

СПЕКТРОСКОПИЯ ОКРУЖАЮЩЕЙ СРЕДЫ

УДК 535.338.31; 539.194

Светодиодная Фурье-спектроскопия H_2^{16}O в диапазоне 14800–15500 cm^{-1}

И.А. Василенко✉, Л.Н. Сеница, В.И. Сердюков*

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

Поступила в редакцию 25.09.2023;
после доработки 25.10.2023;
принята к печати 26.10.2023

Исследован Фурье-спектр поглощения паров воды в области 14800–15500 cm^{-1} с разрешением 0,05 cm^{-1} и длиной оптического пути 3480 см. Получен подробный список, состоящий из 906 идентифицированных линий поглощения H_2^{16}O , а также набор из 426 уровней энергии, принадлежащих 19 колебательным состояниям. Пятьдесят два колебательно-вращательных уровня энергии были определены впервые, 64 исправлены. Проведено сравнение с имеющимися в литературе данными. Погрешность положений хорошо разрешенных одиночных линий с интенсивностью 10^{-26} cm^{-1} составляет 0,002 cm^{-1} , а интенсивностей — 10–15%.

Ключевые слова: H_2^{16}O , водяной пар, Фурье-спектр, уровни энергии, колебательно-вращательные переходы; water vapor, LED-based Fourier transform spectroscopy, energy levels, vibrational-rotational transitions.

Введение

Исследования спектров водяного пара до сих пор актуальны в связи с необходимостью понимания и моделирования процессов, происходящих в атмосфере Земли и других планет. Данные об изотопологах воды, размещенные в известных базах данных HITRAN [1] и GEISA [2], содержат в том числе информацию, которая требует обновления и уточнения. Диапазон 14800–15500 cm^{-1} экспериментально исследовался только в двух публикациях [3, 4]. Авторами работы [3] проведен анализ Фурье-спектра поглощения в диапазоне 13200–16500 cm^{-1} , зарегистрированного в Национальной солнечной обсерватории в Аризоне на спектрометре с многоходовой кюветой 120 м, в результате чего были идентифицированы 115 переходов. В работе [5] был проведен повторный анализ спектра из [3], благодаря чему было идентифицировано 193 колебательно-вращательных перехода, при этом для части переходов идентификация была исправлена. Группой авторов [4] в Университете Реймса в 1999 г. был зарегистрирован Фурье-спектр поглощения в диапазоне 13100–21400 cm^{-1} с разрешением 0,06 cm^{-1} и длиной поглощающего пути 1200 м. Спектр регистрировался в течение 12 ч, что позволило достичь отношения сигнал/шум $\text{SNR} = 3000$. Благодаря новым данным в интересующем нас диапазоне были

определены 199 колебательно-вращательных переходов. В свою очередь, в работе 2005 г. авторы [6] с помощью вариационного расчета провели новый анализ спектра [4], что позволило идентифицировать 201 колебательно-вращательный переход в диапазоне 14800–15500 cm^{-1} . Отдельные переходы H_2^{16}O наблюдались в работе [7] при регистрации спектра поглощения H_2^{18}O .

Все остальные публикации содержат расчетные данные [8–12], которые так или иначе связаны с двумя экспериментальными работами [3, 4].

Цель настоящего исследования — получение детальной спектроскопической информации о поглощении водяного пара в диапазоне 14800–15500 cm^{-1} на высокочувствительном Фурье-спектрометре.

Эксперимент

Спектр поглощения водяного пара зарегистрирован в диапазоне 14800–15500 cm^{-1} на Фурье-спектрометре Bruker IFS125M с многоходовой кюветой 60 см при длине оптического пути 3480 см. Использование в качестве источника излучения светодиода 3GR-R с максимумом излучения в области 15000 cm^{-1} позволило добиться высокого SNR для регистрации очень слабых линий. Радиус апертуры составил 1,1 см. Спектры регистрировались при комнатной температуре ($297 \pm 1 \text{ K}$), контроль давления проводился датчиком АИР-20М с диапазоном измерения 0–100 кПа и погрешностью 0,1%. Доплеровская ширина линий H_2^{16}O в этом диапазоне не составляет 0,044 cm^{-1} , спектральное разрешение —

* Ирина Александровна Василенко (via@iao.ru); Леонид Никифорович Сеница (sln@iao.ru); Виктор Иванович Сердюков (serd49@mail.ru).

0,05 см⁻¹, давление исследуемого газа — 26 мбар. В выбранных условиях при усреднении 9792 сканов SNR = 10000. Это соответствует минимально регистрируемому (пороговому) коэффициенту поглощения $K_{\text{пор}} = 1 \cdot 10^{-7}$ см⁻¹. Температура в помещении для измерений объемом 75 м³ стабилизировалась с помощью кондиционера Midea MSE-24HR с погрешностью менее 1 К, что позволяло проводить длительные (до 9 сут) измерения спектра. Условия эксперимента приведены ниже.

Спектральный диапазон 14800–15500 см⁻¹
 Длина поглощающего пути 3480 см
 Давление паров воды 26,0 мбар
 Температура кюветы 298 ± 1 К
 Спектральное разрешение 0,05 см⁻¹
 Апертура входного отверстия 1,1 мм
 Число интерферограмм 9792
 Источник излучения светодиод 3GR-R

Экспериментальный спектр пропускания и его фрагмент показаны на рис. 1.

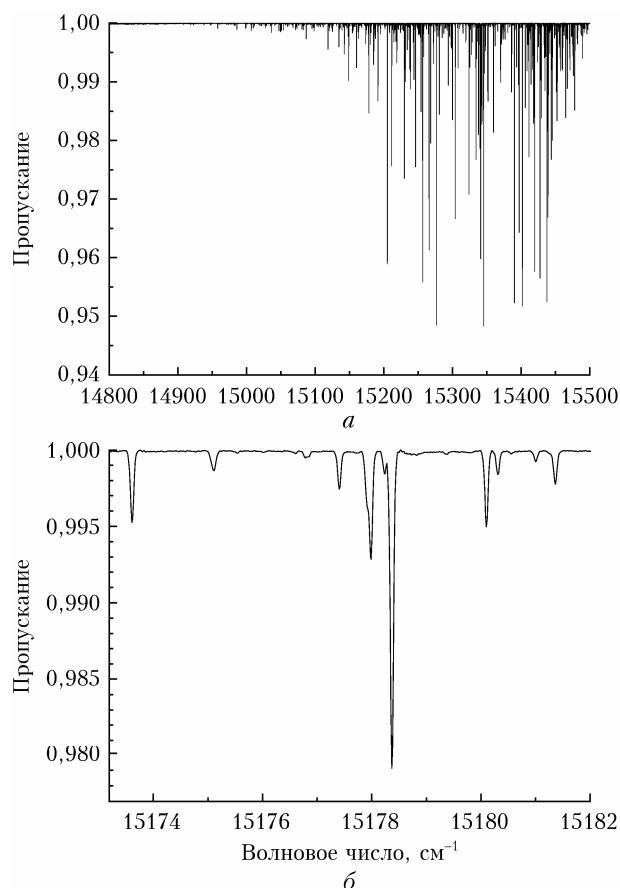


Рис. 1. Спектр пропускания H₂¹⁶O (а) и отдельный его участок (б)

Видно, что спектр в исследуемой области слабый, поглощение в центре наиболее сильных линий не превышает 5%.

Составление списка линий

Определение параметров спектральных линий проводилось программой MFS [13]. С помощью контура Фойгта определены положения и интенсивности 906 и 130 линий поглощения, принадлежащих водяному пару и HD¹⁶O соответственно. С использованием интенсивностей линий поглощения базы данных HITRAN [1] определена концентрация HD¹⁶O в исследуемой смеси, которая составила 4%. Калибровка частотной шкалы проведена по линиям H₂¹⁶O, центры которых взяты из [1]. Параметр калибровки (ε) для волновых чисел вычислен с помощью 134 хорошо изолированных одиночных линий водяного пара по следующей формуле:

$$\nu_{\text{эксп}} = \nu_1 + \nu_1 \varepsilon,$$

где $\varepsilon = (\nu_{\text{HITRAN}} - \nu_{\text{данная работа}}) / \nu_{\text{HITRAN}}$.

Оказалось, что калибровочный фактор можно представить функцией

$$\varepsilon = -3,55172\text{E-}9 \cdot \nu_1 + 0,0000535845,$$

где ν_1 — волновое число соответствующей линии из первоначального списка линий; $\nu_{\text{эксп}}$ — экспериментальная частота перехода. На рис. 2 приведено сравнение волновых чисел из базы данных [1] и волновых чисел, определенных в настоящей работе до калибровки.

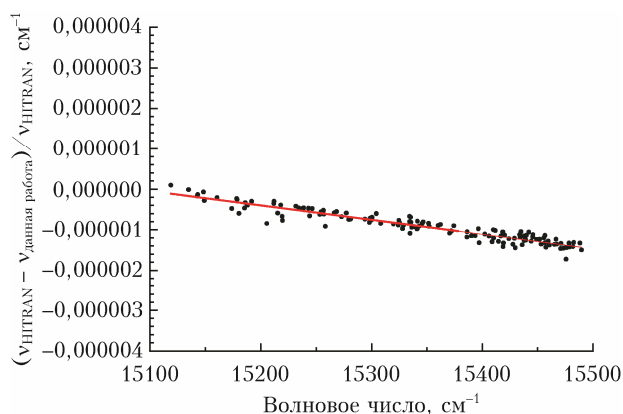


Рис. 2. Сравнение положений линий из базы данных HITRAN [1] и волновых чисел из настоящей работы до калибровки

Среднеквадратичное отклонение (СКО) частот измеренных линий от приведенных в HITRAN для одиночных изолированных линий с интенсивностью $S > 1,78\text{E-}24$ см/молек. составило 0,001 см⁻¹, что и определяет погрешность измерения центров линий.

Погрешности измерения S определяются точностью измерения параметров исследуемого газа в кювете (длина пути, давления и температуры), погрешностями подгонки контура линии и расчета парциального давления. В нашем случае вклад ошибок измерения длины пути, давления и температуры в ошибку интенсивности не превышает 1%. Более частой причиной ошибок при аппроксимации контура линии является спектральный шум, в данной

работе он появляется от источника излучения и на порядок превышает шумы регистрирующей системы. Светодиоды высокой яркости, используемые в нашем исследовании, имеют уровень шума в три раза меньший, чем у галогеновой лампы. Как видно из рис. 1, б, в регистрируемом спектре он не превышает $2 \cdot 10^{-4}$. Для сильных линий с $S = 10^{-22} \dots 10^{-24}$ см/молек. погрешность измерения интенсивностей линий составляет 1%, а для слабых линий с $S < 10^{-24}$ см/молек. — больше 5%. Ошибки, возникающие при подборе профиля спектральной линии, варьируются от 1% для сильных линий до 8% для слабых. При измерении интенсивностей линий Фурье-спектрометром, используя в качестве источников излучения светодиоды высокой яркости, в области высоких частот, где интенсивность линий поглощения мала, правильное определение базовой линии имеет особое значение, так как поглощение в центре слабых линий близко к 1%. Коррекция базовой линии проводилась по 98 опорным линиям молекулы H_2^{16}O с известными значениями интенсивности, которые были взяты из [1]. Это дает общую погрешность измерения интенсивностей 8 и 15% для сильных и слабых одиночных линий соответственно.

Идентификация и анализ спектра

С помощью вариационного расчета [14] идентифицированы 906 переходов, принадлежащих молекуле H_2^{16}O , интенсивности которых варьировались от $2,49\text{E}-24$ до $2,67\text{E}-28$ см/молек. Полный список переходов представлен по ссылке <https://disk.yandex.ru/d/xGVOIliNvn8v1w>.

Среднеквадратичное отклонение от соответствующих значений в базе данных HITRAN для 589 центров одиночных линий — $0,002 \text{ см}^{-1}$ при максимальном отклонении $0,007 \text{ см}^{-1}$. Для 87 линий абсолютные значения разностей частот переходов превышают $0,01 \text{ см}^{-1}$. В то же время СКО для 596 центров линий от соответствующих значений в базе данных W2020 [15] составляет $0,002 \text{ см}^{-1}$ при максимальном отклонении $0,005 \text{ см}^{-1}$, для 85 линий абсолютные значения разностей частот больше $0,01 \text{ см}^{-1}$. Большое количество таких линий обусловлено как наличием перекрывающихся линий, так и тем, что и в HITRAN, и в W2020 переходы являются эмпирическими. Как упоминалось выше, данному диапазону посвящены всего две экспериментальные работы, точность положений линий в которых оценивается на уровне $0,002 \text{ см}^{-1}$.

Для определения уровней энергии мы использовали вариационный расчет 2020 г. [14]. На рис. 3 представлены отклонения расчетных уровней энергии от экспериментальных (далее ΔE) для четырех колебательных полос. Видно, что значения ΔE варьируются около нуля при $J < 6$ и увеличиваются с ростом J . Максимальные отклонения энергии уровней достигают $0,04 \text{ см}^{-1}$ для состояния (311) и $-0,0839 \text{ см}^{-1}$ для состояния (231).

Если сравнить ΔE , полученные с использованием вариационных расчетов других авторов 2000

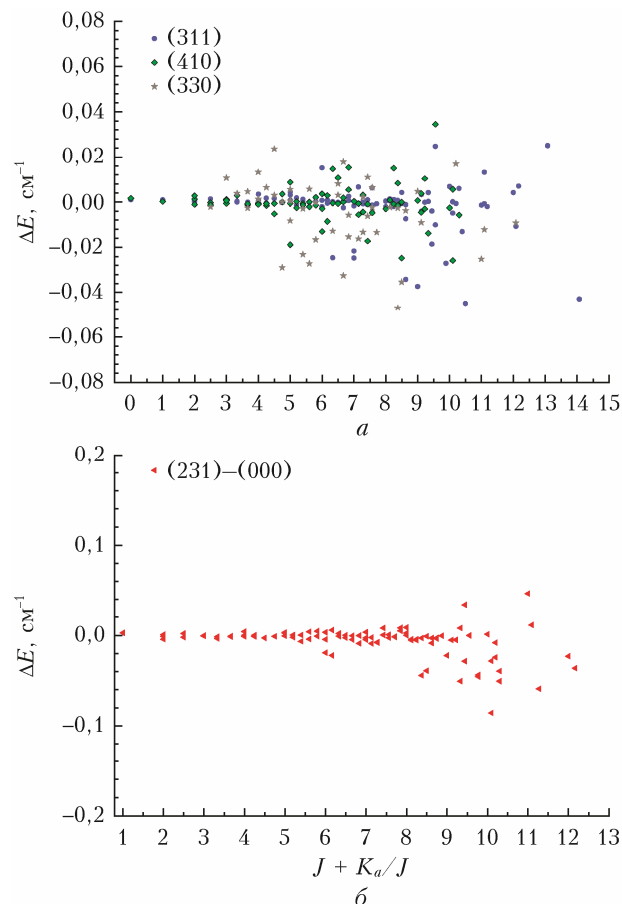


Рис. 3. Отклонение расчетных уровней энергии [14] от экспериментальных для колебательных состояний (311), (330), (410) (а) и (231) (б) (см. цветной рисунок на сайте <http://iao.ru/ru/content/vol.37-2024/iss.03>)

и 2018 гг., то, во-первых, можно увидеть эволюцию вариационных расчетов для молекулы воды, а во-вторых, оценить качество расчета, опубликованного в 2020 г. Так, на рис. 4, а представлен ΔE для расчета 2000 г. [16, 17]. Центр полосы (231)–(000) отклоняется на $0,006 \text{ см}^{-1}$, а для полос (311)–(000), (410)–(000), (330)–(000) — на $0,115$; $0,093$ и $0,054 \text{ см}^{-1}$ соответственно при максимальных отклонениях $0,480$ и $-0,455 \text{ см}^{-1}$ для полосы (231)–(000). Отклонения регулярные, но растут начиная с малых значений $J = 4 \dots 5$. Вариационный расчет [12] (2018 г.) является более точным, чем [16, 17] (рис. 4, б). Так, для центров полос (231)–(000), (311)–(000), (410)–(000) и (330)–(000) $\Delta E = 0,022$; $0,008$; $0,012$ и $0,013 \text{ см}^{-1}$ соответственно при максимальных $\Delta E = 0,079 \text{ см}^{-1}$ для полосы (311). Стоит отметить, что расчет 2018 г. содержит ограниченное число переходов, в частности отсутствуют переходы с высокими J .

Можно сделать вывод, что на данный момент вариационный расчет [14], который мы использовали для идентификации, наиболее точен. Однако из рис. 3 видно, что абсолютные значения ΔE для состояния (231)–(000), быстро увеличиваются начиная с $J = 7$, что может объясняться недостаточной точностью расчета.

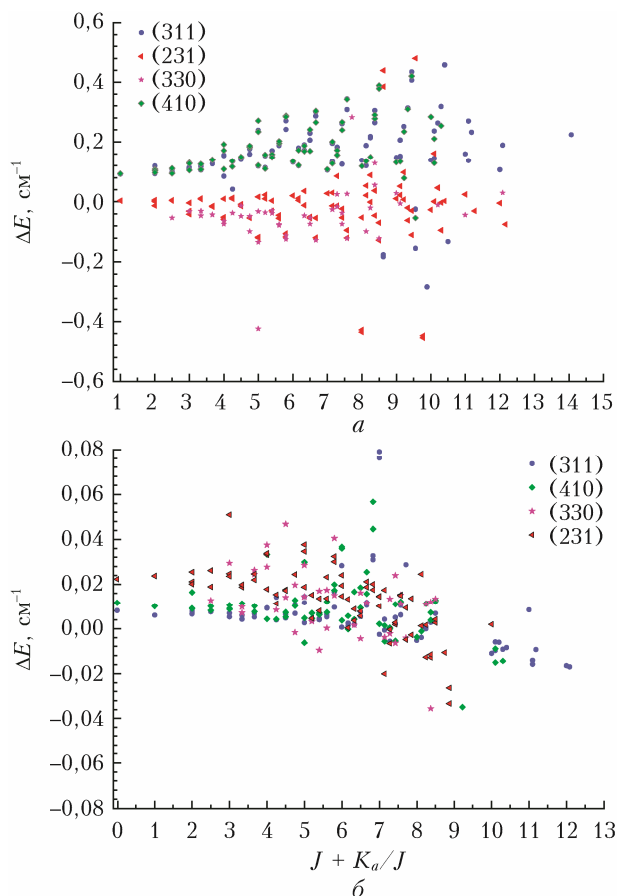


Рис. 4. Сравнение точности вариационных расчетов для молекулы H_2^{16}O : расчет [16, 17] (а); расчет [12] (б) (см. цветной рисунок на сайте <http://iao.ru/ru/content/vol.37-2024/iss.03>)

В результате, используя положения идентифицированных линий, получен набор из 426 колебательно-вращательных уровней энергии, из них 52 новых и 54 исправленных, принадлежащих 19 колебательным состояниям. Определены центры семи колебательных состояний (311)–(000), (410)–(000), (231)–

(000), (330)–(000), (033)–(000), (132)–(000) и (052)–(000). Суммарная информация, полученная из анализа спектра водяного пара, представлена в табл. 1.

При сравнении 426 уровней энергии из настоящей работы с данными из работ [15] и [18] получено СКО = 0,0038 и 0,0037 см^{-1} для 319 и 314 уровней энергии соответственно. При этом абсолютное значение СКО превысило 0,01 см^{-1} для 57 уровней энергии из [15] и для 55 уровней из [18], поэтому они были исключены из сравнения. В ряде случаев уровни энергии из [15] и [18] сильно отличаются. В частности, уровень (311)–(000) [2 11 12] определен в [15] с ошибкой 1,418 см^{-1} , а в [18] этот уровень отклоняется от эксперимента на 0,007 см^{-1} . Это можно объяснить тем, что значение данного уровня в работе [15] определено из набора горячих переходов (имеющих гораздо более низкую точность, чем переходы, определенные из спектров комнатной температуры), а в [18] — из экспериментальной работы [5]. Большое отклонение, порядка 3,29 см^{-1} , было найдено для уровня энергии (311) [14 1 13] из [18], в то время как в списке [15] данного уровня нет. Вероятно, он имеет другой набор квантовых чисел. Авторы [15] рекомендуют использовать их список как более точный и полный, поскольку база данных [18] была обновлена в 2018 г. В целом мы согласны с данным утверждением, но рекомендуем использовать новые значения уровней энергии, определенные в настоящей работе, как более точные. Полный список уровней энергии вместе со сравнением доступен по ссылке <https://disk.yandex.ru/d/4Mzo1v10c3hFDw>. Список новых уровней энергии представлен в табл. 2.

Теперь детально сравним интенсивности линий поглощения H_2^{16}O , зарегистрированных в нашей работе, с данными [1, 5] и вариационным расчетом [14].

Интенсивности из [14] для полос (311)–(000), (410)–(000), (330)–(000), (033)–(000), (132)–(000),

Таблица 1

Энергии колебательных состояний H_2^{16}O , полученные из анализа спектра в настоящей работе

$\nu_1 \nu_2 \nu_3$	$E_{\text{колеб}}, \text{см}^{-1}$		Количество уровней энергии Всего/новые/исправленные	J_{max}	$K_{A_{\text{max}}}$
	Настоящая работа	[1]			
(311)	15347,956	15347,96	100/5/7	13	5
(410)	15344,504	15344,50	74/1/6	10	5
(231)	15119,028	15119,03	102/17/4	11	7
(330)	15108,23*	15108,24	47/10/9	8	5
(151)		14647,98	19/5/4	9	7
(033)	15534,70*	15534,71	36/0/6	8	3
(132)	15377,73*	15377,70	19/2/5	8	4
(052)	14881,36*	14881,36	5/3/1	8	4
(250)			6/2/1	10	5
(212)		15742,80	4/1/1	8	4
Другие состояния			15/6/5	12	5

Примечание. J_{max} — максимальное значение полного углового момента, $K_{A_{\text{max}}}$ — максимальное значение проекции полного углового момента на ось симметрии для вытянутого волчка, * центры полос, определенные из плавных зависимостей отклонений расчетных уровней от экспериментальных для $K_A = 0$.

Новые уровни энергии, определенные в настоящей работе

$\nu_1 \nu_2 \nu_3$	J	K_A	K_C	$E, \text{ cm}^{-1}$	N	$\nu_1 \nu_2 \nu_3$	J	K_A	K_C	$E, \text{ cm}^{-1}$	N	$\nu_1 \nu_2 \nu_3$	J	K_A	K_C	$E, \text{ cm}^{-1}$	N
(090)	8	5	4	16147,0254	1	(231)	10	3	8	16581,8054	1	(151)	7	4	4	15905,3813	1
(212)	8	5	4	16348,8698	1	(231)	10	3	7	16670,7849	1	(151)	8	4	4	16086,2291	1
(0110)	4	0	4	15560,4054	1	(231)	11	0	11	16355,8347	1	(151)	8	6	3	16623,8793	1
(311)	8	7	1	16798,1136	2	(231)	11	1	11	16359,0931	1	(151)	9	6	4	16835,0283	1
(311)	8	7	2	16798,1113	2	(231)	11	3	9	16827,2810	1	(151)	9	6	3	16835,1987	1
(311)	9	5	4	16703,3240	1	(231)	12	0	12	16569,5916	1	(250)	9	3	7	16022,2298	1
(311)	10	5	5	16939,1167	2	(231)	12	2	10	17072,0752	1	(250)	10	3	8	16241,1654	1
(311)	14	1	13	17533,2590	1	(410)	9	5	4	16703,3956	1	(052)	3	1	2	15059,2123	1
(231)	8	3	6	16160,2238	1	(330)	3	2	2	15342,3028	2	(052)	7	4	3	16083,7585	1
(231)	8	4	5	16315,6124	2	(330)	4	2	2	15446,3607	1	(052)	8	6	3	16798,0899	1
(231)	8	6	3	16695,9595	1	(330)	4	3	1	15552,8162	1	(081)	3	1	2	15467,8152	1
(231)	9	3	6	16423,1126	1	(330)	8	3	6	16155,2940	2	(081)	8	1	8	16034,6068	1
(231)	9	4	5	16541,2367	1	(330)	8	4	5	16312,2300	1	(312)	11	0	11	16574,4089	1
(231)	9	5	5	16795,9266	1	(330)	9	1	9	15968,3598	1	(312)	12	2	11	17016,2430	2
(231)	9	7	3	17006,8721	1	(330)	10	2	9	16382,9677	1	(132)	7	1	6	16083,1020	1
(231)	9	7	2	17006,8674	1	(330)	11	0	11	16346,4795	1	(132)	8	1	7	16171,1380	1
(231)	10	2	9	16394,8322	1	(330)	11	1	11	16343,4010	1						
(231)	10	2	8	16575,6834	1	(330)	12	1	12	16556,4213	1						

Примечание. $\nu_1 \nu_2 \nu_3$ — колебательные квантовые числа; $J K_A K_C$ — вращательные квантовые числа; E — энергия, определенная впервые из экспериментальных переходов; N — количество переходов, участвующих в образовании соответствующего уровня энергии.

и (052)–(000) хорошо согласуются с экспериментом, что отражено на рис. 5, а. Средневзвешенное отклонение интенсивностей линий этих переходов, которое рассчитывается по формуле $S_{\text{эксп}}/S_{\text{расч}} - 1$, равно 0,04. В то же время средневзвешенное отклонение интенсивностей полосы (231)–(000) (для $S \geq 1\text{E-}26 \text{ см}^2/\text{молек.}$) равно 0,27.

Рассогласование расчетных и экспериментальных интенсивностей для изгибных колебаний ν_2 отмечалось в [15], в частности авторы сделали заключение, что урезанный базисный набор и менее плотная сетка значений дипольных моментов снижают точность расчетных интенсивностей. С другой стороны, сравнение экспериментальных интенсивностей с данными из работ [1, 6] демонстрирует их хорошее совпадение для всех колебательных полос, включая полосу (231)–(000) (см. рис. 5, б и в).

В диапазоне 14800–15500 см^{-1} в базе данных HITRAN2020 [1] используют расчетные интенсивности из статьи [14], но при сравнении с нашими экспериментальными данными мы обнаружили, что интенсивности всех полос, в том числе и полосы (231)–(000), хорошо согласуются с [1], что отражено на рис. 5, б. Средневзвешенное отклонение интенсивностей (для $S \geq 1\text{E-}26 \text{ см}^2/\text{молек.}$) переходов для полосы (231)–(000) равно 0,04, а для остальных полос — 0,01. Если обратиться к ссылкам из HITRAN, то можно увидеть, что авторы ссылаются на расчет *ab initio*, уточненный экспериментальными данными, ссылок на которые нет. Таким образом, можно сделать вывод, что новый расчет (Conway 2020 [14]) нужно использовать для определения центров переходов, но при идентификации необходимо учитывать неточности интенсивностей, особенно для колебательно-вращательных полос с высокими изгибными колебаниями ν_2 .

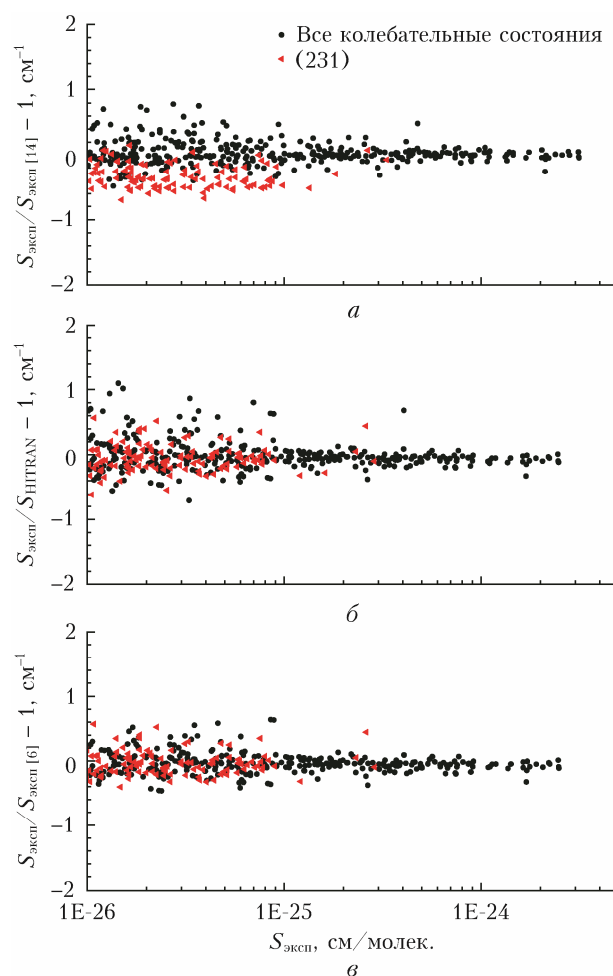


Рис. 5. Сравнение интенсивностей колебательно-вращательных линий H_2^{16}O , измеренных в настоящей работе, с данными [14] (а), HITRAN2020 [1] (б), экспериментальными данными [6] (в) (см. цветной рисунок на сайте <http://iao.ru/ru/content/vol.37-2024/iss.03>)

Заклучение

Зарегистрирован спектр поглощения молекулы H_2^{16}O на Фурье-спектрометре в области 14800–15500 cm^{-1} . Проанализирован список из 903 линий поглощения молекулы с использованием высокоточных вариационных расчетов. В ходе исследования определены 426 уровней энергии, из них 52 новых и 54 исправленных. Уточнены значения энергии семи колебательных состояний. Сравнение наблюдаемых интенсивностей переходов с известными вариационными расчетами выявило проблемы в их несогласованности для полосы (231)–(000). Результаты, полученные в этой работе, будут полезны как для корректировки данных HITRAN, так и для уточнения поверхности дипольного момента молекулы воды и дальнейшей оптимизации поверхности потенциальной энергии.

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

Список литературы

1. Gordon I.E., Rothman L.S., Hargreaves R.J., Hashemi 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., Cane 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., Sadiek I., Schwenke D.W., Starikova E., Sung K., Tamassia F., Tashkun S.A., Vander Auwera J., Vasilenko I.A., Vidasin 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. P. 107949. DOI: 10.1016/j.jqsrt.2021.107949.
2. Delahaye T., Armante R., Scott N.A., Jacquinet-Husson N., Chédin A., Crépeau L., Crevoisier C., Douet V., Perrin A., Barbe A., Boudon V., Campargue A., Couderc L.H., Ebert V., Flaud J.-M., Gamache R.R., Jacquemart D., Jolly A., Kwabia-Tchana F., Kyuberis A., Li G., Lyulin O.M., Manceron L., Mikhailenko S., Moazzen-Ahmadi N., Müller H.S.P., Naumenko O.V., Nikitin A., Perevalov V.I., Richard C., Starikova E., Tashkun S.A., Tyuterev V.G., Vander Auwera J., Vispoel B., Yachmenev A., Yurchenko S. The 2020 edition of the GEISA spectroscopic database // *J. Mol. Spectrosc.* 2021. V. 380. P. 111510.
3. Mandin J.-Y., Chevillard J.-P., Camy-Peyret C., Flaud J.M. The high-resolution spectrum of water vapor between 13200 and 16500 cm^{-1} // *J. Mol. Spectrosc.* 1986. V. 116. P. 167–190.
4. Carleer M., Jenouvrier A., Vandaele A.-C., Bernath P.F., Mérienne M.F., Colin R., Zobov N.F., Polyansky O.L., Tennyson J., Savin V.A. The near infrared, visible, and near ultraviolet overtone spectrum of water // *J. Chem. Phys.* 1999. V. 111. P. 2444–2450. DOI: 10.1063/1.479859.
5. Polyansky O.L., Zobov N.F., Viti S., Tennyson J. Water vapor line assignments in the near infrared // *J. Mol. Spectrosc.* 1998. V. 189. P. 291–300.
6. Tolchenov N., Naumenko O., Zobov N.F., Shirin S.V., Polyansky O.L., Tennyson J., Carleer M., Coheur P.-F., Fally S., Jenouvrier A., Vandaele A.C. Water vapour line assignments in the 9250–26000 cm^{-1} frequency range // *J. Mol. Spectrosc.* 2005. V. 233. P. 68–76.
7. Mikhailenko S.N., Serdyukov V.I., Sinita L.N. LED-based Fourier transform spectroscopy of H_2^{18}O in the 15.000–16.000 cm^{-1} range // *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer*. 2015. V. 156. P. 36–46. DOI: 10.1016/j.jqsrt.2015.02.001.
8. Barber R.J., Tennyson J., Harris G.J., Tolchenov R.N. A high accuracy computed water line list // *Mon. Not. R. Astron. Soc.* 2006. V. 368. P. 1087–1094. DOI: 10.1111/j.1365-2966.2006.10184.x.
9. Lodi L., Tolchenov R.N., Tennyson J., Lynas-Gray A.E., Shirin S.V., Zobov N.F., Polyansky O.L., Császár A.G., Joost N.P. van Stralen, Visscher L. A new *ab initio* ground-state dipole moment surface for the water molecule // *J. Chem. Phys.* 2008. V. 128. P. 044304-044304-11. DOI: 10.1063/1.2817606.
10. Bubukina I.I., Polyansky O.L., Zobov N.F., Yurchenko S.N. Optimized semiempirical potential energy surface for H_2^{16}O up to 26000 cm^{-1} // *Opt. Spectrosc.* 2011. V. 110. P. 160–166. DOI: 10.1134/S0030400X11020032.
11. Polyansky O.L., Kyuberis A.A., Zobov N.F., Tennyson J., Yurchenko S.N., Lodi L. Exomol molecular line lists XXX: A complete high-accuracy line list for water // *Mon. Not. R. Astron. Soc.* 2018. V. 480. P. 2597–608. DOI: 10.1093/mnras/sty1877.
12. Mizus I.I., Kyuberis A.A., Zobov N.F., Makhnev V.Y., Polyansky O.L., Tennyson J. High accuracy water potential energy surface for the calculation of infrared spectra // *Philos. Trans. R. Soc. London A*. 2018. V. 376. P. 20170149. DOI: 10.1098/rsta.2017.0149.
13. Люлин О.М. Определение параметров спектральных линий из нескольких спектров поглощения с помощью программы MultiSpectrum Fitting // *Оптика атмосф. и океана*. 2015. Т. 28, № 5. С. 408–416; Lyulin O.M. Determination of spectral line parameters from several absorption spectra with the MultiSpectrum Fitting computer code // *Atmos. Ocean. Opt.* 2015. V. 28, N 6. P. 487–495.
14. Conway E.K., Gordon I.E., Kyuberis A.A., Polyansky O.L., Tennyson A.J., Zobov N.F. Calculated line lists for H_2^{16}O and H_2^{18}O with extensive comparisons to theoretical and experimental sources including the HITRAN2016 database // *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer*. 2020. V. 241. P. 106711. DOI: 10.1016/j.jqsrt.2019.106711.
15. Furtenbacher T., Tóbiás R., Tennyson J., Polyansky O.L., Császár A.G. W2020: A database of validated rovibrational experimental transitions and empirical energy levels of H_2^{16}O // *J. Phys. Chem. Ref. Data*. 2020. V. 49. P. 033101. DOI: 10.1063/5.0008253.

16. 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.
17. 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.
18. Tennyson J., Bernath P.F., Brown L.R., Campargue A., Császár A.G., Daumont L., Gamache R.R., Hodges J.T., Naumenko O.V., Polyansky O.L., Lodi L., Mizus I.I. IUPAC critical evaluation of the rotational-vibrational spectra of water vapor. Part III. Energy levels and transition wavenumbers for H₂¹⁶O // J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer. 2013. V. 117. P. 29–58. DOI: 10.1016/j.jqsrt.2012.10.002.
19. Zobov N.F., Shirin S.V., Ovsyannikov R.I., Polyansky O.L., Barber R.J., Tennyson J., Bernath P.F., Carleer M., Colin R., Coheur P.-F. Spectrum of hot water in the 4750–13000 cm⁻¹ wavenumber range (0.769–2.1 m) // Mon. Not. Roy. Astron. Soc. 2008. V. 387, N 3. P. 1093–1098.

I.A. Vasilenko, L.N. Sinitsa, V.I. Serdyukov. LED Fourier spectroscopy of H₂¹⁶O in the 14800–15500 cm⁻¹ spectral region.

Fourier absorption spectrum of water vapor is studied in the spectral region 14800–15500⁻¹ with a resolution of 0.05 cm⁻¹ and an optical path length of 3480 cm. A detailed list is obtained consisting of 906 identified absorption lines of H₂¹⁶O, as well as a set of 426 energy levels belonging to 19 vibrational states. Fifty five energy levels are determined for the first time, and the energies of 64 levels are corrected. A comparison is made with the data available in the literature. The error in the positions of well-resolved not very weak lines is 0.002 cm⁻¹, and the error in intensities is 10–15%.