

В.И. Сердюков, Л.Н. Сеница, А.Д. Быков, Л.Н. Чебакова, С.А. Ташкун

Спектр излучения высокотемпературного ($T = 2400$ К) водяного пара в области $10650\text{--}10890$ см^{-1}

Институт оптики атмосферы СО РАН, г. Томск

Поступила в редакцию 13.06.2007 г.

Представлены исследования спектра излучения плазмы H_2O в области $0,9$ мкм. Измерения выполнены на дифракционном спектрометре, оснащённом фотосчитывателем на ПЗС-линейке. Источником спектра излучения служил плазматрон Мультиплаз-2500. Эффективная температура плазмы составляет примерно 2400 К. Проведена интерпретация зарегистрированного спектра. Показано, что почти все линии в наблюдаемом спектре относятся к колебательно-вращательным переходам в молекуле воды.

Введение

Водяной пар является одним из наиболее важных газовых компонентов атмосферы, обеспечивает около 70% поглощенной солнечной радиации и в большой степени определяет климат планеты. По этой причине спектроскопические свойства водяного пара исследуются уже в течение долгого времени. Анализ спектроскопической информации включает изучение тонких деталей внутримолекулярной динамики, уширения и сдвига спектральных линий, исследование слабых переходов между высоковозбужденными состояниями, а также создание подробных банков данных.

Новые результаты в спектроскопии водяного пара, полученные в последние годы, связаны как с быстрым развитием экспериментальной техники, так и с появлением работ, посвященных теории высоковозбужденных состояний молекул, например, с проведением высокоточных *ab initio* расчетов, учитывающих неадиабатические, релятивистские поправки к функции потенциальной энергии молекулы H_2O [1]. Эти результаты в ряде работ (см., например, [2]) определяются как «прорыв» в исследованиях, позволяющий создать подробную картину колебательно-вращательного энергетического спектра вплоть до энергии диссоциации.

Наряду со спектрами паров H_2O , зарегистрированными при комнатной температуре, исследуются интенсивно высокотемпературные спектры водяного пара, и интерес к ним вызван многими причинами. Пары воды обнаружены во многих объектах Солнечной системы, включая Венеру, Марс, кометы. Множество спектральных линий H_2O наблюдалось в ИК-спектрах излучения коричневых карликов, красных гигантских звезд. Плотный спектр (примерно 50 линий на 1 см^{-1}) поглощения H_2O зарегистрирован авторами работы [3] в области солнечных пятен, в результате чего опубликованы два атласа линий поглощения солнечных пятен, в которых многие сильные линии поглощения отнесены к линиям водяного пара [4].

Качественно новую информацию о слабых линиях водяного пара дает эмиссионная спектроскопия, спектры излучения воды используются для мониторинга, регистрации и объяснения процессов горения. Например, Фурье-спектрометр высокого разрешения, помещенный на борту самолета, использовался для регистрации спектров излучения лесных пожаров, и по линиям излучения водяного пара осуществлялся контроль процессов горения [5].

Заметный вклад в атмосферное поглощение вносят слабые линии H_2O , особенно на протяженных трассах. Для учета вклада слабых линий, определения их спектроскопических параметров необходимы спектральные приборы высокой чувствительности. Высокотемпературные спектры дают возможность получить дополнительную, более точную информацию о параметрах слабых линий поглощения с высокими значениями вращательного квантового числа J .

Ранее спектры излучения подробно изучены в микроволновой, далекой и средней ИК-областях, проанализированы колебательные полосы в соответствующих диапазонах. В видимой области спектры излучения практически не изучались из-за малой величины функции Планка в этой области и, следовательно, малой интенсивности линий. В данной работе был зарегистрирован и проанализирован спектр излучения водяного пара в области $10650\text{--}10890$ см^{-1} при $T = 2400$ К. В качестве источника излучения использовался плазматрон.

1. Эксперимент

Плазмообразующей средой в плазматроне Мультиплаз-2500 является водяной пар. Источником пара — вода, замкнутая в герметичном объеме внутри плазматрона. Нагреваясь энергией, выделяемой электрической дугой, вода превращается в пар и проходит через электрическую дугу ($T \sim 8000$ К), диссоциируя на кислород и водород. Диссоциация воды начинается при 1500 К, а при 4000 К диссоциирует уже

основная масса воды. Проходя через сопло диаметром 1–2 мм, газы, нагретые до высокой температуры, вновь соединялись, образуя нагретые до высокой температуры молекулы H_2O , радикал OH , кислород и водород. Используемый плазматрон практически аналогичен кислородно-водородному пламени. Однако благодаря особенностям конструкции температура наблюдаемого пламени существенно превышает типичную для кислородно-водородного пламени.

Сделаем небольшое отступление относительно диссоциации молекул воды при повышении температуры. Считается, что молекулы воды при температуре выше 4000 К полностью диссоциируют. Тем не менее это означает, что при таких температурах не существует молекул воды, а их количество очень мало из-за малого времени жизни молекул. Поэтому можно утверждать, что при высокой температуре в статической кювете относительно содержание молекул воды может быть существенно ниже, чем в динамической продуваемой кювете. В струе, выходящей из сопла плазматрона (аналог динамической кюветы), происходит постоянное возобновление исчезающих молекул воды, и их концентрация должна быть достаточной для уверенной регистрации спектров излучения паров воды в ближнем ИК-диапазоне.

Для регистрации спектров излучения водяного пара нами была проведена модернизация дифракционного спектрометра ДФС-452 с голограммной решеткой 1200 мм^{-1} размерами $60 \times 50 \times 10\text{ мм}$, работающей в первом порядке спектра. Регистрация проводилась разработанным в лаборатории молекулярной спектроскопии ИОА фоторегистрирующим устройством на основе ПЗС-линейки [6]. Измеренная ширина аппаратной функции спектрометра равна $0,1\text{ см}^{-1}$. Погрешность измерения центров линий составляла $0,02\text{ см}^{-1}$, при этом построение частотной шкалы осуществлялось с помощью спектров излучения газоразрядной $He-Ne$ -трубки [7].

Увеличение полезного сигнала дополнительно осуществлялось помещением перед ПЗС-линейкой цилиндрической линзы. На рис. 1 приведена схема регистрации спектров излучения, позволяющая про-

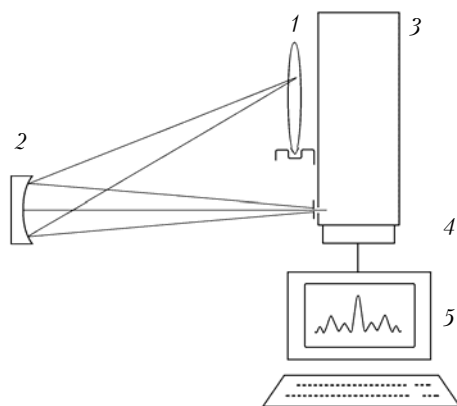


Рис. 1. Схема регистрации спектров излучения: 1 – излучающий газ; 2 – зеркало; 3 – дифракционный спектрометр ДФС-452; 4 – фоторегистрирующее устройство на основе ПЗС-линейки; 5 – ЭВМ

водить регистрацию излучения при различных температурах пламени. Температура пламени оценивалась по вращательной зависимости распределения интенсивности излучения радикала OH [7]. Технические характеристики фотосчитывателя, высокая температура регистрируемого газа позволили нам уверенно регистрировать спектр излучения молекул, содержащихся в пламени, в диапазоне $9500-12000\text{ см}^{-1}$.

2. Анализ спектра

Плазматрон является мощным источником плазмы, в котором поступательная (газовая) температура достигает высоких значений $T \sim 10^4\text{ К}$. Поэтому следует ожидать, что в плотной области плазмы вода диссоциирует на OH и H . В менее плотной и менее нагретой области происходят рекомбинация и образование молекул H_2O в различных колебательных состояниях. На спектрометре регистрировалось излучение на разном расстоянии от сопла в менее нагретой области струи.

Необходимо отметить, что в отличие от других исследований спектров водяного пара при высокой температуре, в которых использовалась плазма углеводородов (метановоздушная смесь, ацетиленовая горелка), когда одним из продуктов сгорания является углекислый газ, в данной работе нет линий посторонних газов – CO_2 , CO или других. Основным продуктом плазматрона – водяной пар при высокой температуре, а также радикалы OH , ионы OH^+ , OH^- , связанные с молекулой H_2O . Необходимо отметить, что аналогичные результаты дает использование водород-кислородного пламени, единственным продуктом которого также является водяной пар.

Анализ спектра проводился на основе разработанного ранее программного пакета расчета и работы с линейчатыми спектрами [8]. Применялись результаты высокоточного вариационного расчета уровней энергии и волновых функций [1] и рассчитанного спектра H_2O [9], также использующего *ab initio* поверхность функции дипольного момента.

Применялась следующая расчетная методика. Интенсивность линии определялась по известному соотношению

$$S_{if} = \frac{8\pi^3}{3hc} N g_i \eta_i [1 - \exp(-h\nu_{if}/kT)] M_{if}, \quad (1)$$

где

$$M_{if} = \langle \psi_i | M_Z | \psi_f \rangle^2 \quad (2)$$

есть момент перехода; ψ_i , ψ_f – волновые функции начального и конечного состояний рассматриваемого перехода; ν_{if} – частота перехода; T – температура; N – плотность; M_Z – Z -проекция дипольного момента перехода в пространственной системе координат; η_i – заселенность состояния i ; c – скорость света; h – постоянная Планка; k – постоянная Больцмана; g_i – степень вырождения уровня; E_i – энергия нижнего состояния.

Для среды в равновесном состоянии

$$\eta_i = \frac{1}{Z(T)} \exp(-hcE_i/kT). \quad (3)$$

Измеряемая величина пропорциональна интенсивности излучения

$$I(\nu) = I_0(\nu) \exp(-K(\nu)PL_{eff}). \quad (4)$$

Здесь P – давление излучающего газа; L_{eff} – некоторая эффективная толщина излучающего слоя. Коэффициент излучения представляется в виде

$$K(\nu) = S_{if}f(\nu), \quad (5)$$

где $f(\nu)$ – форма контура, которая в нашем расчете была выбрана лоренцевской. Для учета искажающего влияния спектрального прибора учитывалась аппаратная функция, измеряемый сигнал рассчитывался по формуле

$$I^*(\nu) = \int_{-\infty}^{\infty} A(\nu - \nu')I(\nu') d\nu'. \quad (6)$$

Для расчетов спектра использовалась аппаратная функция шириной $0,1 \text{ см}^{-1}$, соответствующей спектральному разрешению спектрометра. Предварительный анализ показал, что соотношение интенсивностей отдельных колебательно-вращательных линий примерно соответствует $T \approx 2400 \text{ К}$, и все дальнейшие расчеты проводились именно для этой температуры.

Результаты расчетов в сравнении с измеренными данными представлены в таблице и в качестве примера на рис. 2.

Центр линии, см^{-1}	Отн. интен.	Центр линии (расчет), см^{-1}	V_1	V_2	V_3	J'	K'_a	K'_c	J''	K''_a	K''_c	V'_1	V'_2	V'_3
1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15
10658,100	0,09													
10660,428	0,09	10660,66	3	1	0	8	0	8	7	1	7	0	1	0
10661,870	0,10	10662,06	3	1	0	8	0	8	7	1	7	0	1	0
10662,868	0,04	10662,86	0	2	2	8	2	7	8	1	8	0	0	0
10663,978	0,09	10664,09	3	0	0	9	4	6	9	5	5	0	0	0
10664,977	0,03	10665,04	2	1	1	7	4	3	6	4	2	0	1	0
10666,309	0,05													
10667,531	0,13	10667,76	1	4	0	12	5	8	11	2	9	0	0	0
10669,976	0,07	10670,15	2	0	1	3	2	2	2	2	1	0	0	0
10670,754	0,04	10670,85	0	7	0	10	3	8	9	6	3	0	0	0
10672,311	0,08	10672,28	2	1	1	7	2	6	6	2	5	0	1	0
10673,424	0,12	10673,55	2	0	1	3	0	3	2	0	2	0	0	0
10674,648	0,16	10674,61	2	1	1	8	0	8	7	0	7	0	1	0
10676,652	0,09	10676,79	0	0	3	11	3	9	12	3	10	0	0	0
10678,768	0,08	10678,59	0	7	0	13	2	12	12	3	9	0	0	0
10680,106	0,13	10680,10	2	2	0	9	7	3	9	6	4	0	0	0
10682,335	0,16	10682,36	0	2	2	10	5	5	9	6	4	0	0	0
10683,562	0,16	10683,72	2	0	1	4	3	1	3	3	0	0	0	0
10685,348	0,05	10685,27	2	1	1	8	4	4	7	4	3	0	1	0
10687,358	0,16	10687,40	2	0	1	4	0	4	3	0	3	0	0	0
10688,139	0,08	10688,25	2	0	1	4	2	3	3	2	2	0	0	0
10689,927	0,17	10690,04	2	1	1	10	0	10	9	0	9	0	1	0
10690,933	0,12	10691,04	2	0	1	10	7	3	9	7	2	0	0	0
10691,827	0,13	10691,77	2	0	1	6	5	1	5	5	0	0	0	0
10693,057	0,15	10693,09	2	1	1	9	4	6	8	4	5	0	1	0
10694,064	0,08	10694,07	2	0	1	7	6	2	6	6	1	0	0	0
10695,743	0,07	10695,90	1	2	1	5	4	2	4	2	3	0	0	0
10697,422	0,24	10697,36	3	0	0	10	2	8	10	3	7	0	0	0
10698,878	0,21	10698,97	2	0	1	4	2	2	3	2	1	0	0	0
10699,550	0,15	10699,58	2	0	1	9	6	3	10	2	8	0	0	0
10700,671	0,25	10700,68	2	0	1	4	1	3	3	1	2	0	0	0
10702,576	0,15	10702,68	2	1	1	12	1	12	11	1	11	0	1	0
10703,361	0,08	10703,44	2	1	1	11	2	10	10	2	9	0	1	0
10704,371	0,20	10704,43	2	0	1	5	2	4	4	2	3	0	0	0
10705,381	0,11	10705,51	2	0	1	5	3	2	4	3	1	0	0	0
10706,503	0,20	10706,41	0	3	2	6	3	3	5	2	4	0	1	0
		10706,87	1	2	1	11	6	5	11	4	8	0	0	0
10707,401	0,17	10707,58	2	1	1	13	1	13	12	1	12	0	1	0
10708,187	0,16	10708,21	2	0	1	6	4	2	5	4	1	0	0	0
10710,096	0,26	10710,05	2	0	1	6	1	6	5	1	5	0	0	0
10711,108	0,37	10711,02	0	0	3	11	4	7	11	6	6	0	0	0
10712,232	0,11	10712,23	1	3	1	10	3	7	9	1	8	0	1	0
10714,031	0,23	10713,48	3	0	0	5	2	4	4	1	3	0	0	0
		10714,04	3	0	0	7	1	6	6	2	5	0	0	0
10715,493	0,22	10715,42	3	1	0	5	0	5	5	1	4	0	1	0
10716,506	0,15	10716,65	3	0	0	8	1	8	7	0	7	0	0	0
10717,631	0,15	10717,83	2	0	1	6	2	5	5	2	4	0	0	0
10719,207	0,11													
10720,221	0,24	10720,23	2	0	1	7	1	7	6	1	6	0	0	0

Продолжение таблицы

1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15
10721,010	0,21	10721,17	2	0	1	12	7	5	11	7	4	0	0	0
10721,686	0,19	10721,87	2	0	1	7	0	7	6	0	6	0	0	0
10722,925	0,15	10723,01	1	2	1	7	3	5	6	1	6	0	0	0
10723,715	0,24	10723,75	2	2	0	8	3	6	7	0	7	0	0	0
10725,857	0,33	10725,76	3	0	0	7	2	6	6	1	5	0	0	0
10727,663	0,28	10727,76	2	2	0	6	6	1	5	5	0	0	0	0
10730,260	0,42	10730,16	0	2	2	10	5	6	10	4	7	0	0	0
10731,050	0,35	10731,01	2	0	1	8	0	8	7	0	7	0	0	0
10732,180	0,28	10732,26	2	0	1	7	3	5	6	3	4	0	0	0
10734,214	0,09													
10734,893	0,10	10734,78	0	2	2	13	6	8	12	7	5	0	0	0
10736,137	0,14	10736,02	3	0	0	9	2	8	8	1	7	0	0	0
10737,268	0,07													
10738,739	0,33	10738,83	2	0	1	6	2	4	5	2	3	0	0	0
10740,437	0,55	10740,28	3	0	0	11	1	11	10	0	10	0	0	0
10742,590	0,12	10742,48	0	0	3	12	1	12	12	1	11	0	0	0
10743,156	0,10	10743,22	0	2	2	14	5	10	13	6	7	0	0	0
10744,289	0,13	10744,37	2	0	1	14	1	13	14	1	14	0	0	0
10745,310	0,25	10745,23	0	2	2	12	2	11	11	1	10	0	0	0
10747,464	0,25	10747,52	2	0	1	8	4	4	7	4	3	0	0	0
10748,599	0,48	10748,52	2	0	1	10	1	10	9	1	9	0	0	0
10751,891	0,26	10751,77	2	0	1	9	4	6	8	4	5	0	0	0
10753,709	0,12	10753,77	3	0	0	12	2	11	11	1	10	0	0	0
10755,413	0,62	10755,47	0	1	3	7	1	6	8	1	7	0	1	0
10757,688	0,47	10757,68	2	0	1	10	1	9	9	1	8	0	0	0
10759,622	0,33	10759,56	2	0	1	10	5	5	9	5	4	0	0	0
10761,443	0,51	10761,52	2	0	1	12	1	12	11	1	11	0	0	0
10762,581	0,38	10762,56	2	0	1	11	2	10	10	2	9	0	0	0
10763,379	0,29	10763,17	3	0	0	4	4	0	3	3	1	0	0	0
10766,341	0,64	10766,46	2	0	1	13	1	13	12	1	12	0	0	0
10767,139	0,47	10767,15	0	0	3	10	1	10	11	1	11	0	0	0
10767,937	0,46	10767,95	2	0	1	12	1	11	11	1	10	0	0	0
10770,333	0,75	10770,76	3	0	0	5	4	2	6	3	3	0	0	0
10771,817	0,49	10772,06	0	8	0	15	0	15	14	3	12	0	0	0
10773,072	0,53													
10773,986	0,40	10773,78	2	0	1	11	8	3	11	6	6	0	0	0
10775,585	0,82	10775,73	2	0	1	7	4	3	7	2	6	0	0	0
10777,299	0,45	10777,29	2	0	1	12	2	10	11	2	9	0	0	0
10778,786	0,44	10778,57	2	0	1	13	2	11	12	2	10	0	0	0
10780,501	0,29	10780,78	2	0	1	15	1	14	14	1	13	0	0	0
10781,989	0,32	10781,84	2	0	1	13	4	10	12	4	9	0	0	0
10784,049	0,13	10784,15	2	0	1	15	0	15	14	0	14	0	0	0
10785,653	0,31	10785,59	3	0	0	13	4	10	12	3	9	0	0	0
10786,569	0,09	10786,72	2	0	1	17	0	17	16	0	16	0	0	0
10788,861	0,28	10788,92	2	0	1	10	3	7	9	3	6	0	0	0
10789,893	0,17	10789,73	3	0	0	12	4	9	11	3	8	0	0	0
10790,581	0,19													
10792,072	0,14													
10794,483	0,22	10794,74	2	0	1	14	3	11	13	3	10	0	0	0
10796,205	0,08	10796,21	0	0	3	9	9	0	9	9	1	0	0	0
10797,239	0,09	10797,26	3	0	0	6	4	3	5	3	2	0	0	0
10798,733	0,13	10798,83	2	0	1	13	3	10	12	3	9	0	0	0
10799,882	0,14	10799,95	2	0	1	11	4	7	10	4	6	0	0	0
10801,837	0,07	10801,83	0	0	3	6	4	2	7	4	3	0	0	0
10803,562	0,16	10803,58	2	0	1	12	3	9	11	3	8	0	0	0
10805,404	0,05													
10806,670	0,05	10806,73	2	0	1	11	5	6	11	3	9	0	0	0
10808,743	0,22	10808,84	2	0	1	12	4	8	11	4	7	0	0	0
10810,818	0,15	10811,01	3	0	0	4	4	0	5	3	3	0	0	0
10812,317	0,11	10812,19	3	0	0	1	0	1	2	1	2	0	0	0
10813,008	0,11	10812,99	2	0	1	13	4	9	12	4	8	0	0	0
10814,623	0,08	10814,53	0	0	3	11	8	4	11	8	3	0	0	0
10816,124	0,08	10816,18	0	0	3	6	3	3	7	3	4	0	0	0
10816,932	0,08	10816,89	1	2	1	8	5	3	7	3	4	0	0	0
10818,086	0,15	10818,01	2	0	1	14	5	9	13	5	8	0	0	0
10819,472	0,08	10819,70	0	0	3	10	2	8	10	4	7	0	0	0
10820,743	0,18	10820,60	2	2	0	14	6	9	13	5	8	0	0	0
10822,708	0,09	10822,78	2	0	1	10	10	1	10	8	2	0	0	0

1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15
10824,443	0,15													
10825,831	0,10	10825,67	3	0	0	3	0	3	3	1	2	0	0	0
10828,030	0,09	10828,10	0	0	3	6	2	4	7	2	5	0	0	0
10829,535	0,11	10829,62	3	0	0	3	3	0	4	2	3	0	0	0
10830,693	0,10	10830,67	0	0	3	5	4	2	6	4	3	0	0	0
10832,431	0,12	10832,40	0	0	3	9	8	2	9	8	1	0	0	0
10833,706	0,13													
10835,213	0,13	10834,98	0	2	2	7	4	4	6	3	3	0	0	0
10836,953	0,09	10837,12	2	0	1	6	3	3	5	1	4	0	0	0
10838,694	0,09	10838,59	0	2	2	11	8	3	11	7	4	0	0	0
10839,506	0,09													
10840,551	0,12	10840,56	0	0	3	8	8	1	8	8	0	0	0	0
10841,248	0,10	10841,53	3	1	0	4	2	2	4	1	3	0	1	0
10842,061	0,09													
10843,339	0,11	10843,48	0	0	3	4	2	2	4	4	1	0	0	0
10844,850	0,13	10844,67	3	0	0	9	7	3	8	6	2	0	0	0
10846,361	0,20	10846,34	0	0	3	7	1	7	8	1	8	0	0	0
10848,339	0,11	10848,77	0	1	3	3	2	1	4	2	2	0	1	0
10849,153	0,12	10849,30	3	1	0	1	1	1	0	0	0	0	1	0
10851,481	0,16	10851,49	0	0	3	5	3	3	6	3	4	0	0	0
10852,180	0,15	10852,40	0	2	2	9	8	1	9	7	2	0	0	0
10855,791	0,16	10856,05	0	1	3	8	5	3	8	5	4	0	1	0
10857,773	0,17	10857,66	3	0	0	12	5	8	11	4	7	0	0	0
10858,473	0,15	10858,43	0	0	3	11	7	5	11	7	4	0	0	0
10859,289	0,16	10859,41	0	1	3	3	1	2	4	1	3	0	1	0
10861,156	0,16	10861,03	0	1	3	7	5	3	7	5	2	0	1	0
10862,674	0,16	10862,93	2	1	1	8	3	5	7	1	6	0	1	0
10863,608	0,17	10864,14	0	0	3	10	7	3	10	7	4	0	0	0
10865,477	0,18	10865,90	3	0	0	9	5	4	8	4	5	0	0	0
10866,996	0,21	10866,69	0	1	3	6	5	2	6	5	1	0	1	0
10867,814	0,20	10867,65	2	0	1	7	3	4	6	1	5	0	0	0
10869,684	0,24	10869,64	3	0	0	11	4	7	11	3	8	0	0	0
10871,439	0,30	10871,33	3	0	0	12	9	3	11	8	4	0	0	0
10874,365	0,24	10874,30	3	0	0	9	4	5	9	3	6	0	0	0
10875,536	0,30	10875,55	0	0	3	8	7	1	8	7	2	0	0	0
10876,473	0,24	10876,53	2	0	1	5	4	2	4	2	3	0	0	0
10877,410	0,24	10877,26	3	0	0	8	4	4	7	5	3	0	0	0
10879,285	0,27	10879,25	0	1	3	3	0	3	4	0	4	0	1	0
10880,223	0,25	10880,27	3	1	0	6	4	3	6	3	4	0	1	0
10881,630	0,33	10881,56	0	0	3	7	7	0	7	7	1	0	0	0
10883,038	0,26	10883,10	3	0	0	12	6	7	12	5	8	0	0	0
10884,915	0,32	10885,08	0	0	3	4	2	2	5	2	3	0	0	0
10885,972	0,34													
10887,146	0,31													
10888,790	0,32	10888,68	0	0	3	10	4	6	11	2	9	0	0	0
10889,613	0,33	10889,60	3	0	0	8	3	5	7	2	6	0	0	0
10890,906	0,35	10891,08	3	0	0	6	3	3	6	2	4	0	0	0

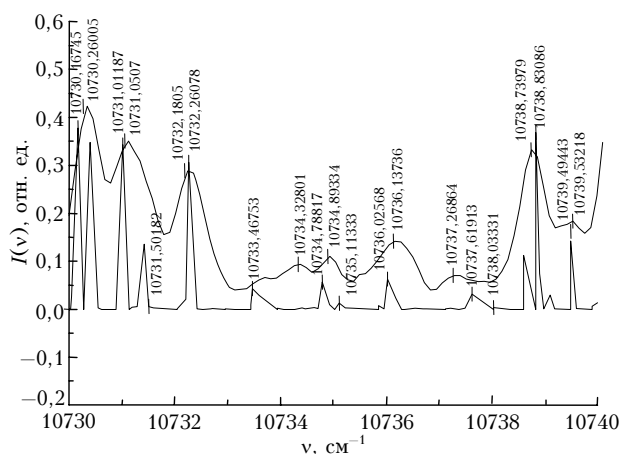


Рис. 2. Участок спектра излучения водяного пара: верхняя кривая — эксперимент; нижняя — расчет

Отнесение линий в спектре излучения плазмы проводилось простым сравнением расчетного и экспериментального спектров, а также данных [10]. Поскольку точность вариационного расчета достаточно высока и ошибки расчета составляют в среднем 1 см^{-1} , то сравнивались интенсивности линий в пределах нескольких обратных сантиметров. Анализ корреляции между интенсивностями близких групп линий позволил достаточно надежно провести отнесение наблюдающихся пиков в измеренном спектре к тем или иным квантовым переходам в молекуле. Результаты идентификации представлены в таблице в графах 4–15. Здесь приведены колебательные квантовые числа V'_1, V'_2, V'_3 , вращательные квантовые числа J', K'_a, K'_c верхнего состояния, вращательные и колебательные квантовые числа $J'', K''_a, K''_c, V''_1, V''_2, V''_3$ нижнего состояния перехода.

В спектре присутствуют линии, определяемые переходами с высоких вращательных уровней со значением вращательного квантового числа до $J = 17$, а также линии горячих полос, что определяется высокой температурой исследуемого водяного пара.

Заклучение

Результаты анализа спектра излучения плазмы H_2O , полученной в мощном дуговом разряде, показали, что почти все линии в наблюдаемом спектре относятся к колебательно-вращательным переходам в молекуле воды, наблюдаются некоторое количество горячих переходов и переходы на высокие изгибные состояния. Эффективная температура плазмы составляет примерно 2400 К.

Работа выполнена при поддержке РФФИ (грант № 05-03-32782), программы РАН «Оптическая спектроскопия и стандарты частоты».

1. Partridge H., Schwenke D. 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. N 11. P. 4618–4639.
2. Tennyson J., Kostin M.A., Barletta P., Harris G.J., Polyansky O.L., Ramanlal J., Zobov N.F. DVR3D: a program suite for the calculation of rotation–vibration

- spectra of triatomic molecules // Comput. Phys. Commun. 2004. V. 163. N 2. P. 85–116.
3. Wallace L., Bernath P., Livingston W., Hinkle K., Busler J., Guo B., Zhang K.-Q. Water on the Sun // Science. 1995. V. 268. P. 1155–1158.
 4. Wallace L., Livingston W., Hinkle K., Bernath P.F. Infrared Spectral Atlases of the Sun from NOAO // Astrophys. J. Suppl. 1996. V. 106. P. 165–169.
 5. Worden H., Beer R., Rinsland C.P. Airborneinfrared spectroscopy of 1994 western wildfires // J. Geophys. Res. 1997. V. 102. P. 1287–1299.
 6. Поплавский Ю.А., Сердюков В.И., Сеница Л.Н., Щербаков А.П., Мамульян Ю.А. Фотоэлектрическая регистрирующая система на основе ПЗС-линейки // Наука – производству. 2003. № 9. С. 28–29.
 7. Mikhailenko S.N., Mellau G.Ch., Starikova E.N., Tashkun S.A., Tyuterev V.I.G. Analysis of the first triad of interacting states (0 2 0), (1 0 0), and (0 0 1) of $D_2^{16}O$ from hot emission spectra // J. Mol. Spectrosc. 2005. V. 233. N 1. P. 32–59.
 8. Быков А.Д., Науменко О.В., Пшеничников А.М., Сеница Л.Н., Щербаков А.П. Экспертная система для идентификации линий в колебательно-вращательных спектрах // Оптика и спектроскопия. 2003. Т. 93. № 4. С. 580–589.
 9. <http://iao.ru/spectra>
 10. Rothman L.S., Barbe A., Benner D.C., Brown L.R., Camy-Peyret C., Carleer M.R., Chance K., Clerbaux C., Dana V., Devi V.M. et al. The HITRAN molecular spectroscopic database: edition of 2000 including updates through 2001 // J. Quant. Spectrosc. and Radiat. Transfer. 2003. V. 82. N 1. P. 5–44.

V.I. Serdukov, L.N. Sinitza, A.D. Bykov, L.N. Chebakova, S.A. Tashkun. Radiation spectrum of high-temperature ($T = 2400$ K) water vapor in 10650–10890 cm^{-1} region.

Emission spectra of the H_2O molecule were studied in 0.9 μm region. Measurements were performed using a grating spectrometer with linear photodiode array. Emission spectra were produced by Multiplaz-2500 plasma source with an effective temperature of plasma of 2400 K. Assignment of the spectra were done, it was shown that lines in the spectra belong to rotation-vibration water vapor transitions.