

О.К. Войцеховская

**РАСЧЕТ КОЛЕБАТЕЛЬНО-ВРАЩАТЕЛЬНОЙ СТРУКТУРЫ СПЕКТРА ВОДЯНОГО ПАРА ДЛЯ ДИАПАЗОНА ТЕМПЕРАТУР 300–2500°K**

В результате решения обратной электрооптической задачи на основе экспериментально измеренных при нормальных температурах интегральных интенсивностей колебательных переходов с волновой функцией, при построении которой учтены колебательные резонансы и ангармоничность, определен оригинальный набор (до второго порядка включительно) производных дипольного момента  $H_2O$ . Полученный набор использован в экстраполяционном расчете (до  $T \sim 2500^\circ K$ ) интегральных интенсивностей полос, образованных переходами с высокими значениями квантовых чисел. ( $V \leq 4$ ). Проведены вычисления центров и интенсивностей колебательно-вращательных линий  $H_2O$  и сформирована база данных по параметрам спектральных линий  $H_2O$  для диапазона температур 300–2500°K.

Исследования спектров водяного пара при высоких ( $\sim 2000$  K) температурах связаны с проблемами распространения оптического излучения в температурно-неоднородной среде. В настоящее время количественное рассмотрение переноса излучения в нагретых газах ориентируется на использование данных по параметрам спектральных линий (ПСЛ) поглощения, обусловленных возбужденными колебательно-вращательными (КВ) переходами.

В данной статье излагается методика, по которой осуществлен расчет центров и интенсивностей КВ-линий  $H_2O$ , дающих вклад в поглощение и излучение при температурах среды  $\sim 2000$  K. Полученные значения ПСЛ занесены в базу данных, являющуюся одной из информационных компонент автоматизированной системы по спектроскопии высокого разрешения [1].

Теоретическое рассмотрение основано на общем подходе, заключающемся в разделении полного колебательно-вращательного (КВ) гамильтониана [2] на группы слагаемых  $H_{mn}$ , соответствующих степени  $m$  по колебательным ( $p$  или  $q$ ) операторам и степени  $n$  по вращательным операторам ( $J_\alpha$ )

$$\begin{aligned}
 H = & H_{20} + H_{30} + H_{40} + \dots \quad (\text{колебательные члены}), \\
 & + H_{21} + H_{31} + H_{41} + \dots \quad (\text{кориолисовы члены}), \\
 & + H_{02} + H_{12} + H_{22} + \dots \quad (\text{вращательные члены}),
 \end{aligned} \tag{1}$$

что дает возможность решения чисто колебательной задачи с гамильтонианом

$$H_v = \sum_n H_{m0}. \tag{2}$$

Это означает, что сначала решается колебательная задача по определению центров и интенсивностей колебательных переходов с последующим разрешением полосы по вращательной структуре и учетом членов  $H_{mn}$  (1), отвечающих колебательно-вращательным взаимодействиям.

**Использование феноменологического колебательного гамильтониана для определения волновой функции резонирующих колебательных состояний**

Основную роль в спектре нагретых газов играют состояния с высокими значениями квантовых чисел, и учет колебательных резонансов является определяющим в расчетах.

В молекуле водяного пара колебательные резонансы связывают состояния с квантовыми числами  $(V_1+1, V_2-2, V_3)$  и  $(V_1, V_2, V_3)$ , поскольку  $2\omega_2 \approx \omega_1$ . Резонансы в этой молекуле классифицируются как кубичные и квартичные в зависимости от члена потенциальной функции, определяющего внедиагональные элементы матрицы гамильтониана. В данной статье для определения волновых функций колебательных резонирующих состояний использован эффективный колебательный гамильтониан  $H_V$ , феноменологически определенный на подпространстве резонирующих состояний [3]. Авторами [3] в результате решения обратной спектроскопической задачи был найден эмпирический набор коэффициентов гамильтониана, дающий хорошее восстановление экспериментальных уровней энергий, но способ приведения к блочно-диагональному виду не обсуждался.

Сравнение предсказанных по данным значений колебательных энергий  $\text{H}_2\text{O}$  с экспериментом ( $\text{см}^{-1}$ )

$V_1 V_2 V_3$	$E_{\text{экс}}$	$E_{\text{расч}}$	$\Delta E = E_{\text{экс}} - E_{\text{расч}}$
123	17312,5389	17312,5430	-0,004
500	17458,3540	17458,08925	0,264
401	17495,5284	17495,61138	-0,083
331	18265,8197	18267,8613	-2,04
213	18393,3141	18393,2997	0,014
312	18392,9738	18393,6578	0,316
411	18989,9607	18987,9105	2,05
303	19781,1045	19782,262	-1,15
313	21221,8283	21221,43934	0,389
412	21221,5686	21221,38353	0,185
403	22529,4452	22530,0039	-0,558

Нами проверена экстраполяционная способность констант, найденных в [3] посредством расчета энергий состояний с более высокими колебательными квантовыми числами  $V_1, V_2, V_3$ , нежели приведенные в [3]. Значения энергий этих состояний хорошо совпали с экспериментальными (см. табл. 1). Это дает основания предполагать, что собственные функции  $H_V$  [3] близки к истинным. Вместе с тем сравнение величины  $K_{122}$  — константы кубической ангармоничности, следующей из найденных характеристик гамильтониана, показывает значительные расхождения с известными [3] значениями. Поэтому данные [3] использовались нами только для определения коэффициентов разложения волновой функции резонирующих состояний, а именно коэффициентов смешивания  $C_i$

$$|V_{\text{res}}\rangle = \sum_i^n C_i |V_i\rangle_0 \quad (3)$$

( $n$  — число резонирующих состояний).

#### Определение интенсивностей колебательных переходов водяного пара

Использование гамильтониана в блочно-диагональной форме априори означает выполнение преобразования  $H_V = THT^{-1}$  сводящего гамильтониан (2) к виду, определенному на подпространстве связанных резонансом функций. Но подобное преобразование соответствует изменению волновой функции  $\tilde{\Psi}_V = T\Psi_V$ , и для сохранения общности матричный элемент дипольного момента в базе нулевых колебательных функций (гармоничного осциллятора) должен быть записан в виде

$$0 \langle V_1 V_2 V_3 | \tilde{M}_z | V'_1 V'_2 V'_3 \rangle_0, \quad (4)$$

где

$$\tilde{M}_z = TMT^{-1}. \quad (5)$$

Преобразования (4) обсуждались во многих работах, из которых отметим лишь [4–11].

Строгий подход требует, чтобы преобразование  $T$  (5), соответствующее волновым функциям (3), было полным:

$$T = e^{-iS_1^v} e^{-iS_2^v} \dots e^{-iS_n^v} \dots \quad (6)$$

Но, основываясь на точности эксперимента, достаточно рассмотреть дважды преобразованный дипольный момент

$$\tilde{\mu} = \mu_0 + \lambda \{\Delta\mu_1\} + \lambda^2 \{\Delta\mu_2\} + O(\lambda^3). \quad (7)$$

Явный вид колебательного оператора, подвергнутого двукратному контактному преобразованию, приведен в [6, приложение XII], с использованием которого для перехода с  $\sum |\Delta V_i| \leq 2$  нами записано общее выражение для матричного элемента дипольного момента,

$$\langle U_1 U_2 U_3 | \tilde{\mu} | V_1 V_2 V_3 \rangle = \sum_{l\kappa} C_l^{[V]} C_\kappa^{[U]} (S_{\kappa l}^1 + S_{\kappa l}^2 + S_{\kappa l}^3), \quad (8)$$

где

$$S_{\kappa l}^1 = (\mu_0 + C) \prod_{i=1}^3 \langle U_i^\kappa | V_i^l \rangle_0. \quad (9)$$

$$S_{\kappa l}^2 = \sum_{i \neq \alpha \neq \beta} \left\{ \frac{1}{\sqrt{2}} \mu_i [V(V_i^l + 1) \delta_{U_i^\kappa V_i^{l+2}} + V \overline{V_i^l} \delta_{U_i^\kappa V_i^{l-1}} + \right. \\ \left. + A_{ii} [V(V_i^l + 1)(V_i^l + 2) \delta_{U_i^\kappa V_i^{l+2}} + V \overline{V_i^l} (V_i^l - 1) \delta_{U_i^\kappa V_i^{l-2}}] + \right. \\ \left. + 2B_{ii} V_i^l \delta_{U_i^\kappa V_i^l} \right\} \delta_{U_\alpha^\kappa V_\alpha^l} \delta_{U_\beta^\kappa V_\beta^l}; \quad (10)$$

$$S_{\kappa l}^3 = 2 \sum_{i < j} \left\{ A_{ij} \left[ V(V_i^l + 1)(V_j^l + 1) \delta_{U_i^\kappa V_i^{l+1}} \delta_{U_j^\kappa V_j^{l+1}} + \right. \right. \\ \left. \left. + V \overline{V_i^l} \overline{V_j^l} \delta_{U_i^\kappa V_i^{l-1}} \delta_{U_j^\kappa V_j^{l-1}} \right] + B_{ij} [V(V_i^l + 1) V_j^l \times \right. \\ \left. \times \delta_{U_i^\kappa V_i^{l+1}} \delta_{U_j^\kappa V_j^{l-1}} + V(V_j^l + 1) V_i^l \delta_{U_i^\kappa V_i^{l+1}} \delta_{U_j^\kappa V_j^{l-1}} \right] \times \delta_{U_i^\kappa V_i^l}, \quad (11)$$

где  $\delta_{U,V}$  – дельта-функции;  $l, k$  – индексы, нумерующие уровни в кластере резонирующих состояний.

Коэффициенты  $A_{ij}$  и  $B_{ij}$  имеют вид

$$A_{ij} = (1/2) \left\{ \mu^{ij} + \frac{3}{2} \left[ \sum_{\nu}^F \frac{K_{ij,\nu}}{\omega_i + \omega_j - \omega_\nu} - \sum_{\nu} \frac{K_{ij,\nu}}{\omega_i + \omega_j + \omega_\nu} \right] \right\}; \quad (12)$$

$$B_{ij} = (1/2) \left\{ \mu^{ij} - \frac{3}{2} \left[ \sum_{\nu}^F \left( \frac{1}{\omega_i + \omega_\nu - \omega_j} + \frac{1}{\omega_\nu + \omega_j - \omega_i} \right) K_{ij,\nu} \right] \right\}. \quad (13)$$

Индекс  $F$  у знака суммы означает, что суммирование не проводится по индексам, отвечающим частотам, связанным Ферми-резонансом. Выражения (9)–(11) во многом идентичны приведенным в [8, 9, 11]. Преимуществом приводимой записи является возможность ее алгоритмизации для различных наборов колебательных квантовых чисел, характеризующих полосу.

Таким образом, приведенные выражения для матричного элемента дипольного момента одновременно учитывают как резонансы, так и центробежные эффекты.

### Определение производных дипольного момента водяного пара

По проблеме определения производных дипольного момента имеется значительное количество публикаций, которые можно классифицировать следующим образом:

- проведение квантовохимических расчетов производных дипольного момента;
- обработка эксперимента по эффекту Штарка;

– получение соотношений, связывающих матричный элемент дипольного момента (МЭДМ) в базе колебательных или колебательно-вращательных (КВ) волновых функций, и решение обратной электрооптической задачи на основе эксперимента по интенсивностям полос или отдельных линий.

Последний подход встречается в наибольшем числе работ. Некоторые известные из литературы коэффициенты разложения дипольного момента (ДМ) по нормальным координатам сведены в табл. 2. Как видно, данные по коэффициентам ДМ весьма противоречивы. Это объясняется следующими факторами:

- а) разнообразием теоретических моделей, приводящих к расхождениям в формулах для МЭДМ через молекулярные и спектроскопические постоянные;

б) погрешностями эксперимента по интенсивностям линий или колебательных полос; (см. табл. 3, в которой приведен интервал возможных значений  $S_{\nu\nu}$   $\text{H}_2\text{O}$ , установленный из анализа литературных данных);

в) использованием различных наборов остальных молекулярных констант.

Таблица 2

**Функция дипольного момента  $\text{H}_2\text{O}$  ( $D \times 10^2$ )**

$\mu_{ij}^x, \mu_{ij}^y$	[17]	[18]	[10]	Данная работа
$\mu_1^y$	2,81	6,05	-2,16	-2,54
$\mu_2^y$	16,47	-22,27	16,17	-16,4
$\mu_3^x$	-8,81	-11,92	9,51	-9,403
$\mu_{11}^y$	1,56	-0,17	-0,17	-0,845
$\mu_{12}^y$	-1,95	-0,335	0,83	-0,505
$\mu_{13}^x$	0,48	0,338	0,70	-0,808
$\mu_{22}^y$	1,31	-1,13	-0,76	1,33
$\mu_{23}^x$	2,16	-2,06	-2,62	-2,17
$\mu_{33}^y$	-0,48	0,25	0,26	-0,288

Таблица 3

**Интервалы известных значений  $S_{\nu\nu}$  ( $\text{см}^{-2} \cdot \text{атм}^{-1}$ ,  $T=296^\circ\text{K}$ ) и использованный в обработке набор  $S_{\nu\nu}$**

Полоса	$S_{\nu \cdot \nu_{\max}} - S_{\nu \cdot \nu_{\min}}$	$S_{\nu \cdot \nu}$ [14]
$\nu_1$	12,27—8,9	12,06
$\nu_2$	317—177	257,3
$\nu_3$	196—164	171,7
$2\nu_1$	3,02—1,13	1,13
$2\nu_2$	1,87—1,63	1,898
$2\nu_3$	0,13—0,144	0,144
$\nu_1 + \nu_2$	0,92—0,45	0,921
$\nu_1 + \nu_3$	18,5—12,0	15,94
$\nu_2 + \nu_3$	23,1—19,7	19,9
$\nu_3 - \nu_2$	$(12,2 - 6,53) \cdot 10^{-3}$	$6,53 \cdot 10^{-3}$
$\nu_1 - \nu_2$	$(4,7 - 2,24) \cdot 10^{-3}$	$4,75 \cdot 10^{-3}$

Учитывая ситуацию, отражаемую данными табл. 2, 3, для корректного проведения расчетов необходимо было определить новый набор производных дипольного момента до вторых производных включительно.

Производные более высокого порядка определить из эксперимента на данном этапе с достаточной точностью практически невозможно, т. к. расхождение между экспериментальными значениями  $S_{\nu\nu}$  для одного и того же перехода велико.

Как видно из соотношений (9—11), для расчета матричных элементов дипольного момента необходимы силовые постоянные  $K_{ij}$ , собственные частоты и коэффициенты разложения дипольного момента.

В наших расчетах использован набор силовых констант, полученный Клафом и приведенный в [11], а также экспериментальные значения интегральных интенсивностей полос из отчета [14].

При реализации вычислительной схемы решения обратной электрооптической задачи придерживались схемы метода наименьших квадратов, описанной в [12]. Для получения простого случая линейной задачи в качестве исходных данных в уравнения МНК подставлялись квадратные корни  $\langle V' | Mz | V'' \rangle^2$ , определяемые из экспериментальных значений интегральных интенсивностей.

Определенную трудность представлял выбор знаков производных, т.к.  $N$  нормальным колебаниям в молекуле при таком подходе соответствуют  $2^N$  возможных наборов параметров  $\{\mu\}$  и для выбора их оптимальных значений следует привлекать дополнительную информацию.

Отбор параметров среди множества вариантов после минимизации был осуществлен, исходя из требований минимума невязки восстановления и предсказания экспериментальных значений интенсивностей колебательных полос и минимума расхождения с первыми производными дипольного момента, рекомендованными в [13].

В итоге с помощью соотношений (9)–(11) найден набор эффективных производных дипольного момента  $H_2O$ , приведенный в табл. 2, который послужил входной информацией в дальнейших экстраполяционных расчетах интегральных интенсивностей колебательных переходов водяного пара при высоких температурах. С использованием рассчитанных значений  $S_{\nu\nu}$  в качестве исходных данных проведены по алгоритму [15] вычисления центров и интенсивностей колебательно-вращательных линий колебательных полос водяного пара для формирования в ИПС по спектроскопии соответствующих баз данных [1].

При расчете центров линий использовались наборы экспериментальных значений уровней энергии, так как наиболее распространенная форма эффективного вращательного гамильтониана, предложенная Уотсоном, не обладает предсказательной способностью и попытки расширить расчет энергий КВ уровней на более высокие квантовые числа приводят к значительным погрешностям. Интенсивности линий для секвенции полос 6,3 мкм ( $\sum_i \Delta V_i = 1$ ) рассчитывались с учетом  $F$ -фактора [1],

данные по чисто вращательным спектрам и полосе 2,7 мкм рассчитывались по модели жесткого волчка.

В дальнейшем планируется реализация учета внутримолекулярных взаимодействий в перечисленных районах, однако технические трудности, в первую очередь значительная продолжительность затрачиваемого процессорного времени на БЭСМ-6 при реализации учета резонансных эффектов в интенсивностях КВ-линий, на данный момент еще не преодолены. Как показывают наши исследования [16], в случае расчета широкополосных спектральных характеристик резонансные эффекты компенсируют друг друга.

#### Анализ достоверности рассчитанных параметров спектральных линий нагретого водяного пара

Эксперимент по измерению параметров отдельных колебательно-вращательных линий, высокотемпературного водяного пара сопряжен со значительными трудностями, связанными, в частности, с учетом суперпозиции большого числа линий, поэтому исследования спектральных характеристик отдельных КВ-переходов при  $T \approx 300^\circ K$  немногочисленны [19–21]. В [19] измерены функции пропускания ( $I/I_0$ ) на частотах, соответствующих отдельным КВ-переходам, при  $T = 1200^\circ K$ , однако неизвестная аппаратная функция прибора практически не позволяет провести корректное сравнение с расчетами ПСЛ. Интенсивности нескольких линий фундаментальных полос  $\nu_1$  и  $\nu_3$  при температурах 673; 1273; 1630°K измерены в [20], однако автор не смог выделить поглощение отдельными КВ-переходами. Этот вывод следует из расхождения в значениях интенсивностей одних и тех же линий, приведенных к  $T \sim 296^\circ K$  более чем в 40%.

Таблица 4

Сравнение рассчитанных по модели жесткого волчка и с учетом  $F$ -фактора (ИОА) интенсивностей вращательных линий полосы  $\nu_2$   $H_2O$  с экспериментом [21] ( $S = \text{см}^{-2} \cdot \text{атм}^{-1}$ ,  $T = 400^\circ K$ )

Полоса	$j'_{\tau'} - j''_{\tau''}$	$\nu_{\text{см}^{-1}}$	$S_{\text{эксп}} [21]$	$S_{\text{расч}}$	$\delta^*$ , %	$S_{\text{расч}}^* [21]$	$\delta^*$ , %
010—000	9 <sub>-1</sub> 10 <sub>-1</sub>	1280,01	0,027	0,0241	11	0,0125	54
010—000	8 <sub>2</sub> 9 <sub>2</sub>	1288,89	0,0197	0,0174	12	0,0077	61
010—000	7 <sub>-2</sub> 8 <sub>0</sub>	1308,21	0,0410	0,0406	1	0,0215	47
010—000	9 <sub>-3</sub> 10 <sub>-3</sub>	1323,35	0,0225	0,0278	23	0,0189	16
010—000	8 <sub>-2</sub> 9 <sub>-2</sub>	1329,9	0,024	0,0218	9	0,014	41
020—010	4 <sub>-1</sub> 5 <sub>1</sub>	1351,56	0,0051	0,00513	2	—	—
010—000	11 <sub>-7</sub> 12 <sub>-7</sub>	1352,36	0,0096	0,01002	4	0,01	4
020—010	2 <sub>1</sub> 3 <sub>3</sub>	1408,52	0,0175	0,0137	21	—	—
010—000	12 <sub>-7</sub> 11 <sub>-7</sub>	1901,82	0,031	0,0349	12,5	0,039	25
010—000	12 <sub>-5</sub> 11 <sub>-5</sub>	1957,69	0,0093	0,0125	34	0,0172	84
010—000	8 <sub>-2</sub> 7 <sub>-4</sub>	1961,19	0,0191	0,0176	8	0,0445	133
010—000	9 <sub>0</sub> 8 <sub>0</sub>	2007,74	0,0163	0,0175	7	0,056	243

Экспериментальные значения интенсивностей отдельных линий полосы  $\nu_2$  при  $T \sim 400^\circ\text{K}$  и результаты наших расчетов приведены в табл. 4. Данные табл. 4 подтверждают значительную роль колебательно-вращательных взаимодействий в интенсивностях линий полос, связанных с деформационным колебанием  $\nu_2$ .

### Заключение

Измерения интенсивностей линий при повышенных температурах в основном проводятся в фундаментальных полосах  $\nu_1$ ,  $\nu_2$ ,  $\nu_3$ , которые экспериментально исследуются и при нормальных температурах, и делать вывод о справедливости разработанных методик из анализа их значений нет оснований.

Данные о КВ-линиях обертонов, комбинационных и разностных полос практически отсутствуют. Поэтому вопрос о достоверности сформированного массива данных по ПСЛ требует дополнительного рассмотрения, что и осуществлено в [16].

Автор выражает глубокую благодарность Н.Н. Трифионовой и А.В. Фильчакову за помощь в работе.

1. Войцеховская О.К., Трифионова Н.Н., Розина А.В. Информационная система по спектроскопии высокого разрешения. Новосибирск: Наука, 1988.
2. Aliev M.R., Watson J.K.G. //J. Mol. Spectr. 1976. V. 62. № 1. P. 29–52.
3. Букон А.Д., Макушкин Ю.С., Улеников О.Н. //J. Mol. Spectr. 1983. V. 99. № 20. P. 221–227.
4. Papoušek D. and Aliev M.P. Molecular vibrational-rotational spectra. Academia, Prague, 1982.
5. Amat G., Nielsen H.H., Tarrago G. Rotation-vibration spectra of polyatomic molecules. New York, M. Dekker INC. 1971. 519 p.
6. Макушкин Ю.С., Тютюрев В.Г. Методы возмущений и эффективные гамильтонианы в молекулярной спектроскопии. Новосибирск: Наука, 1984. 240 с.
7. Berckmans D., Figeys H.P., Geerlings P. //J. Molec. Struct. (Theochem). 1986. V. 148. P. 81–100.
8. Secroun C., Barbe A., Jouve P. //J. Mol. Spectr. 1973. V. 45. № 1. P. 1–9.
9. Yao S.J., Overend J. //Spectrochim. Acta. 1976. V. 32A. № 5. P. 1059–1066.
10. Yamaoka Y., Machida K. //J. Mol. Spectr. 1983. V. 190. № 2. P. 234–244.
11. Flaud J.M., Camy-Peyret C. Etude vibrorototionnelle de la molecule H<sub>2</sub>O. These doct. Sci. phys. 1975.
12. Albritton D.L., Schmeltekopf A.L., Zare R.N. //Molecular Spectroscopy; Modern Research. Acad. Press., N. Y. 1976. V. 11. Ch. 1. P. 1–67.
13. Flaud J.M., Camy-Peyret C. //Molecular Spectroscopy. Modern Research. V. III, 1985. P. 69–110, Ref. there in.
14. Chedin A., Husson M., Scott N.A., Cohell-Hallaleh and Berroir A. The «GEISA» data bank: 1984. Version. //Laboratoire de meteorol. Dynamique da C. N. R. S. 1985–1986 gg.
15. Войцеховская О.К., Макушкин Ю.С., Трифионова Н.Н., Черепанов В.Н. Программа расчета центров и интенсивностей колебательно-вращательных линий молекул типа асимметричного волчка ГОСФАП, 1980. № П 004348.
16. Войцеховская О.К., Трифионова Н.Н., Кузьмина Н.В. //Оптика атмосферы. 1990. № 5. С. 485–493.
17. Гавва С.П. Дис. канд. СПИ, Саратов, 1984.
18. Egmiler W.C., Krohn B.J. //J. Chem. Phys. 1977. V. 67. P. 1360–1370.
19. Pine A.S. et al. //J. Phys. Chem. Ref. Date. 1983. V. 12. № 3. P. 413–465.
20. Maclay C.Y. //J. Chem. Phys. 1965. V. 43. № 1. P. 185–191.
22. Ben Aryeh. //J. Quant. Spectrosc. Rad. Transf. 1967. V. 7. P. 211–224.
22. Camy-Peyret C., Flaud J.M., Mandin J.-Y. et al. //J. Mol. Spectr. 1985. V. 110. P. 208–228.

Институт оптики атмосферы СО АН СССР,  
Томск

Поступила в редакцию  
15 февраля 1990 г.

### О.К. Voitsekhovskaya. Calculation of the Vibration-Rotation Structure of Water Vapor Spectrum at Temperatures 300 to 2500°K.

By solving inverse electro-optical problem using experimentally measured, at normal temperatures, integral intensities of the vibrational transitions, whose wave functions are constructed taking into account vibration al resonances and anharmonicity, an original set of H<sub>2</sub>O dipole moment derivatives is determined up to the second order. This set is then used for extrapolating integral intensities of bands formed due to transitions between energy levels with high values of quantum numbers ( $V \leq 4$ ) to temperatures up to 2500°K. Calculations have been made of centers and intensities of vibration-rotation lines of H<sub>2</sub>O and a data base of H<sub>2</sub>O spectral line parameters for temperature range 300 to 2500°K has been formed.