的简化计算方法与量子计算方法的妥当性和可靠性。

文中分析计算了由氧气与氮气组成的理想空气(混合气体)的配分函数关系, 并给出了在 298 K 下, 1 mol 空气的配分函数自然对数值。

6. 致谢

感谢国家自然科学基金(50976044)的资助, 非常感谢我的导师吴老师以及师兄涂博士和薛博士对我的指导和帮助。

参考文献 (References)

- [1] 高执棣, 郭国霖. 统计热力学导论[M]. 北京: 北京大学出版社, 2004: 134-168, 216-219.
- [2] 吕建良, 任维义, 王娟等. N_2 和 CO 气体的分子配分函数及其热力学性质研究[J]. 西华师范大学学报(自然科学版), 2008, 29(3): 222-227.
- [3] 宋晓书, 令狐荣锋, 李德华等. 20~6000 K 温度范围内二氧化碳配分函数的计算[J]. 原子与分子物理学报, 2007, 24(3): 647-652.
- [4] 黄晓玉. $CH_2 \tilde{a}^1 A_1$ 分子高温下配分函数的计算方法[J]. 西南民族大学学报自然科学版, 2008, 34(4): 755-757.
- [5] 伍冬兰, 万慧军, 谢安东等. 二氧化硅分子配分函数的研究[J]. 物理学报, 2009, 58(11): 7411-7413.
- [6] 王君, 齐建起. CO_2 同位素分子 $^{16}O^{12}C^{16}O$, $^{16}O^{12}C^{17}O$, $^{16}O^{13}C^{17}O$ 配分函数研究[J]. 光散射学报, 2009, 21(3): 226-231.
- [7] 伍冬兰, 曾学锋, 张霏云等. 自由基 NH_2 配分函数的计算[J]. 四川师范大学学报(自然科学版), 2010, 33(3): 352-355.
- [8] 天津大学物理化学教研室. 物理化学(第4版)(下册)[M]. 北京: 高等教育出版社, 2001: 107.
- [9] B. J. 英克萊兰(著), 龚少明(译). 统计热力学[M]. 上海: 上海科学技术出版社, 1980: 36-38, 62-66.
- [10] J. Fischer, R. R. Gamache, A. Goldman, et al. Total internal partition sums for molecular species in the 2000 edition of the HITRAN database. Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer, 2003, 82(1-4): 401-412.
- [11] 赫茨伯格(著), 王鼎昌(译). 分子光谱与分子结构: 双原子分子光谱, 第一卷[M]. 北京: 科学出版社, 1983.
- [12] M. 卡普路斯, R. N. 波特(著), 王荣顺, 黄敬安(译). 原子与分子[M]. 北京: 科学出版社, 1986.
- [13] R. R. Gamache, S. Kennedy, R. L. Hawkins, et al. Total internal partition sums for molecules in the terrestrial atmosphere. Journal of Molecular Structure, 2000, 517-518: 407-425.
- [14] A. Goldman, R. R. Gamache, A. Perrin, J.-M. Flaud, C. P. Rinsland and L. S. Rothman. HITRAN partition functions and weighted transition-moments squared. Journal of Quantitative Spectroscopy & Radiative Transfer, 2000, 66(5): 455-486.
- [15] 肖慎修, 王崇愚, 陈天朗. 密度泛函理论的离散变分方法在化学和材料物理学中的应用[M]. 北京: 科学出版社, 1998: 1-7.
- [16] M. W. Chase Jr. NIST-JANAF Thermochemical Tables, Fourth Edition, Part I, Al-Co. American Institute of Physics and the American Chemical Society, Gaithersburg, 1998.