

ОПТИЧЕСКИЕ МОДЕЛИ И БАЗЫ ДАННЫХ ОПТИЧЕСКОЙ ИНФОРМАЦИИ
ОБ ОКРУЖАЮЩЕЙ СРЕДЕ

УДК 535.343.4+004.78

Информационная система для решения задач молекулярной спектроскопии. 7. Систематизация информационных ресурсов по поглощению для основного изотополога молекулы метанола

**А.Ю. Ахлестин, С.С. Воронина, А.И. Привезенцев,
О.Б. Родимова, А.З. Фазлиев***

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

Поступила в редакцию 28.04.2016 г.

На примере молекулы метанола показано, как средствами информационной системы W@DIS проводится систематизация ресурсов по спектроскопии. Представлены основные информационные объекты, дано объяснение выбора используемого набора квантовых чисел, кратко описаны характеристики почти 40 публикаций о поглощении метанола, и рассмотрены примеры интерфейсов для анализа согласованности волновых чисел разных источников данных, а также интерфейс приложения для формирования списка измеренных переходов.

Ключевые слова: метанол, колебательно-вращательные переходы, информационная система W@DIS; methanol, ro-vibrational transitions, information system W@DIS.

Введение

Накопление данных в науках, использующих большие объемы фактов, в частности в количественной спектроскопии, многократно проходит стадию систематизации связанных с ними информационных ресурсов. В спектроскопии результатом систематизации является повышение качества данных, ориентированных как на внутренние задачи спектроскопии (построение функций потенциальных поверхностей, глобальный фитинг и т.д.), так и на задачи прикладных наук. При систематизации решаются накопившиеся противоречия между вычисленными и измеренными значениями физических величин, унифицируются термины и понятия, уточняются математические модели. В последнее время систематизация часто сопровождается использованием новых форм представления ресурсов (XML-схемы [1], онтологии [2]), обусловленных появлением актуальных программных методов обработки информации и знаний.

Информационная система (ИС) W@DIS, в рамках которой выполнена наша работа, предназначена для накопления и систематизации значений уровней

энергий, волновых чисел, параметров столкновительных контуров атмосферных молекул. Она также ориентирована на коллективную работу исследователей со спектральными информационными ресурсами, и целью ее создания является формирование и актуализация полной системы опубликованных спектральных данных, обеспеченных детальным описанием их свойств. Эти свойства, представленные в форме онтологических баз знаний [2–4], позволяют в автоматическом режиме оценивать достоверность каждого источника данных и сравнивать их друг с другом для выявления и преодоления рассогласований с целью повышения качества данных ИС.

К числу основных формальных характеристик ИС W@DIS относятся:

- 1) полнота и достоверность первичных источников данных (опубликованных значений характеристик состояний и переходов в процессах поглощения и эмиссии);
- 2) высокий уровень детализации свойств данных, характеризующих их качество;
- 3) формальное представление информации и знаний о спектральных характеристиках с высокой степенью выразительности;
- 4) использование унифицированных приложений для анализа и презентации качества данных.

В ИС W@DIS полнота данных достигнута для более чем десятка атмосферных молекул [5–15]. Для молекул H₂O [5] и H₂S [6] и их изотопологов [7–10] согласованы данные по волновым числам.

* Алексей Юрьевич Ахлестин (lexa@iao.ru); Светлана Станиславовна Воронина (vss@iao.ru); Алексей Иванович Привезенцев (gemake@iao.ru); Ольга Борисовна Родимова (rod@iao.ru); Александр Зарипович Фазлиев (faz@iao.ru).

К сожалению, публикации по детальной систематизации полных наборов спектральных данных других молекул все еще являются редкими. Технические характеристики 2)–4) впервые реализованы в ИС W@DIS в 2008 г. и постоянно модернизируются.

В данной статье, являющейся продолжением нашей работы [15], в частности, рассмотрен ряд технических задач, с которыми авторы столкнулись при систематизации волновых характеристик переходов, полученных при исследовании процессов поглощения для основного изотополога молекулы метанола.

В разд. 1 описаны общие характеристики цифровой библиотеки, содержащей публикации, первичные и иные источники данных (ИД) о характеристиках переходов. Во втором разделе рассмотрены подходы к формализации описания состояний в молекуле метанола и приведены используемые в литературе наборы квантовых чисел для этой молекулы. В разд. 3 дана таблица источников данных о волновых числах, добавленных в ИС W@DIS после выхода работы [15]. В четвертом – описаны некоторые функции приложений «Мультимножество» и «Бинарные отношения», используемые при оценке качества данных. В заключении представлено краткое описание результатов работы.

1. Цифровая библиотека информационных ресурсов по молекуле метанола

Основу информационных ресурсов по молекуле метанола, как и по другим молекулам в ИС W@DIS, составляют цифровые публикации (статьи, доклады, материалы конференций, диссертации и т.д.). Доступная большинству пользователей часть включает источники данных, например источник данных, содержащий волновые и квантовые числа, описывающие переходы, и некоторые простые свойства этих переходов (молекула, к которой относятся данные, спектроскопическая задача, решением которой являются данные; публикация, из которой извлечены данные) [16]. Каждый из источников данных содержит один из восьми разных наборов характеристик переходов и состояний. Такими наборами являются данные об опубликованных решениях трех спектроскопических задач [17]; о конкретном состоянии молекулы; о конкретном переходе в изолированной молекуле; о профиле спектральной линии [3] и данные о колебательно-вращательной полосе или колебательном состоянии. Источник данных об опубликованном решении спектральной задачи содержит все данные по одной из спектроскопических задач, содержащиеся в пуб-

ликации; источник данных о переходе – все опубликованные данные о переходе из коллекции информационных ресурсов в ИС W@DIS.

В свою очередь источники данных разделяются на первичные, экспертные и референтные (эталонные). К первичным данным относятся результаты решения одной из восьми задач спектроскопии [18], полученные одним методом. Экспертные данные формируются экспертами, и при детальном рассмотрении они оказываются частями разных первичных источников данных. Эталонные первичные данные об уровнях энергии являются решением задачи определения уровней энергии из полного набора характеристик (вакуумных волновых чисел и погрешностей их определения) идентифицированных спектральных линий [19].

Эти восемь наборов источников данных интенсивно используются как для решения внутренних задач спектроскопии (например, для построения функций потенциальной поверхности), так и в прикладных науках (уровни энергии в физике молекулярных лазеров, спектральные линии в расчетах радиационных процессов в атмосфере, спектральные полосы в климатических исследованиях и т.д.), а также при решении информационных задач (первичные и референтные источники данных для оценки доверия экспертным данным, полосы и колебательные состояния для ускорения скорости выборки пар источников данных, содержащих идентичные переходы или состояния).

В табл. 1 и 2 приведены статистические данные о коллекции информационных ресурсов по основному изотопологу молекулы метанола в ИС W@DIS. Из табл. 1 следует, что число источников данных по поглощению и испусканию практически одинаково, тогда как число источников данных о переходах по поглощению существенно больше числа источников данных о переходах в процессах эмиссии. Для первичных источников данных в скобках дано число источников данных, содержащих результаты расчетов.

В 70–90-х гг. прошлого века появилось несколько атласов спектральных линий метанола в микроволновом и дальнем ИК-диапазонах, которые в нашей системе выделены как экспертные источники данных. Атлас [20] идентифицированных линий поглощения и эмиссии молекулы метанола в диапазоне $0,00021-1257,72652 \text{ см}^{-1}$ содержит около 35000 переходов, почти 20000 переходов из которых впервые были введены в научный оборот. Публикации из содержащейся в атласе обширной библиографии стали составной частью цифровой библиотеки ИС W@DIS, а данные, извлеченные из них, – основой коллекции источников данных.

Таблица 1

Статистика публикаций по молекуле метанола и связанных с ними источников данных

Молекула	Период выхода публикаций, гг.	Число публикаций	Процесс	Число источников данных			Число переходов		
				первичных	экспертных	эталонных	первичных	экспертных	эталонных
CH ₃ OH	1938–2015	339	абсорбция	86(25)	4	–	53907 (28837)	54750	–
CH ₃ OH	1968–2007	(303)	эмиссия	87(17)	11	2	1447 (351)	706 (2522)	4794

Распределение источников данных по вакуумным волновым числам и диапазонам их изменения

Диапазон, см ⁻¹ Период	Радио 0,0–0,1	Микро- волновой 0,1–10	Дальний ИК 10–630	Длинновол- новой ИК 630–1250	Средний ИК 1250–3300	Коротко- волновой ИК 3300–7000	Ближний ИК 7000– 13500	Видимый 13500–24000	Все диапазоны 0–24000
1969–1995	9	24	37	13	3	0	0	1	84
1996–2015	3	4	8	6	7	1	2	0	31
Всего:	12	28	45	19	10	1	2	1	125

Экспертные данные о поглощении в молекуле метанола впервые появились в [20], позже в [21, 22] (в обеих работах один и тот же набор данных из 19897 переходов). В статьях [21, 22] практически отсутствуют ссылки на первоисточники, что не дает возможности оценить, какую часть в них представляли расчетные данные, а какую данные измерений. Используя нашу коллекцию данных, можно показать, что в экспертных данных используются более 50% неопубликованных данных (как расчетных, так и измеренных).

Стоит отметить, что, как следует из табл. 2, работы по основному изотопологу метанола были выполнены в конце прошлого века и в большей своей части сосредоточены в трех диапазонах: микроволновом, дальнем и длинноволновом ИК.

В столбцах табл. 2 указаны название и границы диапазонов, в строчках первого столбца – года публикаций. Были учтены все источники данных, извлеченные из экспериментальных работ. Экспертные данные также вошли в таблицу. Один и тот же набор данных мог считаться несколько раз, поскольку он может состоять из нескольких диапазонов. Как видно из таблицы, наиболее исследованным диапазоном был и остается дальний ИК.

Основную сложность при ретроспективном анализе данных по метанолу представляет использование разных наборов квантовых чисел в течение последних 40 лет.

2. Описание состояний метанола

Метанол является одной из простейших нежестких молекул, способных к заторможенному внутреннему вращению. Структура его уровней очень сложна, поэтому он теоретически интересен и его спектр изучается в микроволновом, дальнем ИК- и ИК-диапазонах более 50 лет. В основном электронном состоянии имеются 12 нормальных колебательных мод $\nu_1 - \nu_{12}$. Все колебательные моды, кроме ν_{12} , лежат в ИК-спектре (1000 см^{-1} и выше), и вращательные переходы расположены в микроволновом и дальнем ИК-диапазонах. Колебательная мода ν_{12} отвечает внутреннему вращению группы ОН и группы CH_3 друг относительно друга. Отталкивание между Н-атомом группы ОН и Н-атомами группы CH_3 порождает периодический тормозящий (торсионный) потенциальный барьер для внутреннего вращения с периодом $2\pi/3$. Внутреннее вращение приводит к переходам между тремя эквивалентными энергетическими configura-

циями. При этом симметрия метильной группы C_{3v} вследствие взаимодействия с ОН понижается до группы $C_s = (E, \sigma^{xz})$ (xz – плоскость, проходящая через вершину С и одну из сторон группы CH_3 перпендикулярно ее основанию и содержащая группу ОН).

Имеется несколько подходов к классификации состояний нежестких молекул. Наиболее распространенным является подход, использующий полную ядерную перестановочно-инверсионную (СNPI) группу молекулы [23, 24], определяемую как прямое произведение группы перестановок тождественных ядер молекулы, группы инверсии пространственных координат всех частиц молекулы (ядер и электронов) относительно центра масс и группы перестановок всех электронов. Такая группа содержит чрезвычайно большое число элементов, и поэтому обычно ограничиваются рассмотрением перестановок только ядер молекулы, с инверсией и без инверсии. Даже и такие группы оказываются слишком велики, и уже в первой работе Lonquet-Higgins [23] было предложено рассматривать не все элементы подобной группы, а лишь «допустимые», т.е. те, которые осуществляются за время, характерное для конкретного эксперимента. Выбор может происходить, например, на основе сравнения времени эксперимента со временем туннелирования между равновесными конфигурациями. Такую группу называют группой молекулярной симметрии (MS). Как отмечено в работе [25], несмотря на отсутствие строго математического аппарата, эта концепция нашла широкое применение. Вскоре после работ Lonquet-Higgins появились работы Altmann [26, 27], которые также были посвящены рассмотрению симметрии нежестких молекул. В них была введена так называемая супергруппа Шредингера, являющаяся полупрямым произведением группы симметрии уравнения Шредингера и группы операций нового типа, называемых изодинамическими операциями. В работе [27] утверждается, что при использовании одинаковых приближений для гамильтониана оба метода дают одинаковые результаты.

Еще одним инструментом для описания симметрии нежестких молекул является применение изометрических групп, систематизированное в работе [25]. Авторы [25] руководствуются желанием найти метод, который стартует с геометрического описания ядерной конфигурации и заменяет концепцию «допустимости» строгими математическими определениями. Новая теория групп нежестких молекул (NRG) предложена в [28]. В отличие от

теории Lonquet-Higgins [23, 24], обращающейся к перестановкам и перестановкам с инверсией, эта теория сохраняет обычные операции симметрии. В ней определяются полные и ограниченные группы симметрии нежестких молекул, причем последние можно сравнить с изодинамическими группами Altmann [26, 27] и изометрическими группами [25]. Мы видим, что в предложенных вариантах прослеживается тенденция сделать концепцию группы симметрии нежестких молекул более наглядной физически, приблизив ее к рассмотрению точечных групп. При этом свойства симметрии гамильтониана на уровне постановки задачи практически не обсуждаются, за исключением приближения Борна–Оппенгеймера.

Подход, развиваемый Бурениным [29,30], явно вводит в рассмотрение свойства гамильтониана. Он основан на концепции цепочки групп симметрии вложенных друг в друга моделей, которые возникают при упрощении задачи о стационарных состояниях молекулы от строгой постановки до решаемой задачи. Анализ преимуществ и недостатков этого метода можно найти в работе Буренина [29]. Мы поясним ниже концепцию цепочки групп на примере метанола. Разрешенные мультиплеты для молекулы метанола в основном электронном состоянии приведены в статье [31, 32].

Для молекулы CH_3OH могут использоваться следующие модели и соответствующие им группы симметрии [32]: 1) строгая постановка задачи – $\pi_3 \times \pi_1$ ($\pi_3 \times \pi_1$ – группа перестановок тождественных ядер H); 2) приближение Борна–Оппенгеймера для нежесткой молекулы – $G_{12} \times C_i$, где расширенная точечная группа $G_{12} = C_{3v} \times C'_s$ (элементы групп C_{3v} и C'_s действуют на пространственные координаты структур CH_3 и OH) определяется геометрической симметрией промежуточной конфигурации, через которую происходит переход между равновесными конфигурациями; 3) приближение Борна–Оппенгеймера для одной конфигурации (жесткая молекула) – $C_s \times C_i$; 4) нулевое приближение, соответствующее жесткой молекуле с независимыми колебательными и вращательными движениями, описание которых проводится в моделях гармонического осциллятора (группа C_s) и жесткого асимметричного волчка (группа D_2). Классификация стационарных состояний получается путем сшивки групп симметрии соседних моделей [31, 32]. Учет торсионных движений, дополнительных к нулевому приближению, происходит на уровне группы G_{12} , которая имеет представления $(A_1 \times A')$, $(E \times A')$, $(A_2 \times A')$, где A_1, A_2, E – представления группы C_{3v} , а A' – представление группы C'_s . Учет группы инверсии добавляет к обозначениям представлений значки \pm .

Одной из основополагающих при рассмотрении спектров метанола является работа Moruzzi et al. [20], в которой систематизированы многочисленные теоретические и экспериментальные исследования спектров CH_3OH , выполненные к тому времени. Ее особенностью является факт, что учет торсионных

движений рассматривается уже в нулевом приближении. Стационарные состояния в рамках нулевого приближения [20] нумеруются квантовыми числами (σ, n, J, K) , где J определяет собственные значения оператора квадрата молекулярного углового момента, а K – его проекцию на ось внутреннего вращения, σ (или Symm , или τ) определяет представление группы C_{3v} , описывающей симметрию метильной группы атомов, n (или ν_t) нумерует состояния, относящиеся к торсионному колебанию. Учет асимметрии вращения молекулы как целого добавляет индексы \pm , нумерующие компоненты дублета A . Разбиение торсионно-вращательных волновых функций по типам симметрии, полученное в [32], отвечает описанному в [20] нулевому приближению.

У метанола есть постоянный дипольный момент с ненулевыми компонентами вдоль осей a и b . Поэтому в метаноле дозволены параллельные (a -типа) и перпендикулярные (b -типа) переходы. Приведем правила отбора для них так, как они сформулированы в [20].

(i) переходы a -типа:

$$\Delta K = 0, \Delta J = 0, \pm 1, \Delta n = 0,$$

$$A^\pm \leftrightarrow A^\pm \text{ для } \Delta J = \pm 1,$$

$$A^\pm \leftrightarrow A^\mp \text{ для } \Delta J = 0.$$

(ii) переходы b -типа:

$$\Delta K = \pm 1, \Delta J = 0, \pm 1, \Delta n = \text{любое},$$

$$A^\pm \leftrightarrow A^\mp, \text{ если } \Delta n + \Delta J - \text{четное},$$

$$A^\pm \leftrightarrow A^\pm, \text{ если } \Delta n + \Delta J - \text{нечетное}.$$

Правила отбора для A^+ и A^- получаются из общей четности $\pm(-1)^{J+n}$ и из того, что четность может меняться в электрическом дипольном переходе. В любом переходе торсионная симметрия сохраняется:

$$E_1 \leftrightarrow E_1, E_2 \leftrightarrow E_2 \text{ и } A \leftrightarrow A,$$

т.е. $\Delta\sigma = 0$, или в обозначениях [33] $\Delta(\tau + K) = 0, \pm 3$.

Учет торсионно-колебательных взаимодействий может приводить к смешиванию состояний и к появлению наблюдающихся в эксперименте переходов с $\Delta K > 2$ (см., например, [34, 35]).

Таким образом, мы видим, что классификация состояний метанола, отвечающая нулевому приближению [20], (σ, n, J, K) , оказывается недостаточной при более точной постановке задачи: так, состояние A , характерное для нулевого приближения, расщепляется на A^+ и A^- при учете асимметрии вращения. Это приводит к некоторым трудностям в формулировке условий для сравнения состояний в информационной системе, которые не связаны с физикой задачи, а только с созданием соответствующих алгоритмов, в которых квантовые числа играют важную роль.

3. Источники волновых чисел по молекуле метанола

В нашей коллекции большинство публикаций по спектральным характеристикам метанола относятся к изолированной молекуле, а число публикаций по столкновительным характеристикам, формирующим контур линии, незначительно. В табл. 3

перечислены 36 источников данных, содержащих 20633 перехода, которые для полноты надо дополнить 30 источниками данных, описанных нами в [15]. В ней приведены названия источников данных и для каждого источника даны диапазоны вакуумных волновых чисел, число переходов, колебательные полосы, содержащиеся в нем, тип экспериментальной установки, использованной при измерениях, и погрешность измерений.

Т а б л и ц а 3

Перечень источников волновых чисел, полученных при измерениях, для основного изотополога молекулы метанола

Публикация	Спектральный диапазон, см ⁻¹	<i>n</i>	Колебательные полосы	ТУ	Погрешность измерений
1972_Lees_b [36]	0,767448–0,875832	22	0–0	<i>a, b</i>	±0,1 МГц
1972_KwDe [37]	0,832264–873,71	55	0–0, 0–2ν ₁₂ , 0–3ν ₁₂ , ν ₁₂ –ν ₁₂ , ν ₁₂ –3ν ₁₂	–	0,03 см ⁻¹ ,
1972_Lees [38]	1,59424–1,670339	18	ν ₈ –ν ₈	<i>b</i>	±0,1 МГц
1972_Radford [39]	0,02783–0,02783	4	0–0	–	0,002 МГц
1977_StBeKaMo [40]	97,04–263,49	117	0–ν ₁₂ , ν ₁₂ –ν ₁₂ , ν ₁₂ –2ν ₁₂ , 2ν ₁₂ –2ν ₁₂ , 2ν ₁₂ –3ν ₁₂ , 3ν ₁₂ –3ν ₁₂ , 3ν ₁₂ –4ν ₁₂	FTS	0,25 см ⁻¹
1978_BeDuHeOr [41]	1033,382–1033,518	4	ν ₈ –0	–	–
1978_SaIcMaKi [42]	9,653–35,415	40	0–0	FTS	0,001 см ⁻¹
1978_Worchesk [43]	8,1722–26,6	6	0–0, ν ₈ –0	–	–
1979_SaRiWo [44]	1026,872–1068,578	290	ν ₈ –0	–	0,004 см ⁻¹
1982_LoSUSnHo [45]	3,1084–3,4243	8	ν ₁₂ –ν ₁₂	–	–
1983_Belz [46]	34,9–215,517	35	ν ₈ –0	–	–
1984_Brink [47]	16624,91–16765,83	80	4ν ₁ –0	–	0,01 нм
1984_SaLeLu [48]	0,507487–13,30741	418	0–0, ν ₁₂ –ν ₁₂ , 2ν ₁₂ –2ν ₁₂	–	±0,1 МГц,
1985_LeMuJo [49]	1002,589–1047,845	42	ν ₈ +ν ₁₂ –ν ₁₂	FTS	0,004 см ⁻¹
1986_RuAvHe [50]	1025,347–1035,665	5	0–0, ν ₁₂ –ν ₁₂ , 2ν ₁₂ –2ν ₁₂	–	–
1986_Lees [51]	172,629–1048,135	101	ν ₁₂ –0, ν ₈ –0, ν ₈ +ν ₁₂ –ν ₁₂ , ν ₈ +2ν ₁₂ –2ν ₁₂	FTS	0,001 см ⁻¹
1987_MuLeJo [52]	117,8595–270,0872	207	ν ₁₂ –0, 3ν ₁₂ –2ν ₁₂	–	–
1988_MuLeJo [53]	23,85–180,60308	87	2ν ₁₂ –ν ₁₂	FTS	0,001 см ⁻¹
1989_MoStCaLe [54]	0,00004 –101,76172	6720	0–0, ν ₁₂ –0, ν ₁₂ –ν ₁₂ , 2ν ₁₂ –ν ₁₂ , 2ν ₁₂ –2ν ₁₂ , 3ν ₁₂ –3ν ₁₂ , ν ₈ –ν ₈ , ν ₈ +ν ₁₂ –ν ₈ +ν ₁₂	FTS	0,001 см ⁻¹
1989_MoPrEvJe [55]	116,229–163,05	91	0–ν ₁₂ , ν ₁₂ –0, ν ₁₂ –2ν ₁₂ , 2ν ₁₂ –0, 2ν ₁₂ –2ν ₁₂	TuFIR	35 кГц,
1990_InZiEvJe [56]	30,42466–85,09798	22	0–0	TuFIR	–
1991_CaIoMeMo [57]	47,548668	1	0–0	–	–
1991_HuShCoBi [58]	2807,582–2873,727	274	ν ₃ +ν ₁₂ –ν ₁₂ , ν ₃ –0	FTS	3 · 10 ⁻⁴ см ⁻¹
1991_MuLeJo [59]	38,7842–191,19881	85	ν ₈ –ν ₈ , ν ₈ +2ν ₁₂ –ν ₈ +ν ₁₂	FTS	4 · 10 ⁻³ см ⁻¹
1992_AnHeLu [60]	0,331435–29,70203	368	0–0, ν ₁₂ –ν ₁₂ , 2ν ₁₂ –2ν ₁₂	–	–
1992_GoMeLu [61]	1047,962–1048,898	9	0–ν ₈ , ν ₁₂ –ν ₈ +ν ₁₂ , 2ν ₁₂ –ν ₈ +2ν ₁₂ , 3ν ₁₂ –ν ₈ +3ν ₁₂	–	–
1992_MoStMoLe [62]	200,0204–351,9782	8797	0–0, 0–3ν ₁₂ , ν ₁₂ –0, ν ₁₂ –ν ₁₂ , 2ν ₁₂ –0, 2ν ₁₂ –ν ₁₂ , 2ν ₁₂ –2ν ₁₂ , 3ν ₁₂ –0, 3ν ₁₂ –ν ₁₂ , 3ν ₁₂ –2ν ₁₂ , 3ν ₁₂ –3ν ₁₂ , 4ν ₁₂ –3ν ₁₂ , 5ν ₁₂ –3ν ₁₂	FTS	–
1994_HePaYaHe [63]	1033,86–1039,815	21	ν ₈ –0	–	–
1995_OdMaNaTs [64]	0,02782–216,3524	1152	0–0, ν ₁₂ –0, ν ₁₂ –ν ₁₂ , 2ν ₁₂ –ν ₁₂ , 2ν ₁₂ –2ν ₁₂	TuFIR	–
1997_XuWaCrPe [65]	2976,313–3027,377	472	ν ₂ –0	–	2 · 10 ⁻⁴ см ⁻¹
2001_ScBeHuLi [66]	20,25452–24,18383	329	0–0, ν ₁₂ –ν ₁₂ , 2ν ₁₂ –2ν ₁₂	–	–
2003_BrWeChBo [67]	2831,593–2836,609	15	ν ₃ –0	–	–
2004_XuKaPe [68]	6510,86–6547,5864	331	ν ₁ +ν ₃ –ν ₁	CRDS	1,7 · 10 ⁻⁹ см ⁻¹
2010_MuOzLe [69]	2006,09–2082,77	147	ν ₈ –0	FTS	4 · 10 ⁻³ см ⁻¹
2015_SlXuGiGo [70]	49,37219–49,84907	239	0–0, 0–ν ₁₂ , ν ₁₂ –ν ₁₂ , 2ν ₁₂ –ν ₁₂ , ν ₁₂ –2ν ₁₂	–	500 кГц
2015_VoHoSvRa [71]	7192,69–7209,98	21	2ν ₁ –0	–	3 · 10 ⁻⁴ см ⁻¹

Примечание. *n* – число переходов в импортированном источнике данных, который относится к публикации; ТУ – тип экспериментальной установки или ее базовые элементы (*a* – 100 кГц спектрограф с модуляцией Штарка; *b* – 85 кГц спектрограф; TuFIR – спектрометр с перестраиваемым диодным лазером, CRDS – спектрометр с внутривибрационным затуханием).

4. Интерактивный инструмент для систематизации информационных ресурсов по спектроскопии

В ИС W@DIS имеются более двух десятков инструментов для систематизации ресурсов, работающих в сети Интернет [72]. В число этих инструментов входят системы импорта данных, просмотра источников данных разного типа, формирования списков параметров спектральных линий, описания свойств источников данных, просмотра парных отношений между источниками данных и т.д. В этом разделе рассмотрены два приложения – «Бинарные отношения» и «Мультимножество». Первое приложение позволяет просматривать значения парных отношений между источниками данных о решениях спектроскопических задач,

а второе – формировать списки спектральных линий и некоторые выборки из них.

4.1. Бинарные отношения. Согласованность волновых чисел

Согласованы или не согласованы волновые числа в источниках данных определяется количественными критериями. Значения критериев зависят от требований к качеству физических характеристик перехода, предъявляемых исследователем. Перечень бинарных отношений, детали вычислений парных отношений и отображения их значений даны в нашей работе [73].

В верхней части рис. 1, представляющего один из интерфейсов приложения «Бинарные отношения», перечислены условия, которые исследователь может определить для выбора искомого источника

Вещество	CH ₃ OH																											
Выбор спектральной полосы. i – начальное и f – конечное состояние	v ₁ ^f	v ₂ ^f	v ₃ ^f	v ₄ ^f	v ₅ ^f	v ₆ ^f	v ₇ ^f	v ₈ ^f	v ₉ ^f	v ₁₀ ^f	v ₁₁ ^f	v ₁₂ ^f	r ^f	v ₁ ⁱ	v ₂ ⁱ	v ₃ ⁱ	v ₄ ⁱ	v ₅ ⁱ	v ₆ ⁱ	v ₇ ⁱ	v ₈ ⁱ	v ₉ ⁱ	v ₁₀ ⁱ	v ₁₁ ⁱ	v ₁₂ ⁱ	r ⁱ		
	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	-v	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	-v	
		Обнулить												Очистить														
Типы источников данных	Измерения (задачи T7, T6, T5) v																											
<input type="checkbox"/> Экспертный источник <input type="checkbox"/> Эталонные переходы																												
Физический процесс	<input checked="" type="checkbox"/> Поглощение <input type="checkbox"/> Испускание																											
Тип отображаемых данных	<input checked="" type="radio"/> Задача А. Максимальное значение разности вакуумных волновых чисел идентичных переходов <input type="radio"/> Задача В. Среднеквадратическое отклонение <input type="radio"/> Задача С1. Результаты сравнения упорядочений квантовых чисел. A ₀₀ <input type="radio"/> Задача С2. Результаты сравнения упорядочений квантовых чисел. A ₀₁ <input type="radio"/> Задача С3. Результаты сравнения упорядочений квантовых чисел. A ₁₀																											
Выделить значения бинарного отношения красным, если оно больше Δ	Δ = <input type="text" value="0.04"/> Единицы измерений. (Задачи А и В - [Δ]=см ⁻¹ . Задача С - [Δ] - безразмерная величина)																											
Вид отображения	<input checked="" type="radio"/> Таблица <input type="radio"/> Цветная карта <input type="checkbox"/> Прямоугольная матрица (по умолчанию треугольная матрица) <input type="checkbox"/> Скрыть значения <input type="checkbox"/> Номера источников данных (только для цветной карты)																											
Создать / Обновить таблицу значений парных отношений																												
x 20 y 3 u 6 v 1												Спектральная полоса: v ₁₂ ^f																
Источники данных	#9	#8	#7	#6	#5	#4	#3	#2	#1	#9	#8	#7	#6	#5	#4	#3	#2	#1	#9	#8	#7	#6	#5	#4	#3	#2	#1	
<input type="checkbox"/> 1986_Lees_CH3OH	4 0 #1		2.62e-4, 1	2.62e-4, 1	2.05e-4, 1		5.00e-5, 10		#1																			
<input type="checkbox"/> 1987_MuLeJo_CH3OH	1 1 #2				1.28e-4, 3	1.00e-1, 66			#2																			
<input type="checkbox"/> 1989_MoStCaCa_CH3OH	1 1 #3		8.60e-1, 11		1.06e-4, 1				#3																			
<input type="checkbox"/> 1992_NoStMoLe_CH3OH	4 0 #4	3.24e-3, 344		1.79e-4, 4	1.13e-4, 3	1.75e-4, 4			#4																			
<input type="checkbox"/> 1994_NaEvZi_CH3OH	2 0 #5			7.45e-5, 34	6.18e-5, 13				#5																			
<input type="checkbox"/> 1995_OdMaNaTs_CH3OH	1 0 #6			0, 15					#6																			
<input type="checkbox"/> 1995_XuHo_a_CH3OH	#7								#7																			
<input type="checkbox"/> 2011_PeDrYuGu_CH3OH	#8								#8																			
<input type="checkbox"/> 2012_BrSuPeBr_CH3OH	#9								#9																			
Источники данных	#9	#8	#7	#6	#5	#4	#3	#2	#1	#9	#8	#7	#6	#5	#4	#3	#2	#1	#9	#8	#7	#6	#5	#4	#3	#2	#1	

Рис. 1. Интерфейс для просмотра результатов вычислений парных отношений. Согласованность волновых чисел по критерию задачи А (Δ = 0,04 см⁻¹)

данных (молекула или изотополог, интервал изменения волновых чисел, колебательная полоса, тип источника данных, физический процесс, с которым связаны данные измерений, критерий для анализа бинарных отношений и величина допустимого расогласования волновых чисел).

В нижней части рис. 1 показана таблица, представляющая общую картину согласования волновых чисел для всех пар источников волновых чисел по молекуле метанола, имеющих полосу ν_{12} и идентичные переходы в ней. В таблице ячейки раскрашены тремя цветами. Если пара источников не имеет идентичных переходов, то соответствующая ячейка имеет белый цвет, если значение отвечает критерию согласования, то желтый цвет (на рис. 1, 2 светло-серый), и, если источники не согласованы, то ячейка закрашена красным цветом (на рис. 1, 2 темно-серый). Поскольку матрица имеет симметричный вид, то на рисунке приведена только ее половина. В верхнем правом углу таблицы показано, для какой полосы проведен расчет. В этом примере всего 23 пары источников, из них 3 пары не согласованы.

Источник [74] не согласован с двумя источниками [75], [76].

Число источников данных по поглощению для метанола, имеющих идентичные переходы, составляет несколько десятков. При таком наборе получаемая таблица становится плохо обозримой. В этом случае можно строить качественную картинку, показанную на рис. 2.

В результирующей таблице по периметру расположены цифры, соответствующие источникам волновых чисел, аккумулированным в ИС. Список имен источников данных показан в нижней части рисунка. Имена источников образованы из года публикации и первых двух букв фамилий авторов (см. [7]). Ссылки на публикации даны в табл. 1 и в работе [15].

В этом случае рассмотрена матрица с 48 источниками данных, имеющими идентичные переходы. Из 172 пар 125 пар согласованы и 47 не согласованы. Перечень источников данных приведен в табл. 4.

Расогласование, как видно из рис. 2, касается пар, включающих старые источники данных.

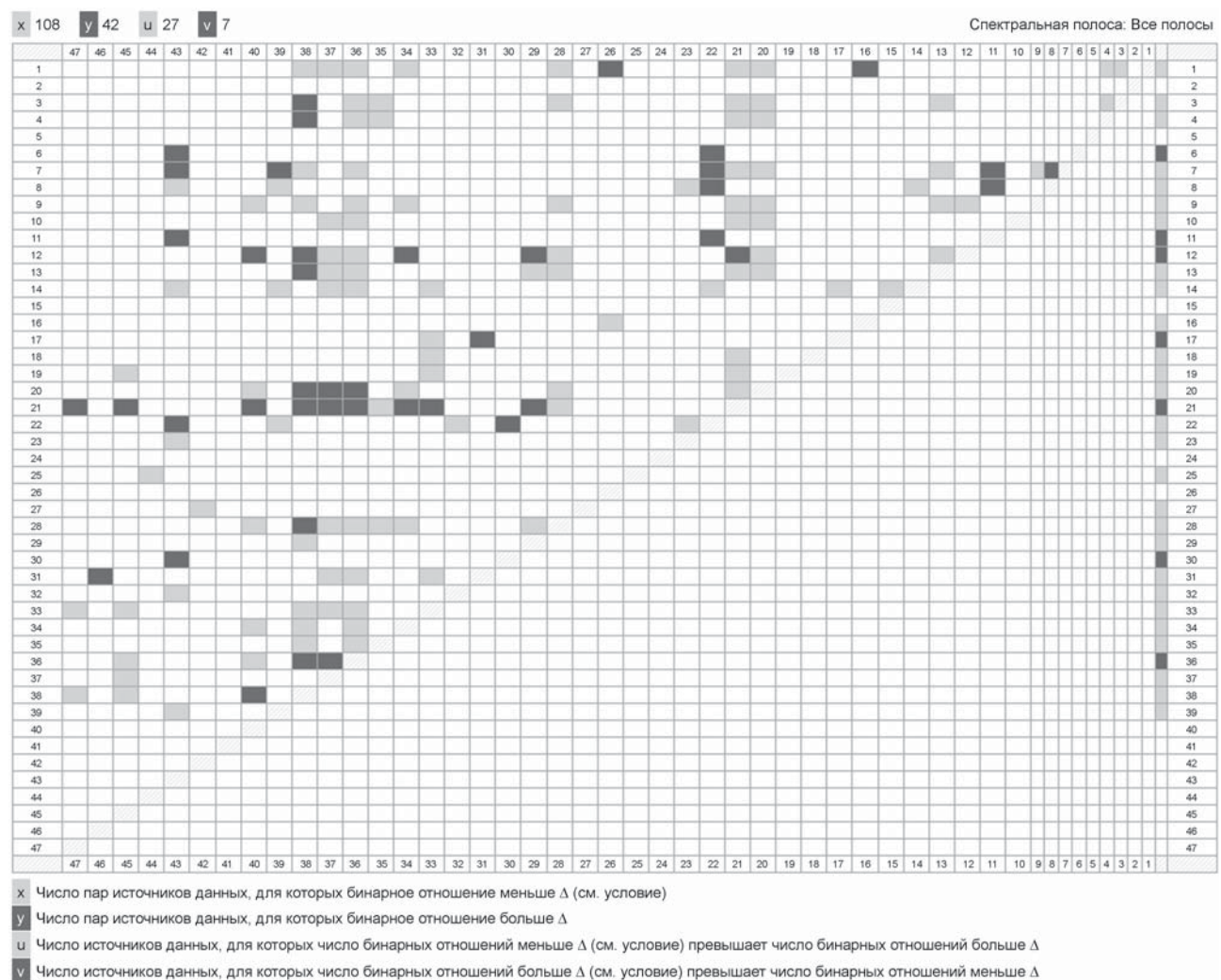


Рис. 2. Качественная картинка согласованности данных по критерию задачи A ($\Delta = 0,04 \text{ см}^{-1}$)

Перечень источников данных

Номер источника	Файл	Ссылка	Номер источника	Файл	Ссылка	Номер источника	Файл	Ссылка
1	1972_KwDe	[38]	17	1987_MuLeJo	[53]	33	1994_HePaYaHe	[64]
2	1972_Lees	[39]	18	1988_MuLeJo	[54]	34	1994_MaEvZi	[90]
3	1973_LeLoKiJo	[78]	19	1988_ZiEvJeMo	[83]	35	1995_BeWiHe	[91]
4	1974_GaCaKu	[79]	20	1989_LuHeAn	[84]	36	1995_BrKu	[92]
5	1977_StBeKaMo	[41]	21	1989_MoStCaCa	[75]	37	1995_OdMaNaTs	[65]
6	1978_BeDuHeOr	[42]	22	1989_MoStCaLe	[55]	38	1995_XuHo_a	[93]
7	1978_Worchesk	[44]	23	1990_DaBlWaAl	[85]	39	1995_XuHo	[94]
8	1979_SaRiWo	[45]	24	1990_MoRiStCa	[76]	40	2000_SuMaTsTa	[95]
9	1981_PiCoBrSc	[80]	25	1990_MuLeSa	[86]	41	2001_ScBeHuLi	[67]
10	1982_LoSUSnHo	[46]	26	1990_MuOzLe	[87]	42	2002_RuBoRiMu	[96]
11	1983_Belz	[47]	27	1991_DaBlWa	[88]	43	2003_BrWeChBo	[68]
12	1984_MoStBoCa	[81]	28	1991_HuShCoBi	[59]	44	2007_LeXuJoWi	[97]
13	1984_SaLeLu	[49]	29	1992_AnHeLu	[61]	45	2010_MuOzLe	[70]
14	1986_Lees	[52]	30	1992_BaPa	[89]	46	2011_PeDrYuGu	[77]
15	1986_RuAvHe	[51]	31	1992_GoMuLe	[62]	47	2012_BrSuPeBr	[98]
16	1987_CoVa	[82]	32	1992_MoStMoLe	[63]	48	2015_SlXUGiGo	[71]

4.2. Мультимножество. Списки линий поглощения для изолированной молекулы

Приложение «Мультимножество» предназначено для формирования массивов параметров переходов изолированной молекулы и их просмотра.

На рис. 3 показан его интерфейс, состоящий из двух частей: в верхней части формируются условия создания списка линий, а в нижней – таблица, содержащая список выбранных линий.

В приложении можно использовать разные условия формирования списка, например выбор определенной молекулы, задание интервала волновых

Выберите молекулу для создания и просмотра списка всех измеренных переходов по выбранной молекуле (мультимножество переходов) в указанном диапазоне волновых чисел

Молекула:

Диапазон вакуумных волновых чисел (см^{-1}): -

Выбор спектральной полосы ($\nu_1-\nu_{12}$)ⁱ - ($\nu_1-\nu_{12}$), i - начальное и j - конечное состояние

(ν_1 ν_2 ν_3 ν_4 ν_5 ν_6 ν_7 ν_8 ν_9 ν_{10} ν_{11} ν_{12})^f -

Физический процесс: Поглощение Эмиссия

Типы источников данных: Экспертные источники Источники эталонных (референтных) переходов

Слова для поиска источников данных по названию:

Округление значений вакуумных волновых чисел (число знаков после запятой):

Выбор типа сортировки в колонке: по значению вакуумных волновых чисел по нотации линии накачки лазера (для эмиссии) по названию источника данных по значениям квантовых чисел Нотация HITRAN Нотация HITRAN (по полосам)

строк от Всего строк: 17162

17162 переходов в 33 источниках данных Число уникальных переходов - 11247

Вакуумные волновые числа перехода (см^{-1})	Неопределенность значения вакуумных волновых чисел перехода (см^{-1})	Квантовые числа состояния в представлении нормальных мод NM ($\nu_1, \nu_2, \nu_3, \nu_4, \nu_5, \nu_6, \nu_7, \nu_8, \nu_9, \nu_{10}, \nu_{11}, \nu_{12}, f, \text{Sym}, \tau, J, K, F$). i - начальное и f - конечное состояние																									Источник данных															
		ν_1^i	ν_2^i	ν_3^i	ν_4^i	ν_5^i	ν_6^i	ν_7^i	ν_8^i	ν_9^i	ν_{10}^i	ν_{11}^i	ν_{12}^i	f	Sym ^f	τ^f	J ^f	K ^f	F ^f	ν_1^f	ν_2^f	ν_3^f	ν_4^f	ν_5^f	ν_6^f	ν_7^f		ν_8^f	ν_9^f	ν_{10}^f	ν_{11}^f	ν_{12}^f	f	Sym ^f	τ^f	J ^f	K ^f	F ^f				
4.5607685	-	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	-	A+	1	16	3	-	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	-	A+	3	15	4	-	1992_AnHeLu_CH3OH.138
4.560768536	-	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	-	A+	1	16	3	-	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	-	A+	3	15	4	-	1995_XuHo_CH3OH.141
4.566996176	-	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	-	E1	3	19	0	-	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	-	E2	4	19	1	-	1995_XuHo_CH3OH.142	
4.5669962	-	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	-	E1	3	19	0	-	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	-	E2	4	19	1	-	1992_AnHeLu_CH3OH.139	
4.5776135	-	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	-	A-	1	16	3	-	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	-	A-	3	15	4	-	1992_AnHeLu_CH3OH.140	

Рис. 3. Интерфейс приложения «Мультимножество»

чисел, колебательно-вращательной полосы, типа источников данных (первичный, экспертный или эталонный), процесса, которому соответствуют переходы, и величины, по которой проводится сортировка сформированного массива. Квантовые числа в сформированном массиве линий даны в представлении нормальных мод. Для каждой группы условий представляются три свойства этого массива: число переходов и число источников, из которых они извлечены, и число уникальных переходов в нем. Физические величины размещены в левой части таблицы, а перечень источников данных в правой части. Приложение используется при идентификации переходов с измеренными параметрами (волновые числа (и интенсивности)).

Систематизация информационных ресурсов осуществляется с помощью свойств источников данных, значения которых вычисляются при их импорте в ИС W@DIS. Для определенности введен термин «источник информации», соответствующий структуре, содержащей источник данных и его свойства. Эти свойства позволяют автоматически проводить систематизацию ресурсов, используя машину вывода FaCT++ [98].

Заключение

Статья является развитием нашей публикации [15], и в ней продолжены систематизация данных по основному изотопологу молекулы метанола и описание интерфейсов приложений, используемых для классификации информационных ресурсов и переходов (в том числе колебательных полос) молекулы метанола. В результате работы созданы онтология источников волновых чисел и онтология переходов и колебательных полос. Даны краткое описание источников волновых чисел для основного изотополога CH_3OH и статистика источников данных о молекуле метанола

Авторы благодарят РФФИ за финансирование работы, выполненной в рамках гранта № 13-07-00411.

1. Rixon G., Dubernet M.L., Piskunov N., Walton N., Mason N., Le Sidaner P., Schlemmer S., Tennyson J., Akram A., Benson K., Bureau J., Doronin M., Endres C., Heiter U., Hill C., Kupka F., Nenadovic L., Marquart T., Mulas G., Ralchenko Y., Shih A., Smith K., Schmitt B., Witherick D., Boudon V., Culhane J.L., Dimitrijevic M.S., Fazliev A.Z., Joblin C., Leto G., Loboda P.A., Mason H.E., Mendoza C., Millar T.J., Nunez L.A., Perevalov V.I., Rothman L.S., Roueff E., Ryabchikova T.A., Ryabtsev A., Sahal-Brechot S., Tyuterev V.G., Wakelam V., Zeippen C.J. VAMDC – The Virtual Atomic and Molecular Data Centre – A new way to disseminate atomic and molecular data – VAMDC level 1 release // AIP Conf. Proc. 2011. V. 1344. P. 107–115.
2. Привезенцев А.И., Царьков Д.В., Фазлиев А.З. Базы знаний для описания информационных ресурсов в молекулярной спектроскопии 3. Формирование базовой и прикладной онтологии // Электронные библиотеки. 2012. Т. 15, вып. 2. URL: www.elbib.ru/index.phtml?page-elbib/rus/journal/2012/part2/PTF

3. Voronina S.S., Privezentsev A.I., Tsarkov D.V., Fazliev A.Z. An Ontological Description of States and Transitions in Quantitative Spectroscopy // Proc. SPIE. 2014. V. 9292. P. 92920C-1–92920C-10.
4. Воронина С.С., Привезенцев А.И., Царьков Д.В., Фазлиев А.З. Различие онтологических представлений предметной области // Труды конф. XVI Всерос. науч. конф. «Электронные библиотеки: перспективные методы и технологии». Дубна, ОИЯИ. 2014. С. 124–130.
5. 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., Rothman L.S., Vandaele A.C., Zobov N.F., Al Derzi A.R., Fabrie C., Fazliev A., Furtenbacher T., Gordon I.E., Lodi L., Mizus 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.
6. Половцева Е.Р., Лаврентьев Н.А., Воронина С.С., Науменко О.В., Фазлиев А.З. Информационная система для решения задач молекулярной спектроскопии. 5. Колебательно-вращательные переходы и уровни энергии молекулы H_2S // Оптика атмосфер. и океана. 2011. Т. 24, № 10. С. 898–905; Polovtseva E.R., Lavrentiev N.A., Voronina S.S., Naumenko O.V., Fazliev A.Z. Information system for molecular spectroscopy. 5. Ro-vibrational transitions and energy levels of the hydrogen sulfide molecule // Atmos. Ocean. Opt. 2012. V. 25. N 2. P. 157–165.
7. Tennyson J., Bernath P.F., Brown L.R., Campargue A., Carleer M.R., Császár A.G., Gamache R.R., Hodges J.T., Jenouvrier A., Naumenko O.V., Polyansky O.L., Rothman L.S., Toth R.A., Vandaele A.C., Zobov N.F., Daumont L., Furtenbacher T., Fazliev A.Z., Gordon I.E., Mikhailenko S.N., Shirin S.V. IUPAC Critical Evaluation of the Rotational-Vibrational Spectra of Water Vapor. Part I. Energy Levels and Transition Wavenumbers for H_2^{17}O and H_2^{18}O // J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer. 2009. V. 110, N 9–10. P. 573–596.
8. Tennyson J., Bernath P.F., Brown L.R., Campargue A., Carleer M.R., Császár A.G., Daumont L., Gamache R.R., Hodges J.T., Naumenko O.V., Polyansky O.L., Rothman L.S., Toth R.A., Vandaele A.C., Zobov N.F., Fally S., Furtenbacher T., Fazliev A., Gordon I.E., Hu S.-M., Mikhailenko S.N., Voronin B.A. IUPAC Critical Evaluation of the Rotational-Vibrational Spectra of Water Vapor. Part II. Energy Levels and Transition Wavenumbers for HD^{16}O , HD^{17}O , and HD^{18}O // J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer. 2010. V. 111, N 15. P. 2160–2184.
9. 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., Rothman L.S., Vandaele A.C., Zobov N.F., Dénes N., Fazliev A.Z., Furtenbacher T., Gordon I.E., Hu S.-M., Szidarovszky T., Vasilenko I.A. IUPAC critical evaluation of the rotational-vibrational spectra of water vapor. Part IV. Energy levels and transition wavenumbers for D_2^{16}O , D_2^{17}O , and D_2^{18}O // J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer. 2014. V. 142. P. 93–108.
10. Ахлестин А.Ю., Воронина С.С., Науменко О.В., Половцева Е.Р., Фазлиев А.З. Информационная система для решения задач молекулярной спектроскопии. 6. Систематизация спектроскопических данных по дейтеро-замещенным изотопологам молекулы сероводорода // Оптика атмосфер. и океана. 2016. Т. 29, № 5. С. 386–396.
11. Voronina S.S., Yurchenko S.N., Fazliev A.Z. Systematization of the published spectroscopic parameters

- of ammonia // Abstracts of the 22nd Colloquium on High Resolution Molecular Spectroscopy. 2011. P. 163.
12. *Laurentiev N.A., Privezentsev A.I., Filippov N.N., Fazliev A.Z.* Complete set of published spectral data on CO₂ molecule // Abstracts of the 22nd Colloquium on High Resolution Molecular Spectroscopy. 2011. P. 353.
 13. *Akhlestin A.Y., Voronina S.S., Privezentsev A.I., Fazliev A.Z.* Systematization of published data on phosphine isotopologues // Proc. SPIE. 2012. V. 8696. P. 8696–8738.
 14. *Voronina S.S., Akhlestin A.Yu., Kozodoev A.V., Laurentiev N.A., Privezentsev A.I., Fazliev A.Z., Naumenko O.V.* Systematization of Published Spectral Data on Sulfur Dioxide Molecule and its Isotopologues // Proc. SPIE. 2014. V. 9292. P. 92920.
 15. *Akhlyostin A.Yu., Voronina S.S., Laurentiev N.A., Privezentsev A.I., Rodimova O.B., Fazliev A.Z.* A systematization of spectral data on the methanol molecule // Proc. SPIE. 2015. V. 9680. P. 929208.
 16. *Апанович З.В., Винокуров П.С., Ахлестин А.Ю., Привезенцев А.И., Фазлиев А.З.* Цифровая библиотека научных статей по количественной спектроскопии // Труды 14-й Всерос. науч. конф. «Электронные библиотеки: перспективные методы и технологии, электронные коллекции» – RCDL'2012. Переславль, 2012. С. 53–59.
 17. *Быков А.Д., Науменко О.В., Синица Л.Н., Родимова О.Б., Творозов С.Д., Тонков М.В., Фазлиев А.З., Филиппов Н.Н.* Информационные аспекты молекулярной спектроскопии. Томск: Изд-во ИОА СО РАН, 2008. 356 с.
 18. *Bykov A.D., Fazliev A.Z., Filippov N.N., Kozodoev A.V., Privezentsev A.I., Simitsa L.N., Tonkov M.V., Tretyakov M.Yu.* Distributed information system on atmospheric spectroscopy // Geophys. Res. Abstracts. 2007. V. 9. P. 01906.
 19. *Fazliev A., Privezentsev A., Tsarkov D., Tennyson J.* Ontology-Based Content Trust Support of Expert Information Resources in Quantitative Spectroscopy // Knowledge Engineering and the Semantic Web: Communications in Computer and Information Science. 2013. V. 394. P. 15–28.
 20. *Moruzzi G., Winnewisser B.P., Winnewisser M., Mukhopadhyay I., Strumia F.* Microwave, Infrared and Laser Transitions of Methanol: Atlas of Assigned Lines from 0 to 1258 cm⁻¹. Boca Raton; New York; London; Tokyo: CRC Press, 1995. 544 p.
 21. *Rothman L.S., Gordon I.E., Barbe A., Benner D.C., Bernath P.F., Birk M., Boudon V., Brown L.R., Campargue A., Champion J.-P., Chance K., Coudert L.H., Dana V., Devi V.M., Fally S., Flaud J.-M., Gamache R.R., Goldman A., Jacquemart D., Kleiner I., Lacombe N., Lafferty W.J., Mandin J.-Y., Massie S.T., Mikhailenko S.N., Miller C.E., Moazzen-Ahmadi N., Naumenko O.V., Nikitin A.V., Orphal J., Perevalov V.I., Perrin A., Predoi-Cross A., Rinsland C.P., Rotger M., Simeckova M., Smith M.A.H., Sung K., Tashkun S.A., Tennyson J., Toth R.A., Vandaele A.C., Auwera J.V.* The HITRAN 2008 molecular spectroscopic database // J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer. 2009. V. 110, N 9. P. 533–572.
 22. *Jacquinet-Husson N., Crepeau L., Armante R., Bouattmane C., Chédin A., Scott N.A., Crevoisier C., Capelle V., Boone C., Poulet-Crovisier N., Barbe A., Campargue A., Chris Benner D., Benilan Y., Bézard B., Boudon V., Brown L.R., Coudert L.H., Coustenis A., Dana V., Devi V.M., Fally S., Fayt A., Flaud J.-M., Goldman A., Herman M., Harris G.J., Jacquemart D., Jolly A., Kleiner I., Kleinböhl A., Kwoabia-Tchana F., Lavrentieva N., Lacombe N., Xu L.-H., Lyulin O.M., Mandin J.-Y., Maki A., Mikhailenko S., Müller C.E., Mishina T., Moazzen-Ahmadi N., Müller H.S.P., Nikitin A., Orphal J., Perevalov V., Perrin A., Petkie D.T., Predoi-Cross A., Rinsland C.P., Remedios J.J., Rotger M., Smith M.A.H., Sung K., Tennyson J., Toth R.A., Vandaele A.-C., Vander Auwera J.* The 2009 edition of the GEISA spectroscopic database // J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer. 2011. V. 112, N 15. P. 2395–2445.
 23. *Longuet-Higgins H.C.* The symmetry groups of non-rigid molecules // Mol. Phys. 1963. V. 6, N 5. P. 445–460.
 24. *Bunker P.R.* Molecular symmetry and spectroscopy. New York; San Francisco; London: Academic Press, 1979. 169 p.
 25. *Frei H., Bauder A., Gunthard H.H.* The isometric group of nonrigid molecules // Large amplitude motion in molecules. Berlin; New York: Springer-Verlag, 1979. V. 1. P. 1–97.
 26. *Altmann S.L.* The symmetry of nonrigid molecules: The Schrodinger supergroup // Proc. Roy. Soc. A. London, 1967. V. 298. P. 184–203.
 27. *Altmann S.L.* More on the symmetry of non-rigid molecules // Mol. Phys. 1971. V. 21, N 4. P. 587–607.
 28. *Smeyers Y.G.* Introduction to Group Theory for Non-Rigid Molecules // Adv. Quant. Chem. 1992. V. 24, N 1. P. 1–77.
 29. *Буренин А.В.* Концепция цепочки групп симметрии в теории спектров молекул // Успехи физ. наук. 1993. Т. 163, № 3. С. 87–98.
 30. *Буренин А.В.* Симметрия квантовой внутримолекулярной динамики. Н.Новгород: ИПФ РАН, 2012. 416 с.
 31. *Буренин А.В.* Конфигурационное вырождение обменного типа в колебательно-вращательном спектре нежесткой молекулы // Ж. структ. химии. 1995. Т. 36, № 1. С. 9–15
 32. *Буренин А.В.* Новый взгляд на картину торсионного движения в молекуле метанола CH₃OH // Оптика и спектроскопия. 1998. Т. 85, № 6. С. 942–947
 33. *Koehler J.S., Dennison D.M.* Hindered Rotation in Methyl Alcohol // Phys. Rev. 1940. V. 57. P. 1006–1021.
 34. *Lees R.M., Xu Li-Hong, Johns J.W.C., Winnewisser B.P., Lock M.* Rotation-torsion-vibration term-value mapping for CH₃OH: Torsion-mediated doorways and corridors for intermode population transfer // J. Mol. Spectrosc. 2007. V. 243, N 2. P. 168–181.
 35. *Pearson J.C., Drouin B.J., Yu S., Gupta H.* Microwave spectroscopy of methanol between 2.48 and 2.77 THz // J. Opt. Soc. Amer. B. 2011. V. 28, N 10. P. 2549–2577.
 36. *Lees R.M.* Torsion-Vibration-Rotation Interactions in Methanol. III. Barrier Height in an Excited Vibrational State of CH₃OH // J. Chem. Phys. 1972. V. 57, N 2. P. 824–826.
 37. *Kwan Y.Y., Dennison D.M.* Analysis of the torsion-rotation spectra of the isotopic methanol molecules // J. Mol. Spectr. 1972. V. 43, N 2. P. 291–319.
 38. *Lees R.M.* Torsion-Vibration-Rotation Interactions in Methanol. IV. Microwave Spectrum of CH₃OH in the Excited CO Stretching State // J. Chem. Phys. 1972. V. 57, N 6. P. 2249–2252.
 39. *Radford H.E.* Remeasurement of the Rest Frequency of the 36-Centimeter Radio Line of Methanol // Astrophys. J. 1972. V. 174. P. 207–208.
 40. *Stern V., Belorgeot C., Kachmarsky J., Moller K.D.* Far infrared spectrum of the internal rotation of

- CH₃OH and CD₃OH // *J. Mol. Spectrosc.* 1977. V. 67, N 1–3. P. 244–264.
41. *Bedwell D.J., Duxbury G., Herman H., Orenco C.A.* Laser Stark and optical-optical double resonance studies of some molecules used in optically pumped submillimetre lasers // *Infrared Phys.* 1978. V. 18, N 5–6. P. 453–460.
 42. *Sakai M., Ichimura K., Masumoto H., Kitagawa Y.* High-resolution spectroscopy of some gaseous molecules with a submillimetre Fourier transform spectrometer // *Infrared Phys.* 1978. V. 18, N 5–6. P. 577–583.
 43. *Worchesky T.L.* Assignment of methyl alcohol submillimetre laser transitions // *Opt. Lett.* 1978. V. 3, N 6. P. 232–234.
 44. *Sattler J.P., Riessler W.A., Worchesky T.L.* Diode laser spectra of the C–O stretch band of gaseous methyl alcohol // *Infrared Phys.* 1979. V. 19, N 2. P. 217–224.
 45. *Lovas F.J., Suenram R.D., Snyder L.E., Hollis J.M., Lees R.M.* Detection of the torsionally excited state of methanol in Orion A // *Astrophys. J.* 1982. V. 253, N 1. P. 149–153.
 46. *Bernard P., Izatt J.R.* New CH₃OH Laser Lines pumped with a Fine-Tuned High-Power CO₂-TEA Laser // *Int. J. Infrared Millim. Waves.* 1983. V. 4, N 1. P. 21–35.
 47. *Brink G.O.* Absorption spectrum of the fourth overtone of the OH stretch in gaseous methanol // *J. Mol. Spectrosc.* 1984. V. 103, N 2. P. 295–299.
 48. *Sastry K.V.L.N., Lees R.M., De Lucia F.C.* Microwave and submillimetre-wave spectra of CH₃OH // *J. Mol. Spectrosc.* 1984. V. 103, N 2. P. 486–494.
 49. *Lees R.M., Mukhopadhyay I., Johns J.W.C.* Assignment of IR transitions and FIR laser lines from torsionally excited CH₃OH // *Opt. Commun.* 1985. V. 55, N 2. P. 127–130.
 50. *Rudolph H., Avery J., Henningsen J.O.* Torsion-vibration interaction in CH₃OH // *J. Mol. Spectrosc.* 1986. V. 117, N 1. P. 38–45.
 51. *Lees R.M.* Far Infrared (FIR) and Infrared (IR) Spectroscopy of Methanol Applied to FIR Laser Assignments // *Proc. SPIE.* 1986. V. 666. P. 158–170.
 52. *Mukhopadhyay I., Lees R.M., Johns J.W.C.* Torsional refilling transitions in tea-pumped CH₃OH fir lasers with associated high-resolution fir spectra // *Int. J. Infrared Millim. Waves.* 1987. V. 8, N 11. P. 1471–1482.
 53. *Mukhopadhyay I., Lees R.M., Johns J.W.C.* Confirmation of far infrared laser assignments from CH₃-deformation and CH₃-rocking states of optically pumped methanol // *Appl. Phys. B: Lasers Opt.* 1988. V. 47, N 4. P. 319–324.
 54. *Moruzzi G., Strumia F., Carnesecchi P., Lees R.M., Mukhopadhyay I., Johns J.W.C.* Fourier spectrum of CH₃OH between 950 and 1100 cm⁻¹ // *Infrared Phys.* 1989. V. 29, N 2–4. P. 583–606.
 55. *Moruzzi G., Prevedelli M., Evenson K.M., Jennings D.A., Vanek M.D., Inguscio M.* Ultrahigh resolution far-infrared spectroscopy of methanol // *Infrared Phys.* 1989. V. 29, N 2–4. P. 541–549.
 56. *Inguscio M., Zink L.R., Evenson K.M., Jennings D.A.* Accurate Frequency of the 119 μm Methanol Laser from Tunable Far-Infrared Absorption Spectroscopy // *IEEE J. Quant. Electron.* 1990. V. 26, N 3. P. 575–579.
 57. *Carelli N., Ioli N., Moretti A., Pereira D., Strumia F.* Acoustooptic Extension of the Frequency tunability of cw CO₂ Lasers: New FIR laser Emissions from CH₃OH and ¹³CH₃OH // *Int. J. Infrared Millim. Waves.* 1991. V. 12, N 5. P. 449–471.
 58. *Hunt R.H., Shelton W.N., Cook W.B., Bignall O.N., Mirick J.W., Flaherty F.A.* Torsion-rotation absorption line assignments in the symmetric CH-stretch fundamental of methanol // *J. Mol. Spectrosc.* 1991. V. 149, N 1. P. 252–256.
 59. *Mukhopadhyay I., Lees R.M., Johns J.W.C.* Assignments and predictions of far-infrared laser lines in methyl alcohol // *Opt. Commun.* 1991. V. 80, N 5–6. P. 425–434.
 60. *Anderson T., Herbst E., De Lucia F.C.* An extension of the high-resolution millimeter- and submillimetre-wave spectrum of methanol to high angular momentum quantum numbers // *Astrophys. J. Suppl. Series.* 1992. V. 82. P. 405–444.
 61. *Goulding R.R.J., Mukhopadhyay I., Lees R.M.* Infrared-infrared double resonance study of methyl alcohol // *Infrared Phys.* 1992. V. 33, N 5. P. 443–447.
 62. *Moruzzi G., Strumia F., Moraes J.C.S., Lees R.M., Mukhopadhyay I., Johns J.W.C., Winnewisser B.P., Winnewisser M.* The spectrum of CH₃OH between 200 and 350 cm⁻¹: Torsional transitions and evidence for state mixings // *J. Mol. Spectrosc.* 1992. V. 153, N 1–2. P. 511–577.
 63. *Hepp M., Pak I., Yamada K.M.T., Herbst E., Winnewisser G.* Diode Laser Study of the Rotational Redistribution in CH₃OH during a Supersonic Jet Expansion // *J. Mol. Spectrosc.* 1994. V. 166, N 1. P. 66–78.
 64. *Odashima H., Matsushima F., Nagai K., Tsunekawa S., Takagi K.* Far-Infrared Spectroscopy of Methanol Using a Tunable Coherent Radiation Source // *J. Mol. Spectrosc.* 1995. V. 173, N 2. P. 404–422.
 65. *Xu L.-H., Wang X., Cronin T.J., Perry D.S., Fraser G.T., Pine A.S.* Sub-Doppler Infrared Spectra and Torsion–Rotation Energy Manifold of Methanol in the CH-Stretch Fundamental Region // *J. Mol. Spectrosc.* 1997. V. 185, N 1. P. 158–172.
 66. *Schilke P., Benford D.J., Hunter T.R., Lis D.C., Philips T.G.* A line survey of Orion-KL from 607 to 725 GHz // *Astrophys. J. Suppl. Ser.* 2001. V. 132. P. 281–364.
 67. *Brooke T.Y., Weaver H.A., Chin G., Bockelee-Morvan D., Kim S.J., Xu L.-H.* Spectroscopy of Comet Hale–Bopp in the infrared // *Icarus.* 2003. V. 166, N 1. P. 167–187.
 68. *Xu S., Kay J.J., Perry D.S.* Doppler-limited CW infrared cavity ringdown spectroscopy of the ν₁+ν₃ OH + CH stretch combination band of jet-cooled methanol // *J. Mol. Spectrosc.* 2004. V. 225, N 2. P. 162–173.
 69. *Mukhopadhyay I., Ozier I., Lees R.M.* High-Resolution Spectrum of the C–O Stretch Overtone Band in Methyl Alcohol // *J. Chem. Phys.* 2010. V. 93, N 10. P. 7049–7053.
 70. *Slocum D.M., Xu L.-H., Giles R.H., Goyette T.M.* Retrieval of methanol absorption parameters at Terahertz frequencies using multispectral fitting // *J. Mol. Spectrosc.* 2015. V. 318. P. 12–25.
 71. *Votava O., Horka-Zelenkova V., Svoboda V., Rakovský J., Pracna P.* OH-stretch overtone of methanol: empirical assignment using two temperature technique in supersonic jet // *Phys. Chem. Chem. Phys.* 2015. V. 17. P. 15710–15717.
 72. *Ахлестин А.Ю., Козодоев А.В., Лаврентьев Н.А., Привезенцев А.И., Фазлиев А.З.* Базы знаний для описания информационных ресурсов в молекулярной спектроскопии. 4. Программное обеспечение ИВС «Молекулярная спектроскопия» // *Электронные библиотеки.* 2012. Т. 15, № 3. URL: www.elbib.ru/index.php?page-elbib/rus/journal/2012/part3/AKLPF
 73. *Ахлестин А.Ю., Лаврентьев Н.А., Привезенцев А.И., Фазлиев А.З.* Базы знаний для описания информационных ресурсов в молекулярной спектроскопии. 5. Качество экспертных данных // *Электронные библиотечки.*

- лиотеки. 2013. Т. 16, № 4. URL: www.elbib.ru/index.php?page-elbib/rus/journal/2013/part4/AKLPF
74. *Moruzzi G., Strumia F., Carnesecchi P., Carli B., Carlotti M.* High resolution spectrum of CH₃OH between 8 and 100 cm⁻¹ // *Infrared Phys.* 1989. V. 29, N 1. P. 47–86.
 75. *Moruzzi G., Riminucci P., Strumia F., Carli B., Carlotti M., Lees R.M., Mukhopadhyay I., Johns J.W.C., Winnewisser B.P., Winnewisser M.* The spectrum of CH₃OH between 100 and 200 cm⁻¹: Torsional and “forbidden” transitions // *J. Mol. Spectrosc.* 1990. V. 144, N 1. P. 139–200.
 76. *Pearson J.C., Drouin B.J., Yu S., Gupta H.* Microwave spectroscopy of methanol between 2.48 and 2.77 THz // *J. Opt. Soc. Amer. B.* 2011. V. 28. P. 2549–2577.
 77. *Lees R.M., Lovas F.J., Kirchhoff W.H., Johnson D.R.* Microwave Spectra of Molecules of Astrophysical Interest: III. Methanol // *J. Phys. Chem. Ref. Data.* 1973. V. 2, N 2. P. 205–214.
 78. *Gaines L., Casleton K.H., Kukolich S.G.* Beam Maser Measurements of CH₃OH Rotational Transitions // *Astrophys. J.* 1974. V. 191, N 7. P. L99–L100.
 79. *Pickett H.M., Cohen E.A., Brinza D.E., Schaefer M.M.* The submillimeter wavelength spectrum of methanol // *Int. J. Infrared Millimeter Waves.* 1981. V. 89, N 2. P. 542–547.
 80. *Moruzzi G., Strumia F., Bonetti C., Carli B., Men-caraglia F., Carlotti M., Di Lonardo G., Trombetti A.* The Fourier spectrum of CH₃OH: The region between 8 and 40 cm⁻¹ // *J. Mol. Spectrosc.* 1984. V. 105, N 1. P. 24–52.
 81. *Coudert L., Valentin A.* The rotation-torsion energy levels of the methanol molecule ¹²CH₃¹⁶OH above the triple potential barrier // *J. Mol. Spectrosc.* 1987. V. 122, N 2. P. 390–407.
 82. *Zink L.R., Evenson K.M., Jennings D.A., Moruzzi G., Inguscio M.* Frequency measurement of the K = 6 asymmetry splittings in CH₃OH // *J. Mol. Spectrosc.* 1988. V. 127, N 1. P. 44–50.
 83. *De Lucia F.C., Herbst E., Anderson T.* The analysis of the rotational spectrum of methanol to microwave accuracy // *J. Mol. Spectrosc.* 1989. V. 134, N 2. P. 395–411.
 84. *Dang-Nhu M., Blanquet G., Walrand J., Allegrini M., Moruzzi G.* Intensities of the CO stretch band of CH₃OH at 9.7 μm // *J. Mol. Spectrosc.* 1990. V. 141, N 2. P. 348–350.
 85. *Mukhopadhyay I., Lees R.M., Sastry K.V.L.N.* Detection of weak microwave and millimeter wave transitions in the C–O stretch state of methyl alcohol // *Infrared Phys.* 1990. V. 30, N 3. P. 291–293.
 86. *Mukhopadhyay I., Ozier I., Lees R.M.* High-resolution spectrum of the C–O stretch overtone band in methyl alcohol // *J. Chem. Phys.* 1990. V. 93, N 10. P. 7049–7053.
 87. *Dang-Nhu M., Blanquet G., Walrand J.* Intensities of methanol spectra around 12.5 μm // *J. Mol. Spectrosc.* 1991. V. 146, N 2. P. 524–526.
 88. *Baskakov O.I., Pashaev M.A.O.* Microwave and sub-millimeter-wave rotational spectrum of methyl alcohol in the ground torsional state // *J. Mol. Spectrosc.* 1992. V. 151, N 2. P. 282–291.
 89. *Matsushima F., Evenson K.M., Zink L.R.* Absolute Frequency Measurements of Methanol from 1.5 to 6.5 THz // *J. Mol. Spectrosc.* 1994. V. 164, N 2. P. 517–530.
 90. *Belov M., Winnewisser G., Herbst E.* The High-Resolution Rotational-Torsional Spectrum of Methanol from 0.55 to 1.2 THz // *J. Mol. Spectrosc.* 1995. V. 174, N 1. P. 253–269.
 91. *Breckenridge S.M., Kukolich S.G.* Precise laboratory measurements of methanol rotational transition frequencies in the 5 to 13 GHz region // *Astrophys. J.* 1995. V. 438, N 1. P. 504–505.
 92. *Xu L.H., Hougen J.T.* Global Fit of Torsional-Rotational Transitions in the Ground and First Excited Torsional States of Methanol // *J. Mol. Spectrosc.* 1995. V. 173, N 2. P. 540–551.
 93. *Xu L.H., Hougen J.T.* Global Fit of Rotational Transitions in the Ground Torsional State of Methanol // *J. Mol. Spectrosc.* 1995. V. 169, N 2. P. 396–409.
 94. *Sun Z.-D., Matsushima F., Tsunekawa S., Takagi K.* Sub-Doppler spectroscopy of the CO stretching fundamental band of methanol by use of microwave sidebands of CO₂ laser lines // *J. Opt. Soc. Amer. B.* 2000. V. 17, N 12. P. 2068–2080.
 95. *Rueda D., Boyarkin O.V., Rizzo T.R., Mukhopadhyay I., Perry D.S.* Torsion-rotation analysis of OH stretch overtone–torsion combination bands in methanol // *J. Chem. Phys.* 2002. V. 116, N 1. P. 91–100.
 96. *Lees R.M., Xu L.-H., Johns J.W.C., Winnewisser B.P., Lock M.* Rotation-torsion-vibration term-value mapping for CH₃OH: Torsion-mediated doorways and corridors for intermode population transfer // *J. Mol. Spectrosc.* 2007. V. 243, N 2. P. 168–181.
 97. *Brauer C.S., Sung K., Pearson J.C., Brown L.R., Xu L.-H.* Empirical line intensities of methanol in the 300–500 cm⁻¹ region // *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer.* 2012. V. 113, N 2. P. 128–139.
 98. *Tsarkov D., Horrocks I.* FaCT++ description logic reasoner: System description // *Proc. 3rd Int. Joint Conf. on Automated Reasoning (IJCAR’06).* LNCS: Springer, 2006. V. 4130. P. 292–297.

A.Yu. Akhlestin, S.S. Voronina, N.A. Lavrent’ev, A.I. Privezentsev, O.B. Rodimova, A.Z. Fazliev.
Information system for molecular spectroscopy. 7. Systematization of information resources on the main isotope of methanol molecule.

Systematization of information resources in quantitative spectroscopy is demonstrated using the methanol molecule as an example and applying the facilities of the W@DIS information system. The choice of quantum numbers for methanol state is explained and brief descriptions of about 40 publications containing spectral characteristics of methanol are given. The main information objects (data and information source) are defined. The interfaces used for the analysis of wavenumber consistency in all data sources and the interface of application for forming measured line list are described.