DE

3 - Avenue Circulaire B - 1180 BRUXELLES

AERONOMICA ACTA

A - Nº 114 - 1973

Absorption raie par raie dans la bande fondamentale infrarouge du monoxyde d'azote

par

S. CIESLIK et C. MULLER

BELGISCH INSTITUUT VOOR RUIMTE-AERONOMIE

3 Ringlaan B 1180 BRUSSEL

ABSORPTION RAIE PAR RAIE DANS LA BANDE FONDAMENTALE INFRAROUGE DU MONOXYDE D'AZOTE

par

S. CIESLIK et C. MULLER

Résumé

L'intensité des raies de rotation-vibration dans la bande fondamentale du monoxyde d'azote est déterminée en vue de son application aux problèmes d'analyse aéronomique de la stratosphère.

Abstract

The strength of rotation-vibration lines in the fundamental band of nitric oxide is determined for its application to aeronomical analysis of the stratosphere.

Samenvatting

De intensiteit van de rotatie-vibratielijnen in de grondband van stikstof-oxyde is bepaald met het oog op de toepassing van aeronomische analysis in de stratosfeer.

Zusammenfassung

Die Intensität der Rotations- und Schwingungslinien in der Fundamentalbanden des Stickoxyds ist für ihre Anwendung zu den Problemen der aeronomischen Analyse der Stratosphäre festgestellt.

AVANT-PROPOS

L'article intitulé "Absorption raie par raie dans la bande fondamentale infrarouge du monoxyde d'azote" sera publié dans le Bulletin de la Classe des Sciences de l'Académie Royale de Belgique.

VOORWOORD

Dit werk,"Absorption raie par raie dans la bande fondamentale infrarouge du monoxyde d'azote" zal verschijnen in Bulletin de la Classe des Sciences de l'Académie Royale de Belgique.

FOREWORD

The note entitled "Absorption raie par raie dans la bande fondamentale infrarouge du monoxyde d'azote" will be published in Bulletin de la Classe des Sciences de l'Académie Royale de Belgique.

VORWORT

Die Arbeit "Absorption raie par raie dans la bande fondamentale infrarouge du monoxyde d'azote" wird in Bulletin de la Classe des Sciences de l'Académie Royale de Belgique herausgegeben werden.

INTRODUCTION

La molécule NO est une des seules molécules diatomiques stables dont l'état fondamental est un doublet de spin ; les deux composantes du doublet sont bien séparées (environ 120 cm⁻¹), ce qui confère au spectre de vibration-rotation un aspect différent de celui d'autres molécules courantes (HCl, CO, etc.). L'étude détaillée des intensités des raies du spectre d'absorption infrarouge de la molécule de monoxyde d'azote mérite un intérêt particulier, car les récents développements de l'étude de la stratosphère ont nécessité l'emploi de la spectrométrie d'absorption infrarouge à haute résolution qui fournit un moyen de mesure si l'on connaît avec précision les intensités des raies.

Le spectre de vibration-rotation du monoxyde d'azote a été étudié par plusieurs auteurs (Shaw, 1956; James et Thibault, 1964; Keck et Hause, 1968) qui ont déterminé les nombres d'onde d'un grand nombre de raies avec grande précision (moins d'un centième de cm⁻¹) et on en déduit les constantes moléculaires de l'état fondamental $X^2\Pi$. James (1964) a déterminé l'intensité de la sous-bande satellite ${}^2\Pi_{3/2} - {}^2\Pi_{1/2}$, qui présente toutefois peu d'intérêt pour l'aéronomie, car son intensité est de l'ordre de 10⁻⁴ fois celle des sous-bandes principales. D'autre auteurs (Brown *et al.*, 1972; Mizushima *et al.*, 1972) ont observé dans l'infrarouge lointain des transitions du spectre de rotation pure, ce qui leur a permis une détermination précise de la constante de couplage spin-orbite A_v, dont la valeur est de 123,16 cm⁻¹.

Le but principal de ce travail est le calcul des sections efficaces d'absorption dans la bande fondamentale $X^2 \Pi(v = 1) - X^2 \Pi(v = 0)$, qui se situe à 5,3 μ .

DESCRIPTION DU SPECTRE

Le dédoublement de spin affectant les deux états impliqués dans la transition contere au spectre une complexité que ne présente pas celui d'une transition entre états singulets. Il y a quatre combinaisons possibles entre les deux sous-états des états supérieur et inférieur. De ces quatre sous-bandes, deux sont intenses $({}^{2}\Pi_{1/2} - {}^{2}\Pi_{1/2}$ et ${}^{2}\Pi_{3/2} - {}^{2}\Pi_{3/2}$, appelées sous-bandes principales) et deux faibles $({}^{2}\Pi_{1/2} - {}^{2}\Pi_{3/2}$ et ${}^{2}\Pi_{3/2} - {}^{2}\Pi_{1/2}$, appelées sous-bandes satellites). Chacune de ces sous-bandes se subdivise à son tour en

- 2 -

branches P, Q et R, soit douze branches en tout. La figure l montre schématiquement l'ensemble des transitions possibles au sein d'une bande ${}^{2}\Pi - {}^{2}\Pi$. Signalons enfin que ce type de transition est soumis au dédoublement lambda, qui affecte tout état dont le moment cinétique orbital n'est pas nul. Néanmoins, ce dédoublement demeure inobservable en infrarouge même à haute résolution, sauf peut-être dans les branches Q, pour des hautes valeurs du nombre quantique de rotation, et nous n'en tiendrons donc pas compte.

CALCUL DE L'ABSORPTION

Le but que l'on s'est assigné est de calculer, dans des conditions expérimentales données (température, pression, longueur du trajet optique), le pourcentage de lumière transmise en fonction du nombre d'onde. Ce pourcentage s'exprime par la loi de Beer -Lambert,

$$\frac{I}{I_0} = e^{-n\sigma(\nu) I}$$
(1)

où I et I_0 sont les intensités transmise et incidente, n le nombre de molécules par cm³, $\sigma(\nu)$ la section efficace d'absorption au nombre d'onde ν et l la longueur du trajet optique. Les grandeurs l et n étant données (ce sont les conditions expérimentales), le problème revient à calculer $\sigma(\nu)$. Or, la section efficace d'absorption, pour un nombre d'onde donné, est la somme des sections efficaces d'absorption individuelles des raies dont le centre est suffisamment proche du nombre d'onde donné pour apporter une contribution appréciable à cette somme. Il faut donc d'abord avoir accès à la section efficace d'absorption individuelle $\sigma_R(\nu)$ de chaque raie, en fonction du nombre d'onde, qui est donnée par l'expression

$$\sigma_{\mathbf{R}}(\nu) = \frac{\sigma_{\mathbf{R}}(\nu_{\mathbf{R}})}{1 + \left[\frac{2(\nu - \nu_{\mathbf{R}})}{\Delta \nu}\right]^2}$$
(2)

où $\nu_{\rm R}$ est le nombre d'onde du centre de la raie et $\Delta \nu$ la largeur à mi-hauteur de la raie (Mitchell et Zemanski, 1934). L'expression (2) représente un profil de Lorentz qui masque complètement le profil de Doppler dans l'infrarouge aux conditions du laboratoire. La section efficace d'absorption au sommet de la raie R est reliée à la section efficace d'absorption intégrée sur toute la raie par



Fig. 1.- Schéma général montrant toutes les transitions possibles entre les niveaux de deux états ²Π(a).
 Les échelles ne sont pas respectées. Le dédoublement lambda, très faible, n'est pas représenté, afin de ne pas surcharger la figure.

$$\sigma_{\mathbf{R}}(\boldsymbol{\nu}_{\mathbf{R}}) = \frac{2}{\pi \Delta \boldsymbol{\nu}} \int_{\mathbf{R}} \sigma_{\mathbf{R}}(\boldsymbol{\nu}) \, d\boldsymbol{\nu} = \frac{2S}{\pi \Delta \boldsymbol{\nu}}$$
(3)

La section efficace d'absorption intégrée S représente l'intensité absolue de la raie. Elle est proportionnelle d'une part à la probabilité quantique de transition de la raie, c'est-à-dire la force d'oscillateur $F_{I''I'}$, où J" et J' sont les nombres quantiques de rotation des états inférieur et supérieur de la transition, d'autre part à la population relative du niveau inférieur. La force d'oscillateur $f_{J''J'}$, est le produit d'un facteur vibrationnel $f_{v''v'}$, constant sur toute la bande et d'un facteur caractéristique de chaque raie ou facteur de Hönl-London normalisé $\frac{S}{2J''+1}$ (voir p.ex. Nicholls et Stewart, 1969). On écrit donc

$$f_{J''J'} = f_{v''v'} = \frac{S_{J''J'}}{2J''+1}$$

où $f_{v''v}$, est la force d'oscillateur totale de la bande caractérisée par les nombres quantiques de vibration v' et v''.

La population relative N₁, /N_{Tot} d'un niveau J" est représentée par l'expression

$$\frac{N_{J''}}{N_{Tot}} = \frac{(2J''+1) e^{-\frac{hc F(i, J'')}{kT}}}{\sum_{i=1}^{2} \sum_{J''} (2J''+1) e^{-\frac{hc F(i, J'')}{kT}}}$$

appelée facteur de Boltzmann du niveau J", où T est la température, h et k les constantes de Planck et le Boltzmann, c la vitesse de la lumière, F(i, J") l'énergie du niveau inférieur; i est égal à l pour la composante ${}^{2}\Pi_{1/2}$ et à 2 pour la composante ${}^{2}\Pi_{3/2}$ du doublet de spin. Le dénominateur du second membre est la somme d'état interne de la molécule et sera noté Q dans la suite de l'exposé, afin de ne pas surcharger les notations. Finalement la section efficace d'absorption intégrée par raie s'écrit (Nicholls et Stewart, 1969)

$$S = \int_{R} \sigma_{R}(\nu) d\nu = \frac{\pi e^{2}}{me^{2}} f_{\nu'\nu'}, S_{J''J}, \frac{e^{-\frac{hc F(i, J'')}{kT}}}{Q}$$
(6)

où m et e sont la masse et la charge de l'électron. Les énergies F(i, J'') peuvent être calculées avec précision si l'on connaît les grandeurs suivantes : la constante rotationnelle B_v ; la

constante de couplage spin-orbite A_v ; la constante de distorsion D_v due à l'interaction entre la rotation et la vibration et la constante γ_v due à l'interaction relativiste spin-rotation. L'énergie F(i, J'') est donnée par (v. Bennett, 1970) :

$$F(i, J'') = T_e + B_v \left[\left(J'' + \frac{1}{2} \right)^2 - \Lambda^2 + \left(i - \frac{3}{2} \right) W \right] - D_v \left[\left(J'' + \frac{1}{2} \right)^2 - \Lambda^2 \right]$$
(7)

où T_e est le terme énergétique constant pour tout l'état; Λ est ici égal à l (car on a un état Π), et

$$W = \left[4 \left(1 - 2 \frac{D_{v}}{B_{v}} X - \frac{\gamma_{v}}{2B_{v}} \right)^{2} \left(J'' + \frac{1}{2} \right)^{2} + \frac{A_{v} - \gamma_{v}}{B_{v}} \left(\frac{A_{v} + 8D_{v}X + \gamma_{v}}{B_{v}} - 4 \right) \right]^{1/2};$$
(8)
$$X = \left(J'' + \frac{1}{2} \right)^{2} - \Lambda^{2}$$
(9)

La force d'oscillateur $f_{v'v}$, est reliée au coefficient d'absorption intégrée par bande K par

$$f_{\mathbf{v}'\mathbf{v}''} = \frac{mc^2}{\pi e^2} \quad K$$
 (10)

Les valeurs du coefficient K a fait l'objet de détermination par de nombreux auteurs revus par Abels et Shaw (1966) et Michels (1971). Il convient de noter qu'un groupe d'auteurs donne des valeurs situées autour de $(260.10^{-1.8} \text{ cm}^{-1}/\text{molécule cm}^{-2})$ tandis qu'un autre groupe indique des valeurs plus élevées (465.10^{-1.8} cm⁻¹/molécule cm⁻²). Toutes les mesures postérieures à 1966 revues dans l'article de Michels (1971) correspondent à la moyenne élevée. En conséquence cette moyenne élevée a été utilisée, en accord avec les mesures à haute résolution de Abels et Shaw (1966).

Les diverses constantes moléculaires adoptées pour le calcul des niveaux d'énergie par la formule (7) sont données au tableau l. La constante γ_v a été estimée à 10⁻⁴ cm⁻¹ par Generosa et Harris (1970); le centre de la bande est situé à 1876,08 cm⁻¹ (James et Thibault, 1964). Avant de pouvoir appliquer la relation (6) permettant d'évaluer les sections efficaces d'absorption intégrées des raies, il faut connaître la nature des facteurs de Hönl-

London. Ceux-ci dépendent de J" et leur forme varie d'une branche à l'autre; ce sont donc ces facteurs qui régissent la distribution des intensités sur les diverses branches de la bande. Leur forme a été calculée par Bennett (1970). Le résultat de l'intégration de toutes les données dans l'équation (6) fournit les sections efficaces d'absorption intégrées (en cm⁻¹ / molécule cm⁻²) par raie. Le tableau 2 donne les résultats de ce calcul. Les nombres d'onde des raies sont ceux déterminés par James et Thibault (1964); les nombres d'onde manquants ont été recalculés à l'aide de la relation (7); ils ont indiqués par un astérisque dans le tableau.

L'étape suivante du calcul est la détermination de $\sigma(\nu)$. Les demi-largeurs ont été tirées de James (1964); le résultat final, c'est à dire le pourcentage de radiation transmise en fonction de ν , calculé pour une atmosphère de NO contenue dans une cellule de 1 cm de long maintenue à la température de 293 °K, est représenté sur la fig. 2.

CONCLUSIONS

Les résultats donnés au tableau 2 sont mis en regard de valeurs de S de certaines raies, déterminées expérimentalement par Abels et Shaw (1966) et James (1964) à 300 °K. Les valeurs calculées dans le présent travail sont en bon accord avec ces mesures; les écarts subsistants sont probablement dus à l'incertitude qui entache la valeur exacte de la section efficace d'absorption intégrée totale de la bande.





. .

REMERCIEMENTS

Les auteurs ont à coeur d'exprimer leur gratitude envers M. le Professeur Nicolet, qui leur a suggéré ce travail, ainsi qu'envers M. le Docteur Ackerman pour ses stimulants conseils et discussions.

v	A _v	B _v	D _v
0	123,16	1,69618	5,5 x 10 ⁻⁶
1	122,91	1,67862	5,5 x 10 ⁻⁶

TABLEAU 1 : Constantes moléculaires (en cm⁻¹) de l'état fondamental X $^{2}\Pi$ de NO (James et Thibault 1964).

TABLEAU 2 : Nombres d'or de (en cm⁻¹) et sections efficaces d'absorption intégrées S(en cm⁻¹/molécule cm⁻²) des raies de la bande fondamentale du monoxyde d'azote, calculées pour deux températures; on a également indiqué des valeurs expérimentales de S déterminées par d'autres auteurs. Les nombres d'onde du tableau sont ceux de James et Thibault (1964); les nombres d'onde des raies non mesurées par ces auteurs ont été recalculés grâce à la formule (7) et sont affectés d'un astérisque.

Branche P₁₁

J"	$1/\lambda(\text{cm}^{-1})$	Sections efficaces d'absorption intégrées (cm/molécule cm ⁻²)			
		T = 220 K	T = 300 K	Abels et Shaw (1966)	
1,5	1871,04*	4,49.10 ⁻²⁰	3,14 10 ⁻²⁰	2,72 10 ⁻²⁰	
2,5	1867,65*	7,66	5,43	5,06	
3,5	1864,225	1,01.10 ⁻¹⁹	7,34	. 6,40	
4,5	1860,75*	1,19	8,85	7,47	
5,5	1857,266	1,29	9,94	8,67	
6,5	1853,732	1,33	1,06 10 ⁻¹⁹	9,89	
7,5	1850,164	1,30	1,08	9,15	
8,5	1846,572	1,23	1,07	8,81	
9,5	1842,933	1,11	9,65 10 ⁻²⁰	8,56	
10,5	1839,266	9,81.10 ⁻²⁰	8,79	7,96	
11,5	1835,545	8,36	7,82	7,55	
12,5	1831,836	6,91	6,80	6,66	
13,5	1828,049	5,55	5,79	5,28	
14,5	. 1824,262	4,34	4,82	5,06	
15,5	1820,421	3,31	3,49	3,80	
16,5	1816,554	2,45	3,15	3,38	
17,5	1812,62*	1,77	2,48	2,28	
. 18,5	1808,684	1,25	1,91	1,99	
19,5	1804,721	·8,60.10 ⁻²¹	1,44	1,58	
20.5	1800.726	5.77.	1.07	1,18	

11 -

TABLEAU 2 : (suite 1)

Branche Q₁₁

J"	$1/\lambda(cm^{-1})$	Sections efficaces d'absorption int	égrées (cm ⁻¹ /molécule cm ⁻²)
	•	T = 220 K	T = 300 K
0,5.	1876,06*	2,32.10 ⁻²⁰	1,61 10 ⁻²⁰
1,5	1876,01*	9,02.10 ⁻²¹	6,30 10 ⁻²¹
2,5	1875,92*	5,51	3,91
3,5	1875,80*	3,80	2,75
4,5	1875,65*	2,76	2,05
5,5	1875,46*	2,05	1,57
6,5	1875,24*	1,53	1,22
7,5	1874,99*	1,15	9,59 10 ⁻²²
8,5	1874,70*	8,59.10 ⁻²²	7,52
9,5	1874,38*	6,36	5,88
10,5	1874,02*	4,65	4,58
11,5	1873,63*	3,36	3,54
12,5	1873,21*	2,40	2,71
13,5	1872,75*	1,68	2,06
14,5	1872,26*	1,16	1,55
15,5	1871,73*	7,91.10 ⁻²³	1,15
16,5	1871,17*	5,28	8,48 10 ⁻²³
17,5	1870,57*	3,46	6,16
18,5	1869,94*	2,22	4,41
19,5	1869,28*	1,40	3,12
20,5	1868,58*	8,71.10 ⁻²⁴	2,18

.

TABLEAU 2 (suite 2)

Branche R₁₁

J"	$1/\lambda(cm^{-1})$	Sections efficaces d'absorption intégrées (cm ⁻¹ /molécule cm ⁻²)			
		T = 220 K	T = 300 K	James (1964)	Abels et Shaw (1966)
0,5	1881,041	4,64.10 ⁻²⁰	3,22 10 ⁻²⁰		2,94 10 ⁻²⁰
1,5	1884,28*	8,09	5,65		-
2,5	1887,51*	1,09.10 ⁻¹⁹	7,76		-
3,5	1890,710	1,31	9,51		8,56
4,5	1893,862	1,46	1,08 10 ⁻¹⁹		9,68
5,5	1896,983	1,53	1,17		1,05 10 ⁻¹⁹
6,5	1900,082	1,53	1,22	1,37.10 ⁻¹⁹	1,11
7,5	1903,112	1,48	1,23	1,20	1,08
8,5	1906,142	1,37	1,20	1,19	1,09
9,5	1909,139	1,23	1,14	1,26	1,04
10,5	1912,076	1,07	1,05		9,82 10 ⁻²⁰
11,5	1914,993	9,09.10 ⁻²⁰	9,56 10 ⁻²⁰		8,48
12,5	1917,91*	7,47	8,45		7,52
13,5	1920,715	5,97	7,31	7,0 3.10 ⁻²⁰	6,66
14,5	1923,58*	4,64	6,19		5,40
15,5	1926,288	3,52	5,14	5,40	4,61
16,5	1929,022	2,60	4,18	4,61	3,83
17,5	1931,725	1,87	3,33	3,68	3,25
18,5	1934,392	1,31	2,61		2,43
19,5	1937,018	9,05.10 ⁻²¹	2,01		1,88
20,5	1939,619	6,06.10 ⁻²¹	1,59		1,42
21,5	1944,690	3,96	1,12		1,00

13 -

TABLEAU 2 (suite 3)

Branche P₂₁

J"	$l/\lambda(cm^{-1})$	m ⁻¹) Sections efficaces d'absorption intégrées (cm ⁻¹ /molécule cm		
		T = 220 K	T = 300 K	
2,5	1987,352	5,28.10 ⁻²⁴	3,75 10 ⁻²⁴	
3,5	1984,148	1,05.10 ⁻²³	7,67	
4,5	1981,029	1,50	1,11 10 ⁻²³	
5,5	1977,946	1,81	1,39	
6,5	1974,927	1,99	1,58	
7,5	1971,967	2,04	1,70	
8,5	1969,06*	1,97	1,72	
9,5	1966,20*	1,82	1,68	
10,5	1963,39*	1,61	1,59	
11,5	1960,63*	1,37	1,44	
12,5	1957,92*	1,13	1,28	
13,5	1955,25*	9,04 10 ⁻²⁴	1,10	
14,5	1952,62*	6,97	9,29 10 ⁻²⁴	
15,5	1950,04*	5,22	7,62	
16,5	1947,49*	3,79	6,10	
17,5	1944,98*	2,68	4,77	3
18,5	1942,50*	1,84	3,65	
19,5	1940,05*	1,23	2,74	
20,5	1937,63*	8,04 10 ⁻²⁵	2,01	

- 14 -

TABLEAU 2 (suite 4)

Branche Q₂₁

J"	1/ λ (cm ⁻¹) Sections efficaces d'absorption inté		es d'absorption: intégrées (cm	égrées (cm ⁻¹ /molécule cm ⁻²)	
		T = 220 K	T = 300 K	James (1969)	
1,5	1995,717	2,17.10 ⁻²³	1,52.10 ⁻²³		
2,5	1995,864	3,52	2,49		
3,5	1996,071	4,50	3,26		
4,5	1996,340	5,15	3,83		
5,5	1996,663	5,49	4,21		
6,5	1997,051	5,53	4,41		
7,5	1997,454	5,32	4,43		
8,5	1997,974	4,91	4,30		
9,5	1998,516	4,38	4,05		
10,5	1999,10*	3,77	3,71		
11,5	1999,752	3,15	3,31		
12,5	2000,432	2,55	2,88		
13,5	2000,150	2,00	2,45		
14,5	2001,918	1,53	2,04	2,15 10 ⁻²³	
15,5	2002,719	1,14	1,66	1,99	
16,5	2003,560	8,27.10 ⁻²⁴	1,32	1,57	
17,5	2005,29*	5,84	1,03	1,01	
18,5	2005,338	4,01	7,96.10 ⁻²⁴	8,26 10 ⁻²⁴	
19,5	2006,262	2,69	5,98		
20,5	2007,243	1,76	4,40		
21,5	2008,193	1,12	3,18		

TABLEAU 2 (suite 5)

Branche R₂₁

J"	$1/\lambda(cm^{-1})$	Sections efficaces d'absorption intégrées (cm ⁻¹ /1		n ⁻¹ /molécule cm ⁻²)
·	1.	T = 220 K	T = 300 K	James (1964)
0,5	2000,727	2,74.10 ⁻²³	1,90.10 ⁻²³	
1,5	2004,228	3,10	2,17	
2,5	2007,79*	3,40	2,42	
3,5	2011,372	3,56	2,58	
4,5	2015,052	3,57	2,66	
5,5	2018,780	3,45	2,65	
6,5	2022,560	3,20	2,56	2,90 10 ⁻²³
7,5	2026,396	2,87	2,40	3,01
8,5	2030,280	2,48	2,18	2,63
9,5	2034,207	2,08	1,94	2,38
10,5	2038,200	1,70	1,68	2,01
11,5	2042,213	1,34	1,42	1,80
12,5	2046,299	1,03	1,17	1,71
13,5	2050,399	7,69.10 ⁻²⁴	9,51.10 ⁻²⁴	1,65
14,5	2054,524	5,58	7,52	9,53 10 ⁻²⁴
15,5	2058,709	3,93	5,81	
16,5	2062,94*	2,71	4,40	
17,5	2067,19*	1,81	3,26	
18,5	2071,444	1,18	2,37	
19,5	2075,732	7,52.10 ⁻²⁵	1,69	
20,5	2080,08*	4,66	1,18	

- 16 -

TABLEAU 2 (suite 6)

Branche P₁₂

J" $1/\lambda(cm^{-1})$ Sections efficaces d'absorption		Sections efficaces d'absorption in	intégrées (cm ⁻¹ /molécule cm ⁻²)	
		Т = 220 К	T = 330 K	•
		22		
1,5	1751,15*	1,23.10 ⁻²³	1,06.10 ⁻²³	
2,5	1747,52*	1,41	1,23	
3,Ŝ	1743,75*	1,56	1,39	
4,5	1739,86*	1,66	1,52	
5,5	1735,84*	1,68	1,59	
6,5	1731,69*	1,63	1,61	
7,5	1727,42*	1,53	1,57	
8,5	1722,02*	1,38	1,50	
9,5	1718,51*	1,21	1,38	
10,5	1713,87*	1,02	1,25	
11,5	1709,11*	8,42.10 ⁻²⁴	1,09	
12,5	1704,24*	6,69	9,41.10 ⁻²⁴	
13,5	1699,26*	5,17	7,88	
14,5	1694,17*	3,88	6,45	
15,5	1688,97*	2,83	5,16	
16,5	1683,66*	2,01	4,04	
17,5	1678,25*	1,39	3,10	
18,5	1672,73*	9,36.10 ⁻²⁵	2,33	
19,5	1667,12*	6,14	1,71	
20,5	1661,42*	3,92	1,23	

17 -

TABLEAU 2 (suite 7)

Branche Q₁₂

J.,	$1/\lambda(cm^{-1})$	Sections efficaces d'absorption intégrées (cm ⁻¹ /molécule cm ⁻²)	
· .		T = 220 K	T = 300 K
1,5	1756,12*	9,57.10 ⁻²⁴	8,26.10 ⁻²⁴
2,5	1755,79*	1,54.10 ⁻²³	1,35.10 ⁻²³
3,5	1755,34*	1,97	1,76
4,5	1754,76*	2,25	2,07
5,5	1754,05*	2,39	2,27
6,5	1753,21*	2,40	2,37
7,5	1752,25*	2,30	2,37
8,5	1751,16*	2,11	2,30
9,5	1749,96*	1,87	2,15
10,5	1748,63*	1,60	1,96
11,5	1747,19*	1,33	1,74
12,5	1745,63*	1,07	1,51
13,5	1743,96*	8,36.10 ⁻²⁴	1,28
14,5	1742,18*	6,34	1,06
15,5	1740,29*	4,67	8,59.10 ⁻²⁴
16,5	1738,29*	3,35	6,81
17,5	1736,19*	2,34	5,28
18,5	1733,69*	1,59	4,02
19,5	1731,30*	1,06	2,99 .
20,5	1729,31*	6,86.10 ⁻²⁵	2,19

- 18 -

TABLEAU 2 (suite 8)

Branche R₁₂

J"	$1/\lambda(cm^{-1})$	Sections efficaces d'absorption intégrées (cm ⁻¹ /molécule cm ⁻²)		
 		T = 220 K	T = 300 K	
1,5	1764,48*	2,24.10 ⁻²⁴	1,93.10 ⁻²⁴	
2,5	1767,30*	4,43	3,89	
3,5	1770,24*	6,17	5,53	
4,5	1772,96*	7,33	6,76	
5,5	1775,56*	7,92	7,56	
6,5	1778,04*	7,96	7,90	
7,5	1780,39*	7,54	7,85	
8,5	1782,61*	6,83	7,47	
9,5	1784,72*	5,93	6,87	
10,5	1786,70*	4,95	6,12	
11,5	1788,57*	3,99	5,27	
12,5	1790,33*	3,10	4,43	
13,5	1791,97*	2,34	3,63	
14,5	1793,50*	1,71	2,89	
15,5	1794,92*	1,21	2,25	
16,5	1796,24*	8,35.10 ⁻²⁵	1,71	
17,5	1797,45*	5,99	1,27	
18,5	1798,56*	3,64	9,29.10 ⁻²⁵	
19,5	1799,57*	2,30	6,61	
20,5	1800,49*	1,42	4,63	

N

- 19 -

J"	$1/\lambda(cm^{-1})$	Sections efficaces d'absorption intégrées (cm ⁻¹ /moléc		(cm ⁻¹ /molécule cm ⁻²)
		T = 220 K	T = 300 K	Abels et Shaw (1966)
2,5	1867,209	2,32.10 ⁻²⁰	2,03.10 ⁻²⁰	2,01 10 ⁻²⁰
3,5	1863,681	3,84	3,43	3,15
4,5	1860,118	4,86	4,46	4,09
5,5	1856,509	5,46	5,18	4,69
6,5	1852,878	5,70	5,63	5,28
7,5	1849,207	5,64	5,82	5,10
8,5	1845,51*	5,33	5,78	5,32
9,5	1841,776	4,84	5,56	4,65
10,5	1838,001	4,24	5,19	4,32
11,5	1834,177	3,60	4,72	4,09
12,5	1830,35*	2,96	4,19	3,45
13,5	1826,491	2,36	3,63	3,64
14,5	1822,56*	1,83	3,07	3,27
15,5	1818,62*	1,38	2,54	2,82
16,5	1814,687	1,02	2,07	2,14
17,5	1810,64*	7,32.10 ⁻²¹	1,64	1,76
18,5	1806,663	5,11	1,28	
19,5	1802,52*	3,48	9,83.10 ⁻²¹	1,03
20,5	1798,41*	2,31	7,38	-
21,5	1794,364	1,49	5,43	-

TABLEAU 2 (suite 9)

Branche P₂₂

- 20 -

TABLEAU 2 (suite 10)

Branche Q₂₂

. J"	$1/\lambda(cm^{-1})$	Sections efficaces d'absorption intégrées (cm ⁻¹ /molécule cm ⁻		
		T = 220 K	T = 300 K	
1,5	1875,81*	3,69.10 ⁻²⁰	3,18.10 ⁻²⁰	
2,5	1875,72*	2,24	1,95	
3,5	1875,60*	1,53	1,36	
4,5	1875,43*	1,09	1,00	
5,5	1875,24*	8,03.10 ⁻²¹	7,62.10 ⁻²¹	
6,5	1875,00*	5,92	5,83	
7,5	1874,73*	4,35	4,49	
8,5	1874,43*	3,18	3,45	
9,5	1874,08*	2,29	2,64	
10,5	1873,70*	1,64	2,01	
11,5	1873,29*	1,15	1,51	
12,5	1872,84*	8,00.10 ⁻²²	1,13	
13,5	1872,36*	5,45	8,36.10 ⁻²²	
14,5	1871,83*	3,65	6,10	
15,5	1871,28*	2,40	4,40	
16,5	1870,68*	1,54	3,13	
17,5	1870,05*	9,80.10 ⁻²³	2,20	
18,5	1869,39*	6,08	1,52	
19,5	1868,69*	3,70	1,04	
20,5	1867,95*	2,21	7,06.10 ⁻²³	
21,5	1867,18*	1,29	4,69	

- 21 -

TABLEAU 2 (suite 11)

Branche R₂₂

J"	1/λ(cm ⁻¹)	Sections efficaces d'absorption intégrées (cm ⁻¹ /molécule cm ⁻²)			
		T = 220 K	T=300 K	Abels et Shaw (1966)	
1,5	1884,316	2,46.10 ⁻²⁰	2,12.10 ⁻²⁰		
2,5	1887,64*	4,15	3,63	•	
3,5	1890,904	5,38	4,80	4,35 10 ⁻²⁰	
4,5	1894,150	6,18	5,68	5,25	
5,5	1897,337	6,60	6,27	5,73	
6,5	1900,515	6,68	6,58	6,33	
7,5	1903,643	6,45	6,65	6,14	
. 8,5	1906,729	5,99	6,51	6,03	
9,5	1909,79*	5,37	6,18	5,69	
10,5	1912,787	4,66	5,71	5,02	
11,5	1915,771	3,92	5,14	4,65	
12,5	1918,693	3,20	4,53	4,09	
13,5	1921,603	2,54	3,90	3,67	
14,5	1924,461	1,96	3,29	3,04	
15,5	1927,273	1,48	2,71	2,36	
16,5	1930,056	1,08	2,19	1,91	
17,5	1932,789	7,75.10 ⁻²¹	1,74	1,54	
18,5	1935,493	5,39	1,35	1,08	
19,5	1938,23*	3,66	1,03	8,45 10 ⁻²¹	
20,5	1940,782	2,42	7,74.10 ⁻²¹	-	
21,5	1943,347	1,56	5,69	•	

- 22 -

- ABELS, L.L. et SHAW, J.H., Widths and strengths of vibration-rotation lines in the fundamental band of nitric oxide, J. Mol. Spectry., 20, 11 (1966).
- BENNETT, R.J.M., Honl-London factors for doublet transitions in diatomic molecules, Mon. Not. R. Astr. Soc., 147, 35 (1970).
- BROWN, J.M., COLE, A.R.H. et HONEY, F.R., Magnetic dipole transitions in the far infrared spectrum of nitric oxide, *Mol. Phys.*, 23 (2), 287 (1972).
- GENEROSA, J.I. et HARRIS, R.A., Effects of high rotational quantrum numbers on Rydberg-Klein-Rees Franck-Condon factors: the nitric oxide beta band system, J. Chem. Phys., 53, 3147 (1970).
- JAMES, T.C., Intensity of the forbidden $X {}^{2}\Pi_{3/2} X {}^{2}\Pi_{1/2}$ satellite band in the infrared spectrum of nitric oxide, J. Chem. Phys., 40, 762 (1964).
- JAMES, T.C. et THIBAULT, R.J., Spin-orbit coupling constant of nitric oxide. Determination from fundamental and satellite band origins, J. Chem. Phys., 41, 2806 (1964).
- KECK, D.B. et HAUSE, C.D., High resolution study of nitric oxide near 5.4 microns, J. Mol. Spectry., 26, 163 (1968).
- MICHELS, H.H., Calculation of the integrated band intensities of NO, J.Q.R.S.T., 11, 1735 (1971).
- MITCHELL, A.C.G. et ZEMANSKY, M.W., Resonance radiation and excited atoms, Cambridge at the university press, 1934.
- MIZUSHIMA, M., EVENSON, K.M. et WELLS, J.S., Laser magnetic resonance of the NO molecule using 78 79, and 119 μm H₂O laser lines, *Phys. Rev. A.*, 5 (5), 2276 (1972).
- NICHOLLS, R.W. et STEWART, A.L., Atomic and molecular processes (édité par Bates, D.R.), Acad. Press, New York (1962).