

## Спектр поглощения $\text{H}_2^{17}\text{O}$ между 7900 и 9500 $\text{см}^{-1}$

В.И. Сердюков, Л.Н. Сеница<sup>✉</sup>, С.Н. Михайленко\*

*Институт оптики атмосферы им. В.Е. Зуева СО РАН  
634055, г. Томск, пл. Академика Зуева, 1*

Поступила в редакцию 16.01.2023 г.;  
после доработки 1.02.2023 г.;  
принята к печати 2.03.2023 г.

Спектр поглощения водяного пара с высоким содержанием  $^{17}\text{O}$  (более 80%) зарегистрирован на Фурье-спектрометре Bruker IFS 125M в диапазоне 7900–9500  $\text{см}^{-1}$  при комнатной температуре. В зарегистрированном спектре найдено около 6300 линий с минимальной интенсивностью  $5,0 \cdot 10^{-27}$   $\text{см}^2/\text{молек}$ . 4835 линий спектра отнесены к 5185 переходам пяти изотопологов молекулы воды ( $\text{H}_2^{16}\text{O}$ ,  $\text{H}_2^{17}\text{O}$ ,  $\text{H}_2^{18}\text{O}$ ,  $\text{HD}^{16}\text{O}$  и  $\text{HD}^{17}\text{O}$ ). Линии  $\text{H}_2^{17}\text{O}$  отнесены к 14 колебательным полосам, из них большая часть — к  $\nu_2 + 2\nu_3$ ,  $3\nu_2 + \nu_3$ ,  $\nu_1 + \nu_2 + \nu_3$ ,  $\nu_1 + 3\nu_2$  и  $2\nu_1 + \nu_2$ . Впервые идентифицированы линии горячих полос  $\nu_1 + 2\nu_2 + \nu_3 - \nu_2$ ,  $2\nu_1 + \nu_3 - \nu_2$  и  $2\nu_1 + 2\nu_2 - \nu_2$ . Идентификация позволила определить более 153 новых колебательно-вращательных уровней энергии девяти колебательных состояний молекулы  $\text{H}_2^{17}\text{O}$  и 22 уровня энергии двух состояний молекулы  $\text{HD}^{17}\text{O}$ . Проведены сравнения полученных данных с результатами предыдущих исследований, спектроскопической базой HITRAN2020 и списком W2020.

**Ключевые слова:** Фурье-спектроскопия, редкие изотопологи,  $\text{H}_2^{17}\text{O}$ ,  $\text{HD}^{17}\text{O}$ , колебательно-вращательные уровни энергии; water isotopologue, Fourier Transform spectroscopy,  $\text{H}_2^{17}\text{O}$ ,  $\text{HD}^{17}\text{O}$ , rotation–vibration energy level.

### Введение

Водяной пар играет важную роль во многих задачах атмосферной оптики. Несмотря на большое число работ по исследованию спектров поглощения водяного пара в средней и ближней ИК-областях, первые данные о поглощении молекулы  $\text{H}_2^{17}\text{O}$  в диапазоне 7900–9500  $\text{см}^{-1}$  опубликованы лишь в 2005 г. Р.Н. Толченков и Дж. Теннисон [1] определили положения и интенсивности линий 150 колебательно-вращательных (КВ) переходов  $\text{H}_2^{17}\text{O}$  из анализа Фурье-спектров поглощения паров воды с естественной концентрацией изотопических модификаций, зарегистрированных при длине пути 480 и 800 м [2]. Затем Лю и др. [3] определили центры и интенсивности 446 линий (между 8589 и 9332  $\text{см}^{-1}$ ) из Фурье-спектра обогащенного водяного пара (5%  $^{17}\text{O}$ ). Спектр [3] был зарегистрирован на ФС Национальной солнечной обсерватории (Кит Пик, Аризона, США). Л. Регалия и др. [4] наблюдали в Фурье-спектре водяного пара с естественным содержанием изотопологов линии 260 переходов в области 8136–9187  $\text{см}^{-1}$ . Дополнительно 269 линий наблюдались с помощью лазерного спектрометра с затуханием излучения в резонаторе (CRDS) в спектрах естественного [5, 6] и высокообогащенного (до 50%

$\text{H}_2^{17}\text{O}$ ) [7] водяного пара. Эти линии, охватывают область 7900–8333  $\text{см}^{-1}$ . Всего в предыдущих исследованиях в интересующей нас области зарегистрировано 783 линии, соответствующие переходам молекулы  $\text{H}_2^{17}\text{O}$ . Все переходы  $\text{H}_2^{17}\text{O}$ , о которых сообщалось ранее, в сравнении с наблюдаемыми в настоящем исследовании (TW — this work), показаны на рис. 1, а. Вертикальная ось рисунка соответствует вариационным значениям интенсивности, рассчитанным С.А. Ташкуном [8] (расчетный список SP — Schwenke Partridge) на основе результатов Х. Партриджа и Д. Швенке [9, 10].

О первом наблюдении линий поглощения  $\text{HD}^{17}\text{O}$  выше 7900  $\text{см}^{-1}$  сообщалось в работе С.Н. Михайленко и др. [11] из анализа Фурье-спектра паров воды, обогащенных дейтерием и  $^{18}\text{O}$ . В работе [11] 47 линий между 8469 и 8709  $\text{см}^{-1}$  были отнесены к переходам полосы  $\nu_2 + 2\nu_3$ . Позже Д. Монделайн и др. [7] обнаружили 27 линий  $\text{HD}^{17}\text{O}$  в диапазоне 7900–7921  $\text{см}^{-1}$ . Сравнение наблюдаемых нами переходов с ранее зарегистрированными линиями приведено на рис. 1, б.

Таким образом, видно, что имеющаяся в литературе информация о поглощении изотопологами молекулы воды, содержащих кислород  $^{17}\text{O}$ , в области 7900–9500  $\text{см}^{-1}$  весьма скудна. Фактически, специальных исследований о поглощении молекул  $\text{H}_2^{17}\text{O}$  и  $\text{HD}^{17}\text{O}$  в этом спектральном диапазоне ранее не проводилось.

Цель настоящей работы — анализ спектра поглощения паров воды, обогащенной изотопом кислорода  $^{17}\text{O}$ , в диапазоне от 7900 до 9500  $\text{см}^{-1}$ .

\* Виктор Иванович Сердюков (serd49@mail.ru); Леонид Никифорович Сеница (sln@iao.ru); Семен Николаевич Михайленко (semen@iao.ru).

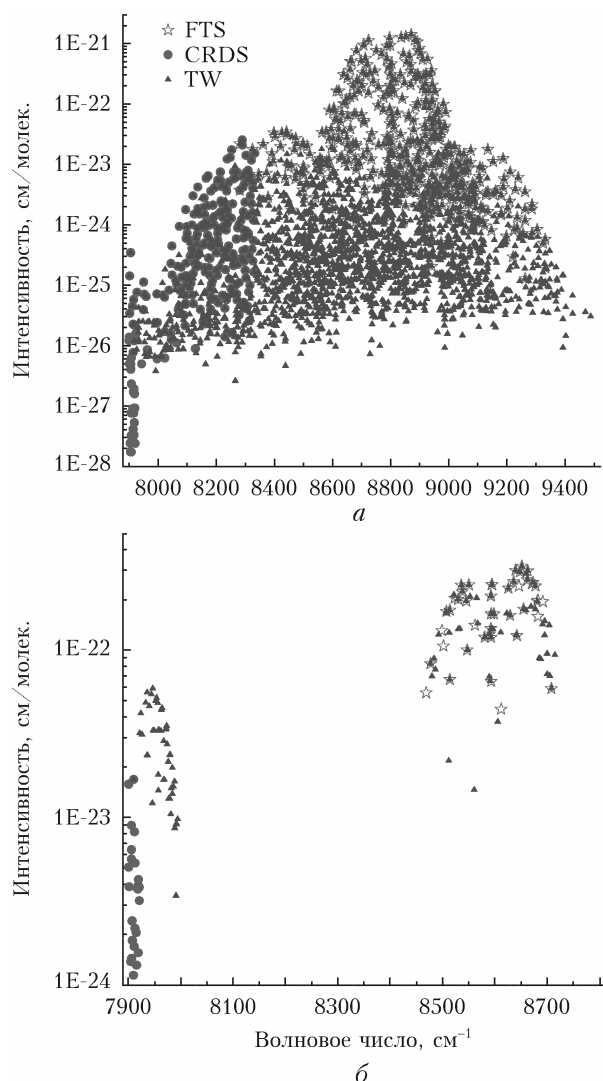


Рис. 1. Сравнение ранее наблюдаемых (FTS [1, 3, 4, 11] и CRDS [5–7]) и зарегистрированных (TW) переходов  $\text{H}_2^{17}\text{O}$  (а) и  $\text{HD}^{17}\text{O}$  (б)

Данная работа является продолжением исследований поглощения паров воды в ближнем инфракрасном (ИК) и видимом диапазонах с использованием источников высокой яркости в сочетании с Фурье-спектрометром (ФС). Наши предыдущие усилия были сосредоточены на изучении спектров молекулы  $\text{H}_2^{18}\text{O}$  [12–14].

## 1. Эксперимент

Для регистрации спектра использовался Фурье-спектрометр IFS 125M фирмы Bruker. Спектр зарегистрирован при комнатной температуре с разрешением  $0,02 \text{ см}^{-1}$  и длиной оптического пути 24 м. Температура в комнате объемом  $75 \text{ м}^3$  стабилизировалась с погрешностью менее 1К кондиционером Midea MSE-24HR, что позволяло проводить длительные (до 9 сут) измерения спектров. Спектрометр был оснащен галогенной лампой в качестве источника света, а также германиевым детектором

и светодетелем из  $\text{CaF}_2$ . Конструкция многопроходной вертикальной абсорбционной кюветы (длина 60 см, объем 22 л) основана на трехзеркальной конфигурации У. Уайта, усовершенствованной Х. Бернштейном и Дж. Герцбергом [15]. Общее давление водяного пара составляло около 24 мбар. Давление измерялось датчиком АИР-20М с диапазоном 0–100 кПа и точностью порядка 0,1%. Для аподизации спектра использовалась треугольная функция. При количестве сканов 6840 достигнуто отношение сигнал/шум, равное 500, что соответствует минимально регистрируемому коэффициенту поглощения  $K_{\min} = 1 \cdot 10^{-7} \text{ см}^{-1}$ . Излучение лампы после многопроходной кюветы по эмиссионному каналу попадало в спектрометр. Спектрометр не вакуумировался, однако низкая влажность воздуха (относительная влажность менее 20%) не требовала продувки прибора сухим азотом.

Для приготовления паров  $\text{H}_2^{17}\text{O}$  использовали жидкую воду, обогащенную изотопологом  $\text{H}_2^{17}\text{O}$  до 86%, производства компании Sigma-Aldrich. Остальные 14% пробы составляют  $\text{H}_2^{16}\text{O}$  и незначительное количество  $\text{H}_2^{18}\text{O}$ ,  $\text{HD}^{17}\text{O}$  и  $\text{HD}^{16}\text{O}$ . После напуска паров в кювету давление пара стабилизировалось в течение 2–3 ч за счет адсорбции и десорбции, так что измерение спектра начиналось через три часа после напуска газа. Перед регистрацией спектра были выполнены все процедуры юстировки спектрометра, чтобы получить качественные спектры поглощения с максимально симметричными неперекрывающимися линиями. Экспериментальная установка и методика измерений подробно описаны в [16]. Аппаратную функцию спектрометра контролировали по регистрации спектра поглощения неона [17]. Условия эксперимента при регистрации спектров приведены в табл. 1. Оценка изотопического состава водяного пара проводилась на основе сравнения интенсивностей наблюдаемых линий с их значениями в базе данных HITRAN [18].

Таблица 1

| Условия измерения спектра       |                                                                                                                                              |
|---------------------------------|----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| Параметр                        | Значение                                                                                                                                     |
| Спектральный диапазон           | 7900–9500 $\text{см}^{-1}$                                                                                                                   |
| Длина поглощающего пути         | 2400 см                                                                                                                                      |
| Давление паров воды             | 24,0 мбар                                                                                                                                    |
| Температура кюветы              | $298 \pm 1 \text{ К}$                                                                                                                        |
| Спектральное разрешение         | $0,02 \text{ см}^{-1}$                                                                                                                       |
| Апертура входного отверстия     | 0,85 мм                                                                                                                                      |
| Число интерферограмм            | 6840                                                                                                                                         |
| Источник излучения              | Галогенная лампа                                                                                                                             |
| Изотопический состав паров воды | $\text{H}_2^{17}\text{O}:\text{H}_2^{16}\text{O}:\text{H}_2^{18}\text{O}:\text{HD}^{16}\text{O}:\text{HD}^{17}\text{O}$<br>81:17:2:0,03:0,1% |

Общий вид зарегистрированного спектра показан на рис. 2. Большинство насыщенных линий в области между 8600 и 9000  $\text{см}^{-1}$  соответствуют наиболее сильным линиям полосы  $\nu_1 + \nu_2 + \nu_3$  молекул

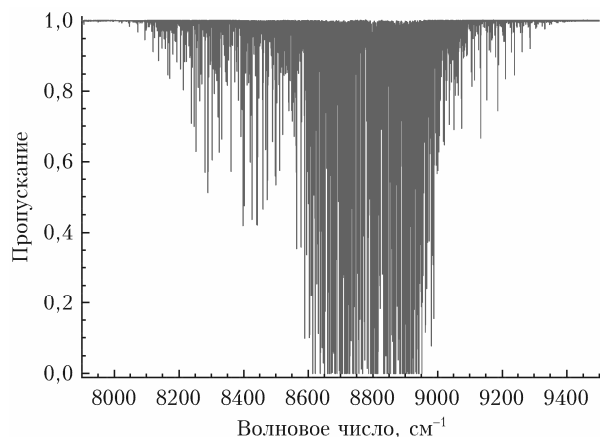


Рис. 2. Обзор зарегистрированного спектра поглощения паров воды между 7900 и 9400  $\text{см}^{-1}$

$\text{H}_2^{17}\text{O}$  и  $\text{H}_2^{16}\text{O}$ . На рис. 3 показаны два участка спектра в разных областях для демонстрации качества спектра. Отношение сигнал/шум достаточно сильно (до 5 раз) меняется в зависимости от диапазона при максимальном значении более 500 около 8500  $\text{см}^{-1}$ .

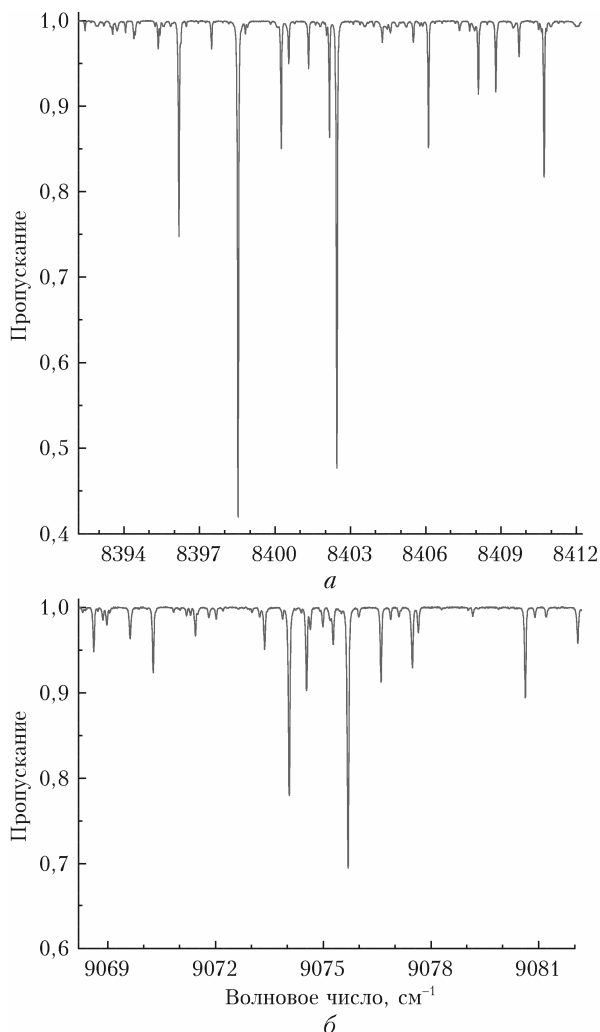


Рис. 3. Примеры зарегистрированного спектра в районах 8403 (а) и 9075  $\text{см}^{-1}$  (б)

## 2. Анализ спектра и результаты

Список линий был создан с помощью программного обеспечения SpectraPlot [19]. Программа использовалась как для подготовки списка линий, так и для определения параметров линий. Для подгонки формы наблюдаемой линии применяли контур Фойгта. При этом коэффициент самоуширения линий фиксировался значением 0,4  $\text{см}^{-1}/\text{атм}$  в случае слабых, смешанных или сильно перекрывающихся линий. Всего в спектре было обнаружено около 6300 линий поглощения между 7902 и 9488  $\text{см}^{-1}$ . Спектр калибровался по достаточно сильным ненасыщенным изолированным в зарегистрированном спектре линиям молекулы  $\text{H}_2^{16}\text{O}$ . Положения линий, полученные из обработки экспериментальных контуров, сравнивались с соответствующими значениями из базы данных HITRAN версии 2020 г. [18].

Идентификация спектральных линий базировалась на расчетном списке SP [8] и доступных эмпирических энергиях КВ-уровней всех изотопов молекулы воды. Как и в наших предыдущих исследованиях спектра паров воды (см., например, [12–14]), линий воды идентифицировались в два этапа.

Первый этап — это «тривиальная идентификация», представляющая собой прямое сравнение нашего списка линий с ранее полученными экспериментальными списками. Таким способом проведено отнесение 1624 переходов основной изотопической модификации ( $\text{H}_2^{16}\text{O}$ ) по данным, опубликованным в [1]; 57 переходов  $\text{HD}^{16}\text{O}$  полос  $\nu_2 + 2\nu_3$  и  $3\nu_1$  идентифицированы путем сравнения с результатами работ [20] и [21]. Линии 855 переходов молекулы  $\text{H}_2^{18}\text{O}$  идентифицированы с использованием недавних результатов исследований, полученных при анализе Фурье-спектров поглощения водяного пара, обогащенного  $^{18}\text{O}$  [22, 23]. В итоге для молекул  $\text{H}_2^{16}\text{O}$ ,  $\text{H}_2^{18}\text{O}$  и  $\text{HD}^{16}\text{O}$  среди зарегистрированных линий не обнаружено новых или исправленных данных по сравнению с публикациями [1, 20–23]. Обзор идентифицированных переходов показан на рис. 4.

Второй этап идентификации, как сказано выше, основан на рассчитанных SP-списках положений и интенсивностей КВ-переходов. Для идентификации вариационные положения линий ( $\nu^{\text{SP}}$ ) заменялись соответствующими (эмпирическими) значениями ( $\nu^{\text{Emp}}$ ), рассчитанными с использованием известных эмпирических энергий КВ-уровней. Идентификация учитывает серии разностей между вариационными и эмпирическими положениями линий ( $d\nu = \nu^{\text{SP}} - \nu^{\text{Emp}}$ ) в зависимости от вращательных чисел  $J$  и  $K_a$ . Как правило, эти разности представляют собой гладкие кривые. Примеры таких серий для  $K_a = 0$  для пяти колебательных состояний показаны на рис. 5. Как мы видим, поведение  $d\nu$  описывается гладкими, плавно меняющимися зависимостями от вращательного числа  $J$  ( $d\nu(J)$ ). Использование соответствующих серий  $d\nu(J)$  позволило идентифицировать более 300 линий молекул  $\text{H}_2^{17}\text{O}$  и  $\text{HD}^{17}\text{O}$ , отвечающих

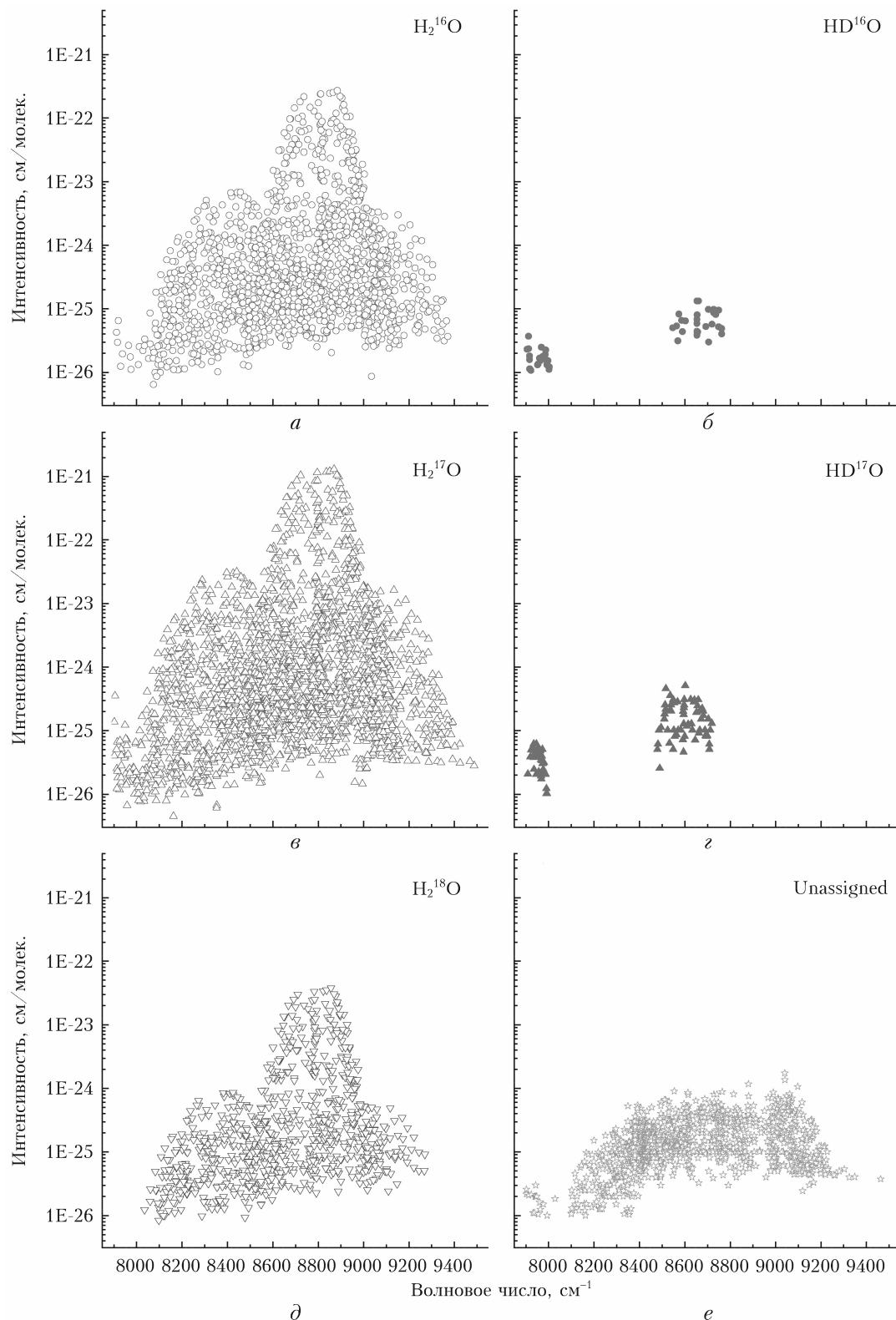


Рис. 4. Обзор идентифицированных (*a–d*) и не идентифицированных (*e*) линий в диапазоне 7900–9500  $\text{см}^{-1}$

ранее неизвестным верхним энергетическим уровням. Для подтверждения идентификации использовалась близость рассчитанных и наблюдаемых интенсивностей линий, а также проверка комбинационных разностей для энергий основного состояния.

В табл. 2 содержится общая информация об идентифицированных переходах молекул  $\text{H}_2^{17}\text{O}$  и  $\text{HD}^{17}\text{O}$ . Приведено число переходов (NT), максимальные значения вращательных чисел ( $J_{\text{max}}$  и  $K_a \text{ max}$ ) и диапазон для каждой полосы.

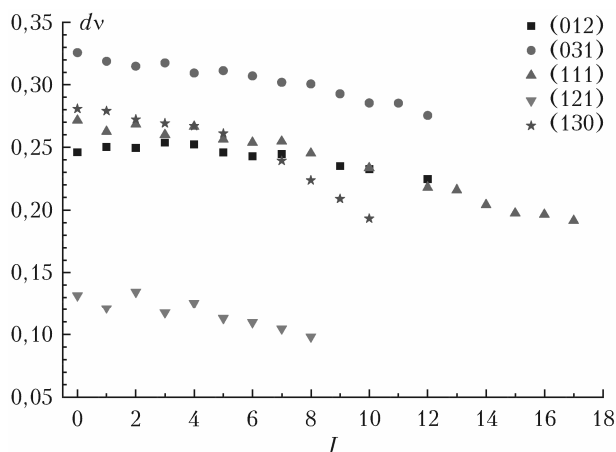


Рис. 5. Разности частот  $dv = \nu^{\text{SP}} - \nu^{\text{Emp}}$  переходов на колебательные состояния (012), (031), (111), (121), и (130) молекулы  $\text{H}_2^{17}\text{O}$  для серии  $K_a = 0$

Таблица 2

Статистика идентификации переходов для различных полос  $\text{H}_2^{17}\text{O}$  и  $\text{HD}^{17}\text{O}$

| Полоса                                      | NT  | $J_{\text{max}}, K_{a\text{max}}$ | Диапазон, $\text{см}^{-1}$ |
|---------------------------------------------|-----|-----------------------------------|----------------------------|
| <b><math>\text{H}_2^{17}\text{O}</math></b> |     |                                   |                            |
| $2\nu_3$                                    | 26  | 14, 6                             | 7902–8088                  |
| $2\nu_1$                                    | 6   | 12, 7                             | 7911–8011                  |
| $5\nu_2$                                    | 50  | 11, 8                             | 7914–9026                  |
| $3\nu_2 + \nu_3$                            | 477 | 13, 8                             | 7932–9272                  |
| $\nu_1 + \nu_3$                             | 2   | 15, 4                             | 7933–7960                  |
| $\nu_1 + 2\nu_2$                            | 1   | 11, 6                             | 7952,763                   |
| $\nu_1 + 3\nu_2$                            | 366 | 12, 7                             | 7962–9280                  |
| $\nu_1 + 4\nu_2 - \nu_2$                    | 2   | 4, 1                              | 8026–8032                  |
| $4\nu_2 + \nu_3 - \nu_2$                    | 28  | 5, 3                              | 8110–8380                  |
| $6\nu_2$                                    | 13  | 6, 1                              | 8171–9069                  |
| $\nu_1 + \nu_2 + \nu_3$                     | 677 | 17, 9                             | 8176–9427                  |
| $2\nu_1 + \nu_2$                            | 341 | 14, 7                             | 8263–9274                  |
| $\nu_2 + 2\nu_3$                            | 411 | 12, 8                             | 8414–9488                  |
| $\nu_1 + 2\nu_2 + \nu_3 - \nu_2$            | 111 | 9, 5                              | 8494–8917                  |
| $2\nu_1 + 2\nu_2 - \nu_2$                   | 2   | 4, 2                              | 8729–8814                  |
| $2\nu_1 + \nu_3 - \nu_2$                    | 3   | 6, 2                              | 8984–9104                  |
| <b><math>\text{HD}^{17}\text{O}</math></b>  |     |                                   |                            |
| $3\nu_1$                                    | 48  | 10, 4                             | 7910–7994                  |
| $\nu_1 + \nu_2 + \nu_3$                     | 1   | 7, 3                              | 7980,923                   |
| $\nu_2 + 2\nu_3$                            | 76  | 10, 4                             | 8477–8716                  |

В зарегистрированном спектре идентифицировано более 2500 переходов 11 холодных и 5 горячих полос молекулы  $\text{H}_2^{17}\text{O}$ . Все горячие полосы связаны с нижним колебательным состоянием (010). Для молекулы  $\text{HD}^{17}\text{O}$  найдены линии 125 переходов полос  $3\nu_1$ ,  $\nu_1 + \nu_2 + \nu_3$  и  $\nu_2 + 2\nu_3$  между 7910 и  $8715 \text{ см}^{-1}$ .

Идентифицированные переходы использовались для определения энергий верхних КВ-уровней. Частоты переходов позволили найти 143 и 22 КВ-уровней энергии молекул  $\text{H}_2^{17}\text{O}$  и  $\text{HD}^{17}\text{O}$  соответственно. Энергии, впервые полученные из наблюдаемых частот переходов, приведены в табл. 3.

Таблица 3

Значения исправленных энергий КВ-уровней и их сравнение со списком W2020 [24]

| Vib | $J$ | $K_a$ | $K_c$ | $E(\text{TW}), \text{см}^{-1}$ | $E(\text{W2020}), \text{см}^{-1}$ | $unc, 10^{-4} \text{ см}^{-1}$ | $dE, 10^{-4} \text{ см}^{-1}$ | $ dE /unc$ |
|-----|-----|-------|-------|--------------------------------|-----------------------------------|--------------------------------|-------------------------------|------------|
| 031 | 6   | 5     | 2     | 9470,2104                      | 9740,2296                         | 6                              | −192                          | 32,0       |
| 012 | 7   | 0     | 7     | 9548,4388                      | 9548,5427                         | 50                             | −1039                         | 20,8       |
| 012 | 7   | 1     | 7     | 9548,2010                      | 9548,2114                         | 50                             | −104                          | 2,1        |
| 012 | 7   | 1     | 6     | 9673,9210                      | 9673,6748                         | 50                             | 2462                          | 49,2       |
| 012 | 9   | 3     | 7     | 10181,1645                     | 10181,1105                        | 1                              | 540                           | 540,0      |
| 111 | 7   | 6     | 1     | 10016,1880                     | 10016,2148                        | 1                              | −268                          | 268,0      |
| 111 | 10  | 6     | 5     | 10658,1548                     | 10658,1747                        | 50                             | −199                          | 4,0        |
| 111 | 11  | 0     | 11    | 10064,1749                     | 10064,1582                        | 335                            | 167                           | 0,5        |
| 121 | 8   | 1     | 8     | 11025,9911                     | 11026,0236                        | 5                              | −325                          | 65,0       |

Примечание. Vib — колебательные квантовые числа  $V_1V_2V_3$ ;  $J, K_a, K_c$  — вращательные квантовые числа;  $E(\text{TW})$  — эмпирическая энергия, определенная в настоящей работе;  $E(\text{W2020})$  — эмпирическая энергия из [24];  $unc$  — неопределенность энергии из [24].

### 3. Сравнение с доступными списками переходов

#### 3.1. Сравнение с HITRAN2020

Последняя версия базы спектроскопической информации HITRAN2020 содержит параметры более 33000 переходов семи изотопических модификаций молекулы воды ( $\text{H}_2^{16}\text{O}$ ,  $\text{H}_2^{18}\text{O}$ ,  $\text{H}_2^{17}\text{O}$ ,  $\text{HD}^{16}\text{O}$ ,  $\text{HD}^{18}\text{O}$ ,  $\text{HD}^{17}\text{O}$  и  $\text{D}_2^{16}\text{O}$ ) с минимальной интенсивностью  $1 \cdot 10^{-30} \text{ см}^2/\text{молек.}$  для основной изотопической модификации,  $1 \cdot 10^{-32} \text{ см}^2/\text{молек.}$  для  $\text{D}_2^{16}\text{O}$  и  $1 \cdot 10^{-29} \text{ см}^2/\text{молек.}$  для остальных изотопологов. Основу списка центров линий  $\text{H}_2^{16}\text{O}$  в HITRAN2020 составляют данные из списка W2020 [24] (16955 из 20248 переходов). Частоты 1845, 1088 и 35 взяты из работ [25–27] соответственно. Аналогично большая часть центров линий  $\text{H}_2^{18}\text{O}$  взята из W2020 [24] (3368 из 4173 переходов) и дополнена 805 переходами из [25]. Центры линий  $\text{HD}^{16}\text{O}$ ,  $\text{HD}^{18}\text{O}$ ,  $\text{HD}^{17}\text{O}$  и  $\text{D}_2^{16}\text{O}$  представлены в HITRAN2020 эмпирическими и вариационными данными из работы [28]. Большая часть (2455 из 2769) центров линий  $\text{H}_2^{17}\text{O}$  представлена данными из [29, 30]. Лишь немногим более 300 центров линий взяты из [26] и W2020 [24].

Как сказано в предыдущем разделе, положения линий  $\text{H}_2^{16}\text{O}$  использовались для калибровки зарегистрированного спектра.

Для 1618 переходов  $\text{H}_2^{16}\text{O}$ , идентифицированных в зарегистрированном спектре, среднее отклонение экспериментальных центров линий ( $\nu^{\text{TW}}$ ) от соответствующих значений в HITRAN2020

$$(\nu^{\text{HITRAN}}) \quad \delta\nu = \sum_{i=1}^{\text{NT}} (\nu_i^{\text{HITRAN}} - \nu_i^{\text{TW}}) / \text{NT} = 0,0003 \text{ см}^{-1}$$

при среднеквадратичном отклонении  $\delta^2\nu =$

$$= \sqrt{\sum_{i=1}^{\text{NT}} (\nu_i^{\text{HITRAN}} - \nu_i^{\text{TW}})^2 / \text{NT}} = 0,0028 \text{ см}^{-1}.$$

Для 35 слабых линий и линий, перекрывающихся с более сильными линиями, разность  $d\nu = \nu^{\text{TW}} - \nu^{\text{HITRAN}} > 0,01 \text{ см}^{-1}$ . Центры соответствующих линий в HITRAN2020 взяты из [24, 26, 27].

Все линии молекулы  $\text{H}_2^{18}\text{O}$ , наблюдаемые в зарегистрированном спектре, относятся к 853 переходам из W2020 [24];  $\delta\nu = 0,0004 \text{ см}^{-1}$  при  $\delta^2\nu = 0,0037 \text{ см}^{-1}$ ;  $d\nu > 0,01 \text{ см}^{-1}$  для двух слабых линий.

Центры линий всех 57 переходов  $\text{HD}^{16}\text{O}$ , наблюдаемых в зарегистрированном спектре, представлены в HITRAN2020 эмпирическими значениями из работы [28]. Среднее отклонение  $\delta\nu = 0,0012 \text{ см}^{-1}$  при  $\delta^2\nu = 0,0051 \text{ см}^{-1}$ ;  $d\nu > 0,01 \text{ см}^{-1}$  для семи слабых линий.

Как видно из рис. 6, наблюдается весьма хорошее соответствие между экспериментальными положениями линий и данными из работ [24, 26] для  $\text{H}_2^{17}\text{O}$  и эмпирическими данными из [28] для  $\text{HD}^{17}\text{O}$ . Совсем иная ситуация для положений линий  $\text{H}_2^{17}\text{O}$  из работ [29, 30]. Более чем для 850 переходов  $d\nu > 0,01 \text{ см}^{-1}$  по абсолютному значению, достигая максимумов для переходов полосы  $\nu_1 + \nu_2 + \nu_3$ :  $+0,137 \text{ см}^{-1}$  для  $13_{410} - 12_{49}$  и  $13_{49} - 12_{48}$  и  $-0,150 \text{ см}^{-1}$  для  $9_{91} - 9_{90}$  и  $9_{90} - 9_{91}$ . В случае молекулы  $\text{HD}^{17}\text{O}$  (рис. 6, б) вариационные зна-

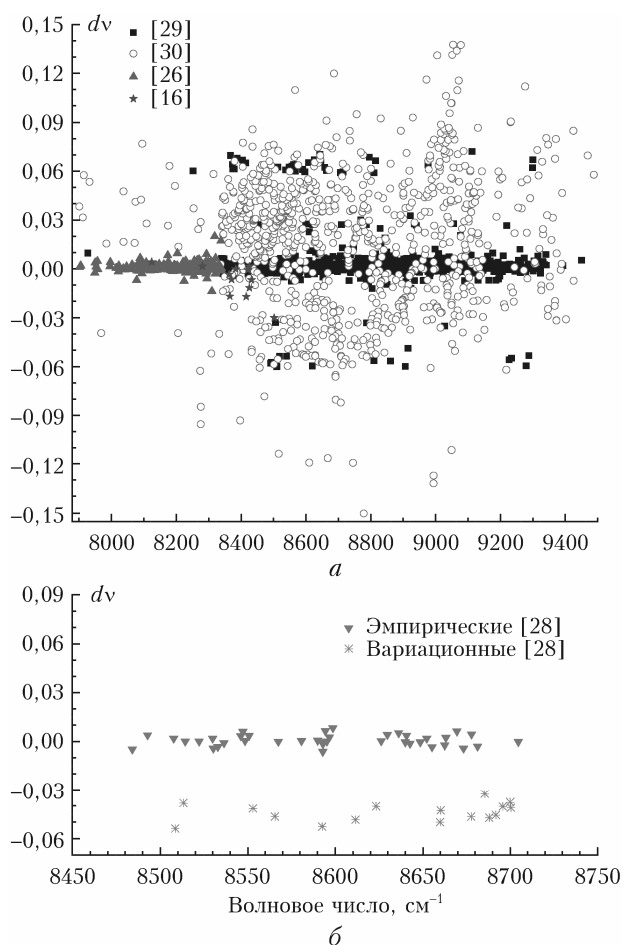


Рис. 6. Разности частот  $d\nu = \nu^{\text{HITRAN}} - \nu^{\text{TW}}$  переходов  $\text{H}_2^{17}\text{O}$  (а) и  $\text{HD}^{17}\text{O}$  (б) в зависимости от источника данных

чения частот переходов из [28] в среднем занижены на  $0,045 \text{ см}^{-1}$  по сравнению с их наблюдаемыми значениями.

Заметим также, что вследствие высокого обогащения паров воды кислородом  $^{17}\text{O}$  в спектре наблюдается более 160 линий 14 полос  $\text{H}_2^{17}\text{O}$  и 65 линий трех полос  $\text{HD}^{17}\text{O}$ , отсутствующих в списке переходов HITRAN2020. Большая часть отсутствующих линий  $\text{HD}^{17}\text{O}$  принадлежит полосе  $3\nu_1$  в диапазоне  $7900\text{--}8000 \text{ см}^{-1}$ , не представленной в базе.

### 3.2. Сравнение с W2020

Недавно опубликованные списки КВ-уровней энергии и частот переходов W2020 анонсируются авторами работы [24] как наиболее полные и точные наборы данных для молекул  $\text{H}_2^{16}\text{O}$ ,  $\text{H}_2^{17}\text{O}$  и  $\text{H}_2^{18}\text{O}$ . Мы сравнили наблюдаемые положения линий этих трех молекул с частотами из списков W2020 (рис. 7).

Из рис. 7, а видно удовлетворительное согласие между положениями линий из нашего исследования и опубликованного в [24] для  $\text{H}_2^{16}\text{O}$  и  $\text{H}_2^{18}\text{O}$ . Различия  $d\nu = \nu^{\text{W2020}} - \nu^{\text{TW}}$  в целом лежат

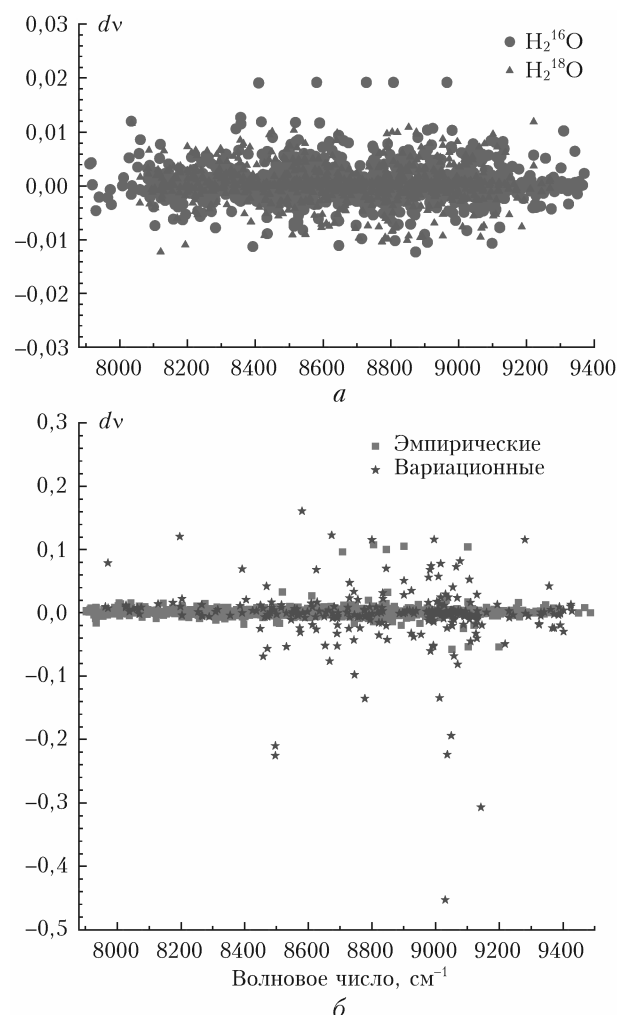


Рис. 7. Разности частот  $d\nu = \nu^{\text{W2020}} - \nu^{\text{TW}}$  переходов  $\text{H}_2^{16}\text{O}$  и  $\text{H}_2^{18}\text{O}$  (а) и  $\text{H}_2^{17}\text{O}$  (б)

в пределах  $\pm 0,01 \text{ см}^{-1}$ . Наибольшие отклонения соответствуют слабым, зашумленным и/или перекрывающимся линиям, для которых экспериментальные центры определены недостаточно точно. Отметим, что как среднее ( $\delta\nu$ ), так и среднеквадратичное ( $\delta^2\nu$ ) отклонения частот для  $\text{H}_2^{16}\text{O}$  несколько лучше, чем в HITRAN2020. Соответствующие значения равны 0,0002 и  $0,0023 \text{ см}^{-1}$ . Для  $\text{H}_2^{18}\text{O}$  эти значения равны 0,0003 и  $0,0033 \text{ см}^{-1}$ , что также лучше, чем в HITRAN2020.

Единственным примером достоверного отклонения наблюдаемых положений линий от значений, приведенных в списке W2020, являются пять линий, соответствующих переходам на верхний КВ-уровень (031)  $6_{52}$  молекулы  $\text{H}_2^{16}\text{O}$ . Наблюдаемые частоты соответствующих переходов полосы  $3\nu_2 + \nu_3$  ( $6_{52} - 7_{53}$  ( $8410,5638 \text{ см}^{-1}$ ),  $6_{52} - 6_{51}$  ( $8581,5778 \text{ см}^{-1}$ ),  $6_{52} - 5_{51}$  ( $8727,1374 \text{ см}^{-1}$ ),  $6_{52} - 6_{33}$  ( $8808,6615 \text{ см}^{-1}$ ) и  $6_{52} - 5_{33}$  ( $8966,2423 \text{ см}^{-1}$ ) на  $0,019 \text{ см}^{-1}$  меньше значений, которые приведены в списке W2020. Это говорит о том, что энергия КВ-уровня (031)  $6_{52}$  молекулы  $\text{H}_2^{16}\text{O}$  в работе [24] определена недостаточно точно. Наибольшее отличие частот из списка W2020 относится к переходам, взятым из [31].

Совсем иная ситуация для положений линий молекулы  $\text{H}_2^{17}\text{O}$ . Как видно из рис. 7, б, макси-

мальные отклонения  $d\nu > 0,45 \text{ см}^{-1}$  по абсолютной величине. Заметим, что часть наблюдаемых в нашем спектре линий  $\text{H}_2^{17}\text{O}$  соответствует переходам, для которых в списке W2020 указаны вариационные значения частот переходов. Это те переходы, верхние уровни которых до сих пор не были определены из эксперимента. Однако даже для тех переходов, верхние уровни которых являются эмпирическими, согласно W2020 максимальные отклонения  $d\nu > 0,1 \text{ см}^{-1}$ . В целом для  $\text{H}_2^{17}\text{O}$   $\delta^2\nu = 0,0062$  и  $0,0535 \text{ см}^{-1}$  для эмпирических и вариационных положений линий. Для положений линий, соответствующих восьми верхним КВ-уровням, установлены достоверные отклонения  $d\nu > 0,015 \text{ см}^{-1}$ .

Восемь исправленных уровней молекулы  $\text{H}_2^{17}\text{O}$  вместе с уровнем (031)  $6_{52}$  молекулы  $\text{H}_2^{16}\text{O}$  даны в табл. 3 в сравнении с соответствующими значениями, приведенными в [24]. Разности энергий  $dE = E(\text{TW}) - E(\text{W2020})$  в табл. 3 превышают по абсолютной величине значение  $0,01 \text{ см}^{-1}$ , достигая  $0,246 \text{ см}^{-1}$  для энергии уровня (012)  $7_{16}$ .

В табл. 4 приведены эмпирические значения КВ-энергий 153 уровней молекулы  $\text{H}_2^{17}\text{O}$  и 22 уровней молекулы  $\text{HD}^{17}\text{O}$ , впервые определенные из экспериментальных частот переходов.

Таблица 4

Новые энергии КВ-уровней молекул  $\text{H}_2^{17}\text{O}$  и  $\text{HD}^{17}\text{O}$

| Vib                                         | J  | $K_a$ | $K_c$ | $E, \text{ см}^{-1}$ | Vib | J  | $K_a$ | $K_c$ | $E, \text{ см}^{-1}$ | Vib | J  | $K_a$ | $K_c$ | $E, \text{ см}^{-1}$ |
|---------------------------------------------|----|-------|-------|----------------------|-----|----|-------|-------|----------------------|-----|----|-------|-------|----------------------|
| 1                                           | 2  | 3     | 4     | 5                    | 6   | 7  | 8     | 9     | 10                   | 11  | 12 | 13    | 14    | 15                   |
| <b><math>\text{H}_2^{17}\text{O}</math></b> |    |       |       |                      | 050 | 8  | 8     | 1     | 10380,6041           | 130 | 11 | 3     | 9     | 10042,0133           |
| 012                                         | 7  | 2     | 6     | 9676,7340            | 050 | 8  | 8     | 0     | 10380,6042           | 130 | 11 | 5     | 7     | 10462,6698           |
| 012                                         | 7  | 4     | 4     | 9904,7084            | 050 | 9  | 5     | 5     | 9617,1295            | 130 | 12 | 0     | 12    | 9773,3835            |
| 012                                         | 8  | 0     | 8     | 9699,5197            | 050 | 9  | 5     | 4     | 9604,8844            | 130 | 12 | 1     | 12    | 9765,1528            |
| 012                                         | 8  | 4     | 4     | 10107,2568           | 050 | 11 | 3     | 9     | 9524,4731            | 130 | 12 | 2     | 10    | 10296,9105           |
| 012                                         | 8  | 6     | 3     | 10381,4718           |     |    |       |       |                      | 130 | 12 | 4     | 9     | 10526,8873           |
| 012                                         | 8  | 6     | 2     | 10381,4980           | 060 | 6  | 1     | 5     | 9514,7742            |     |    |       |       |                      |
| 012                                         | 9  | 0     | 9     | 9868,4966            |     |    |       |       |                      | 140 | 3  | 0     | 3     | 9844,4029            |
| 012                                         | 9  | 1     | 9     | 9868,5747            | 111 | 8  | 6     | 3     | 10206,2380           |     |    |       |       |                      |
| 012                                         | 9  | 2     | 7     | 10168,0955           | 111 | 8  | 8     | 1     | 10612,7625           | 210 | 7  | 3     | 5     | 9557,0156            |
| 012                                         | 9  | 4     | 6     | 10310,9004           | 111 | 8  | 8     | 0     | 10612,7625           | 210 | 7  | 5     | 3     | 9823,5406            |
| 012                                         | 9  | 5     | 4     | 10451,8238           | 111 | 9  | 6     | 3     | 10419,9220           | 210 | 8  | 2     | 6     | 9716,7341            |
| 012                                         | 9  | 6     | 4     | 10595,4968           | 111 | 9  | 7     | 2     | 10619,4918           | 210 | 8  | 3     | 5     | 9788,1987            |
| 012                                         | 9  | 6     | 3     | 10595,6465           | 111 | 9  | 8     | 2     | 10831,4885           | 210 | 8  | 4     | 4     | 9878,1362            |
| 012                                         | 9  | 7     | 3     | 10779,0320           | 111 | 9  | 8     | 1     | 10831,4887           | 210 | 8  | 5     | 3     | 10012,8899           |
| 012                                         | 9  | 7     | 2     | 10779,0193           | 111 | 9  | 9     | 1     | 10990,6841           | 210 | 8  | 6     | 3     | 10182,5278           |
| 012                                         | 9  | 8     | 1     | 10975,2542           | 111 | 9  | 9     | 0     | 10990,6843           | 210 | 8  | 6     | 2     | 10182,5619           |
| 012                                         | 10 | 0     | 10    | 10054,7732           | 111 | 10 | 3     | 7     | 10321,3816           | 210 | 9  | 3     | 6     | 10015,0370           |
| 012                                         | 10 | 1     | 10    | 10054,8519           | 111 | 10 | 5     | 6     | 10496,9124           | 210 | 9  | 4     | 6     | 10084,3735           |
| 012                                         | 10 | 1     | 9     | 10242,9930           | 111 | 10 | 7     | 4     | 10860,0617           | 210 | 9  | 4     | 5     | 10099,4533           |
| 012                                         | 10 | 2     | 9     | 10243,9376           | 111 | 10 | 7     | 3     | 10859,8955           | 210 | 9  | 5     | 5     | 10227,8731           |
| 012                                         | 10 | 2     | 8     | 10397,9838           | 111 | 11 | 3     | 8     | 10584,4330           | 210 | 9  | 5     | 4     | 10228,2013           |
| 012                                         | 10 | 4     | 6     | 10586,0800           | 111 | 11 | 4     | 7     | 10667,2452           | 210 | 9  | 6     | 3     | 10396,7907           |
| 012                                         | 10 | 5     | 6     | 10689,3712           | 111 | 11 | 5     | 6     | 10768,6877           | 210 | 10 | 0     | 10    | 9816,0104            |
| 012                                         | 10 | 6     | 5     | 10833,4248           | 111 | 11 | 6     | 6     | 10919,6850           | 210 | 10 | 1     | 9     | 10007,1133           |
| 012                                         | 10 | 6     | 4     | 10833,8865           | 111 | 11 | 6     | 5     | 10918,8668           | 210 | 10 | 2     | 9     | 10009,6970           |
| 012                                         | 11 | 1     | 10    | 10467,6096           | 111 | 11 | 7     | 5     | 11123,9414           | 210 | 10 | 5     | 6     | 10465,0107           |
| 012                                         | 12 | 0     | 12    | 10479,5619           | 111 | 12 | 3     | 10    | 10712,9372           | 210 | 10 | 5     | 5     | 10468,0663           |
| 012                                         | 12 | 1     | 12    | 10479,3211           | 111 | 12 | 4     | 9     | 10882,2908           | 210 | 10 | 6     | 5     | 10634,0022           |
| 012                                         | 12 | 4     | 9     | 11081,5656           | 111 | 12 | 5     | 7     | 11060,1296           | 210 | 11 | 1     | 11    | 10016,9322           |
|                                             |    |       |       |                      | 111 | 13 | 1     | 12    | 10772,5476           | 210 | 11 | 1     | 10    | 10230,6531           |

| 1   | 2  | 3 | 4 | 5          | 6   | 7  | 8 | 9  | 10         | 11                      | 12 | 13 | 14 | 15         |
|-----|----|---|---|------------|-----|----|---|----|------------|-------------------------|----|----|----|------------|
| 031 | 7  | 7 | 1 | 10078,9266 | 111 | 13 | 2 | 11 | 10984,7632 | 210                     | 11 | 4  | 8  | 10565,0705 |
| 031 | 7  | 7 | 0 | 10078,9266 | 111 | 13 | 3 | 11 | 10989,8494 | 210                     | 12 | 3  | 10 | 10665,1526 |
| 031 | 8  | 5 | 4 | 9811,9331  | 111 | 13 | 3 | 10 | 11172,8911 | 210                     | 12 | 5  | 8  | 11007,0758 |
| 031 | 8  | 6 | 3 | 10032,7909 | 111 | 13 | 4 | 10 | 11175,4304 | 210                     | 13 | 0  | 13 | 10473,7324 |
| 031 | 8  | 6 | 2 | 10032,7960 | 111 | 13 | 4 | 9  | 11281,2883 | 210                     | 14 | 1  | 14 | 10727,4687 |
| 031 | 8  | 7 | 2 | 10274,1156 | 111 | 13 | 5 | 9  | 11342,3147 | <b>HD<sup>17</sup>O</b> |    |    |    |            |
| 031 | 8  | 7 | 1 | 10274,1162 | 111 | 14 | 1 | 13 | 11047,5963 | 012                     | 1  | 0  | 1  | 8611,6042  |
| 031 | 8  | 8 | 1 | 10524,3570 | 111 | 14 | 2 | 13 | 11047,7806 | 012                     | 2  | 1  | 2  | 8652,9592  |
| 031 | 8  | 8 | 0 | 10524,3570 | 111 | 14 | 2 | 12 | 11281,8604 | 012                     | 4  | 2  | 2  | 8816,1740  |
| 031 | 9  | 2 | 7 | 9610,1567  | 111 | 14 | 3 | 12 | 11284,2440 | 012                     | 4  | 3  | 2  | 8886,5140  |
| 031 | 9  | 5 | 4 | 10029,2148 | 111 | 15 | 0 | 15 | 11047,6475 | 012                     | 5  | 1  | 5  | 8816,0104  |
| 031 | 9  | 6 | 4 | 10250,7620 | 111 | 15 | 1 | 15 | 11047,6480 | 012                     | 5  | 2  | 3  | 8898,6550  |
| 031 | 9  | 6 | 3 | 10250,8652 | 111 | 15 | 1 | 14 | 11339,5894 | 012                     | 5  | 3  | 3  | 8964,1340  |
| 031 | 9  | 7 | 3 | 10492,7598 | 111 | 15 | 2 | 14 | 11339,5503 | 012                     | 5  | 4  | 2  | 9067,0490  |
| 031 | 9  | 7 | 2 | 10492,7546 | 111 | 16 | 0 | 16 | 11336,2014 | 012                     | 5  | 4  | 1  | 9067,0874  |
| 031 | 9  | 8 | 2 | 10742,7605 | 111 | 16 | 1 | 16 | 11336,2013 | 012                     | 6  | 2  | 4  | 8998,5127  |
| 031 | 9  | 8 | 1 | 10742,7607 | 111 | 17 | 0 | 17 | 11641,6789 | 012                     | 6  | 3  | 4  | 9057,2665  |
| 031 | 10 | 3 | 8 | 9887,8853  |     |    |   |    |            | 012                     | 6  | 3  | 3  | 9060,4978  |
| 031 | 10 | 5 | 6 | 10271,4101 | 130 | 7  | 3 | 5  | 9167,1205  | 012                     | 7  | 2  | 6  | 9079,0173  |
| 031 | 10 | 5 | 5 | 10271,6730 | 130 | 7  | 6 | 2  | 9785,7122  | 012                     | 7  | 3  | 5  | 9165,8625  |
| 031 | 10 | 6 | 4 | 10492,4717 | 130 | 7  | 6 | 1  | 9785,7115  | 012                     | 7  | 3  | 4  | 9173,1610  |
| 031 | 10 | 8 | 3 | 10984,0547 | 130 | 7  | 7 | 1  | 10043,7674 | 012                     | 8  | 0  | 8  | 9093,4850  |
| 031 | 10 | 8 | 2 | 10984,0545 | 130 | 7  | 7 | 0  | 10043,7672 | 012                     | 8  | 1  | 7  | 9187,6914  |
| 031 | 12 | 3 | 9 | 10554,3873 | 130 | 8  | 4 | 5  | 9535,7214  | 012                     | 9  | 0  | 9  | 9211,1706  |
| 031 | 12 | 5 | 7 | 10827,8418 | 130 | 8  | 4 | 4  | 9539,3660  | 012                     | 9  | 1  | 9  | 9211,2783  |
|     |    |   |   |            | 130 | 8  | 6 | 3  | 9978,8120  | 012                     | 10 | 0  | 10 | 9340,7703  |
| 041 | 0  | 0 | 0 | 9813,3487  | 130 | 9  | 3 | 7  | 9563,5387  |                         |    |    |    |            |
| 041 | 3  | 0 | 3 | 9950,3620  | 130 | 9  | 3 | 6  | 9625,4464  | 300                     | 9  | 2  | 8  | 8598,4696  |
|     |    |   |   |            | 130 | 9  | 5 | 5  | 9960,6950  | 300                     | 10 | 0  | 10 | 8624,1373  |
| 050 | 6  | 6 | 1 | 9348,2488  | 130 | 10 | 2 | 9  | 9596,4946  |                         |    |    |    |            |
| 050 | 6  | 6 | 0 | 9348,2454  | 130 | 11 | 2 | 9  | 10023,2532 |                         |    |    |    |            |
| 050 | 7  | 6 | 1 | 9520,3069  |     |    |   |    |            |                         |    |    |    |            |

## Заключение

С помощью Фурье-спектрометра Bruker IFS 125M и многоходовой кюветы зарегистрирован и исследован спектр поглощения паров воды, высокообогащенной кислородом  $^{17}\text{O}$ , в диапазоне  $7900\text{--}9500\text{ см}^{-1}$ . В спектре идентифицировано более 2500 переходов молекулы  $\text{H}_2^{17}\text{O}$  вместо 783, опубликованных ранее в работах [4–10]. Сравнение полученного списка экспериментальных положений линий с базой данных HITRAN2020 и списком W2020 позволило обнаружить ряд неточностей. Установлено, что спектроскопическая база HITRAN2020 требует дальнейшего уточнения и дополнения. Различия в положениях линий между экспериментом и HITRAN2020 и W2020 достигают  $0,15$  и  $0,5\text{ см}^{-1}$ .

Нужно отметить, что согласно ссылкам на источники данных в базе HITRAN2020 более 20300 частот переходов  $\text{H}_2^{16}\text{O}$ ,  $\text{H}_2^{17}\text{O}$  и  $\text{H}_2^{18}\text{O}$  взяты из списков W2020. Однако прямое сравнение этих частот переходов показывает, что часть из них не принадлежит изотопологам воды. Для 23 переходов не совпадают частоты; разница в частотах  $\Delta\nu = \nu^{\text{HITRAN}} - \nu^{\text{W2020}}$  достигает  $-0,645\text{ см}^{-1}$ . Для перехода  $\nu_1 + \nu_2 + \nu_3$  ( $20_{219} - 19_{218}$ ) в HITRAN2020 указано значение  $9055,06345\text{ см}^{-1}$  вместо  $9055,7084\text{ см}^{-1}$  в W2020. Для 34 переходов не совпадает КВ-идентификация верхнего уровня. Наконец, в HITRAN2020 включены 15 переходов, также помеченных как пе-

реходы из W2020, для которых в списке эмпирических уровней  $\text{H}_2^{16}\text{O}$  нет соответствующих энергий. Таким образом, в базе данных HITRAN2020 в исследуемом спектральном диапазоне содержится по крайней мере  $\sim 80$  переходов  $\text{H}_2^{16}\text{O}$ , частоты которых взяты из неустановленных источников.

Полученные в работе экспериментальные центры линий позволили определить 175 КВ-уровней энергии молекул  $\text{H}_2^{17}\text{O}$  и  $\text{HD}^{17}\text{O}$  и уточнить девять уровней энергий молекул  $\text{H}_2^{17}\text{O}$  и  $\text{H}_2^{16}\text{O}$ .

**Финансирование.** Работа выполнена в рамках государственного задания ИОА СО РАН.

## Список литературы

1. Tolchenov R.N., Tennyson J. Water line parameters for weak lines in the range  $7400\text{--}9600\text{ см}^{-1}$  // J. Mol. Spectrosc. 2005. V. 231. P. 23–27. DOI: 10.1016/j.jms.2004.12.001.
2. Schermaul R., Learner R.C.M., Canas A.A.D., Brault J.W., Polyansky O.L., Belmiloud D., Zobov N.F., Tennyson J. Weak line water vapor spectra in the region  $13200\text{--}15000\text{ см}^{-1}$  // J. Mol. Spectrosc. 2002. V. 211. P. 169–178. DOI: 10.1006/jmsp.2001.8498.
3. Liu A.-W., Hu S.-M., Camy-Peyret C., Mandin J.-Y., Naumenko O., Voronin B. Fourier transform absorption spectra of  $\text{H}_2^{17}\text{O}$  and  $\text{H}_2^{18}\text{O}$  in the  $8000\text{--}9400\text{ см}^{-1}$  spectral region // J. Mol. Spectrosc. 2006. V. 237. P. 53–62. DOI: 10.1016/j.jms.2006.02.008.
4. Régalia L., Oudot C., Mikhailenko S., Wang L., Thomas X., Jenouvrier A., Von der Heyden P. Water vapor

- line parameters from 6450 to 9400  $\text{cm}^{-1}$  // J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer. 2014. V. 136. P. 119–136. DOI: 10.1016/j.jqsrt.2013.11.019.
5. *Mikhailenko S., Kassi S., Wang L., Campargue A.* The absorption spectrum of water in the 1.25  $\mu\text{m}$  transparency window (7408–7920  $\text{cm}^{-1}$ ) // J. Mol. Spectrosc. 2011. V. 269. P. 92–103. DOI: 10.1016/j.jms.2011.05.005.
  6. *Campargue A., Mikhailenko S.N., Lohan B.G., Karlovets E.V., Mondelain D., Kassi S.* The absorption spectrum of water vapor in the 1.25  $\mu\text{m}$  atmospheric window (7911–8337  $\text{cm}^{-1}$ ) // J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer. 2015. V. 157. P. 135–152. DOI: 10.1016/j.jqsrt.2015.02.011.
  7. *Mondelain D., Mikhailenko S.N., Karlovets E.V., Béguer S., Kassi S., Campargue A.* Comb-assisted cavity ring down spectroscopy of  $^{17}\text{O}$  enriched water between 7443 and 7921  $\text{cm}^{-1}$  // J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer. 2017. V. 203. P. 206–212. DOI: 10.1016/j.jqsrt.2017.03.029.
  8. *Спектроскопия атмосферных газов.* URL: <http://spectra.iao.ru/molecules/simlaunch?mol=1> (дата обращения: 1.01.2022).
  9. *Partridge H., Schwenke D.W.* The determination of an accurate isotope dependent potential energy surface for water from extensive *ab initio* calculations and experimental data // J. Chem. Phys. 1997. V. 106. P. 4618–4639. DOI: 10.1063/1.473987.
  10. *Schwenke D.W., Partridge H.* Convergence testing of the analytic representation of an *ab initio* dipole moment function for water: Improved fitting yields improved intensities // J. Chem. Phys. 2000. V. 113. P. 6592–6597. DOI: 10.1063/1.1311392.
  11. *Mikhailenko S.N., Naumenko O.V., Nikitin A.V., Vasilenko I.A., Liu A.-W., Song K.-F., Ni H.-Y., Hu S.-M.* Absorption spectrum of deuterated water vapor enriched by  $^{18}\text{O}$  between 6000 and 9200  $\text{cm}^{-1}$  // J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer. 2012. V. 113. P. 653–669. DOI: 10.1016/j.jqsrt.2012.02.009.
  12. *Vasilchenko S.S., Mikhailenko S.N., Serdyukov V.I., Sinitsa L.N.* The absorption spectrum of  $\text{H}_2^{18}\text{O}$  in the range 13400–14460  $\text{cm}^{-1}$  // Opt. Spectrosc. 2012. V. 113. P. 451–455. DOI: 10.1134/S0030400X12110069.
  13. *Mikhailenko S.N., Serdyukov V.I., Sinitsa L.N.* LED-based Fourier transform spectroscopy of  $\text{H}_2^{18}\text{O}$  in the 15000–16000  $\text{cm}^{-1}$  range // J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer. 2015. V. 156. P. 36–46. DOI: 10.1016/j.jqsrt.2015.02.001.
  14. *Mikhailenko S.N., Serdyukov V.I., Sinitsa L.N.* Study of  $\text{H}_2^{16}\text{O}$  and  $\text{H}_2^{18}\text{O}$  absorption in the 16,460–17,200  $\text{cm}^{-1}$  range using LED-based Fourier transform spectroscopy // J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer. 2018. V. 217. P. 170–177. DOI: 10.1016/j.jqsrt.2018.05.032.
  15. *Bernstein H.J., Herzberg G.* Rotation-vibration spectra of diatomic and simple polyatomic molecules with long absorbing paths. I. The spectrum of fluorofom ( $\text{CHF}_3$ ) from 2.4 to 0.7  $\mu$  // J. Chem. Phys. 1948. V. 16. P. 30–38. DOI: 10.1063/1.1746650.
  16. *Сердюков В.И., Синица Л.Н., Васильченко С.С., Воронин Б.А.* Высокочувствительная Фурье-спектроскопия в высокочастотной области с небольшими многоходовыми кюветами // Оптика атмосфер. и океана. 2013. Т. 26, № 3. С. 240–246; *Serdyukov V.I., Sinitsa L.N., Vasil'chenko S.S., Voronin B.A.* High-sensitive Fourier-transform spectroscopy with short-base multipass absorption cells // Atmos. Ocean. Opt. 2013. V. 26. P. 329–336. DOI: 10.1134/S1024856013040131.
  17. *Васильченко С.С., Сердюков В.И.* Спектр излучения неона как репер частотной шкалы для спектрофотометров // Оптика атмосфер. и океана. 2012. Т. 25, № 9. С. 822–825; *Vasil'chenko S.S., Serdyukov V.I.* Emission spectrum of neon as a frequency reference for spectrophotometers // Atmos. Ocean. Opt. 2013. V. 26. P. 154–158. DOI: 10.1134/S1024856013020139.
  18. *Gordon I.E., Rothman L.S., Hargreaves R.J., Hasemi R., Karlovets E.V., Skinner F.M., Conway E.K., Hill C., Kochanov R.V., Tan Y., Wcislo P., Finenko A.A., Nelson K., Bernath P.F., Birk M., Boudon V., Campargue A., Chance K.V., Coustenis A., Drouin B.J., Flaud J.-M., Gamache R.R., Hodges J.T., Jacquemart D., Mlawer E.J., Nikitin A.V., Perevalov V.I., Rotger M., Tennyson J., Toon G.C., Tran H., Tyuterev V.G., Adkins E.M., Baker A., Barbe A., Canu E., Császár A.G., Dudaryonok A., Egorov O., Fleisher A.J., Fleurbaey H., Foltynowicz A., Furtenbacher T., Harrison J.J., Hartmann J.-M., Horneman V.-M., Huang X., Karman T., Karns J., Kassi S., Kleiner I., Kofman V., Kwabia-Tchana F., Lavrentieva N.N., Lee T.J., Long D.A., Lukashchuk A.A., Lyulin O.M., Makhnev V.Yu., Matt W., Massie S.T., Melosso M., Mikhailenko S.N., Mondelain D., Müller H.S.P., Naumenko O.V., Perrin A., Polyansky O.L., Raddaoui E., Raston P.L., Reed Z.D., Rey M., Richard C., Tóbiás R., Sadiék I., Schwenke D.W., Starikova E., Sung K., Tamassia F., Tashkun S.A., Vander Auwera J., Vasilenko I.A., Vigan A.A., Villanueva G.L., Vispoel B., Wagner G., Yachmenev A., Yurchenko S.N.* The HITRAN2020 molecular spectroscopic database // J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer. 2022. V. 277. 107949. DOI: 10.1016/j.jqsrt.2021.107949.
  19. *Никитин А.В., Кочанов Р.В.* Визуализация и идентификация спектров программой SpectraPlot // Оптика атмосфер. и океана. 2011. Т. 24, № 11. С. 936–941.
  20. *Hu S.-M., He S.-G., Zheng J.-J., Wang X.-H., Ding Y., Zhu Q.-S.* High-resolution analysis of the  $\nu_2 + 2\nu_3$  band of HDO // Chinese Physics. 2001. V. 10. P. 1021–1027. DOI: 10.1088/1009-1963/10/11/306.
  21. *Naumenko O.V., Voronina S., Hu S.-M.* High resolution Fourier transform spectrum of HDO in the 7500–8200  $\text{cm}^{-1}$  region: Revisited // J. Mol. Spectrosc. 2004. V. 227. P. 151–157. DOI: 10.1016/j.jms.2004.06.002.
  22. *Régalia L., Thomas X., Rennesson T., Mikhailenko S.* Line parameters of water vapour enriched by  $^{18}\text{O}$  from 6525 to 8011  $\text{cm}^{-1}$  // J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer. 2019. V. 235. P. 257–271. DOI: 10.1016/j.jqsrt.2019.06.031.
  23. *Régalia L., Mikhailenko S.* Spectral line parameters of  $\text{H}_2^{18}\text{O}$  molecule in the 8050–9300  $\text{cm}^{-1}$  region // Abstracts of Reports of XIX Symposium on High Resolution Molecular Spectroscopy HighRus-2019, Tomsk, 2019. P. 37. URL: [https://symp.iao.ru/files/symp/hrms/19/ru/abstr\\_10531.pdf](https://symp.iao.ru/files/symp/hrms/19/ru/abstr_10531.pdf).
  24. *Furtenbacher T., Tóbiás R., Tennyson J., Polyansky O.L., Kyuberis A.A., Ovsyannikov R.I., Zobov N.F., Császár A.G.* The W2020 database of validated rovibrational experimental transitions and empirical energy levels of water isotopologues. II.  $\text{H}_2^{17}\text{O}$  and  $\text{H}_2^{18}\text{O}$  with an update to  $\text{H}_2^{16}\text{O}$  // J. Phys. Chem. Ref. Data. 2020. V. 49. P. 043103. DOI: 10.1063/5.0030680.
  25. *Бубукина И.И., Зобов Н.Ф., Полянский О.Л., Шурин С.В., Юрченко С.Н.* Оптимизированная полумпирическая поверхность потенциальной энергии  $\text{H}_2^{16}\text{O}$  до 26000  $\text{cm}^{-1}$  // Оптика и спектроскопия. 2011. Т. 110, № 2. С. 186–193.

26. Mikhailenko S.N., Kassi S., Mondelain D., Gamache R.R., Campargue A. A spectroscopic database for water vapor between 5850 and 8340  $\text{cm}^{-1}$  // J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer. 2019. V. 179. P. 198–216. DOI: 10.1016/j.jqsrt.2016.03.035.
27. Mikhailenko S., Kassi S., Mondelain D., Campargue A. Water vapor absorption between 5690 and 8340  $\text{cm}^{-1}$ : Accurate empirical line centers and validation tests of calculated line intensities // J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer. 2020. V. 245. P. 106840. DOI: 10.1016/j.jqsrt.2020.106840.
28. Kyuberis A.A., Zobov N.F., Naumenko O.V., Voronin B.A., Polyansky O.L., Lodi L., Liu A., Hu S.-M., Tennyson J. Room temperature line lists for deuterated water // J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer. 2017. V. 203. P. 175–185. DOI: 10.1016/j.jqsrt.2017.06.026.
29. Tennyson J., Bernath P.F., Brown L.R., Campargue A., Carleer M.R., Császár A.G., Gamache R.R., Hodges J.T., Jenouvrier A., Naumenko O.V., Polyansky O.L., Rothman L.S., Toth R.A., Vandaele A.C., Zobov N.F., Daumont L., Fazliev A.Z., Furtenbacher T., Gordon I.E., Mikhailenko S.N., Shirin S.V. IUPAC critical evaluation of the rotational-vibrational spectra of water vapor. Part I. Energy levels and transition wavenumbers for  $\text{H}_2^{17}\text{O}$  and  $\text{H}_2^{18}\text{O}$  // J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer. 2009. V. 110. P. 573–596. DOI: 10.1016/j.jqsrt.2009.02.014.
30. Lodi L., Tennyson J. Line lists for  $\text{H}_2^{18}\text{O}$  and  $\text{H}_2^{17}\text{O}$  based on empirical line positions and *ab initio* intensities // J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer. 2012. V. 113. P. 850–858. DOI: 10.1016/j.jqsrt.2012.02.023.
31. Polyansky O.L., Kyuberis A.A., Lodi L., Tennyson J., Yurchenko S.N., Ovsyannikov R.I., Zobov N.F. ExoMol molecular line lists XIX: High-accuracy computed hot line lists for  $\text{H}_2^{16}\text{O}$  and  $\text{H}_2^{18}\text{O}$  // Mon. R. Astron. Soc. 2017. V. 466. P. 1363–1371. DOI: 10.1093/mnras/stw3125.

**V.I. Serdyukov, L.N. Simitsa, S.N. Mikhailenko. Absorption spectrum of  $\text{H}_2^{17}\text{O}$  between 7900 and 9500  $\text{cm}^{-1}$ .**

Absorption spectrum of water vapor highly enriched with  $^{17}\text{O}$  (more than 80%) was recorded using a Bruker IFS 125M Fourier spectrometer in the 7900–9500  $\text{cm}^{-1}$  range at room temperature. The spectrum was recorded at a pressure of about 24 mbar with a spectral resolution of 0.02  $\text{cm}^{-1}$ . About 6300 lines with a minimal intensity value of  $5.0 \cdot 10^{-27}$   $\text{cm}^2/\text{molecule}$  are found in the recorded spectrum. 4835 recorded lines are assigned to 5185 transitions of five water isotopologues ( $\text{H}_2^{16}\text{O}$ ,  $\text{H}_2^{17}\text{O}$ ,  $\text{H}_2^{18}\text{O}$ ,  $\text{HD}^{16}\text{O}$ , and  $\text{HD}^{17}\text{O}$ ).  $\text{H}_2^{17}\text{O}$  lines are assigned to 14 vibration bands. Most of them are the lines of the  $\nu_2 + 2\nu_3$ ,  $3\nu_2 + \nu_3$ ,  $\nu_1 + \nu_2 + \nu_3$ ,  $\nu_1 + 3\nu_2$ , and  $2\nu_1 + \nu_2$  bands. The lines of the  $\nu_1 + 2\nu_2 + \nu_3 - \nu_2$ ,  $2\nu_1 + \nu_3 - \nu_2$ , and  $2\nu_1 + 2\nu_2 - \nu_2$  hot bands are assigned for the first time. The assigned lines allow us to determine 153 new vibration-rotation energies of nine vibrational states of the  $\text{H}_2^{17}\text{O}$  molecule and 22 energies of two states of the  $\text{HD}^{17}\text{O}$  molecule. The data obtained are compared with the results of previous studies, the HITRAN2020 spectroscopic database, and W2020 list.