

ОПТИЧЕСКИЕ МОДЕЛИ И БАЗЫ ДАННЫХ ОПТИЧЕСКОЙ ИНФОРМАЦИИ ОБ ОКРУЖАЮЩЕЙ СРЕДЕ

УДК 535.34

Анализ параметров линий поглощения водяного пара в современных спектроскопических базах данных в области 16700–17000 см⁻¹

Л.Н. Сеница✉, Т.Ю. Чеснокова*

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

Поступила в редакцию 11.04.2023 г.;
после доработки 15.06.2023 г.;
принята к печати 10.07.2023 г.

Проведена валидация современных спектроскопических баз данных HITRAN2016, HITRAN2020, GEISA2020 и расчетного банка линий H₂O W2020 по параметрам линий поглощения H₂O в видимой области 16700–17000 см⁻¹. Выполнены моделирование спектров пропускания H₂O с использованием баз данных и сравнение с лабораторными спектрами чистого водяного пара и смеси H₂O–N₂ ($P = 1$ атм), измеренными на Фурье-спектрометре со светодиодами высокой яркости. По результатам измерений скорректированы параметры 65 линий поглощения H₂O, содержащиеся в HITRAN2020. У 32 линий исправлены центры, у 51 линии – интенсивности, у 10 линий – коэффициенты самоуширения. Отношение коэффициентов уширения HITRAN2020 к экспериментальным значениям близко к единице, в то время как коэффициенты сдвига линий давлением воздуха в базах данных в среднем в два раза превышают соответствующие экспериментальные значения, поэтому для моделирования спектра пропускания смеси H₂O–N₂ применялись экспериментальные значения коэффициентов сдвига линий давлением азота, полученные нами ранее.

Отличие экспериментальных спектров пропускания от рассчитанных с использованием HITRAN2016, HITRAN2020, GEISA2020, W2020 и скорректированного HITRAN2020cor характеризуется среднеквадратичными отклонениями $RMS = 1,49E-4$; $1,64E-4$; $3,96E-4$; $3,49E-4$ и $1,26E-4$ для чистой воды, $RMS = 1,15E-4$; $1,1E-4$; $2,23E-4$; $2,28E-4$ и $0,86E-4$ для H₂O–N₂ соответственно.

Ключевые слова: спектр поглощения, водяной пар, спектроскопические базы данных, параметры линий поглощения, пропускание; absorption spectrum, water vapor, spectroscopic databases, absorption line parameters, transmittance.

Введение

Водяной пар является одним из основных газов, поглощающих солнечное излучение в атмосфере Земли. Точное знание спектральных параметров линий поглощения молекулы H₂O в видимой области необходимо во многих задачах, связанных с дистанционным зондированием Земли и атмосферы, а также моделированием климата. Несмотря на достаточно большое количество измерений (см., например, [1–4]) и расчетов [5, 6] спектров поглощения водяного пара, имеются значительные различия в параметрах линий поглощения H₂O в видимом спектральном диапазоне в современных спектроскопических базах данных (БД), что приводит к неопределенностям в результатах измерения содержания газов спектроскопическими методами. В работе [3] было показано, что наблюдаются значимые расхождения между измеренными в лабораторных условиях спектрами поглощения водяного пара и спек-

трами, вычисленными с использованием спектроскопической БД HITRAN2016 [7] в области 16400–17000 см⁻¹. В публикации [8] анализировались результаты определения общего содержания водяного пара в столбе атмосферы по данным спутникового сенсора S-5P/TROPOMI в видимом диапазоне с помощью различных версий БД HITRAN (2008, 2012, 2016). Был сделан вывод, что HITRAN2016 содержит некорректные параметры контура и *ab initio* значения интенсивностей линий H₂O и наиболее адекватной для рассматриваемой задачи является более ранняя версия HITRAN2008. В 2021 г. вышла новая версия БД HITRAN2020 [9].

Согласно коду ссылок на литературные источники в БД HITRAN2020, основу списка центров линий H₂¹⁶O составляют данные из списка W2020 [4, 10] (2062 из 4896 переходов), работы И.И. Бубукиной с соавт. [11] (2645 переходов), Р.Н. Толченова с соавт. [12] (188 переходов) и Дж. Теннисона с соавт. [13] (1 переход). Основу списка интенсивностей линий составляют *ab initio* расчеты [6]. Коэффициенты самоуширения линий взяты из результатов измерений на Фурье-спектрометре [1]

* Леонид Никифорович Сеница (sln@iao.ru); Татьяна Юрьевна Чеснокова (ches@iao.ru).

или получены с помощью полиномиальной подгонки [14]. Коэффициенты сдвига линий давлением воздуха определены с использованием полуэмпирических коэффициентов [15] или измерены на Фурье-спектрометре [1]. Коэффициенты уширения линий давлением воздуха получены с помощью полуэмпирических коэффициентов [16] или также измерены на Фурье-спектрометре [1].

Кроме того, в 2021 г. появилась новая версия спектроскопической БД GEISA2020 [17]. Недавно были сделаны расчеты спектра водяного пара W2020 [4, 10], уточняющие положения центров и интенсивностей линий H_2O в диапазоне до 30000 см^{-1} .

Цель настоящей работы — проанализировать информацию о параметрах линий поглощения H_2O в современных спектроскопических БД на основе измеренных лабораторных спектров поглощения водяного пара в видимой области $16700\text{--}17000\text{ см}^{-1}$ и скорректировать данные из последней версии БД HITRAN2020.

1. Экспериментальные измерения спектров поглощения H_2O

В качестве экспериментальных были использованы спектры поглощения H_2O в диапазоне от 16700 до 17000 см^{-1} , зарегистрированные ранее на Фурье-спектрометре IFS-125M с разрешением $0,05\text{ см}^{-1}$ при температуре $297 \pm 1\text{ К}$ и давлении $P_{\text{H}_2\text{O}} = 17,2\text{ мбар}$, $P_{\text{N}_2} = 0$ и 987 мбар [2]. Измерения проводились в термостабилизированном помещении; использовалась кювета с базой длиной 60 см и многопроходной оптической схемой Уайта с длиной оптического пути 24 м . Источником излучения служил светодиод CREE XPE AMB с высокой спектральной яркостью в районе $0,59\text{ мкм}$ (с максимумом в спектральном диапазоне $16700\text{--}16900\text{ см}^{-1}$), которая превышает на два порядка яркость галогенных ламп в этой области спектра и обеспечивает высокое отношение сигнал/шум (S/N) для регистрации слабого поглощения. Это позволило получить отношение сигнал/шум около 10000 и обнаружить слабые линии поглощения с интенсивностью порядка $10^{-26}\text{ см}^2/\text{молек}$. Измерения проводились в течение нескольких дней; каждый спектр был получен усреднением по 3456 сканам. Фурье-спектрометр, использующий светоизлучающие диоды, более подробно описан в [18]. Давление измеряли прибором АИР-20М (диапазон $0\text{--}100\text{ кПа}$, точность порядка $0,1\%$).

Параметры линий определялись с помощью пакета программ Wxspе, способного выполнять автоматический поиск пиков с использованием теории распознавания образов [19]. Спектры были проанализированы с помощью профиля Фойгта, параметры аппаратной функции были определены из подгонки. Спектры поглощения чистого и уширенного азотом водяного пара, зарегистрированные на Фурье-спектрометре, были ранее [2] использованы для определения параметров уширения спектральных

линий. В данной работе приводятся зарегистрированные спектры пропускания. Калибровка частоты выполнена с помощью более точных значений положений центров линий H_2O из БД W2020 [10].

Погрешность определения положений центров линии составляет $0,0008\text{ см}^{-1}$. Погрешность определения коэффициентов уширения и сдвига изолированных линий с интенсивностью $3 \cdot 10^{-24} \dots 5 \cdot 10^{-26}\text{ см}^2/\text{молек}$ не превышает $0,003$ и $0,002\text{ см}^{-1}/\text{атм}$ соответственно.

2. Сравнение модельных спектров с результатами измерений

2.1. Спектр пропускания H_2O при самоуширении линий

На рис. 1 приведен зарегистрированный спектр поглощения H_2O при давлении 17 мбар . Спектр в этой области очень слабый, пропускание в центре наиболее сильных линий остается выше $0,964$. Модельные спектры пропускания рассчитаны с использованием параметров линий поглощения водяного пара из БД HITRAN2020, 2016, GEISA2020, W2020, проведено сравнение с измеренным спектром в диапазоне $16700\text{--}17000\text{ см}^{-1}$ [2]. Модельные спектры вычислялись полинейным методом *line-by-line* [20] со спектральным разрешением $0,05\text{ см}^{-1}$ с контуром линий Фойгта с прямоугольной аппаратной функцией. В расчете W2020 отсутствуют параметры уширения линий и коэффициент температурной зависимости, необходимые для моделирования пропускания. Для оценки параметров уширения линий применялась методика с использованием $J'J''$ -зависимости [21].

Была рассчитана разность пропускания $dT = T_{\text{exp}} - T_{\text{calc}}$, где T_{exp} — экспериментально зарегистрированный спектр пропускания, а T_{calc} — модельный спектр, вычисленный с помощью спектроскопической БД. Максимальные различия в пропускании между измеренным спектром и спектрами, вычисленными с БД HITRAN2016, HITRAN2020, GEISA2020 и W2020 в области $16700\text{--}17000\text{ см}^{-1}$ (рис. 1), достигают $0,0025$; $0,0029$; $0,009$ и $0,0055$ соответственно.

Пример различия в пропускании между указанными спектрами в области одной спектральной линии $16779,7\text{--}16780,0\text{ см}^{-1}$ приведен на рис. 2.

При использовании HITRAN2016 и HITRAN2020 максимальное значение $dT_{\text{max}} = 0,003$, для GEISA2020 $dT_{\text{max}} = 0,01$, для W2020 $dT_{\text{max}} = 0,006$. Ошибки в моделировании спектра пропускания чистой воды возникают из-за неправильных значений частот, интенсивностей или коэффициентов самоуширения линий H_2O в базах данных. На рис. 3. приведены dT в случае неправильных значений интенсивности, центра и полуширины отдельных линий поглощения в HITRAN2020.

Моделирование спектра пропускания H_2O показало, что наилучшую точность описания экспериментальных данных в этой области дает HITRAN2016 ($\text{RMS} = 1,49\text{E-4}$), которому немного уступает HITRAN2020 ($\text{RMS} = 1,64\text{E-4}$).

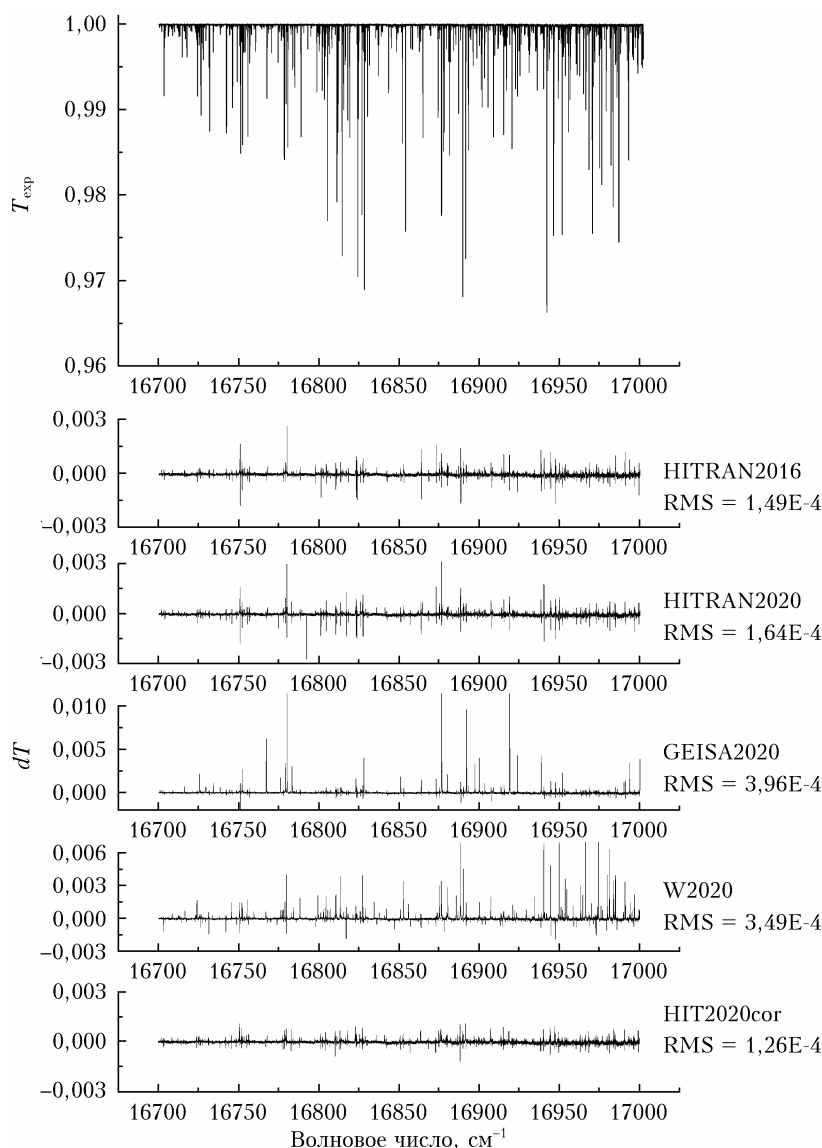


Рис. 1. Измеренный спектр H_2O (T_{exp}) и разность пропускания между ним и спектрами, вычисленными с помощью различных спектроскопических БД; RMS – среднеквадратичное отклонение измеренных спектров от модельных

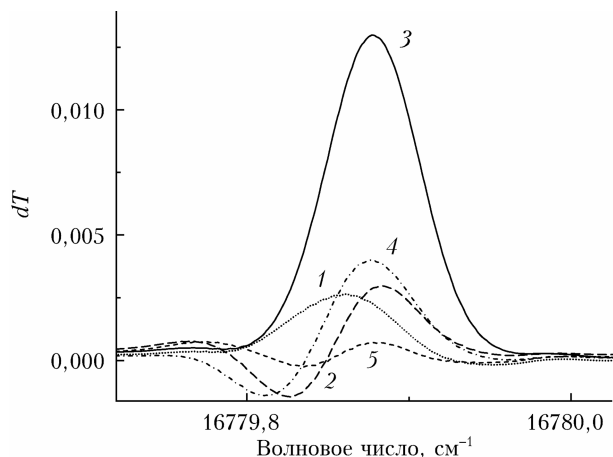


Рис. 2. Различия в пропускании между измеренным спектром и спектрами, вычисленными с помощью HITRAN2016 (1), HITRAN2020 (2), GEISA2020 (3), W2020 (4) и HITRAN2020cor (5) в области 16779,7–16780,0 cm^{-1}

Далее была проведена коррекция БД HITRAN2020, исправлены значения интенсивностей, частот и коэффициентов самоуширения для 65 линий, для которых имело место большое отклонение T_{calc} от T_{exp} .

В таблице приводятся интенсивности линий, не измеренные в обычном понимании, когда производится подгонка зарегистрированного контура спектральной линии к модельному, а полученные коррекцией интенсивностей по разности dT , проявляющейся в спектре. Часть случайных погрешностей исключается, и данная процедура может обеспечить более высокую точность определения параметров линии. Такая процедура применяется в прикладных атмосферных задачах, когда создаются специализированные БД, представляющие собой компиляцию литературных данных по параметрам линий поглощения и данных, скорректированных по атмосферным измерениям (например, [22–24]).

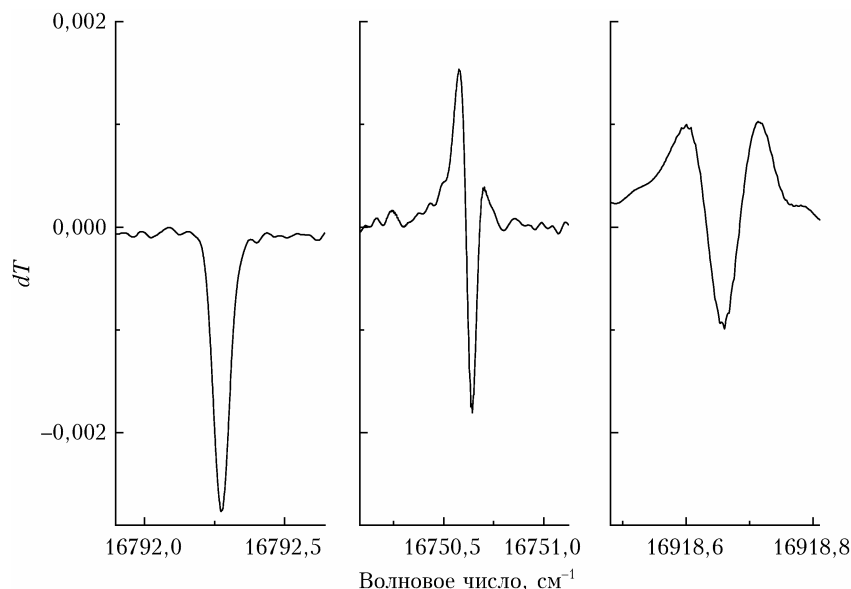


Рис. 3. Разность пропускания в случае неправильных значений интенсивности (а), центра (б) и полуширины (в) линий поглощения

Центры (ν), интенсивности (S) и коэффициента самоугищения (γ_{self}) линий поглощения H_2O в БД HITRAN2020 и исправленные значения (HITRAN2020cor)

HITRAN2020			HITRAN2020cor		
ν , cm^{-1}	S , $\text{cm}^2/\text{молек.}$	γ_{self} , $\text{cm}^{-1}/\text{атм}$	ν , cm^{-1}	S , $\text{cm}^2/\text{молек.}$	γ_{self} , $\text{cm}^{-1}/\text{атм}$
1	2	3	4	5	6
16701,851047	4,08E-26			4,975E-26	
16723,498683	1,15E-25			1,310E-25	
16723,743908	1,67E-25			1,835E-25	
16723,946677	6,25E-25		16723,947410*	6,480E-25	
16745,629987	7,44E-25			7,670E-25	
16750,638798	1,19E-24	0,893	16750,642698	1,220E-24	0,600
16751,871807	1,03E-24			1,070E-24	
16755,157192	1,03E-24		16755,158172*		
16756,470775	1,52E-25		16756,467962**	2,000E-25**	
16766,957642	4,58E-25			3,980E-25	
16766,965942	1,56E-25			1,060E-25	
16774,740400	2,49E-27			6,220E-26*	
16778,804117	5,67E-25		16778,800590*		
16779,846550	9,33E-25	1,190	16779,840318*	9,272E-25	0,839
16779,879421	7,47E-25			6,340E-25	
16792,274800	1,30E-26			2,110E-25*	
16801,127712	5,73E-25			6,540E-25**	
16804,418222	1,87E-24		16804,419455*		
16810,351002	3,59E-25			3,900E-25	
16810,404046	1,59E-24	0,412			0,400
16810,985187	1,00E-24		16810,983544*		
16813,366800	2,20E-24		16813,367394*		
16816,971194	9,10E-25		16816,964963*		
16818,163997	9,98E-25		16818,163412**	1,060E-24	
16823,102814	2,27E-24	0,432		2,370E-24	0,400
16823,481865	7,01E-25			5,810E-25	
16823,549400	6,64E-25		16823,546035**	8,070E-25**	
16825,752440	1,81E-24		16825,754340		
16827,296805	2,56E-24		16827,299000	2,590E-24	
16863,606099	1,04E-24	0,639		1,060E-24	0,500
16863,665323	1,45E-25		16863,662803**	1,900E-25	
16864,460236	6,22E-27			5,910E-27*	
16872,911717	3,81E-25			2,400E-25	
16873,008285	7,78E-25			7,944E-25	
16876,195811	2,11E-25			2,680E-26	
16876,283330	3,10E-25			3,000E-25	

1	2	3	4	5	6
16876,317455	1,09E-24	0,758			0,500
16888,239913	2,70E-24	0,585	16888,238100	2,630E-24	0,539
16888,310799	2,54E-25			2,740E-25	
16907,236184	1,09E-24		16907,237680	1,150E-24	
16918,665234	1,05E-24	0,906		1,020E-24	0,600
16918,701448	4,42E-25			4,150E-25**	
16938,319771	2,91E-25			2,790E-25	
16938,341960	4,49E-25		16938,343915**	3,791E-25	
16940,264106	2,75E-24		16940,267100	2,721E-24	
16944,360828	1,96E-24		16944,363600	1,953E-24	
16947,315152	8,49E-25			6,966E-25	
16947,371671	2,40E-25		16947,373360**	4,503E-25	
16949,028266	1,55E-25		16949,024900*	1,990E-25	
16949,760221	2,05E-24		16949,761448*	2,010E-24	
16951,712162	2,04E-25			1,540E-25	
16951,776427	3,66E-25			4,350E-25	
16960,601491	4,85E-25		16960,603277*		
16968,465666	2,02E-24		16968,466366	1,990E-24	
16973,006423	1,35E-24		16973,008815*		
16976,967935	8,06E-25			8,378E-25	
16979,984290	1,30E-24		16979,985464*		
16981,248899	1,72E-24		16981,249874*		
16984,842318	1,99E-24		16984,843820	2,020E-24	
16990,839529	1,12E-24			1,148E-24	
16991,143957	2,19E-25			2,301E-25	
16995,250526	9,79E-26			1,070E-25	
16996,671110	2,91E-25			2,070E-25	
16996,743477	3,19E-25			4,210E-25	
16999,518279	1,97E-25			2,045E-25	

* Значение взято из [7].

** Значение взято из [10].

Высокое отношение $S/N = 10000$, достигнутое в спектрометре за счет использования светодиодов высокой яркости в качестве источника излучения, позволяет уверенно регистрировать изменение пропускания на 0,1%. Такое изменение спектрального пропускания соответствует изменению интенсивности линий водяного пара на $5 \cdot 10^{-26}$ см/молек. при данных условиях регистрации. Как видно из рис. 1, параметры некоторых линий из БД HITRAN2016 более адекватно описывают зарегистрированный спектр, поэтому при коррекции HITRAN2020 часть параметров линий взята из HITRAN2016, а часть — из W2020. Остальные параметры линий уточнены экспериментально.

Частоты были исправлены у 32 линий, интенсивности — у 51 линии, а коэффициенты самоуширения — у 10. В таблице приведены скорректированные значения положения центра, интенсивности и коэффициентов самоуширения линий поглощения H_2O (HITRAN2020cor).

В результате использования скорректированных данных HITRAN2020cor максимальное dT не превышает 0,001, а значение RMS при моделировании с HITRAN2020cor уменьшилось в 1,2 раза и было наименьшим ($RMS = 1,26E-4$) среди всех рассмотренных БД (см. рис. 1).

2.2. Спектр пропускания H_2O при уширении линий давлением N_2

На следующем этапе валидации современных спектроскопических БД был проанализирован спектр поглощения H_2O-N_2 при давлении 1 атм и проведено его моделирование с помощью HITRAN2016, HITRAN2020, GEISA2020, W2020 и HITRAN2020cor. Результаты моделирования приведены на рис. 4. Максимальные различия в пропускании между измеренным спектром и спектрами, вычисленными на основе с БД HITRAN2016, HITRAN2020, GEISA2020 и W2020, достигают 0,0015; 0,0014; 0,0039 и 0,0025 соответственно.

Моделирование спектра пропускания H_2O-N_2 показало, что наилучшую точность описания экспериментальных данных в этой области обеспечивает HITRAN2020, при использовании которого средне-квадратичная разница ($RMS = 1,10E-4$) получилась меньше, чем при использовании HITRAN2016. Это говорит о том, что в последней версии HITRAN параметры линий, связанные с уширением линий давлением буферного газа, играют большую роль в моделировании атмосферного пропускания, а их значения точнее, чем в предыдущей версии. Использование скорректированного списка линий H_2O

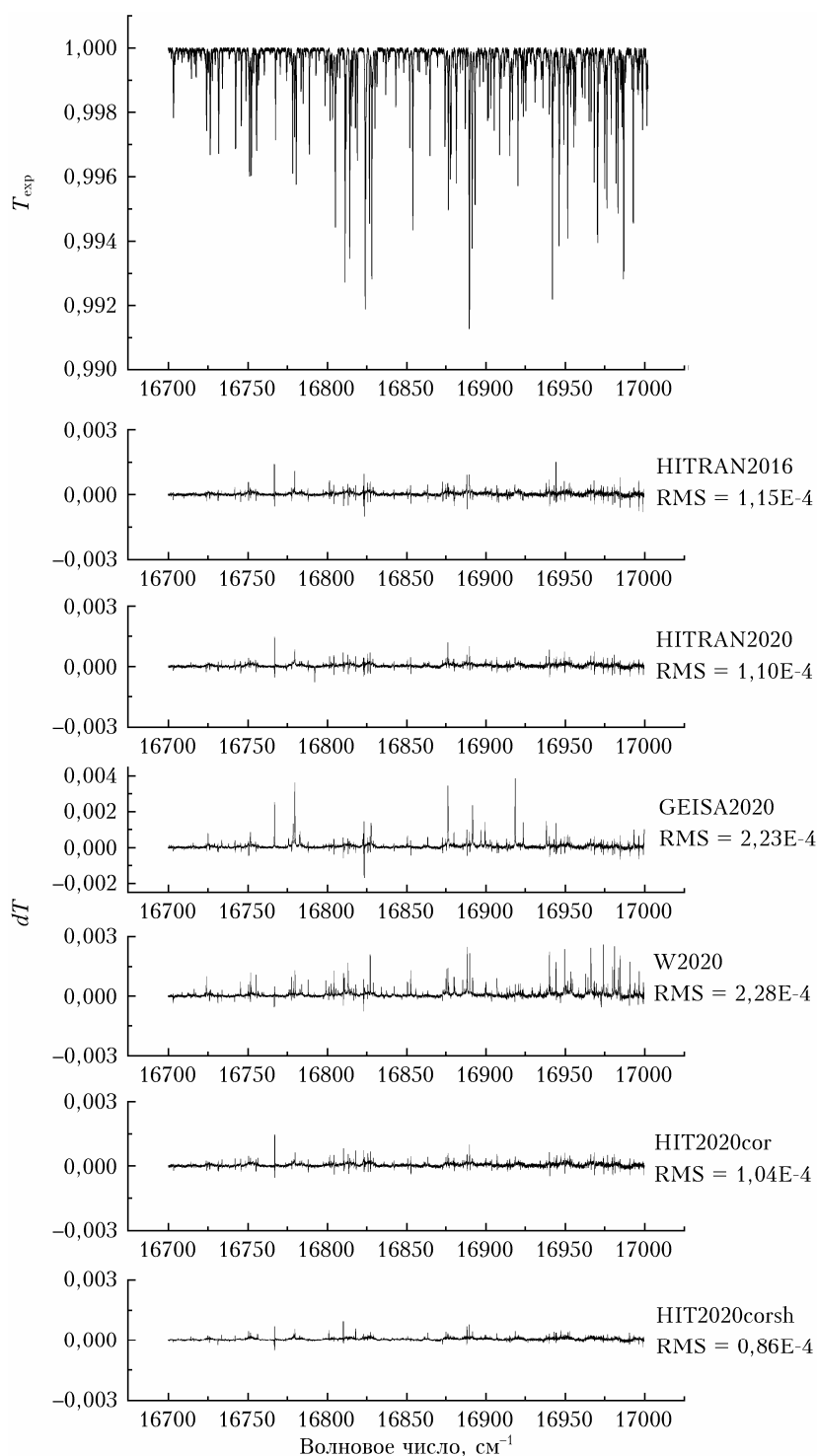


Рис. 4. Измеренный спектр H_2O при уширении N_2 и разность пропускания между ним и спектрами, вычисленными с помощью различных спектроскопических БД

HITRAN2020cor (согласно таблице) уменьшило RMS до $1,04\text{E-}4$.

Проведенные ранее исследования [2] параметров уширения спектральных линий водяного пара давлением азота показали, что в области $16700\text{--}17000\text{ см}^{-1}$ значения параметров уширения атмосферным воздухом существенно отличаются от имеющих в спектроскопических БД значений.

На рис. 5 приведено отношение коэффициентов уширения линий давлением воздуха ($D = \gamma_{\text{HITRAN}}/\gamma_{\text{exp}}$), а также отношение коэффициентов сдвига линий давлением воздуха ($d = \delta_{\text{HITRAN}}/\delta_{\text{exp}}$) в исследуемой области (γ_{exp} , δ_{exp} — экспериментальные значения коэффициентов уширения и сдвига; γ_{HITRAN} и δ_{HITRAN} — соответствующие значения коэффициентов уширения и сдвига из БД HITRAN2020).

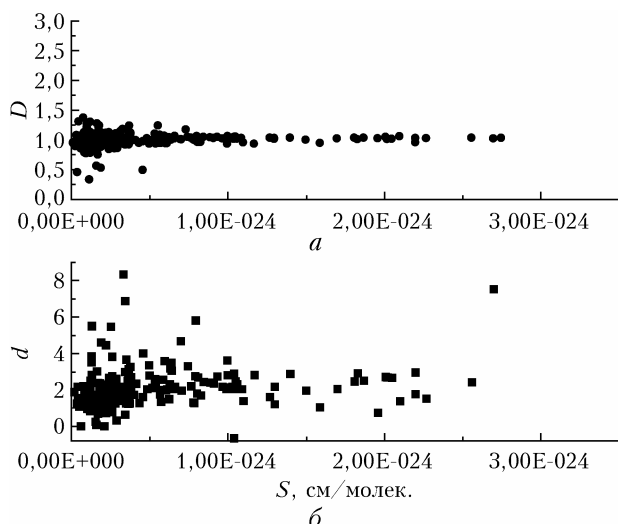


Рис. 5. Сравнение коэффициентов уширения (а) и сдвига (б) линий H_2O давлением воздуха

По оси абсцисс отложены интенсивности (S) зарегистрированных линий. Поскольку уширение линий водяного пара кислородом $\text{H}_2\text{O}-\text{O}_2$ значительно меньше уширения азотом $\text{H}_2\text{O}-\text{N}_2$, для смеси H_2O –воздух при сравнении использовались соотношения $\gamma(\text{H}_2\text{O}-\text{воздух}) = 0,89\gamma(\text{H}_2\text{O}-\text{N}_2)$ и $\delta(\text{H}_2\text{O}-\text{воздух}) = 0,88\delta(\text{H}_2\text{O}-\text{N}_2)$ [25]. Рис. 5 показывает различную точность, которую обеспечивает БД HITRAN2020 для коэффициентов уширения и сдвига линий давлением воздуха. Для коэффициентов уширения на большом интервале интенсивностей отношение D остается постоянным, а ошибка возрастает для слабых линий. Для коэффициентов сдвига линий давлением азота отношение d варьируется в широком диапазоне (от 0 до 8) и не зависит от интенсивности линий.

Как видно из рис. 5, отношение коэффициентов уширения HITRAN2020 и экспериментальных значений близко к единице, в то время как коэффициент сдвига линий давлением воздуха в среднем в два раза превышает соответствующие экспериментальные значения. В связи с этим дальнейшая коррекция этой БД проведена следующим образом. Коэффициенты уширения H_2O давлением воздуха оставлены без изменения, а коэффициенты сдвига линий взяты из работы [2], причем коэффициенты сдвига остальных линий H_2O из HITRAN2020, не измеренные в [2], уменьшены в два раза. В результате использования таких скорректированных данных, условное dT не превышает 0,001 (см. рис. 4), а RMS при моделировании с нашими значениями параметров линий поглощения $\text{H}_2\text{O}-\text{N}_2$ уменьшилось до $0,86\text{E-}4$, что значительно меньше RMS, полученных при использовании рассмотренных БД.

Заключение

Проведенный анализ современных спектроскопических БД HITRAN2016, HITRAN2020,

GEISA2020, W2020 с использованием зарегистрированных спектров поглощения H_2O и $\text{H}_2\text{O}-\text{N}_2$ в видимой области спектра $16700-17000\text{ см}^{-1}$ выявил их недостатки и позволил исправить значения интенсивностей, частот и коэффициентов самоуширения линий, коэффициентов сдвига линий давлением атмосферного воздуха. Моделирование спектра пропускания H_2O показало, что наилучшую точность описания экспериментальных данных в этой области обеспечивает HITRAN2016 ($\text{RMS} = 1,49\text{E-}4$), которой немного уступает HITRAN2020 ($\text{RMS} = 1,64\text{E-}4$). Моделирование спектра пропускания $\text{H}_2\text{O}-\text{N}_2$ показало, что наилучшую точность обеспечивает БД HITRAN2020, при использовании которой среднеквадратичная разница ($\text{RMS} = 1,10\text{E-}4$) получилась меньше, чем при использовании HITRAN2016 ($\text{RMS} = 1,15\text{E-}4$).

В результате использования скорректированной базы HITRAN2020corsh максимальное различие в пропускании модельного и экспериментального спектров dT для спектра чистой воды не превышает 0,001, а RMS при моделировании с нашими параметрами линий поглощения H_2O уменьшилось в 1,2 раза и было наименьшим ($\text{RMS} = 1,26\text{E-}4$). Для спектра $\text{H}_2\text{O}-\text{N}_2$ значение dT не превышает 0,001, а значение RMS при моделировании с нашими параметрами линий поглощения H_2O уменьшилось в 1,3 раза и оказалось наименьшим ($\text{RMS} = 0,86\text{E-}4$) среди всех рассмотренных баз.

Полная версия скорректированных данных HITRAN2020corsh по линиям поглощения водяного пара в диапазоне $16700-17000\text{ см}^{-1}$ может быть предоставлена авторами статьи по запросу.

Финансирование. Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (грант № 23-23-00184).

Список литературы

1. Fally S., Coheur P.-F., Carleer M., Clerbaux C., Colin R., Jenouvrier A., Merienne M.-F., Hermans C., Vandaele A.C. Water vapor line broadening and shifting by air in the $26000-13000\text{ см}^{-1}$ region // J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer. 2003. V. 82. P. 119–131.
2. Serdyukov V.I., Sinitsa L.N., Vasilchenko S.S., Lavrentieva N.N., Dudaryonok A.S., Scherbakov A.P. Study of H_2O line broadening and shifting by N_2 pressure in the $16,600-17,060\text{ см}^{-1}$ region using FT-spectrometer with LED source // J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer. 2018. V. 219. P. 213–223. DOI: 10.1016/j.jqsrt.2018.08.014.
3. Mikhailenko S., Serdyukov V., Sinitsa L. Study of H_2^{16}O and H_2^{18}O absorption in the $16460-17200\text{ см}^{-1}$ 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.
4. 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. H_2^{17}O and H_2^{18}O with an update to H_2^{16}O // J. Phys. Chem. Ref. Data. 2020. V. 49. P. 043103.

5. 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. Roy. Astron. Soc.* 2018. V. 480, N 2. P. 2597–2608.
6. Conway E.K., Gordon I.E., Kyuberis A.A., Polyansky O.L., Tennyson 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.
7. Gordon E., Rothman L.S., Hill C., Kochanov R.V., Tana Y., Bernath P.F., Birk M., Boudon V., Campargue A., Chance K.V., Drouin B.J., Flaud J.-M., Gamache R.R., Hodges J.T., Jacquemart D., Perevalov V.I., Perrin A., Shine K.P., Smith M.-A.H., Tennyson J., Toon G.C., Tran H., Tyuterev V.G., Barbe A., Császár A.G., Devi V.M., Furtenbacher T., Harrison J.J., Hartmann J.-M., Jolly A., Johnson T.J., Karman T., Kleiner I., Kyuberis A.A., Loos J., Lyulin O.M., Massie S.T., Mikhailenko S.N., Moazzen-Ahmadi N., Müller H.S.P., Naumenko O.V., Nikitin A.V., Polyansky O.L., Rey M., Rotger M., Sharpe S.W., Sung K., Starikova E., Tashkun S.A., Vander Auwera J., Wagner G., Wilzewski J., Wcisło P., Yu S., Zak E.J. The HITRAN2016 molecular spectroscopic database // *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer.* 2017. V. 203. P. 3–69.
8. Borger C., Beirle S., Dörner S., Sihler H., Wagner T. Total column water vapour retrieval from S-5P/TROPOMI in the visible blue spectral range // *Atmos. Meas. Tech.* 2020. V. 13, N 5. P. 2751–2783. DOI: 10.5194/amt-13-2751-2020.
9. 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., Wcisło 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., Canè 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., Lukashevskaya A.A., Lyulin O.M., Makhnev V.Yu., Matt W., Massie S.T., Melosso M., Mikhailenko S.N., Monodelain 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., 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. P. 107949. DOI: 10.1016/j.jqsrt.2021.107949.
10. 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.
11. Бубукина И.И., Зобов Н.Ф., Полянский О.Л., Шурин С.В., Юрченко С.Н. Оптимизированная полуэмпирическая поверхность потенциальной энергии H_2^{16}O до 26000 cm^{-1} // *Опт. и спектроскоп.* 2011. Т. 110, № 2. С. 186–193.
12. Tolchenov R.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.
13. Tennyson J., Bernath P.F., Brown L.R., Campagne A., Császár A.G., Daumont L., Gamache R.R., Hodges J.T., Naumenko O.V., Polyansky O.L., Rothman L.S., Vandaele A.C., Zobov N.F., Al Derzi A.R., Fabri C., Fazliev A.Z., Furtenbacher T., Gordon I.E., Lodi L., Mizus I.I. IUPAC critical evaluation of the rotational-vibrational spectra of water vapor, part III: Energy levels and transition wavenumbers for H_2^{16}O // *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer.* 2013. V. 117. P. 29–58. DOI: 10.1016/j.jqsrt.2012.10.002.
14. Antony B.K., Neshyba S., Gamache R.R. Self-broadening of water vapor transitions via the complex Robert–Bonamy theory // *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer.* 2007. V. 105. P. 148–163.
15. Jacquemart D., Gamache R.R., Rothman L.S. Semi-empirical calculation of air-broadened half-widths and air pressure-induced frequency shifts of water-vapor absorption lines // *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer.* 2005. V. 96. P. 205–239.
16. Gamache R.R., Laraia A.L. N_2 , O_2 , and air-broadened half-widths, their temperature dependence, and line shifts for the rotation band of H_2^{16}O , calculations redone at 20 4 4 order // *J. Mol. Spectrosc.* 2009. V. 257. P. 116–127.
17. 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.I.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. DOI: 10.1016/j.jms.2021.111510.
18. Serdyukov V.I., Sinitsa L.N. New features of an FT spectrometer using LED sources // *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer.* 2016. V. 177. P. 248–252. DOI: 10.1016/j.jqsrt.2016.01.002.
19. Kruglova T.V., Shcherbakov A.P. Automated line search in molecular spectra based on nonparametric statistical methods: Regularization in estimating parameters of spectral lines // *Opt. Spectrosc.* 2011. V. 111. P. 353–356.
20. Мицель А.А., Пташник И.В., Фурсов К.М., Фомин Б.А. Эффективный метод полинейного счета пропускания поглощающей атмосферы // *Оптика атмосф. и океана.* 1995. Т. 8, № 10. С. 1547–1551.
21. Voronin B.A., Lavrentieva N.N., Mishina T.P., Chesnokova T.Yu., Barber M.J., Tennyson J. Estimate of the $J''J'$ -dependence of water vapor line broadening parameters // *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer.* 2010. V. 111, N 15. P. 2308–2314.
22. *Compilations* from Geoffrey Toon (JPL). URL: <http://mark4sun.jpl.nasa.gov/toon/linelist/linelist.html> (last access: 10.03.2023).
23. Toon G.C., Blavier J.-F., Keeyoon Sung, Rothman L.S., Gordon I.E. HITRAN spectroscopy evaluation using

- solar occultation FTIR spectra // J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer. 2016. V. 182. P. 324–336.
24. *Frankenberg C., Warneke T., Butz A., Aben I., Hase F., Spietz P., Brown L.R.* Pressure broadening in the $2\nu_3$ band of methane and its implication on atmospheric retrievals // Atmos. Chem. Phys. 2008. V. 8. P. 5061–5075.
 25. *Toth R.A.* Air- and N_2 -broadening parameters of water vapor: 604 to 2271 cm^{-1} // J. Mol. Spectrosc. 2000. V. 201. P. 218–243.

L.N. Sinitsa, T.Yu. Chesnokova. Analysis of water vapor absorption lines in the modern spectroscopic databases in the 16700–17000 cm^{-1} region.

The validation of H_2O absorption lines parameters in the modern spectroscopic databases such as HITRAN2016, HITRAN2020, GEISA2020, and W2020 database of H_2O lines is carried out in the visible region 16700–17000 cm^{-1} . The H_2O transmission spectra were simulated with the spectroscopic databases and compared with laboratory spectra of pure water vapor and H_2O-N_2 mixture ($P = 1$ atm), recorded using a Fourier spectrometer with light-emitting diodes of high luminance. The parameters of 65 H_2O absorption lines from HITRAN2020 database were corrected on the basis of the measurements. The positions of 32 lines, intensities of 51 lines, and self-broadening coefficients of 10 lines were improved. The ratio of the HITRAN2020 broadening coefficients to the experimental values is close to 1, whereas the air pressure-induced line shift coefficients in the spectroscopic databases are, on average, two times higher than the experimental values, and therefore, our previously obtained experimental values of N_2 pressure-induced line shift coefficients were used to simulate the transmission spectra of H_2O-N_2 mixture.

The difference of the experimental spectra from the spectra calculated with HITRAN2016, HITRAN2020, GEISA2020, and W2020 spectroscopic databases and corrected HITRAN2020cor gives root-mean-square deviations $RMS = 1.49E-4$, $1.64E-4$, $3.96E-4$, $3.49E-4$, and $1.26E-4$ in the case of pure water vapor and $RMS = 1.15E-4$, $1.1E-4$, $2.23E-4$, $2.28E-4$, and $0.86E-4$ for H_2O-N_2 mixture, respectively.