

等离子体技术

B. 格罗斯 等 著

DENG LI ZI TI JI SHU



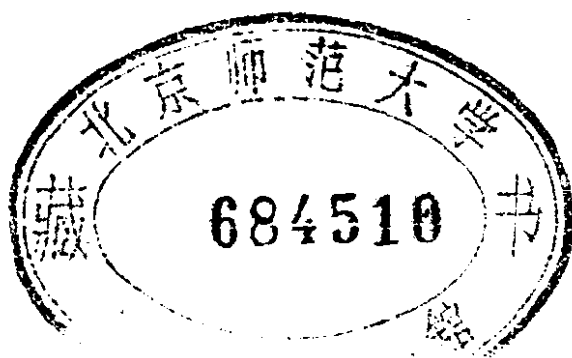
科学出版社

等 离 子 体 技 术

B. 格罗斯 等著

过增元 傅维标 译

74.11.10 159



科 学 出 版 社

1 9 8 0

内 容 简 介

全书共分三个部分。第一部分是高压等离子体有关的理论基础，第二部分主要叙述热等离子体产生的各种途径和等离子炬中的电物理和热物理过程，第三部分着重介绍等离子体技术的工业应用。

本书的特点是对工业中应用较广泛的热等离子体（温度范围为3000~50000K）的性质和它的运动规律，从微观和宏观两个方面进行了较全面的分析。同时也介绍了捷克、美国、苏联等国家等离子炬的设计和 application 情况。

本书可供从事等离子体动力转换、高温热物理和等离子体技术等方面的研究和工程技术人员参考。

B. Gross, B. Grycz and K. Miklóssy

PLASMA TECHNOLOGY

Iliffe Books Ltd., 1968

等 离 子 体 技 术

B. 格罗斯 等著

过增元 傅维标 译

*

科 学 出 版 社 出 版

北京朝阳门内大街137号

中国科学院印刷厂印刷

新华书店北京发行所发行 各地新华书店经售

*

1980年4月第 一 版 开本：787×1092 1/32

1980年4月第一次印刷 印张：14 1/8

印数：0001—4,650 字数：324,000

统一书号：15031·272

本社书号：1697·15—10

定 价： 2.15 元

目 录

第一部分 高压等离子体物理绪论	1
1.1 热力学平衡等离子体的性质	1
1.1.1 等离子体和热力学平衡	1
1.1.2 理想气体的热力学描述	6
1.1.3 解离平衡	15
1.1.4 电离平衡	21
1.1.5 气体混合物中的解离平衡和电离平衡	29
1.2 等离子体中的非平衡过程	37
1.2.1 热力学平衡的偏离	37
1.2.2 输运现象分子运动论的基础	43
1.2.3 不可逆过程唯象热力学的基本概念	54
1.2.4 等离子体的电导	62
1.2.5 扩散和双极扩散	70
1.2.6 粘性	77
1.2.7 热传导	80
1.2.8 弛豫和复合	86
1.3 等离子体动力学基础	91
1.3.1 等离子体动力学的对象	91
1.3.2 电磁方程	92
1.3.3 气体动力学方程	102
1.3.4 磁流体动力学基础	109
1.3.5 等离子体物理和磁流体动力学中相似理论的基础	117
1.3.6 等离子体—固体界面	122

1.4 等离子体辐射	126
1.4.1 等离子体辐射谱线的强度	126
1.4.2 等离子体的连续辐射强度	136
1.4.3 等离子体辐射谱线的自吸收	143
1.4.4 等离子体辐射谱线的加宽	145
1.4.5 非均匀等离子体层的辐射	151
1.5 等离子体诊断	154
1.5.1 水稳电弧等离子体温度的计算	154
1.5.2 水稳电弧等离子体的成份计算	158
1.5.3 空气中自由燃烧的电弧等离子体成份的计算	164
1.5.4 空气中自由燃烧电弧等离子体热导率的计算	167
1.5.5 水稳电弧等离子体的电导率计算	173
1.5.6 等离子体温度的测量	178
1.5.7 电子密度的测量	191
参考文献	195
第二部分 等离子体工业源	200
2.1 历史介绍	200
2.1.1 化学反应	200
2.1.2 太阳炉	202
2.1.3 利用电阻加热获得高温	205
2.1.4 高频加热	206
2.1.5 电弧	206
2.1.6 短暂过程	214
2.2 等离子炬的物理和技术原理	216
2.2.1 稳定电弧的历史发展	216
2.2.2 电弧	221
2.2.3 电弧的各个部分	227
2.2.4 阴极	228
2.2.5 阳极	232
2.2.6 弧柱(热等离子体)	234

2.2.7	稳定电弧	239
2.2.8	高频等离子体发生器	243
2.2.9	等离子体的径向温度分布及其与热导率的关系	247
2.2.10	稳定电弧弧柱中的静态特性和电位梯度	251
2.2.11	电能转变为热能时等离子炬的效率	253
2.2.12	电弧的点燃	255
2.3	捷克斯洛伐克等离子炬的设计原理及构造	258
2.3.1	引言	258
2.3.2	等离子炬的一般设计原理	258
2.3.3	等离子炬元件设计原理	264
2.3.4	等离子炬装置	276
2.3.5	电源及其特性	283
2.4	国外的等离子炬装置	285
2.4.1	美国制造的等离子炬	285
2.4.2	苏联制造的等离子炬	297
2.4.3	德意志民主共和国研制工作的状况	298
2.4.4	波兰的研制工作	303
	参考文献	304
第三部分 等离子体的工业应用		308
3.1	等离子炬切割金属	308
3.1.1	引言	308
3.1.2	用稳定电弧等离子体切割金属	310
3.1.3	等离子切割金属的热平衡	317
3.1.4	用等离子炬切割金属的工艺	321
3.1.5	各种切割方法的经济比较	337
3.1.6	安全防护措施	338
3.2	适用于表面处理的等离子炬	341
3.2.1	引言	341
3.2.2	等离子炬应用于保护涂层	342

3.2.3	等离子喷涂——技术和设备·····	345
3.2.4	影响喷涂质量的诸因素·····	348
3.2.5	喷涂材料及其性能·····	356
3.2.6	等离子炬金属堆焊硬化·····	362
3.3	热能变为电能的等离子体动力转换·····	367
3.3.1	前言·····	367
3.3.2	电等离子体动力发电机·····	369
3.3.3	磁流体动力能量转换的简单描述·····	371
3.3.4	磁流体动力学方程组·····	378
3.3.5	部分电离等离子体的电导率·····	385
3.3.6	等离子体电导率的各向异性·····	394
3.3.7	磁等离子体动力发电机的型式·····	398
3.3.8	交流磁等离子体动力发电机·····	401
3.3.9	发电厂用磁等离子体动力发电机·····	405
3.4	气相高温化学合成·····	411
3.4.1	前言·····	411
3.4.2	高温合成的当前课题·····	413
3.4.3	氧化氮的直接合成·····	415
3.4.4	饱和烃在电弧中裂解制乙炔·····	420
3.4.5	有机硅化合物的直接合成·····	427
3.4.6	等离子炬·····	431
3.5	等离子体工业应用的前景·····	434
	参考文献·····	442

第一部分 高压等离子体物理绪论

1.1 热力学平衡等离子体的性质

1.1.1 等离子体和热力学平衡

1.1.1.1 等离子体

加热到摄氏几千度以上的气体形成了特殊的物质第四态——等离子体。它和普通气体的不同，特别是在于下列性质方面：

- △ 除了单个分子间的弹性碰撞之外，还发生大量的非弹性碰撞，它们使分子处于激发量子态，有时则引起分子的解离和电离。
- △ 这些过程使得化学均匀的气体转变为分子、原子、正离子、负离子、电子、光子等不同粒子的气态混合物。
- △ 等离子体包含有荷电粒子——电子和离子。正是通过这些粒子，电场和磁场能够作用于电离的气体：由于气体混合物是导电的，所以它能从电场或磁场接受能量或者把能量传递给电磁场。因为在每一点处，正粒子和负粒子的浓度大体上是相等的 ($n_+ \sim n_-$)，所以混合物作为整体来说是准中性的。
- △ 如果荷电粒子的密度不是太小，那么气体的性质在很大程度上受它们的库仑相互作用的影响。库仑作用的特点是随着粒子间距离的增加，力的减小是比较慢的 ($F \sim \frac{1}{r^2}$)。因此，每个粒子同时作用于大

量的其它粒子——理论上来说，作用于所有的粒子（“集体相互作用”）。粒子的轨道不再像在理想气体中那样是直线了。

在本书中，我们将讨论温度范围在 10^3 和 10^4K 之间的高压等离子体 ($p \sim 10^{-1}$ 大气压或更高一些)，它处于近乎热力学平衡态。为了讨论，我们将把等离子体看作是理想的、非退化的、化学反应性气体的混合物。

1.1.1.2 热力学平衡

让我们设想某个充满等离子体的体积元，它被器壁与附近的体元相隔开，此器壁对各种粒子以及对热都是不可透的，并且是一个理想的电磁辐射反射器。

把由封闭的、孤立的气体或液体系统的热力学得来的经验加以推广，我们可以期望在一定的（足够长的）时间内，所有“自发的”不可逆的变化已经完成，而且（除有一些波动之外）建立起了一个稳定的宏观物理状态。我们称这状态为完全热力学平衡。在最简单的情形下，所说的处在热力学平衡态体元的宏观物理状态（对于给定的质量）可以由下列任一对状态的独立变量来单值地确定： T, V ; T, p ; S, V ; S, p 。其中 T 是绝对温度， V 是体积， p 是压力， S 是体元中等离子体的熵。借助于已知的热力学关系式（参看 1.1.2.3 节），就可以从这些独立变量计算所有其它的宏观量。

描述一个系统热力学状态的最方便的方法是用它的热力学势来表示：

内能

$$E = E(S, V) \quad (1.1.1)$$

焓

$$H = H(S, p) = E + pV \quad (1.1.2)$$

自由能

$$F = F(T, V) = E - TS \quad (1.1.3)$$

自由焓(吉布斯 (Gibbs) 势)

$$G = G(T, p) = E - TS + pV \quad (1.1.4)$$

通常,把这些量作为写在括号中的独立变量的函数来使用。对于括号中的两个变量来说,量 E, H, F, G 具有势的性质: 因为把相应的热力势对它们进行偏微分后,我们就可得到其余的两个变量。例如

$$S = -\left(\frac{\partial F}{\partial T}\right)_V \quad p = -\left(\frac{\partial F}{\partial V}\right)_T \quad (1.1.5)$$

等离子体通常是空间不均匀的,并且处于外部场中(重力场、电场等),在这种等离子体的普通形式中,平衡是局部的,平衡只是对于围绕某点一个小的等离子体元而言。于是,系统中各点处的平衡参数(尤其是温度)是不同的,而且取决于外部场的大小和分布。

1.1.1.3 统计平衡

从微观上看,等离子体的状态是由等离子体中组份粒子相互作用的各种微观过程所决定的,例如弹性碰撞、使粒子激发、解离和电离的非弹性碰撞、复合粒子(原子、分子、离子)对光子的吸收和辐射等。一般来说,这些过程伴随着能量、动量的交换,或者还伴随着粒子的形成或破坏。由于这些过程,完全平衡的等离子体也建立起所谓的统计平衡。统计平衡的特点是粒子按照其类型有一个唯一确定的分布,以及在给定的类型中按粒子的坐标、动量和内部状态有一个唯一确定的分布。

在 1.1.2.1 节中分析了这种分布(吉布斯分布)的一个比较普遍的例子。这里,我们不加推导而只列举几个特殊的分

布——在等离子体物理中最经常碰到的那些分布。它们都可以从方程(1.1.11)的分布推导出来。

随机选取一个粒子，其平动动能 ϵ'' 位于区间 $(\epsilon'', \epsilon'' + d\epsilon'')$ 中的几率 $W(\epsilon'')d\epsilon''$ 由麦克斯韦 (Maxwell) 分布给出：

$$W(\epsilon'')d\epsilon'' = 2(\pi kT)^{-3/2} e^{-\frac{\epsilon''}{kT}} \sqrt{\epsilon''} d\epsilon'' \quad (1.1.6)$$

其中， $k = 1.38 \times 10^{-23}$ 焦耳 $\cdot$ K $^{-1}$ 是玻耳兹曼 (Boltzmann) 常数， T 是系统的温度 [K]。

对于处在第 m 个激发态的原子的密度 n_m ，玻耳兹曼公式 [文献 1.1.12] 是适用的：

$$\frac{n_m}{n_0} = \frac{g_m}{g_0} e^{-\frac{\epsilon_m}{kT}} \quad (1.1.7)$$

其中， n_0 是处于基态 ($\epsilon_0 = 0$) 的原子的密度， ϵ_m 是第 m 个激发态的激发能， g_m 、 g_0 相应地是基态和第 m 个激发态的统计权重。这些统计权重描述了在给定的相当高的温度下

($e^{-\frac{\epsilon_m}{kT}} \rightarrow 1$)，某特殊状态能够发生的几率(由因量子退化，能级 ϵ_m 劈裂为次能级的数目所预先确定)。

普朗克 (Planck) 公式 [文献 1.1.12] 给出了相当于具有频率范围 $(\nu, \nu + d\nu)$ 的电磁量子的辐射能量密度 $u(\nu)$ (即 1 m 3 中所含的辐射能)

$$u(\nu) = \frac{8\pi h}{c^3} \frac{\nu^3}{e^{\frac{h\nu}{kT}} - 1} \quad (1.1.8)$$

其中， $h = 6.625 \times 10^{-34}$ 焦耳 $\cdot$ 秒是普朗克常数， $c = 2.9979 \times 10^8$ 米 $\cdot$ 秒 $^{-1}$ 是真空中光速。

对于处于完全热力学平衡，因此也是处于统计平衡的等离子体来说，不论所考虑的是等离子体中的哪种成份，在分布 (1.1.6)，(1.1.7)，(1.1.8) 以及在吉布斯公式 (方程 1.1.11) 和沙哈 (Saha) 方程 (1.1.79) 中，温度 T 具有相同的数值。这样

的等离子体称之为等温的。

在等离子体中引向平衡和保持平衡的基本过程可以成对地组合(电离—复合、激发—第二类碰撞等),其中每一个过程是另一个过程的逆过程(逆过程的定义可参看文献[1.1.29]),由于某些基本过程的作用(例如,由于碰撞增加了电离)引起的对平衡的偏离,直接由相应的反向过程所平衡,而不是由通过各种中间过程的迂回道路来平衡。这个论述就是所谓细致平衡原理的内容。从这个意义上说,每个统计平衡都是在正向和逆向过程之间的细致平衡。这个事实常用来考察对平衡的微小偏离。然而,特别在伴随有光子发射和光子吸收的过程中,定义正向和逆向过程的概念必须十分小心谨慎。

1.1.1.4 热力学平衡等离子体性质的确定

迄今,还没有可靠的实验方法能用来直接测量气体($\sim 10^3$ — 10^4 K)的各种热力学性质。这些性质是指化学成份、内能、焓和等离子体的其它性质,它们对于等离子炬、等离子火箭发动机、MHD(磁流体动力)发电机中流动的宏观描述是十分重要的。这些性质是用统计热力学的方法由理论上进行定义的,而其结果则是用各种间接的方法(温度、电子密度、弱场中电导率的测量等)来校核的。

当所讨论的是中等温度($T = 10^4$ K)和处在 10^{-3} 大气压 $\sim 10^3$ 大气压的等离子体时,我们可以把它看作为理想气体的混合物[文献1.1.2],它满足状态方程

$$p = \frac{kT}{V} \sum_i N_i \quad (1.1.9)$$

其中 p , V , k , T , N_i 相应地代表压力、一个克分子混合物的体积、玻耳兹曼常数、温度和一个克分子混合物中第 i 种粒子的数目。

如果荷电粒子的密度是高的,库仑作用可以产生相当的影响。在德拜-许克尔 (Debye-Hückel) 近似中 (参看 1.1.4.4 节),状态方程写为如下形式:

$$p = p_0 - \Delta p = \frac{KT}{V} \sum_i N_i - \frac{e^3}{3V^{3/2}} \sqrt{\frac{\pi}{KT}} \left(\sum_i N_i q_i^2 \right)^{3/2} \quad (1.1.10)$$

其中, e 是电子的电荷 ($e = 1.602 \times 10^{-19}$ 库仑), 修正项中的 q_i 代表一个第 i 种粒子的 (用 e 作单位表示的) 电荷。其余符号的意义和方程 (1.1.9) 相同。对这精确状态方程的进一步近似, 可在例如文献 [1.1.17] 中找到。在由电子和简单离子组成的, 温度为 10^4 K 的等离子体中, 状态方程的修正项在电子密度低到 $n_e \sim 10^{12}/\text{m}^3$ 时开始产生微弱的影响, 当电子密度 $n_e \sim 10^{24}/\text{m}^3$ 时, 修正项则与 p_0 是可比较的。

本书中, 我们将不考虑 (少数例外) 因库仑作用而引起的对状态方程的修正。于是, 平衡等离子体热力学函数的计算简化为三个部分的计算:

- △ 用平衡态理想气体统计热力学的公式计算“纯粹”单个成份的热力学参数;
- △ 用化学平衡的完全方程组 (包括解离和电离方程) 来计算等离子体的成份;
- △ 从已知的单个成份的这些函数值计算理想气体混合物的热力学函数。

1.1.2 理想气体的热力学描述

1.1.2.1 配分函数 (状态和)

如果我们知道了满足经典或量子力学定律的单个分子或气体整体所可能具有的全部微观物理状态, 就能够用统计热

力学的方法确定平衡态理想气体的热力学性质。“气体整体的微观物理状态”这个术语是表示所有 N 个单个气体分子的坐标、动量和内部状态的每一个实际组态。在所谓的半经典的近似中[文献 1.1.4]*，我们可以分别考虑全部的微观状态和相应的气体总能量 $\mathcal{E}_i$ 。在若干个微观状态中，气体的某些能量值 $\mathcal{E}_i$ 可以是相等的，从而我们用 $\Omega(\mathcal{E}_i)$ 表示具有相同能量 $\mathcal{E}_i$ 的微观状态的数目。吉布斯公式[文献 1.1.4]给出了气体整体具有能量 $\mathcal{E}_i$ 的几率 $W(\mathcal{E}_i)$ ：

$$W(\mathcal{E}_i) = \frac{1}{\mathcal{Z}} e^{-\frac{\mathcal{E}_i}{kT}} \Omega(\mathcal{E}_i) \quad (1.1.11)$$

其中， k 是玻耳兹曼常数， T 是温度，常数 $\mathcal{Z}$ 的数值可用方程(1.1.11)几率的总和为 1 而求得：

$$\mathcal{Z} = \sum_i e^{-\frac{\mathcal{E}_i}{kT}} \Omega(\mathcal{E}_i) \quad (1.1.12)$$

其中，对 N 个分子系统的所有可能的各不相同的状态进行求和。常数 $\mathcal{Z}$ 被称之为气体的配分函数(状态和)。它之所以重要就在于理想气体的所有热力学都能够表示为 $\mathcal{Z}$ 的函数(参看方程(1.1.32)到(1.1.45))。类似的表示式：

$$Z = \sum_i e^{-\frac{\varepsilon_i}{kT}} \Omega(\varepsilon_i) \quad (1.1.13)$$

称为分子的配分函数或分子的状态和。其中是对单个分子所有可能的微观状态进行求和。 ε_i 是分子的总能量， $\Omega(\varepsilon_i)$ 是相应于能量 ε_i 的分子的状态数。

如果单个分子的物理状态是相互无关的(理想气体)，气体整体的配分函数就可以用单个分子的配分函数(1.1.13)来表示。这是由于气体整体的每一个状态可以认为是单个分子

* 原书误为方程(1.1.4)。——译者注

状态的组合。如果这些分子是相同的,我们就可写成:

$$\mathcal{Z} = \frac{1}{N!} Z^N \quad (1.1.14)$$

在 $\mathcal{Z}$ 表示式中的因子 $N!$ 是考虑到,仅由于相同粒子的排列不同并不能算作不同的微观状态。

每个分子的能量 ϵ_i ,包括它的平动动能 ϵ_i^{tr} 和它的内部物理状态的能量 ϵ_i^{int} :

$$\epsilon_i = \epsilon_i^{tr} + \epsilon_i^{int} \quad (1.1.15)$$

因为分子的内部状态与它的平动运动无关,所以我们可以把分子的配分函数(方程 1.1.13)写成如下形式:

$$Z = Z^{tr} \cdot Z^{int} \quad (1.1.16)$$

其中

$$Z^{tr} = \sum_i e^{-\frac{\epsilon_i^{tr}}{kT}} \Omega(\epsilon_i^{tr}); \quad Z^{int} = \sum_i e^{-\frac{\epsilon_i^{int}}{kT}} \Omega(\epsilon_i^{int}) \quad (1.1.17)$$

平动运动的各自的状态彼此之间只有微小的差别(它们的差别由量子力学的测不准原理所给定);所以我们可以把它们看作是连续的,而在 Z^{tr} 的公式中用在分子的整个相空间上的积分来代替对 i 的求和。这样,我们就得到式(1.1.17)*:

$$Z^{tr} = \frac{V}{h^3} (2\pi m kT)^{3/2} \quad (1.1.18)$$

其中, V 是气体的体积, h 是普朗克常数, m 是分子质量, k 是玻耳兹曼常数, T 是温度(K)。

1.1.2.2 内部配分函数

原子。 原子核和电子云的状态确定了原子的内部状态。

* 原文误为(1.1.4)。——译者注。

我们以 ϵ_i^{nuc} 和 ϵ_i^{el} 相应地表示原子核和电子云的第 i 个激发态的能量(对于非激发的基态来说, $\epsilon_0^{nuc} = \epsilon_0^{el} = 0$)。以 g_0^{nuc} , g_i^{nuc} , g_0^{el} , g_i^{el} 表示这些状态的统计权重, 它们相应地表示了原子核具有能量 ϵ_i^{nuc} , 电子云具有能量 ϵ_i^{el} 的微观状态的数目的多少。于是, 对于内部配分函数应用公式:

$$Z^{int} = Z^{nuc} \cdot Z^{el} = \left(\sum_i g_i^{nuc} e^{-\frac{\epsilon_i^{nuc}}{kT}} \right) \left(\sum_i g_i^{el} e^{-\frac{\epsilon_i^{el}}{kT}} \right) \quad (1.1.19)$$

其中, 我们对原子核和电子云所有可能的能级进行了求和。因为在我们感兴趣的温度范围内, $i \neq 0$ 时, $e^{-\frac{\epsilon_i^{nuc}}{kT}} \sim 0$ (所以, $Z^{nuc} = g_0^{nuc}$), 所以我们能够写内部配分函数为:

$$Z^{int} = g_0^{nuc} (g_0^{el} + g_1^{el} e^{-\frac{\epsilon_1^{el}}{kT}} + g_2^{el} e^{-\frac{\epsilon_2^{el}}{kT}} + \dots) \quad (1.1.20)$$

在实际计算中, 我们把从光谱数据中获得的能级和统计权重代入方程 (1.1.20)。对于某些元素, 这些数据已用表列出(例如可参看文献[1.1.12])。大多数情况下, 能级表示为每个 1/厘米*相应于 1.2390×10^{-4} eV 的能量。

利用关系式:

$$\epsilon_i^{el} = kT_i^{el} \text{ 和 } \epsilon_i^{nuc} = kT_i^{nuc}$$

就可以对能级赋予所谓的特征温度。于是, 当气体温度为 T 时, 在配分函数中, 我们可以忽略 $T_i^{el} \gg T$ 的所有能级 ϵ_i^{el} 。这意味着, 在温度为 T 时, 这些能级不参与总的宏观态的形成, 它们是“冻结的”。电子态的特征温度约为 10^5 K, 核子态的特征温度约为 10^{11} K。

分子。 分子的物理状态是由它的电子云、核的振动、分子整体转动的物理状态和分子中核的内部状态决定的。因为可

* 这里 1/厘米是指波数的单位。——译者注

以认为这些量子化运动的形式是相互无关的,所以我们可以写

$$Z^{int} = Z^{el} Z^{vib} Z^{rot} Z^{nuc} \quad (1.1.21)$$

和处理原子时类似,我们假定

$$Z^{nuc} = \prod_{\alpha} g_{0,\alpha}^{nuc} \quad (1.1.22)$$

其中 g^{nuc} 是分子的第 α 个核的基态的统计权重. 下面我们只限于讨论双原子分子. 对于这些分子的一级近似(转动刚体),我们有

$$\begin{aligned} \epsilon_J^{rot} &= \frac{h^2}{8\pi^2 I} J(J+1) \quad g_J^{rot} = 2J+1 \\ T_1^{rot} &\sim 10\text{K 到 } 10^2\text{K} \end{aligned} \quad (1.1.23)$$

其中 I 是分子的惯性矩, J 是转动量子数 $J = 1, 2, \dots$, T_1^{rot} 是第一个激发转动态的特征温度,对于配分函数的旋转部分,我们有[文献 1.1.4]

$$Z^{rot} = \frac{1}{2} \sum_{J=1}^{\infty} (2J+1) e^{-\frac{h^2 J(J+1)}{8\pi^2 I k T}} \sim \frac{8\pi^2 I k T}{2h^2} \quad (1.1.24)$$

在具有相同核的分子中引入对称系数 $1/2$. 对于振动运动(简谐振子)我们有

$$\epsilon_v^{vib} = h\nu \left(v + \frac{1}{2} \right) \quad g_v^{vib} = 1 \quad T_1^{vib} \sim 10^3\text{K} \quad (1.1.25)$$

其中, ν 是振子的基频; v 是振动的量子数, $v = 0, 1, 2, \dots$. 振动能级是不退化的 $g_v^{vib} = 1$. 配分函数中的振动部分为[文献 1.1.4]:

$$Z^{vib} = \sum_{v=0}^{\infty} e^{-\frac{h\nu(v+\frac{1}{2})}{kT}} = \frac{e^{-\frac{h\nu}{kT}}}{1 - e^{-\frac{h\nu}{kT}}} \quad (1.1.26)$$

最后,就如在原子的情况时一样,分子配分函数中的电子部分我们有