

Сравнение спектральных массивов данных HITRAN и GEISA с учетом ограничения на опубликование спектральных данных

Н.А. Лаврентьев, М.М. Макогон, А.З. Фазлиев*

*Институт оптики атмосферы им. В.Е. Зуева СО РАН
634021, г. Томск, пл. Академика Зуева, 1*

Поступила в редакцию 24.12.2010 г.

Обоснована необходимость применять ограничения опубликования спектральных данных по отношению к экспертным массивам спектральных данных, и описаны ограничения на вакуумные волновые числа, используемые в процедуре декомпозиции информационных ресурсов по первичным опубликованным данным. Показано, что в экспертных массивах данных HITRAN и GEISA части, относящиеся к изотопмерам молекулы воды, содержат устаревшие данные (с низкой точностью нахождения вакуумных волновых чисел).

Ключевые слова: достоверность данных в спектроскопии изотопмеров молекулы воды, экспертные данные, ограничение существования; *validity of water spectroscopy data, expert data, publishing constraints.*

Введение

Пользователь, обращающийся к экспертным массивам спектральных данных, должен решить, какой из массивов использовать, чтобы проводимый им расчет совпадал с результатами измерений с лучшей точностью. В исследовании потоков входящего в атмосферу и уходящего из нее излучения достоверность большей части получаемых расчетных данных слабо связана с некорректностью отнесения переходов к квантовым числам, а при расчете интегральных потоков и с точностью параметров значительного числа слабых линий. Однако при расчете потоков излучения в узких спектральных диапазонах некорректности в исходном массиве спектральных данных сказываются существенно.

Пользователь имеет дело с двумя группами ограничений, которым должны удовлетворять массивы спектральных данных: ограничения на значения физических величин, входящих в экспертные массивы, и ограничения на опубликование спектральных данных.

Первая группа ограничений включает в себя типы данных, к которым относятся значения физических величин (например, большая часть квантовых чисел должна быть целыми неотрицательными числами), интервалы изменения физических величин (ограничителем может являться энергия ионизации молекулы), правила отбора и ограничения, связанные с базовыми математическими отноше-

ниями (транзитивности, рефлексивности и т.д.). Как показывает проверка публикаций, с правилами отбора связан небольшой процент ошибок, тогда как ошибки, обусловленные нарушением отношения рефлексивности, составляют уже на порядок большее число. Проверка данных на их удовлетворение этим ограничениям должна осуществляться при подготовке оригинальных работ к публикации.

Вторая группа ограничений связана с работами, в которых авторы предлагают отобранные по некоторым, как правило, в явном виде не описанным критериям составные массивы спектральных данных. Эти массивы, содержащие несколько миллионов значений физических величин, снабжаются библиографией, относящейся почти к каждому из значений такого массива. Проверить соответствие библиографии и значений, размещенных в экспертном массиве, невозможно без использования компьютерных приложений.

В последние несколько лет выполнен проект IUPAC [1], одной из целей которого являлась систематизация всех опубликованных характеристик переходов молекулы воды и ее изотопмеров. В рамках проекта собраны практически все публикации, относящиеся к спектральным характеристикам молекулы воды [2, 3]. Наличие этого набора публикаций, данные из которых размещены в информационной системе W@DIS, позволило нам ответить на вопрос, какая часть существующих экспертных массивов, относящихся к изотопмерам молекулы воды, содержит опубликованные данные, а какая — ранее не публиковавшиеся. В качестве исследуемых массивов были выбраны части HITRAN [4] и GEISA [5], содержащие данные о $H_2^{17}O$, $H_2^{18}O$, HDO, $HD^{17}O$, $HD^{18}O$.

* Николай Александрович Лаврентьев (lnick@iao.ru); Михаил Мордухович Макогон (mmm@asd.iao.ru); Александр Зарипович Фазлиев (faz@iao.ru).

Для декомпозиции экспертного массива данных на части, содержащие опубликованные и неопубликованные данные, в информационной системе W@DIS был создан сервис, выполняющий такое разложение в соответствии с ограничениями на допустимую величину отклонения сравниваемых величин.

В статье обсуждаются ограничения на существование значений в опубликованных работах (ограничение опубликования), физические основания для проведения сравнения измеренных величин и результаты декомпозиции спектральных массивов данных HITRAN и GEISA.

1. Достоверность спектральных данных

Проверка достоверности данных является одной из важнейших задач предметных областей естественных наук. Понятие «достоверность» трактуется разными способами. Общий принцип, который объединяет эти трактовки, можно сформулировать следующим образом: поскольку при описании свойств объектов используются их математические модели, в основании которых лежат базовые отношения математики (такие как рефлексивность, транзитивность и т.д.), то результаты, получаемые с помощью этих моделей, должны удовлетворять ограничениям, накладываемым ими.

В спектроскопии к числу наиболее известных ограничений относятся правила отбора, определяющие отношения между квантовыми числами. Например, если $\{x\}$ – набор квантовых чисел, то он может описывать состояние (переход) только в том случае, когда их значения удовлетворяют правилам отбора. Проверки такого типа ограничений на значения физических величин назовем проверками на ограничения значений. Подавляющее большинство опубликованных данных удовлетворяет таким ограничениям.

Существует другой тип ограничений, связанный с проверкой опубликования значений физических величин. Здесь термин «опубликование» трактуется как публикация значений физических величин в журналах, сети Интернет, диссертациях и иных средствах коммуникаций, перечень которых определяется научным сообществом, исследующим ту или иную предметную область. Значимость этого типа ограничений возрастает при автоматизированной проверке достоверности данных, требующей представления данных в виде, допускающей компьютерную обработку. На практике проверки такого типа важны по следующей причине. При решении задач спектроскопии важны условия, при которых проводились измерения, или приближения, используемые при вычислениях. Табличное представление спектральных данных использует библиографические ссылки на публикации, в которых часто описаны эти условия или приближения, но автоматизированная обработка таких ссылок в настоящее время не представляется возможной. В некоторых работах данные публикуются без подобных описаний; в первую очередь это относится к работам, в которых публикуются синтетические массивы спектральных данных.

В настоящей статье представлены результаты проверки ограничения опубликования на примере массивов спектральных данных HITRAN [4] и GEISA [5]. Эти массивы позиционируются как спектральные данные для применения в задачах атмосферной радиации, астрономии и атмосферной оптики. Они иногда использовались и для решения внутренних задач спектроскопии, например для определения уровней энергии молекул. Проведенный анализ позволил нам установить, какие значения вакуумных волновых чисел в этих массивах данных одинаковы, чем они качественно отличаются друг от друга и почему их использование для решений внутренних задач спектроскопии возможно лишь при тщательной проверке накопленных в этих массивах данных.

2. Физические основания для сравнения волновых чисел

При проведении массовых спектроскопических измерений положения центров линий поглощения и излучения газов и паров в настоящее время принята следующая схема редукции и анализа данных:

- 1) из экспериментальных измерений определяются центры линий;
- 2) линеаризуется развертка частотной шкалы;
- 3) осуществляется абсолютная «привязка» частотной шкалы по положению точно определенных линий некоторых веществ, выполняющих, по существу, роль вторичных эталонов.

Критерием надежности (точности, воспроизводимости) полученных в эксперименте данных служит степень совпадения с данными расчетов или других измерений. Для корректного сопоставления разных данных необходим учет зависимости частот центров линий от температуры, давления и состава смеси анализируемых газов. Такая схема применяется при любых измерениях; вместе с тем каждый метод измерений вследствие различных физических принципов, положенных в его основу, накладывает на нее свой специфический «отпечаток».

Наиболее часто в последние 10–15 лет для определения центров линий поглощения применяются спектrophотометрические методы, метод внутрирезонаторной лазерной спектроскопии и метод «ging-down spectroscopy». По спектrophотометрическому методу измерения проводят с помощью Фурье-спектрометров (в таком приборе источник и приемник излучения «объединены») и спектрометров, в которых источником излучения является перестраиваемый лазер или лазерная система. Центры линий излучения измеряют, как правило, с помощью Фурье-спектрометров.

2.1. Определение центров линий

Для нахождения центра линии измеренный спектр аппроксимируется кривой, описывающей форму контура (доплеровской, лоренцевской, фойгтовской или более сложной в условиях конкретного эксперимента), и положение максимума кривой принимается за центр линии. Погрешность «изме-

ренного» таким образом положения центра будет зависеть от соотношения между спектральным разрешением используемого прибора и шириной анализируемой линии, отношения сигнал-шум при записи спектра, правильности выбора формы контура, присутствия в области анализируемого (подгоняемого) спектра других (даже существенно более слабых) линий, наклона нулевой линии и некоторых других параметров. Если имеется несколько близких линий, расположенных так, что спектрального разрешения прибора недостаточно для их разделения, то найденное по этой процедуре положение «центра линии» даст какое-то усредненное значение для всей группы линий. Оценить рассматриваемую погрешность в общем случае не представляется возможным.

Вместе с этим практика показывает, что спектроскопические измерения проводятся, как правило, с разрешением, которое на порядок лучше, чем ширина линии, а центры находятся с точностью на 1–2 порядка лучше, чем спектральное разрешение. Таким образом, погрешность определения центров линий поглощения газов в атмосферных условиях для видимого и близкого к нему диапазонов составляет около 10^{-3} – 10^{-4} см^{-1} . При продвижении в ИК- и микроволновую области спектра ширины линий уменьшаются и вместе с ними уменьшается абсолютная величина этой погрешности.

Такой подход используется во всех спектроскопических измерениях, выполненных по разным методикам и с разными приборами, однако качество получаемой информации о положении центра линии варьируется. Это связано как минимум с двумя факторами: с реальной возможностью накопления данных (она зависит от времени измерений, которое при массовых измерениях не может быть слишком большим) и с возможностью улучшения отношения сигнал-шум, и нестабильностью как аппаратуры, так и параметров анализируемой среды (в первую очередь температуры и давления). Для разных методик и приборов эти факторы проявляются по-разному.

2.2. Линеаризация развертки частотной шкалы

Нелинейность развертки частотной шкалы имеет разные физические причины. В дифракционных

спектральных приборах, широко используемых в составе внутрирезонаторных лазерных спектрометров, она вызывается несовпадением фокальной поверхности с плоскостью регистратора (фотопластинка, ПЗС-линейка), в лазерных спектрометрах на перестраиваемых диодных лазерах – нелинейной зависимостью частоты излучения от тока накачки. В спектрометрах с лазерами на красителях эта нелинейность обусловлена сложной зависимостью частоты излучения от положения перестроечных элементов.

Для линеаризации шкалы практически всегда используется один и тот же подход – параллельно с записью исследуемого спектра записывается пропускание интерферометра Фабри–Перо, помещенного в вакуумированный (иногда и термостатированный) кожух, что обеспечивает постоянство частотного расстояния между максимумами его пропускания. База интерферометра и его острота выбираются такими, чтобы неопределенность положения этих максимумов не ухудшала получаемые данные.

2.3. Абсолютная привязка частотной шкалы

Приборы, используемые в измерениях положения линий, как правило, не имеют абсолютной привязки частотной шкалы. Только в спектрофотометрах терагерцового диапазона частота излучения, формируемого стабилизированными CO_2 -лазерами и микроволновыми генераторами, известна абсолютно. Определенным исключением являются также Фурье-спектрометры, в составе которых имеются стабилизированные лазеры. Однако поскольку положения восстановленных из записанной интерферограммы линий зависят от настройки прибора, диаметров установленных в нем диафрагм, ширины аппаратной функции и ряда других параметров, то абсолютная погрешность Δ их определения оказывается на уровне 10^{-3} см^{-1} , хотя длина волны лазера известна с погрешностью порядка 10^{-5} см^{-1} . Поэтому в ходе эксперимента при одной и той же настройке аппаратуры дополнительно записываются спектры веществ, положения отдельных линий которых принимаются за эталонные.

В табл. 1 приведены данные о характерных (типичных) измерениях положения центров линий водяного пара, проведенных в последние 10–15 лет.

Таблица 1

Диапазоны и погрешности измерения центров линий в спектрах поглощения и излучения водяного пара

Метод измерений	Спектральный диапазон, см^{-1}	Разрешение, см^{-1}	Линеаризация	Привязка шкалы по веществу	$\Delta \cdot 10^3$, см^{-1}	Литература	Номер области
Спектрофотометрический: Фурье-спектрометрия	20–12000	0,0056	нет	–	0,01–10	[6]	
	110–500	0,0025	»	OCS	0,002–0,13	[27]	1
	2900–8000	0,011	»	NO_2 , CO	0,03–3	[16]	2
	4880–7550	0,02	»	–	0,3–0,8	[10]	3
	8600–15000	0,03	»	–	**	[8]	
	9000–30000	0,06	»	J_2	4	[29]	4
	9250–13000	0,03 и 0,06	»	–	**	[12]	
	9500–11500	0,01–0,02	»	–	1–3	[9]	5
	13000–26000	0,06	»	J_2	**	[11]	

Метод измерений	Спектральный диапазон, см ⁻¹	Разрешение, см ⁻¹	Линейризация	Привязка шкалы по веществу	$\Delta \cdot 10^3$, см ⁻¹	Литература	Номер области
лазерная спектроскопия терагерцового диапазона	0,33–2,67 (10–80 ГГц)	**	нет	—	10 ⁻⁴ (3 кГц)	[24]	6
	3,33–20 (100–600 ГГц)	**	»	—	**	[25]	
	16–173 (0,5–5 ТГц)	35 кГц	»	—	0,01–0,03 0,0013 (40 кГц)	[20] [23]	7
	16–173 (0,5–5 ТГц)	**	»	—	0,001–0,002	[26, 29]	8
ВРЛС	11335–12843	0,015	есть	H ₂ O	4	[18]	
	12746–13558	*	нет	—	5	[22]	9
Ring-down спектроскопия	6025–6870	0,0001	есть	H ₂ O	1–2	[21]	10
	6130–6750	**	»	H ₂ O	0,5–2	[30]	11
	13312–13377	**	»	J ₂	5	[15]	
	16570–17125	0,06	нет	—	**	[19]	
	16600–18000	0,05	»	J ₂	4	[7]	
	25195–25340	**	есть	J ₂	0,2–0,6	[14]	12
Фурье-спектрометрия	50–500	0,005	нет	—	0,9	[13]	
	373–933	0,01	»	H ₂ O	**	[28]	
	500–13000	0,03–0,05	»	H ₂ O	**	[17]	

Примечание. «*» — ограничено доплеровским уширением; «**» — нет данных; серым цветом выделено измерение спектров излучения.

Поскольку погрешность определения центров линий в отдельных работах очень сильно варьируется, то в этих случаях приведены округленные значения границ диапазона изменения и надо иметь

в виду, что подавляющее большинство центров определено с погрешностью в середине этого диапазона. Для большей наглядности эти же данные представлены и на рис. 1.

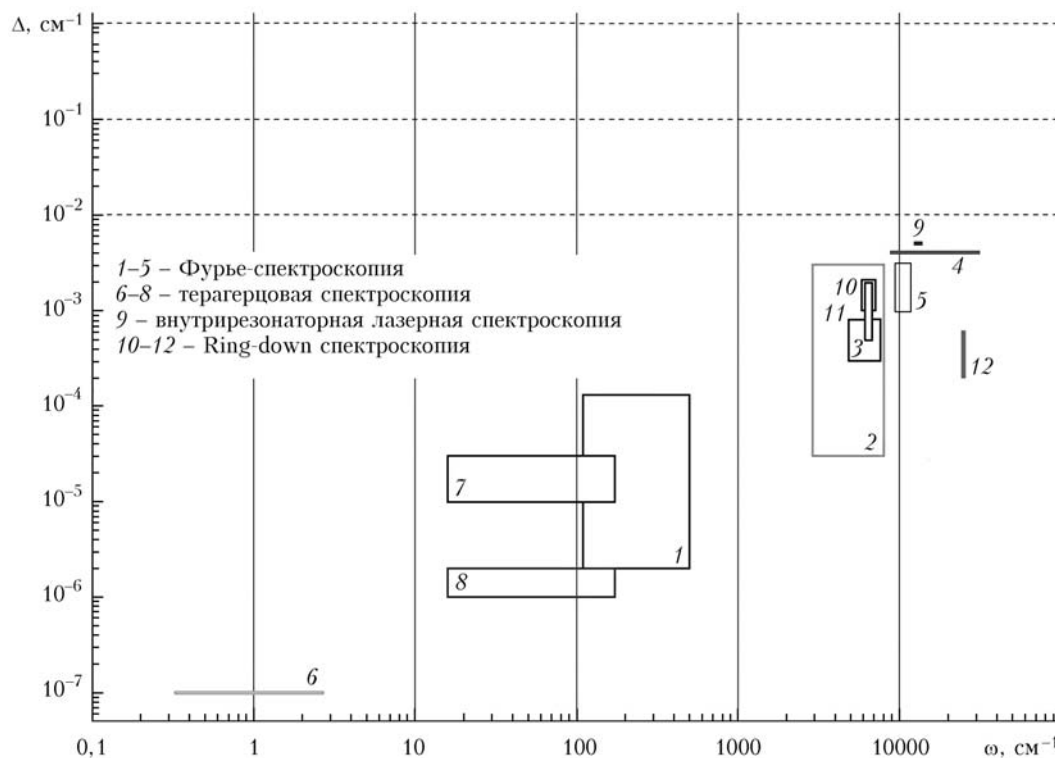


Рис. 1. Погрешность определения центров линий (1–12 – номера областей измерений, см. табл. 1). Области 1–12 иллюстрируют спектральный диапазон измерений и интервал вариации погрешностей; ω – вакуумные волновые числа. Штриховые линии соответствуют точности, с которой проводилось сравнение данных при декомпозиции

3. Банки данных в атмосферных приложениях

Спектральные данные в молекулярной спектроскопии собираются и классифицируются разными группами исследователей. В прикладных атмосферных науках используется только часть этих данных, связанная с молекулами, участвующими в процессах поглощения солнечной радиации. Наиболее популярными среди таких массивов данных являются массивы HITRAN и GEISA. Применяемые на практике версии этих массивов для ряда прикладных задач дают удовлетворительные результаты.

Процедура составления этих массивов является непрозрачной, хотя значение каждой величины, например в массиве HITRAN, связано с публикацией. К сожалению, в списке публикаций присутствуют ссылки на частные сообщения и ссылки на другие составные массивы данных, иногда встречаются циклические ссылки. Проверить корректность ссылок практически невозможно. Это обстоятельство объясняет необходимость постановки задачи автоматического разложения экспертного массива данных по наборам данных из первичных публикаций, содержащих результаты экспериментальных и теоретических работ. Результаты такого разложения экспертных массивов можно сравнить между собой и выяснить, какие части двух разных экспертных массивов совпадают, какие различаются и в чем состоят различия. Знание этих свойств экспертных массивов может служить основанием, с одной стороны, для выбора пользователем требуемого ему по качеству набора данных, а с другой стороны, для постановки экспериментов для проверки недостоверных характеристик переходов.

Выше было показано, какие точности измерения достигаются в разных спектральных интервалах. В табл. 2 для ряда изотопов воды из массивов HITRAN и GEISA представлено общее число переходов в шести спектральных интервалах, число переходов с некорректными квантовыми числами

(в круглых скобках) и число переходов (в том числе в процентах к общему их количеству), не найденных в массиве опубликованных данных, собранных в ИС W@DIS. В этой ИС размещены собранные и прокомментированные в [2, 3] экспериментальные данные. Результаты теоретических расчетов взяты из публикаций последних 14 лет [137–142].

В табл. 2 курсивом отмечено количество переходов в массиве данных GEISA, прямым шрифтом – в массиве данных HITRAN. В скобках указано количество переходов без определенных значений квантовых чисел, с совпадающими квантовыми числами и не удовлетворяющих правилам отбора.

В последних двух столбцах приведены результаты разложения двух экспертных массивов по набору первичных данных (измерения и вычисления), хранящихся в ИС W@DIS с точностью до $0,1 \text{ см}^{-1}$. Для каждого вещества приведено число переходов из экспертного массива, не обнаруженных в оригинальных публикациях, и указано, какой процент это число недокументированных переходов составляет от общего числа переходов. Более детальные результаты анализа представлены в разд. 5. В Приложении для всех интервалов указаны ссылки на работы, в которых опубликованы данные, удовлетворяющие критериям, заданным при анализе.

Для понимания деталей результатов последнего анализа обратимся к описанию технологии декомпозиции экспертных массивов, использованной в ИС W@DIS.

4. Проверка экспертного массива по критерию опубликования значений данных среди всех опубликованных данных

Для проверки критерия опубликования была использована информация о вакуумных волновых числах воды [2, 3], из которой были удалены данные, содержащие некорректные отнесения квантовых чисел.

Таблица 2

Количество переходов по интервалам частот и число частот, не удовлетворяющих ограничению опубликования для массивов данных HITRAN & GEISA

Изотопмер	Интервалы значений вакуумных волновых чисел, см^{-1}							0–20000 см^{-1}	
	0–10	10–30	30–50	50–200	200–10000	10000–20000	0–20000	HITRAN	GEISA
H_2^{17}O	0	10	25	279	4762	1916	6992 (18,0,0)	403	369
	<i>1</i>	<i>10</i>	<i>25</i>	<i>279</i>	<i>4828</i>	<i>325</i>	<i>5468 (0,8,0)</i>	6%	7%
H_2^{18}O	31	15	33	342	6889	2443	9753 (1,6,0)	710	738
		<i>15</i>	<i>33</i>	<i>342</i>	<i>7106</i>	<i>863</i>	<i>8360 (0,20,0)</i>	7%	9%
HDO	65	76	76	599	8825	3483	13238 (2,0,0)	44	128
	<i>66</i>	<i>76</i>	<i>76</i>	<i>599</i>	<i>11045</i>	<i>119</i>	<i>11981(121,88,31)</i>	0%	1%
HD^{17}O	0	0	0	0	175	0	175	0	0
	<i>0</i>	<i>0</i>	<i>0</i>	<i>0</i>	<i>175</i>	<i>0</i>	<i>175</i>	0%	0%
HD^{18}O	53	61	45	544	908	0	1611	189	154
	<i>0</i>	<i>0</i>	<i>0</i>	<i>0</i>	<i>669</i>	<i>0</i>	<i>659</i>	12%	23%

Скорректированная информация используется при декомпозиции информационных ресурсов об изотомерах молекулы воды в массиве данных HITRAN и GEISA.

Критерий для проверки ограничения опубликования, используемый нами, основан на утверждении, что проверяемые данные из массивов должны отличаться от опубликованных не более чем на величину ошибок измерений, характерных для соответствующего диапазона вакуумных волновых чисел.

Для проведения проверки ограничения опубликования исследуемого массива данных проводилась декомпозиция массива по опубликованным данным, полученным в измерениях [27, 30–136] и расчетах [137–142]. Систематизация спектральных данных по изотомерам воды осуществлена в специально созданной информационной системе W@DIS, в которой аккумулированы все первичные данные, собранные в рамках проекта IUPAC.

Собранные первичные данные были размещены в базах данных ИС W@DIS с указанием публикации, из которой они извлечены. Наряду с первичными данными в системе размещены составные (экспертные) массивы HITRAN и GEISA.

Для декомпозиции массива данных пользователь должен выполнить действия в следующем порядке:

- 1) выбрать данные для последующей декомпозиции (рис. 2);
- 2) задать допустимую точность измерения (ϵ , табл. 3, рис. 3);

- 3) задать интервал вакуумных волновых чисел;
- 4) указать, по какой части первичных данных (расчетной или измерительной) проводить декомпозицию переходов с одинаковыми квантовыми числами, удовлетворяющими ограничению ϵ ;

5) пользователь может просмотреть остаток, т.е. переходы, не удовлетворяющие ограничению ϵ .

При просмотре результатов декомпозиции (см. рис. 3) для каждого первичного источника данных указывается число переходов, удовлетворяющих заданным ограничениям, а в колонке «Показать» приведена ссылка на таблицы, в которых размещены переходы из первичного источника данных, соответствующие указанным в интерфейсе ограничениям.

На рис. 4 показано сравнение переходов, которые удовлетворяют критериям пользователя.

5. Сравнение массивов HITRAN и GEISA по результатам декомпозиции

Результаты декомпозиции экспертных массивов данных приведены в табл. 3. Каждому изотоперу соответствуют две строки. В верхней строке представлены результаты декомпозиции экспертного массива по публикациям, собранным группой данных IUPAC, а в нижней строке – по вариационным расчетам. В отношениях числитель является числом переходов, не удовлетворяющих критериям заданного при декомпозиции сравнения, а знаменатель равен числу переходов экспертного массива

Поиск источников информации

Выбор задачи	<input type="radio"/> Уровни энергии <input type="radio"/> Профили линий <input checked="" type="radio"/> Переходы
Вещество	H ₂ O
Диапазон вакуумных частот (см ⁻¹)	0 - 30000
Слова для поиска источников данных по контексту, содержащемуся в аннотации или ссылке на публикацию. (Фамилии авторов публикаций, журнал, год публикации, слова из названий статьи)	<input type="text"/>

40 **строк от** 0 **Всего строк** 115

Выбор	Название Вычисления/Эксперимент	Число записей [z-a]	Публикация
<input checked="" type="radio"/>	2006_BaTeHaTo_H2O	1791456	R.J.Barber, J. Tennyson, G.J. Harris, R.N. Tolchenov, A high accuracy computed water line list - BT2. // Mon. Not. R. Astron. Soc., 2006, Volume 368, Pages 1087-1094, DOI: 10.1111/j.1365-2966.2006.10184.x.
<input checked="" type="radio"/>	2007_ScPaTa_b_H2O	1027079	Schwenke D.W., H. Partridge, Tashkun S.A., Schwenke-Partridge linelists (PS-2007-1000) for H ₂ ¹⁶ O. http://soectra.iao.ru

Рис. 2. Интерфейс для выбора источника данных с целью его декомпозиции

2009_RoGoBaBe_H2O

L.S. Rothman, I.E. Gordon, A. Barbe, D.Chris Benner, P.F. Bernath, M. Birk, V. Boudon, L.R. Brown, A. Campargue, J.-P. Champion, K. Chance, L.H. Coudert, V. Dana, V.M. Devi, S. Fally, J.-M. Flaud, R.R. Gamache, A. Goldman, etc, The HITRAN 2008 molecular spectroscopic database. // Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer, 2009, Volume 110, Issue 9, Pages 533-572, DOI: 10.1016/j.jqsrt.2009.02.013.

Ошибка определения частоты (см⁻¹) 1

Ограничения на частоту (см⁻¹) 0 - 20000

Декомпозиция по эксперименту

Декомпозиция по расчету

Провести декомпозицию

Показать 40 строк от 0 Всего строк 82

Название Вычисления/Эксперимент	Число записей	Число совпадений [z-a]	Показать	Публикация
2005_ToNaZoSh_H2O	16990	11922	Показать	Tolchenov R.N., O.Naumenko, N.F.Zobov, S.V.Shirin, O.L.Polyansky, J.Tennyson, M.Carleer, P.-F.Coheur, S.Fally, A.Jenouvrier and A.C.Vandaele, Water vapour line assignments in the 9250-26 000 cm ⁻¹ frequency range. // Journal of Molecular Spectroscopy, 2005, v. 233, no. 1, p. 68-76.

Рис. 3. Интерфейс для задания условий декомпозиции и представления ее результатов

Information source left													Information source right			
2009_RoGoBaBe_H2O													2005_ToNaZoSh_H2O			
L.S. Rothman, I.E. Gordon, A. Barbe, D.Chris Benner, P.F. Bernath, M. Birk, V. Boudon, L.R. Brown, A. Campargue, J.-P. Champion, K. Chance, L.H. Coudert, V. Dana, V.M. Devi, S. Fally, J.-M. Flaud, R.R. Gamache, A. Goldman, etc, The HITRAN 2008 molecular spectroscopic database. // Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer, 2009, Volume 110, Issue 9, Pages 533-572													Tolchenov R.N., O.Naumenko, N.F.Zobov, S.V.Shirin, O.L.Polyansky, J.Tennyson, M.Carleer, P.-F.Coheur, S.Fally, A.Jenouvrier and A.C.Vandaele, Water vapour line assignments in the 9250-26 000 cm ⁻¹ frequency range. // Journal of Molecular Spectroscopy, 2005, v. 233, no. 1, p. 68-76.			
Show 40 rows starting from 0													In all rows 11922			
ω_1 (cm ⁻¹)	ν_1^{up}	ν_2^{up}	ν_3^{up}	J^{up}	K_a^{up}	K_c^{up}	ν_1^{low}	ν_2^{low}	ν_3^{low}	J^{low}	K_a^{low}	K_c^{low}	ω_2 (cm ⁻¹)	$\Delta\omega$ (cm ⁻¹)		
9251.2391	1	1	1	9	4	6	0	0	0	8	2	7	9251.2408	1.7000e-3		
9253.5825	0	1	2	6	4	2	0	0	0	5	3	3	9253.5841	1.6000e-3		
9256.5636	2	1	0	7	5	2	0	0	0	7	0	7	9256.5661	2.5000e-3		
9257.0917	0	1	2	5	5	0	0	0	0	4	4	1	9257.0921	4.0000e-4		
9257.0917	0	1	2	5	5	1	0	0	0	4	4	0	9257.0624	2.9300e-2		

Рис. 4. Сравнение вакуумных волновых чисел массива HITRAN и одного из источников данных, удовлетворяющих ограничениям пользователя

Таблица 3

Сравнение массивов спектральных данных HITRAN и GEISA в диапазоне 0–20000 см⁻¹

Изотомер	HITRAN	GEISA	HITRAN	GEISA	HITRAN	GEISA
	0–10 см ⁻¹		10–30 см ⁻¹		30–50 см ⁻¹	
H₂¹⁷O	–	0/1 (0%)	–	0/10 (0%)	9/25 (36%)	9/29 (36%)
	–	0/1 (0%)	–	0/10 (0%)	0/25 (0%)	0/29 (0%)
H₂¹⁸O	28/31 (90%)	0/1 (0%)	0/15 (0%)	0/15 (0%)	17/33 (52%)	17/33 (52%)
	8/31 (26%)	0/1 (0%)	0/15 (0%)	0/15 (0%)	0/33 (0%)	0/33 (0%)
HDO	20/65 (31%)	20/66 (30%)	39/76 (51%)	20/76 (26%)	60/76 (79%)	60/76 (79%)
	0/65 (0%)	0/66 (0%)	0/76 (0%)	0/76 (0%)	2/76 (3%)	2/76 (3%)
HD¹⁸O	26/53 (49%)	–	52/61 (85%)	–	28/45 (62%)	–
	8/53 (15%)	–	3/61 (5%)	–	0/45 (0%)	–
	50–200 см ⁻¹		200–10000 см ⁻¹		10000–20000 см ⁻¹	
H₂¹⁷O	147/279 (53%)	147/279 (53%)	1309/4762 (28%)	1383/4828 (29%)	118/1916 (6%)	9/325 (3%)
	0/279 (0%)	0/279 (0%)	669/4762 (14%)	119/4828 (2%)	639/1916 (33%)	107/325 (33%)
H₂¹⁸O	205/342 (60%)	205/342 (60%)	1529/6889 (22%)	1380/7109 (20%)	164/2443 (7%)	23/863 (3%)
	2/342 (1%)	0/342 (1%)	302/6889 (4%)	317/7109 (4%)	208/2443 (9%)	49/863 (6%)
HDO	370/599 (62%)	370/599 (62%)	1674/8825 (19%)	2980/11045 (27%)	8/3483 (0%)	8/119 (7%)
	2/599 (0%)	0/599 (0%)	5/8825 (0%)	27/11045 (0%)	94/3483 (3%)	0/119 (0%)
HD¹⁷O	–	–	7/175 (4%)	7/175 (4%)	–	–
	–	–	0/175 (0%)	0/175 (0%)	–	–
HD¹⁸O	378/544 (69%)	–	434/908 (48%)	195/679 (29%)	–	–
	16/544 (3%)	–	221/908 (24%)	221/679 (33%)	–	–

Сравнение спектральных массивов данных HITRAN и GEISA с учетом ограничения на опубликование...

в данном интервале. Это же отношение в процентах показано в скобках. Подчеркнутые цифры означают, что сравнение проведено с точностью $\varepsilon = 0,01 \text{ см}^{-1}$, выделенные курсивом — $\varepsilon = 0,1 \text{ см}^{-1}$, жирным шрифтом — $\varepsilon = 1 \text{ см}^{-1}$.

Сравнение массивов HITRAN и GEISA показало следующее:

— в диапазоне $0-200 \text{ см}^{-1}$ число переходов в них практически одинаково. Исключением является интервал $10-30 \text{ см}^{-1}$, в котором для молекулы HDO данные GEISA лучше соответствуют набору данных IUPAC;

— в диапазоне $0-10000 \text{ см}^{-1}$ декомпозиция по данным вариационных расчетов содержит меньше неопубликованных данных, чем декомпозиция по данным измерений;

— в диапазоне $10000-20000 \text{ см}^{-1}$ тенденция обратная, а именно: число переходов, взятых в экспертные массивы из экспериментальных работ, существенно больше числа переходов, взятых из вариационных расчетов. Этот факт, по-видимому, указывает на некорректное приписывание квантовых чисел при вариационных расчетах в этом диапазоне.

Особое внимание следует обратить на факт несовпадения данных из экспертных массивов с данными вариационных расчетов в диапазоне $0-50 \text{ см}^{-1}$. Для изотопомеров H_2^{18}O и HDO в диапазоне $0-10 \text{ см}^{-1}$, а для изотомера HD^{18}O в диапазоне $0-50 \text{ см}^{-1}$ процент неопубликованных данных значителен. Если данные из массивов HITRAN и GEISA в этих диапазонах используют неопубликованные данные, то, скорее всего, они были получены десятилетия тому назад.

В Приложении приведены библиографические ссылки на работы, в которых опубликованы данные о вакуумных волновых числах, совпадающие с размещенными в экспертных массивах при тех же ограничениях на значение ε . Курсивом выделены

ссылки на работы, содержащие описание вариационных расчетов. Число n равно числу переходов, не найденных в анализируемом массиве.

Заключение

В данной статье представлено обоснование необходимости применять ограничения опубликования спектральных данных по отношению к экспертным массивам, показано, что в экспертных массивах данных содержатся устаревшие данные (данные с низкой точностью определения вакуумных волновых чисел), и описаны ограничения на процедуру декомпозиции информационных ресурсов по первичным опубликованным данным.

Проведен анализ экспертных массивов HITRAN и GEISA. В качестве основы для анализа экспертных массивов взят массив данных IUPAC [2, 3]. Показано, что $\sim 7\%$ переходов изотопомеров H_2^{17}O , H_2^{18}O в экспертных массивах не документированы, т.е. они не присутствуют ни в экспериментальных, ни в расчетных данных, и диапазоны $0-10$, $30-200 \text{ см}^{-1}$ содержат в основном расчетные данные. В диапазоне $0-200 \text{ см}^{-1}$ данные экспертных массивов совпадают и содержат одинаковые неточности. Основные различия между двумя проанализированными массивами сосредоточены в диапазоне $200-20000 \text{ см}^{-1}$. Для изотомера H_2^{17}O в HITRAN не документировано 20% переходов, а в GEISA 4% (относится к расчетным данным). По остальным изотопомерам выявлено приблизительно одно и то же процентное содержание недокументированных данных.

Выполненный анализ указывает на необходимость планирования экспериментов, ориентированных на проверку данных, используемых в приложениях, но не подтвержденных расчетами и измерениями.

ПРИЛОЖЕНИЕ

Результаты декомпозиции в интервале $0-20000 \text{ см}^{-1}$

Изотопомер	N	$\varepsilon, \text{ см}^{-1}$	Массив данных HITRAN	n	N	$\varepsilon, \text{ см}^{-1}$	Массив данных GEISA	n
$0-100 \text{ см}^{-1}$								
H_2^{17}O					1	10^{-3}	[58, 69, 101]	0
						10^{-3}	[134]	0
H_2^{18}O	31	10^{-1}	[49, 53, 124, 135]	28	1	10^{-4}	[53, 124, 135]	0
		10^{-1}	[134-137]	8		10^{-2}	[134-137]	0
HDO	65	1	[31-40, 42-46, 48, 50-52, 56, 75, 89]	20	66	1	[31-40, 42-46, 48, 50-52, 56, 75, 89]	20
		10^{-1}	[114, 116, 117, 119]	0		10^{-1}	[114, 116, 117, 119]	0
$10-30 \text{ см}^{-1}$								
H_2^{17}O	10	10^{-2}	[58, 68, 69, 101]	0	10	10^{-2}	[58, 68, 69, 101]	0
		10^{-5}	[139-143]	0		10^{-2}	[139-143]	0
H_2^{18}O	15	10^{-3}	[60, 68, 82, 101, 124, 135]	0	15	10^{-2}	[60, 68, 82, 101, 124, 135]	0
		10^{-2}	[139-143]	0		10^{-2}	[139-143]	0
HDO	76	10^{-1}	[51, 60, 74, 75]	39	76	10^{-1}	[51, 60, 74, 75]	20
		10^{-1}	[137, 138, 140, 141]	0		10^{-1}	[137, 138, 140, 141]	0

Изотопомер	<i>N</i>	ϵ , см^{-1}	Массив данных HITRAN	<i>n</i>	<i>N</i>	ϵ , см^{-1}	Массив данных GEISA	<i>n</i>
				30–50 см^{-1}				
H ₂ ¹⁷ O	25	10 ⁻¹	[68, 101]	9	25	10 ⁻¹	[68, 101]	9
		10 ⁻²	[139–143]	0		10 ⁻²	[139–143]	0
H ₂ ¹⁸ O	33	10 ⁻²	[60, 68, 75, 101]	17	33	10 ⁻²	[60, 68, 75, 101]	17
		10 ⁻²	[139–143]	0		10 ⁻²	[139–143]	0
HDO	76	10 ⁻¹	[60, 74, 75]	60	76	10 ⁻¹	[60, 74, 75]	60
		10 ⁻¹	[137, 138, 140, 141]	2		10 ⁻¹	[137, 138, 140, 141]	2
				50–200 см^{-1}				
H ₂ ¹⁷ O	279	10 ⁻¹	[61, 64, 66, 101]	147	279	10 ⁻¹	[61, 64, 66, 101]	147
		10 ⁻¹	[139–143]	0		10 ⁻¹	[139–143]	0
H ₂ ¹⁸ O	342	10 ⁻¹	[61, 64, 66, 75, 101]	205	342	10 ⁻¹	[61, 64, 66, 75, 101]	205
		10 ⁻¹	[139–143]	2		10 ⁻¹	[139–143]	0
HDO	599	10 ⁻¹	[27, 64, 75]	370	599	10 ⁻¹	[27, 64, 75]	370
		10 ⁻¹	[137, 138, 140, 141]	2		10 ⁻¹	[137, 138, 140, 141]	0
				200–10000 см^{-1}				
H ₂ ¹⁷ O	4762	10 ⁻¹	[47, 54, 57, 61, 62, 64–67, 72, 88, 90–92, 100, 112, 117, 120, 122, 128, 129, 134, 136]	1310	4828	10 ⁻¹	[47, 54, 57, 61, 62, 64–67, 72, 88, 90–92, 112, 117, 120, 122, 128, 129, 134, 136]	1384
		1	[134, 139–142]	669		1	[134, 139–142]	119
H ₂ ¹⁸ O	6889	10 ⁻¹	[47, 54, 57, 59, 61–66, 72, 73, 75, 76, 78, 79, 83, 88, 90–92, 110, 112, 114, 117, 120, 122, 125–129, 134, 136]	1259	7106	10 ⁻¹	[47, 54, 57, 59, 61–66, 72, 73, 75, 76, 78, 79, 83, 88, 90–92, 110, 112, 114, 117, 120, 125–129, 134, 136]	1379
		1	[134, 139–142]	302		1	[134, 139–142]	317
HDO	8825	1	[41, 57, 64, 70–73, 75, 77, 81, 84–86, 90–93, 96, 99, 108, 109, 111, 115, 116, 118, 120, 122, 128, 129]	1674	11045	1	[41, 57, 64, 70–75, 77, 81, 84, 85, 86, 90, 92, 93, 96, 99, 108, 109, 111, 115, 116, 118, 120, 122, 128, 129]	2980
		1	[137, 138, 140, 141]	5		1	[137, 138, 140, 141]	27
				10000–20000 см^{-1}				
H ₂ ¹⁷ O	1916	10 ⁻¹	[100, 122, 123, 131]	118	325	10 ⁻¹	[100, 122, 123, 131]	9
		10 ⁻¹	[139, 140, 141]	639		10 ⁻¹	[139]	107
H ₂ ¹⁸ O	2443	10 ⁻¹	[80, 94, 113, 122, 123, 131]	164	863	10 ⁻¹	[80, 94, 113, 122, 123, 131]	23
		1	[139, 140, 141]	208		1	[139, 140, 141]	49
HDO	3483	10 ⁻¹	[32, 77, 97, 98, 102–107, 109, 116, 119, 121, 122, 130, 131–133]	8	119	10 ⁻¹	[32, 77, 87, 97, 102–107, 109, 116, 119, 121, 122, 130–133]	8
		1	[137, 138, 140, 141]	0		1	[137, 138]	0

1. IUPAC project N 2004-035-1-100 «A database of water transitions from experiment and theory». URL: <http://www.iupac.org/web/ins/2004-035-1-100>
2. 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., Daumont L., Fazliev A.Z., Furtenbacher T., 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 H₂¹⁷O and H₂¹⁸O // J. Quant. Spectrosc. and Radiat. Transfer. 2009. V. 110, N 9. P. 573–596.
3. 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., Toth R.A., Vandaele A.C., Zobov N.F., Fally S., Fazliev A.Z., Furtenbacher T., Gordon I.E., Hu Shui-Ming, 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 HD¹⁶O, HD¹⁷O, and HD¹⁸O // J. Quant. Spectrosc. and Radiat. Transfer. 2010. V. 111, N 15. P. 2160–2184.
4. Rothman L.S., Gordon I.E., Barbe A., Benner D., 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., Lacome 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. Vander.* The HITRAN 2008 molecular spectroscopic database // *J. Quant. Spectrosc. and Radiat. Transfer.* 2009. V. 110, N 9. P. 533–572.
5. *Jacquinot-Husson N., Scott N.A., Chédin A., Crépeau L., Armante R., Capelle V., Orphal J., Cous-tenis A., Boone C., Poulet-Crovisier N., Barbe A., Birk M., Brown L.R., Camy-Peyret C., Claveau C., Chance K., Christidis N., Clerbaux C., Coheur P.F., Dana V., Daumont L., De Backer-Barilly M.R., Di Lonardo G., Flaud J.-M., Goldman A., Hamdouni A., Hess M., Hurley M.D., Jacquemart D., Klei-ner I., Köpke P., Mandin J.Y., Massie S., Mikhai-lenko S., Nemtchinov V., Nikitin A., Newnham D., Perrin A., Perevalov V.I., Pimock S., Régalia-Jarlot L., Rinsland C.P., Rublev A., Schreier F., Schult L., Smith K.M., Tashkun S.A., Teffo J.L., Toth R.A., Tyuterev V.I., Auwera J. Vander, Varanasi P., Wagner G.* The GEISA spectroscopic database: Current and future archive for Earth and planetary atmosphere studies // *J. Quant. Spectrosc. and Radiat. Transfer.* 2008. V. 109, N 6. P. 1043–1059.
 6. *Lanquetin R., Coudert L.H., Camy-Peyret C.* High-Lying Rotational Levels of Water: An Analysis of the Energy Levels of the Five First Vibrational States // *J. Mol. Spectrosc.* 2001. V. 206, N 1. P. 83–103.
 7. *Naus H., Ubachs W., Levelt P.F., Polyansky O.L., Zobov N.F., Tennyson J.* Cavity-Ring-Down Spectroscopy on Water Vapor in the Range 555–604 nm // *J. Mol. Spectrosc.* 2001. V. 205, N 1. P. 117–121.
 8. *Schermaul R., Learner R.C.M., Newnham D.A., Wil- liams R.G., Ballard J., Zobov N.F., Belmiloud D., Tennyson J.* The water vapor spectrum in the region 8600–15000 cm⁻¹: experimental and theoretical studies to a new spectral line database // *J. Mol. Spectrosc.* 2001. V. 208, N 1. P. 32–42.
 9. *Brown L.R., Toth R.A., Dulick M.* Empirical Line Parameters of H₂¹⁶O near 0.94 μm: Positions, Intensities and Air-Broadening Coefficients // *J. Mol. Spec- trosc.* 2002. V. 212, N 1. P. 57–82.
 10. *Tereszczuk K., Bernath P.F., Zobov N.F., Shi- rin S.V., Polyansky O.L., Libeskind N.I., Tenny- son J. and Wallace L.* Laboratory Spectroscopy of Hot Water Near 2-μm and Sunspot Spectroscopy in the H-Band Region // *The Astrophys. J.* 2002. V. 577, N 1. P. 496–500.
 11. *Coheur P.-F., Fally S., Carleer M., Clerbaux C., Colin R., Jenouvrier A., Mérienne M.-F., Hermans C., Vandaele A.C.* New water vapor line parameters in the 26000–13000 cm⁻¹ region // *J. Quant. Spectrosc. and Radiat. Transfer.* 2002. V. 74, N 4. P. 493–510.
 12. *Mérienne M.-F., Jenouvrier A., Hermans C., Van- daele A.C., Carleer M., Clerbaux C., Coheur P.-F., Colin R., Fally S., Bach M.* Water vapor line param- eters in the 13 000–9250 cm⁻¹ region // *J. Quant. Spectrosc. and Radiat. Transfer.* 2003. V. 82, N 1–4. P. 99–117.
 13. *Coudert L.H., Piralí O., Vervloet M., Lanquetin R. and Camy-Peyret C.* The eight first vibrational states of the water molecule: measurements and analysis // *J. Mol. Spectrosc.* 2004. V. 228, N 2. P. 471–498.
 14. *Dupre P., Germain T., Zobov N.F., Tolchenov R.N. and Tennyson J.* Continuous-Wave Cavity ring down near ultraviolet rotation-vibration spectrum of water // *J. Chem. Phys.* 2005. V. 123, N 15. P. 154307.
 15. *Kassi S., Macko P., Naumenko O., Campargue A.* The absorption spectrum of water near 750 nm by CW-CRDS: contribution to the search of water dimer absorption // *Phys. Chem. Chem. Phys.* 2005. V. 7, N 12. P. 2460–2467.
 16. *Toth R.A.* Measurements of positions, strengths and self-broadened widths of H₂O from 2900 to 8000 cm⁻¹: line strength analysis of the 2-nd triad bands // *J. Quant. Spectrosc. and Radiat. Transfer.* 2005. V. 94, N 1. P. 51–107.
 17. *Coheur P.-F., Bernath P.F., Carleer M., Colin R., Polyansky O.L., Zobov N.F., Shirin S.V., Bar- ber R.J., Tennyson J.* A 3000K laboratory emission spectrum of water // *J. Chem. Phys.* 2005. V. 122, N 7. 074307.
 18. *Mazzotti F., Naumenko O.V., Kassi S., Bykov A.D., Campargue A.* ICLAS of weak transitions of water be- tween 11300 and 12850 cm⁻¹. Comparison with FTS da- tabases // *J. Mol. Spectrosc.* 2006. V. 239, N 2. P. 174–181.
 19. *Naumenko O., Sneep M., Tanaka M., Shirin S.V., Ubachs W., Tennyson J.* Cavity ring-down spectroscopy of H₂¹⁷O in the range 16570–17125 cm⁻¹ // *J. Mol. Spectrosc.* 2006. V. 237, N 1. P. 63–69.
 20. *Matsushima F., Tomatsu N., Nagai T., Moriwaki Y., Takagi K.* Frequency measurement of pure rotational transitions in the ν₂ = 1 state of H₂O // *J. Mol. Spec- trosc.* 2006. V. 235. P. 190–195.
 21. *Mikhailenko S.N., Wang Leb, Kassi S., Campar- gue A.* Weak water absorption lines around 1.455 and 1.66 μm by CW-CRDS // *J. Mol. Spectrosc.* 2007. V. 244, N 2. P. 170–178.
 22. *Campargue A., Mikhailenko S., Liu A.W.* ICLAS of water in the 770 nm transparency window 12 746–13 558 cm⁻¹. Comparison with current experimental and calculated databases // *J. Quant. Spectrosc. and Radiat. Transfer.* 2008. V. 109, N 17–18. P. 2832–2845.
 23. *Furtenbacher T., Császár A.G.* On employing H₂¹⁶O, H₂¹⁷O, H₂¹⁸O, D₂¹⁶O lines as frequency standards in the 15–170 cm⁻¹ window // *J. Quant. Spectrosc. and Ra- diat. Transfer.* 2007. V. 109, N 7. P. 1234–1251.
 24. *Amano T. and Scappini F.* Millimeter-wave spectrum of rotationally excited H₂O // *Chem. Phys. Lett.* 1991. V. 182, N 2. P. 93–95.
 25. *Pearson J.C., Anderson T., Herbst E., De Lucia F.C., Helminger P.* Millimeter- and submillimeter-wave spec- trum of highly excited states of water // *The Astro- phys. J.* 1991. V. 379, N 1. L41–L43.
 26. *Matsushima F., Odashima H., Iwasaki T., Tsune- kawa S., Takagi K.* Frequency measurement of pure rotational transitions of H₂O from 0.5 to 5 THz // *J. Mol. Struct.* 1995. V. 352. P. 371–378.
 27. *Paso R., Horneman V.-M.* High-resolution rotational absorption spectra of H₂¹⁶O, HD¹⁶O, and D₂¹⁶O be- tween 110 and 500 cm⁻¹ // *J. Opt. Soc. Amer. B.* 1995. V. 12, N 10. P. 1813–1838.
 28. *Polyansky O.L., Busler J.R., Guo B., Zhang K., Ber- nath P.F.* The Emission Spectrum of Hot Water in the Region between 370 and 930 cm⁻¹ // *J. Mol. Spec- trosc.* 1996. V. 176, N 2. P. 305–315.
 29. *De Natale P., Lorini L., Inguscio M., Nolt I.G., Park Jae H., Di Lonardo G., Fusina L., Ade Peter A.R., Murray A.G.* Accurate frequency measurements for H₂O and ¹⁶O₃ in the 119-cm⁻¹ OH atmospheric window // *Appl. Opt.* 1997. V. 36, N 33. P. 8526–8532.
 30. *Macko P., Romanini D., Mikhailenko S.N., Nau- menko O.V., Kassi S., Jenouvrier A., Tyuterev V.I.G., Campargue A.* High Sensitivity cw-Cavity Ring Down Spectroscopy of water in the region of the 1.5 μm at- mospheric window // *J. Mol. Spectrosc.* 2004. V. 227, N 1. P. 90–108.

31. Townes C.H., Merritt F.R. Water Spectrum Near One-Centimeter Wave-Length // Phys. Rev. 1946. V. 70, N 7. P. 558–559.
32. Strandberg M.W.P., Wentink T.Jr., Hillger R.E., Wannier G.H., Deutsch M.L. Stark Spectrum of HDO // Phys. Rev. 1948. V. 73, N 2. P. 188.
33. Strandberg M.W.P. Rotational Absorption Spectrum of HDO // J. Chem. Phys. 1949. V. 17, N 10. P. 901–904.
34. Jen C.K. Rotational Magnetic Moments for H₂O and HDO // Phys. Rev. 1949. V. 75, N 2. P. 471.
35. Jen C.K., Bianco D.R., Massey J.T. Some Heavy Water Rotational Absorption Lines // J. Chem. Phys. 1953. V. 21, N 3. P. 520–525.
36. Beers Y., Weisbaum S. An ultra-high-frequency rotational line of HDO // Phys. Rev. 1953. V. 91, N 4. P. 1014.
37. Burke B.F., Strandberg M.W.P. Zeeman Effect in Rotational Spectra of Asymmetric-Rotor Molecules // Phys. Rev. 1953. V. 90, N 2. P. 303–308.
38. Posener D.W., Strandberg M.W.P. Microwave Spectrum of HDO // J. Chem. Phys. 1953. V. 21, N 8. P. 1401–1402.
39. Weisbaum S., Beers Y., Hermann G. Low-Frequency Rotational Spectrum of HDO // J. Chem. Phys. 1955. V. 23, N 9. P. 1601–1605.
40. Erlandsson G., Cox J. Millimeter-Wave Lines of Heavy Water // J. Chem. Phys. B. 1956. V. 25, N 4. P. 778–779.
41. Benedict W.S., Gailar N., Plyler E.R. Rotational-vibration spectra of deuterated water vapor // J. Chem. Phys. 1956. V. 24, N 6. P. 1139–1165.
42. Posener D.W. // Austral. J. Phys. 1957. V. 10. P. 276–285.
43. Treacy E.B., Beers Y. Hyperfine Structure of the Rotational Spectrum of HDO // J. Chem. Phys. 1962. V. 36, N 6. P. 1473–1480.
44. Thaddeus P., Krisher L.C., Loubser J.H.N. Hyperfine Structure in the Microwave Spectrum of HDO, HDS, CH₂O, and CHDO: Beam-Maser Spectroscopy on Asymmetric-Top Molecules // J. Chem. Phys. 1964. V. 40, N 2. P. 257–273.
45. Bluysen H., Verhoeven J., Dymanus A. Hyperfine structure of HDO and D₂O by beam maser spectroscopy // Phys. Lett. A. 1967. V. 25, N 3. P. 214–215.
46. Verhoeven J., Bluysen H., Dymanus A. Hyperfine structure of HDO and D₂O by beam maser spectroscopy // Phys. Lett. A. 1968. V. 26, N 9. P. 424–425.
47. Fraley P.E., Rao K. Narahari, Jones L.H. High resolution infrared spectra of water vapor ν_1 and ν_3 bands of H₂¹⁸O // J. Mol. Spectrosc. 1969. V. 29, N 1. P. 312–347.
48. Steenbeckliers G., Bellet J. Spectre de rotation de l'eau lourde // Comp. Rend. B. 1970. V. 270. P. 1039–1041.
49. Powell F.X., Johnson D.R. Microwave Detection of H₂¹⁸O // Phys. Rev. Lett. 1970. V. 24, N 12. P. 637.
50. Bellet J., Steenbeckliers G. Calcul des constantes rotationnelles des molecules H₂O, HDO et D₂O dans leurs etats fondamentaux de vibration // Comp. Rend. B. 1970. V. 271. P. 1039–1041.
51. De Lucia F.C., Cook R.L., Helminger P., Gordy W. Millimeter and Submillimeter wave Rotational spectrum and centrifugal Distortion effects of HDO // J. Chem. Phys. 1971. V. 55, N 11. P. 5334–5339.
52. Lafferty W., Bellet J., Steenbeckliers G. Spectre microonde des transitions de faible intensite de la molecule HDO // Comp. Rend. B. 1971. V. 273. P. 388–391.
53. Steenbeckliers G., Bellet J. Spectre micro-ondes des molecules H₂¹⁶O, H₂¹⁷O, et H₂¹⁸O // Comp. Rend. B. 1971. V. 273, N 12. P. 471–474.
54. Williamson J.G., Rao K. Narahari, Jones L.H. High resolution infrared spectra of water vapor ν_2 band of H₂¹⁸O // J. Mol. Spectrosc. 1971. V. 40, N 2. P. 372–387.
55. De Lucia F.C., Cook R.L., Helminger P., Gordy W. Millimeter and Submillimeter wave Rotational spectrum and centrifugal Distortion effects of HDO // J. Chem. Phys. 1971. V. 55, N 11. P. 5334–5339.
56. Clough S.A., Beers Y., Klein G.P., Rothman L.S. Dipole Moment of Water from Stark Measurements of H₂O, HDO and D₂O // J. Chem. Phys. 1973. V. 59, N 5. P. 2254–2259.
57. Camy-Peyret C., Flaud J.M., Guelachvili G., Amiot C. High resolution Fourier transform spectrum of water between 2930 and 4255 cm⁻¹ // Mol. Phys. 1973. V. 26, N 4. P. 825–855.
58. De Lucia F.C., Helminger P. Microwave Spectrum and Ground State Energy Levels of H₂¹⁷O. // J. Mol. Spectrosc. 1975. V. 56, N 1. P. 138–145.
59. Toth R.A., Margolis J.S. Spectrum of H₂¹⁸O in the 2900 to 3400 cm⁻¹ // J. Mol. Spectrosc. 1975. V. 57, N 2. P. 236–245.
60. Fleming J.W., Gibson M.J. Far-Infrared Absorption Spectra of Water Vapor H₂¹⁶O and Isotopic Modifications // J. Mol. Spectrosc. 1976. V. 62, N 3. P. 326–337.
61. Winther F. The Rotational Spectrum of Water between 650 and 50 cm⁻¹ H₂¹⁸O and H₂¹⁷O in Natural Abundance // J. Mol. Spectrosc. 1977. V. 65, N 3. P. 405–419.
62. Toth R.A., Flaud J.-M., Camy-Peyret C. Spectrum of H₂¹⁸O and H₂¹⁷O in the 5030 to 5640 cm⁻¹ region // J. Mol. Spectrosc. 1977. V. 67, N 1–3. P. 185–205.
63. Toth R.A., Flaud J.-M., Camy-Peyret C. Spectrum of H₂¹⁸O and H₂¹⁷O in the 6974 to 7387 cm⁻¹ // J. Mol. Spectrosc. 1977. V. 67, N 1–3. P. 206–218.
64. Kaupinnen J., Karkainen T., Kyro E. High-Resolution Spectrum of Water Vapor between 30 and 720 cm⁻¹ // J. Mol. Spectrosc. 1978. V. 71, N 1–3. P. 15–45.
65. Johns J.W.C., McKellar A.R.W. Stark spectroscopy with CO laser: Lamb dip spectra of H₂¹⁷O and H₂¹⁸O in the ν_2 fundamental band // Can. J. Phys. 1978. V. 56, N 6. P. 737–743.
66. Kaupinnen J., Kyro E. High resolution pure rotational spectrum of water vapor enriched by H₂¹⁷O and H₂¹⁸O // J. Mol. Spectrosc. 1980. V. 84, N 2. P. 405–423.
67. Camy-Peyret C., Flaud J.-M., Papineau N. La Bande ν_2 des especes isotopiques H₂¹⁷O et H₂¹⁸O // C. R. Acad. Sc. Paris. Serie B. 1980. V. 290. P. 537–540.
68. Partridge R.H. Far-infrared absorption spectra of H₂¹⁶O, H₂¹⁷O, and H₂¹⁸O // J. Mol. Spectrosc. 1981. V. 87, N 2. P. 429–437.
69. Kyro E. Centrifugal distortion analysis of pure rotational spectra of H₂¹⁶O, H₂¹⁷O, and H₂¹⁸O // J. Mol. Spectrosc. 1981. V. 88, N 1. P. 167–184.
70. Papineau N., Camy-Peyret C., Flaud J.-M. and Guelachvili G. The $2\nu_2$ and ν_1 bands of HD¹⁶O // J. Mol. Spectrosc. 1982. V. 92, N 2. P. 451–468.
71. Toth R.A., Gupta V.D., Brault J.W. Line positions and strengths of HDO in the 2400–3300 cm⁻¹ region // Appl. Opt. 1982. V. 21, N 18. P. 3337–3347.

72. *Guelachvili G.* Experimental Doppler-limited spectra of the ν_2 bands of H_2^{16}O , H_2^{17}O , H_2^{18}O and HDO by Fourier-transform spectroscopy: secondary wave-number standards between 1066 and 2296 cm^{-1} // *J. Opt. Soc. Amer. A.* 1983. V. 73, N 2. P. 137–150.
73. *Toth R.A., Brault J.W.* Line positions and strengths in the 001, 110, and 030 bands of HDO // *Appl. Opt.* 1983. V. 22, N 6. P. 908–926.
74. *Messer J.K., De Lucia F.C., Helming P.* Submillimeter spectroscopy of the major isotopes of water // *J. Mol. Spectrosc.* 1984. V. 105, N 1. P. 139–155.
75. *Johns J.W.C.* High-resolution far-infrared 20–350- cm^{-1} spectra of several isotopic species of H_2O // *J. Opt. Soc. Amer. B.* 1985. V. 2, N 8. P. 1340–1354.
76. *Pine A.S., Coulombe S.J., Camy-Peyret C., Flaud J.-M.* Atlas of high temperature water spectrum in the 3000 to 4000 cm^{-1} region // *J. Phys. and Chem. Ref. Data.* 1983. V. 12, N 3. P. 413–465.
77. *Flaud J.-M., Camy-Peyret C., Mahmoudi A., Guelachvili G.* The ν_2 band of HD^{16}O // *Int. J. Infrared and Millim. Waves.* 1986. V. 7, N 7. P. 1063–1090.
78. *Chevillard J.-P., Mandin J.-Y., Flaud J.-M., Camy-Peyret C.* The $2\nu_2 + \nu_3 - \nu_2$ hot band of H_2^{18}O between 4800 and 6000 cm^{-1} : Line positions and intensities // *J. Quant. Spectrosc. and Radiat. Transfer.* 1986. V. 36, N 4. P. 395–399.
79. *Chevillard J.-P., Mandin J.-Y., Camy-Peyret C., Flaud J.-M.* The first hexad {040, 120, 021, 200, 101, 002} of H_2^{18}O experimental levels and line intensities // *Can. J. Phys.* 1986. V. 64, N 6. P. 746–761.
80. *Taskun S., Putilova T.* Rotational structure of the 000, 010, 001, 020 and 100 vibrational states of H_2^{18}O ; Spectroscopic assignment up to $J, K_a = 30$ and critical analysis of the published experimental energy levels and line list // *Atmos. Ocean Opt.* 2009. V. 22, N 5. P. 499–505.
81. *Guelachvili G., Rao K. Narahari.* Handbook of infrared standards, with spectral maps and transition assignments between 3 and 2600 μm . Orlando, Florida: Academic Press, 1986. 32887 p.
82. *Belov S.P., Kozin I.N., Polyansky O.L., Tret'yakov M.Yu., Zobov N.F.* Measurement and analysis of precise data on rotational and ro-vibrational spectra of water. Ground and 010 state of H_2^{18}O // *Opt. and Spectrosc.* 1987. V. 62, N 6. P. 1244–1248.
83. *Ulenikov O.N., Zhilyakov A.S., Shevchenko G.A.* The line intensities of the $2\nu_2 + \nu_3 - \nu_2$ hot band of H_2^{18}O // *J. Mol. Spectrosc.* 1989. V. 133, N 1. P. 224–226.
84. *Ohshima T., Sasada H.* 1.5- μm DFB semiconductor laser spectroscopy of deuterated water // *J. Mol. Spectrosc.* 1989. V. 136, N 2. P. 250–263.
85. *Sasada H., Takeuchi S., Iritani M., Nakatani K.* Semiconductor-laser heterodyne frequency measurements on 1.52- μm molecular transitions // *J. Opt. Soc. Amer. B.* 1991. V. 8, N 4. P. 713–717.
86. *Rinsland C.P., Smith M.A.H., Devi V.M., Benner D.C.* Measurements of Lorentz-Broadening Coefficients and Pressure-Induced Line Shift Coefficients in the ν_2 Band of HD^{16}O // *J. Mol. Spectrosc.* 1991. V. 150, N 2. P. 640–646.
87. *Jenouvrier A., Merienne M.F., Carleer M., Colin R., Vandaele A.-C., Bernath P.F., Polyansky O.L., Tennyson J.* The Visible and Near Ultraviolet Rotation-Vibration Spectrum of HOD // *J. Mol. Spectrosc.* 2001. V. 209, N 2. P. 165–168.
88. *Toth R.A.* Transition frequencies and absolute strengths of H_2^{17}O and H_2^{18}O in the 6.2- μm region // *J. Opt. Soc. Amer. B.* 1992. V. 9, N 4. P. 462–482.
89. *Goyette T.M., DeLucia F.C., Dutta J.M., Jones C.R.* Variable temperature pressure broadening of the $4_{1,4}-3_{2,1}$ transition of H_2O by O_2 and N_2 // *J. Quant. Spectrosc. and Radiat. Transfer.* 1993. V. 49, N 5. P. 485–489.
90. *Toth R.A.* HD^{16}O , HD^{18}O , and HD^{17}O Transition Frequencies and Strengths in the ν_2 Bands // *J. Mol. Spectrosc.* 1993. V. 162, N 1. P. 20–40.
91. *Toth R.A.* Measurements of HDO between 4719 and 5843 cm^{-1} // *J. Mol. Spectrosc.* 1997. V. 186, N 2. P. 276–292.
92. *Toth R.A.* Line Positions and Strengths of HDO between 6000 and 7700 cm^{-1} // *J. Mol. Spectrosc.* 1997. V. 186, N 1. P. 66–89.
93. *Bykov A., Naumenko O., Petrova T., Scherbakov A., Sinitsa L., Mandin J.-Y., Camy-Peyret C., Flaud J.-M.* The second decade of H_2^{18}O : line positions and energy levels // *J. Mol. Spectrosc.* 1995. V. 172. P. 243–254.
94. *Bykov A., Kapitanov V., Naumenko O., Petrova T., Serdukov V., Sinitsa L.* The laser spectroscopy of highly excited vibrational states of HD^{16}O // *J. Mol. Spectrosc.* 1992. V. 153, N 1–2. P. 197–207.
95. *Bykov A., Naumenko O., Zotov O., Makarov V.* $\nu_2 + \nu_3$ band of HD^{16}O // *Proc. of SPIE 10 All-Union Symposium and School on High-Resolution Mol. Spectrosc.* 1992. V. 1811. P. 191–193.
96. *Votava O., Fair J.R., Plusquellic D.F., Riedle E., Nesbitt D.J.* High resolution vibrational overtone studies of HOD and H_2O with single mode, injection seeded ring optical parametric oscillators // *J. Chem. Phys.* 1997. V. 107, N 21. P. 8854–8865.
97. *Fair J.R., Votava O., Nesbitt D.J.* OH stretch overtone spectroscopy and transition dipole alignment of HOD // *J. Chem. Phys.* 1998. V. 108, N 1. P. 72–80.
98. *Lazarev V.V., Petrova T.M., Sinitsa L.N., Qing-Shi Zhu, Jia-Xiang Han, Lu-Yuan Hao.* Absorption spectrum of HD^{16}O in 0.7 μm region // *Atmos. and Ocean. Opt.* 1998. V. 11, N 9. P. 809–812.
99. *Toth R.A.* HDO and D_2O low pressure, long path spectra in the 600–3100 cm^{-1} region. I. HDO line positions and strengths // *J. Mol. Spectrosc.* 1999. V. 195, N 1. P. 73–97.
100. *Camy-Peyret C., Flaud J.-M., Mandin J.-Y., Bykov A., Naumenko O., Sinitsa L., Voronin B.* Fourier-transform absorption spectrum of the H_2^{17}O molecule in the 9711–11335 cm^{-1} // *J. Quant. Spectrosc. and Radiat. Transfer.* 1999. V. 61, N 6. P. 795–812.
101. *Matsushima F., Nagase H., Nakauchi T., Odashima H., Takagi K.* Frequency Measurement of Pure Rotational Transitions of H_2^{17}O and H_2^{18}O from 0.5 to 5 THz // *J. Mol. Spectrosc.* 1999. V. 193, N 1. P. 217–223.
102. *Naumenko O., Bertseva E., Campargue A.* The $4V_{\text{OH}}$ Absorption Spectrum of HDO // *J. Mol. Spectrosc.* 1999. V. 197, N 2. P. 122–132.
103. *Naumenko O., Campargue A.* High-Order Resonance Interactions in HDO: Analysis of the Absorption Spectrum in the 14980–15350 cm^{-1} Spectral Region // *J. Mol. Spectrosc.* 2000. V. 199, N 1. P. 59–70.
104. *Campargue A., Bertseva E., Naumenko O.* The Absorption Spectrum of HDO in the 16 300–16 670 and 18 000–18 350 cm^{-1} Spectral Regions // *J. Mol. Spectrosc.* 2000. V. 204, N 1. P. 94–105.
105. *Naumenko O., Bertseva E., Campargue A., Schwenneke D.W.* Experimental and *ab initio* Studies of the HDO Absorption Spectrum in the 13 165–13 500 cm^{-1} Spectral Region // *J. Mol. Spectrosc.* 2000. V. 201, N 2. P. 297–309.
106. *Naumenko O., Campargue A.* High-Order Resonance Interactions in HDO: Analysis of the Absorption Spec-

- trum in the 14 980–15 350 cm^{-1} Spectral Region // *J. Mol. Spectrosc.* 2000. V. 199, N 1. P. 59–72.
107. Bertseva E., Naumenko O., Campargue A. The $5V_{\text{OH}}$ Overtone Transition of HDO. // *J. Mol. Spectrosc.* 2000. V. 203, N 1. P. 28–36.
 108. Siemsen K.J., Bernard J.E., Madej A.A., Marmet L. Absolute Frequency Measurement of an HDO Absorption Line near 1480 cm^{-1} // *J. Mol. Spectrosc.* 2000. V. 199, N 1. P. 144–145.
 109. Wang Xianghuai, He Shenggui, Hu Shuiming, Zheng Jingjing, Zhu Qingshi. Analysis of the HDO absorption spectrum between 9600–10200 cm^{-1} // *Chin. Phys.* 2000. V. 9. P. 885–891.
 110. Moretti L., Sasso A., Gianfrani L., Ciurylo R. Collisional-Broadened and Dicke-Narrowed Lineshapes of H_2^{16}O and H_2^{18}O Transitions at 1.39 μm // *J. Mol. Spectrosc.* 2001. V. 205, N 1. P. 20–27.
 111. Parekunnel T., Bernath P.F., Zobov N.F., Shirin S.V., Polyansky O.L., Tennyson J. Emission Spectrum of Hot HDO in the 380–2190 cm^{-1} Region // *J. Mol. Spectrosc.* 2001. V. 210, N 1. P. 28–40.
 112. Mikhailenko S.N., Tyuterev V.I.G., Starikov V.I., Albert K.K., Winnewisser B.P., Winnewisser M., Mellau G., Camy-Peyret C., Lanquetin R., Flaud J.-M., Brault J.W. Water Spectra in the Region 4200–6250 cm^{-1} , Extended Analysis of $\nu_1 + \nu_2$, $\nu_2 + \nu_3$, and $3\nu_2$ Bands and Confirmation of Highly Excited States from Flame Spectra and from Atmospheric Long-Path Observations // *J. Mol. Spectrosc.* 2002. V. 213, N 2. P. 91–121.
 113. Tanaka M., Brault J.W., Tennyson J. Absorption spectrum of H_2^{18}O in the 12,400–14,520 cm^{-1} range // *J. Mol. Spectrosc.* 2002. V. 216, N 1. P. 77–80.
 114. Mikhailenko S.N., Tyuterev V.I.G., Mellau G. 0 0 0 and 0 1 0 States of H_2^{18}O : analysis of rotational transitions in hot emission spectrum in the 400–850 cm^{-1} region // *J. Mol. Spectrosc.* 2003. V. 217, N 2. P. 195–211.
 115. Janca A., Tereszchuk K., Bernath P.F., Zobov N.F., Shirin S.V., Polyansky O.L., Tennyson J. Emission spectrum of hot HDO below 4000 cm^{-1} // *J. Mol. Spectrosc.* 2003. V. 219, N 1. P. 132–135.
 116. Bertseva E., Naumenko O., Campargue A. The absorption spectrum of HDO around 1.0 μm by ICLAS-VECSEL // *J. Mol. Spectrosc.* 2003. V. 221, N 1. P. 38–46.
 117. Naumenko O.V., Voronina S., Hu S.-M. High resolution Fourier transform spectrum of HDO in the 7500–8200 cm^{-1} region: revisited // *J. Mol. Spectrosc.* 2004. V. 227, N 2. P. 151–157.
 118. Naumenko O., Hu S.-M., He S.-G., Campargue A. Rovibrational analysis of the absorption spectrum of HDO between 10110 and 12215 cm^{-1} // *Phys. Chem. Chem. Phys.* 2004. V. 6. P. 910–918.
 119. Tolchenov R.N., Tennyson J. Water line parameters for weak lines in the range 7400–9600 cm^{-1} // *J. Mol. Spectrosc.* 2005. V. 231, N 1. P. 23–27.
 120. Campargue A., Vasilenko I., Naumenko O. Intracavity laser absorption spectroscopy of HDO between 11645 and 12330 cm^{-1} // *J. Mol. Spectrosc.* 2005. V. 234, N 2. P. 216–227.
 121. Toth R.A. Measurements of positions, strengths and self-broadened widths of H_2O from 2900 to 8000 cm^{-1} : line strength analysis of the 2nd triad bands // *J. Quant. Spectrosc. and Radiat. Transfer.* 2005. V. 94, N 1. P. 51–107.
 122. 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 9250–26 000 cm^{-1} frequency range // *J. Mol. Spectrosc.* 2005. V. 233, N 1. P. 68–76.
 123. Tanaka M., Naumenko O., Brault J., Tennyson J. Fourier transform absorption spectroscopy of H_2^{18}O and H_2^{17}O in the $3\nu + d$ and 4ν polyad region // *J. Mol. Spectrosc.* 2005. V. 234, N 1. P. 1–9.
 124. Golubiatnikov G.Yu., Markov V.N., Guarneri A., Knuchel R. Hyperfine structure of H_2^{16}O and H_2^{18}O measured by Lamb-dip technique in the 180–560 GHz frequency range // *J. Mol. Spectrosc.* 2006. V. 240, N 2. P. 251–254.
 125. An-Wen Liu, Jun-He Du, Ke-Feng Song, Le Wang, Lei Wan, Shui-Ming Hu. High-resolution Fourier-transform spectroscopy of ^{18}O -enriched water molecule in the 1080–7800 cm^{-1} region // *J. Mol. Spectrosc.* 2006. V. 237, N 2. P. 149–162.
 126. Liu A.-W., Hu S.-M., Camy-Peyret C., Mandin J.-Y., Naumenko O. and Voronin B. Fourier transform absorption spectra of H_2^{17}O and H_2^{18}O in the 8000–9400 cm^{-1} spectral region // *J. Mol. Spectrosc.* 2006. V. 237, N 1. P. 53–62.
 127. Liu A.-W., Naumenko O., Song K.-F., Voronin B., Hu S.-M. Fourier-transform absorption spectroscopy of H_2^{18}O in the first hexade region // *J. Mol. Spectrosc.* 2006. V. 236, N 1. P. 127–133.
 128. Mikhailenko S.N., Wang Leb, Kassi S., Campargue A. Weak water absorption lines around 1.455 and 1.66 μm by CW-CRDS // *J. Mol. Spectrosc.* 2007. V. 244, N 2. P. 170–178.
 129. Jenouvrier A., Daumont L., Regalia-Jarlot L., Tyuterev V.I.G., Carleer M., Vandaele A.C., Mikhailenko S., Fally S. Fourier transform measurements of water vapor line parameters in the 4200–6600 cm^{-1} region // *J. Quant. Spectrosc. and Radiat. Transfer.* 2007. V. 105, N 2. P. 326–355.
 130. Voronin B.A., Naumenko O.V., Carleer M., Coheur P.-F., Fally S., Jenouvrier A., Tolchenov R.N., Vandaele A.C., Tennyson J. HDO absorption spectrum above 11500 cm^{-1} : Assignment and dynamics // *J. Mol. Spectrosc.* 2007. V. 244, N 1. P. 87–101.
 131. Mazzotti F., Tolchenov R.N., Campargue A. High sensitivity ICLAS of H_2^{18}O in the region of the second decade 11520–12810 cm^{-1} // *J. Mol. Spectrosc.* 2007. V. 243, N 1. P. 78–89.
 132. Naumenko O.V., Voronin B.A., Mazzotti F., Tennyson J., Campargue A. Intracavity Laser Absorption Spectroscopy of HDO between 12145 and 13160 cm^{-1} // *J. Mol. Spectrosc.* 2008. V. 248, N 2. P. 122–133.
 133. Lisak D., Hodges J.T. Low-uncertainty H_2O line intensities for the 930-nm region // *J. Mol. Spectrosc.* 2008. V. 249, N 1. P. 6–13.
 134. Pine A.S., Coulombe S.J., Camy-Peyret C., Flaud J.-M. Atlas of high temperature water spectrum in the 3000 to 4000 cm^{-1} region // *J. Phys. and Chem. Ref. Data.* 1983. V. 12, N 3. P. 413–465.
 135. De Lucia F.C., Helminger P., Cook R.C., Gordy W., Submillimeter microwave spectrum of H_2^{18}O // *Phys. Rev. A.* 1972. V. 6, N 4. P. 1324–1326.
 136. Toth R.A. Water Vapor Measurements between 590 and 2582 cm^{-1} . Line positions and strengths // *J. Mol. Spectrosc.* 1998. V. 190, N 2. P. 379–396.
 137. Voronin B.A., Tennyson J., Tolchenov R.N., Lugovskoy A.A., Yurchenko S.N. A high accuracy computed line list for the HDO molecule // *Mon. Notic. Roy. Astron. Soc.* 2010. V. 402, N 1. P. 492–496.

138. *Schwenke D.W., Partridge H.* Convergence testing of the analytic representation of an ab initio dipole moment function for water: Improved fitting yields improved intensities // *J. Chem. Phys. B.* 2000. V. 113, N 16. P. 6592–6597.
139. *Zobov N.F., Ovsyannikov R.I., Shirin S.V., Polyansky O.L.* The Assignment of Quantum Numbers in the Theoretical Spectra of the H_2^{16}O , H_2^{17}O and H_2^{18}O Molecules Calculated by Variational Methods in the Region $0\text{--}26000\text{ cm}^{-1}$ // *Opt. and Spectrosc.* 2007. V. 102, N 3. P. 348–353.
140. *Schwenke D.W., Partridge H., Tashkun S.A.* Schwenke–Partridge linelists PS-2007-296 for H_2^{18}O . URL: <http://spectra.iao.ru>
141. *Schwenke D.W., Partridge H., Tashkun S.A.* Schwenke–Partridge linelists PS-2007-1000 for H_2^{18}O . URL: <http://spectra.iao.ru>
142. *Shirin S.V., Zobov N.F., Ovsyannikov R.I., Polyansky O.L., Tennyson J.* Water line lists close to experimental accuracy using a spectroscopically determined potential energy surface for H_2^{16}O , H_2^{17}O and H_2^{18}O // *J. Chem. Phys.* 2008. V. 128, N 22. 224306.

N.A. Lavrentiev, M.M. Makogon, A.Z. Fazliev. **Comparison of HITRAN and GEISA spectral data, based on taking into account the existent constraints.**

In this paper we have justified the necessity to use the restriction publishing constraints of spectral data in relation to expert data. The physical restrictions on vacuum wavenumbers used in the process of information sources decomposition according to primary published data have been described. We have also shown that HITRAN and GEISA data banks contain outdated data (low precision data on vacuum wavenumbers' measurements). Spectral intervals, in which the data quality is not high enough for usage spectroscopic applications, have been defined as well.