

# Информационная система для решения задач молекулярной спектроскопии. 6. Систематизация спектроскопических данных по дейтерозамещенным изотопологам молекулы сероводорода

А.Ю. Ахлестин, С.С. Воронина, О.В. Науменко,  
Е.Р. Половцева, А.З. Фазлиев\*

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

Поступила в редакцию 30.12.2015 г.

Представлено описание свойств опубликованных данных о параметрах спектральных линий молекул сероводорода- $d_1(-d_2)$  (HDS, HD<sup>34</sup>S, D<sub>2</sub>S и D<sub>2</sub><sup>34</sup>S). Большая часть свойств связана с результатами анализа качества вакуумных волновых чисел, характеризующих переходы, обусловленные поглощением молекулами излучения. Описаны два приложения из информационной системы W@DIS для работы с полным списком идентифицированных переходов и для просмотра результатов анализа бинарных отношений между источниками данных, содержащих параметры спектральных функций, полученных из измерений. Результаты автоматического анализа качества данных дополнены экспертной оценкой качества волновых чисел для молекул сероводорода- $d_1(-d_2)$ . Колебательно-вращательные переходы и уровни энергии изотопологов сероводорода размещены в базе данных, а их свойства собраны в онтологической базе знаний и доступны в сети Интернет в информационной системе W@DIS (<http://wadis.saga.iao.ru/>).

*Ключевые слова:* дейтерозамещенные изотопологи молекулы сероводорода, информационная система W@DIS, колебательно-вращательные переходы, уровни энергии; deuterio-substituted isotopologues of hydrogen sulphide molecule, information system W@DIS, vibration-rotational transitions, energy levels.

## Введение

Исследование спектров сероводорода и его изотопологов необходимо при решении прикладных задач в физике, химии, астрономии и т.д. В частности, в астрономии оно связано с изучением атмосферы Венеры и межзвездного пространства, в котором, например, существование D<sub>2</sub>S уже доказано [1]. Число работ по спектральным свойствам дейтерированных изотопологов сероводорода составляет чуть более 40. Систематизации спектральных данных по молекуле сероводорода и его изотопологам посвящены, в частности, наши работы [2, 3]. В этой статье, продолжающей наши предыдущие публикации и состоящей из двух связанных между собой частей, описаны приложения, используемые в информационной системе (ИС) W@DIS для оценки достоверности спектральных данных, и приведены результаты их экспертного анализа. Экспертный анализ дополняет автоматический анализ качества в тех случаях, когда невозможно формализовать

критерии, и позволяет принять окончательное решение о доверии к значениям спектральных характеристик.

Одним из важных критериев сравнения идентифицированных экспериментальных данных из разных источников является соответствие квантовых чисел. При этом в отличие от так называемых точных квантовых чисел —  $J$  (значение полного углового момента) и симметрии уровня, которые однозначно определяются правилами отбора, следующими из теории, приписывание приближенных квантовых чисел —  $K_a$  (проекция углового момента на молекулярную ось), колебательные квантовые числа  $\nu_1, \nu_2, \nu_3$  объективно становится неоднозначным в случае сильных резонансных взаимодействий. «Плохие» квантовые числа могут отличаться в работах разных авторов, и их сопоставление не может быть формализовано в общем случае. В такой ситуации выбор предпочтительного колебательно-вращательного (КВ) отнесения (идентификации) остается за экспертом. Одним из методов восстановления непротиворечивого набора КВ квантовых чисел является анализ результирующей волновой функции уровня в методе эффективного гамильтониана. Молекулы сероводорода- $d_1(-d_2)$  (HDS, HD<sup>34</sup>S, D<sub>2</sub>S, D<sub>2</sub><sup>34</sup>S) являются удобным примером для демонстрации.

\* Алексей Юрьевич Ахлестин (lexa@iao.ru); Светлана Станиславовна Воронина (vss@iao.ru); Ольга Васильевна Науменко (olga@iao.ru); Елена Рудольфовна Половцева (elena@asd.iao.ru); Александр Зарипович Фазлиев (faz@iao.ru).

В статье представлены интерфейсы приложений ИС W@DIS для получения оценки качества вакуумных волновых чисел и уровней энергии, описывающих центры спектральных линий и диаграмму энергий молекулы. Такая оценка является частью комплексной проблемы определения качества спектральных информационных ресурсов. Комплексность обусловлена иерархической структурой информационных ресурсов. В спектроскопии можно выделить две группы ресурсов. Первая группа связана с описанием математических и физических моделей молекулы, определением физических величин, представляющих спектральные свойства, методами вычислений и измерений и т.д. Для каждой модели часто характерны собственные критерии, по которым оценивается достоверность значений физических величин. К этой же группе относятся входные данные для решения задач, в которых определяются значения этих величин. В число таких данных входит поверхность потенциальной функции или дипольного момента. Оценка качества данных на этом уровне является одним из этапов системной оценки качества спектральной информации. Этот уровень в нашей работе не рассматривается. Вторая группа информационных ресурсов содержит описание решений задач спектроскопии. В этой группе сосредоточен основной объем несогласованных значений физических величин, используемый в спектроскопии.

При оценке качества спектральных данных используются как индивидуальные критерии, применяемые к набору данных, так и относительные критерии, применяемые к парам наборов данных [4]. Если эти критерии обусловлены математическими моделями, характеризующими молекулу и процессы ее взаимодействия с излучением, то, как правило, они формализованы и, в частности, сводятся к ограничениям на значения физических величин. Наиболее важными ограничениями в количественной спектроскопии являются правила отбора, определяющие допустимые значения квантовых чисел при переходах, и ограничения на квантовые числа состояний, которые следуют из математической модели молекулы. Квантовые числа применяются для идентификации состояний и позволяют выделять и систематизировать наблюдаемые состояния молекул. Другая группа критериев используется при сравнении идентичных состояний или переходов и описывает допустимые значения величины стандартного отклонения при сравнении всех пар идентичных переходов из разных источников данных или всех значений одной и той же физической величины одного перехода. Эти критерии применяются в большинстве статей, представляющих результаты измерений в количественной спектроскопии. Проверки по таким критериям связывают с достоверностью спектральных данных. Наряду с проверкой достоверности к оценке качества относится оценка доверия спектральным данным, использующая критерии, не относящиеся к модели молекулы. Такие критерии позволяют выделить сомнительные значения физических величин в экс-

пертных источниках данных. Сомнительные значения величин требуют дополнительных проверок. Одним из таких критериев является критерий опубликования [5, 6], применение которого основано на декомпозиции экспертных данных по полному набору опубликованных значений волновых чисел.

При анализе качества одних и тех же физических величин можно использовать их разные наборы. В ИС W@DIS анализируются три таких набора: набор источников данных, каждый из которых содержит спектральные характеристики одной молекулы, извлеченные из одной публикации и полученные одним методом; набор колебательно-вращательных полос; набор характеристик состояний и переходов. Такое разбиение позволяет описывать содержащуюся в них информацию с разным уровнем детализации. Для внятного изложения этой части работы в статье используются термины «источник данных», «источник информации» и «онтология», формально определенные в наших публикациях [7, 8]. Неописанные в данной работе подходы создания приложений в ИС W@DIS изложены в [9].

В первых двух разделах настоящей статьи дано описание методов и средств, реализованных в ИС W@DIS для оценки качества данных и построения результирующих списков линий. В третьем разделе приводится экспертное описание источников спектральных данных, импортированных в ИС. Наконец, в четвертом разделе проводится экспертная проверка сгенерированных ИС числовых массивов данных, а также обсуждаются некоторые результаты их использования.

## 1. Оценка качества данных

В этой статье мы рассматриваем частную задачу, возникающую при решении проблемы качества спектральных данных, на примере вакуумных волновых чисел, извлеченных из спектров поглощения молекул сероводорода- $d_1$  и сероводорода- $d_2$ . В статье опущено описание проверок правил отбора и ограничений на квантовые числа состояний, так как на практике число их нарушений в публикациях не превышает десятой доли процента. Автоматическая проверка эффективна на объемных массивах данных при вычислениях характеристик бинарных отношений между значениями волновых чисел идентичных переходов или уровней энергии, между идентичными колебательными полосами или источниками данных, каждый из которых содержит волновые числа, извлеченные из одной публикации и относящиеся к одной молекуле. Идентичные переходы трактуются в статье как переходы с одинаковым набором значений квантовых чисел. Одним из этапов анализа является согласование значений вакуумных волновых чисел, т.е. установление непротиворечивости этих значений, критерием которой являются экспериментальные погрешности измерения, имеющие разные значения в различных диапазонах волновых чисел. Анализ будет исчерпывающим, если он применен к полному набору опубликованных данных измерений (предполагается, что опубликованию предшествует экспертиза данных).

Собранные опубликованные значения волновых чисел (далее данные) необходимо импортировать в информационную систему и сопровождать каждый занесенный набор данных описанием его простейших свойств. Перечень таких свойств обоснован нами в работе [7]. В него входят обозначение одной из задач спектроскопии [10], наименование молекулы, библиографическая ссылка на статью, из которой извлечены данные, и название метода решения задачи. Для определенности этот набор назовем первичным источником данных. Исследование таких источников порождает определение их дополнительных свойств. Дополнение источника данных этими свойствами приводит к созданию новой структуры, которая может содержать величины из первоначального источника данных или нет, — это зависит от выбора информационных задач, решаемых исследователем. Эту новую структуру назовем источником информации об источнике данных (или просто источником информации). В свою очередь, источники информации обладают рядом свойств, которые их отличают друг от друга. Систематизация источников информации осуществляется автоматически в рамках онтологий информационных ресурсов [8].

Статистика источников данных и содержащихся в них переходов и состояний дейтерозамещенных изотопологов сероводорода, собранных в ИС W@DIS, показана в табл. 1.

Нам не удалось найти рассчитанных волновых чисел для этих изотопологов, поэтому в скобках показано только число измеренных переходов. Отметим, что в число уровней энергии и переходов в каждом из источников могут входить такие, которые не удовлетворяют правилам отбора, не содержат хотя бы одного значения квантовых чисел и имеют дубликаты в одном источнике данных.

В ИС W@DIS для решения информационных задач, таких как сравнение данных, просмотр результатов анализа качества данных, обмен данными между информационными системами, используются не только разные свойства источников данных, источников информации, но и разные представления этих свойств [8].

Оценка качества спектральных данных зависит от того, какой набор данных оценивается. В спек-

троскопии можно выбрать три разных набора данных, которые позволяют исследователю проводить анализ качества данных с разной степенью детализации (статья, полоса, переход). Стоит отметить, что для большинства молекул, как правило, число публикаций может быть меньше числа полос, а число полос меньше числа переходов. В первом варианте анализируются источник опубликованных данных и его отношения с другими источниками данных. Цель анализа в этом варианте — обнаружить противоречия между данными разных публикаций. Результат анализа поможет создать основу для оценки доверия к данным определенных авторов. Во втором варианте анализируются колебательные состояния и колебательно-вращательные полосы. Цель этого варианта — осуществить поэтапный анализ качества данных за меньшее число шагов, разделив полосы на согласованные и несогласованные. Наконец, в третьем варианте исследуются значения физических величин, характеризующие идентичные состояния или переходы (связанные с определенным физическим процессом). Заметим, что для некоторых молекул число таких переходов может быть около десятка тысяч. Этот вариант дает детальный ответ на вопрос, какие переходы или состояния несогласованы. Цель этого варианта — автоматически выделить несогласованные между собой значения данных и в тех случаях, в которых невозможно автоматическое принятие решения, передать несогласованные переходы и состояния для анализа экспертам. Значения, характеризующие бинарные отношения между источниками данных, колебательными полосами (состояниями) и вакуумными волновыми числами, вычисляются при импорте источников данных в информационную систему.

Для просмотра результатов вычислений в ИС W@DIS используются два приложения. Одно из них позволяет исследователю просматривать рассогласование между источниками данных и колебательными полосами, а второе — рассогласование между значениями волновых чисел.

В этом разделе рассмотрим интерфейс приложения для просмотра рассогласования между источниками данных и колебательными полосами. На рис. 1 показан внешний вид интерфейса, состоящего из двух частей.

Таблица 1

Статистика источников данных о молекулах сероводород- $d_1$  и сероводород- $d_2$  в ИС W@DIS

Сероводород- $d_1$ (или - $d_2$ )	Число источников данных (измеренных волновых чисел)	Число источников данных уровней энергии	Число уровней энергии из измерений	Число рассчитанных уровней энергии
HD <sup>32</sup> S	8(3356)	7	3268	3418
HD <sup>34</sup> S	2(95)	2	196	128
D <sub>2</sub> <sup>32</sup> S	6(867)	6	3716	467
D <sub>2</sub> <sup>34</sup> S	1(64)	2	2	—

Задать параметры представления

Вещество:

Выбор спектральной полосы:

Типы источников данных:   
 Экспертный источник  
 Эталонные переходы

Вид отображения:  Таблица  
 Цветная карта  
 Прямоугольная матрица (по умолчанию треугольная матрица)  
 Скрыть значения

Тип отображаемых данных:  Задача А. Максимальное значение разности вакуумных волновых чисел идентичных переходов  
 Задача В. Среднеквадратическое отклонение  
 Задача С1. Результаты сравнения упорядочений квантовых чисел. A<sub>00</sub>  
 Задача С2. Результаты сравнения упорядочений квантовых чисел. A<sub>01</sub>  
 Задача С3. Результаты сравнения упорядочений квантовых чисел. A<sub>10</sub>

Выделить значения бинарного отношения красным, если оно больше Δ: Δ =  Единицы измерений. (Задачи А и В - [Δ]=см<sup>-1</sup>. Задача С - [Δ] - безразмерная величина)

Источники данных			#1	#2	#3	#4	#5	
<input type="checkbox"/> 1969_MiLeNa_D2S	0	1	#1				9.29e-2, 59	#1
<input type="checkbox"/> 1970_Burrus_D2S	3	0	#2		0, 1	0, 2	1.67e-3, 11	#2
<input type="checkbox"/> 1971_LuCe_D2S	2	0	#3	0, 1			2.00e-7, 1	#3
<input type="checkbox"/> 1972_CoLuHe_D2S	2	0	#4	0, 2			1.00e-5, 57	#4
<input type="checkbox"/> 1985_CaFlLeJo_D2S	3	1	#5	9.29e-2, 59	1.67e-3, 11	2.00e-7, 1	1.00e-5, 57	#5
Источники данных			#1	#2	#3	#4	#5	

Рис. 1. Интерфейс для просмотра результатов анализа парных отношений между источниками данных для молекулы D<sub>2</sub>S

Верхняя часть предоставляет возможность выбора молекулы, полосы, типов источников данных, для которых следует отображать результаты анализа парных отношений, способы табличного представления данных и список из пяти задач, каждая из которых соответствует количественной характеристике. Величина Δ, задаваемая исследователем, определяет количественный критерий рассогласования данных. Нижняя часть таблицы содержит источники данных, для каждого из которых имеется хотя бы один иной источник данных, содержащий хотя бы один идентичный с ним переход. Ячейка таблицы содержит пару чисел, первое из которых является значением парного отношения, а второе — числом идентичных переходов в сравниваемой паре источников данных (см. рис. 1). Светлым фоном отмечены ячейки, характеризующие согласованные пары, а темным — несогласованные по значению соответствующей характеристики.

Как следует из табл. 1, только один источник данных по молекуле D<sub>2</sub>S не имеет с другими источниками данных идентичных переходов. Пять из шести источников включают в себя переходы, связанные только с основной фундаментальной полосой (000–000). В самой поздней работе [11] рассматриваются полосы (100–000) и (001–000). Несогласо-

ванные данные есть в самых ранних публикациях [12] и [13]. Таким образом, на полном наборе данных, извлеченных из шести статей, две статьи содержат несогласованные данные в полосе (000–000). Рассогласование можно ликвидировать, приняв во внимание различие во времени выхода этих публикаций и точность измерений в каждой из них.

## 2. Построение списков линий

В ИС W@DIS для решения задачи определения референтных (эталонных) уровней энергии из полного набора вакуумных волновых чисел необходимо сформировать из первичных источников данных, относящихся к решениям задачи T6 [10], набор элементов мультимножества (списка переходов), идентифицируемых квантовыми числами, значениями волновых чисел и погрешностью их измерения. Такое мультимножество необходимо согласовать по значениям вакуумных волновых чисел для идентичных переходов. Результаты согласования волновых чисел нужно представить в форме, допускающей ее однозначную интерпретацию как исследователем, так и программным агентом при автоматическом разборе результатов анализа качества данных.

В силу того что нам не удалось формализовать все операции по согласованию значений вакуумных волновых чисел, для программной поддержки исследователя создано приложение (программа) для формирования мультимножеств переходов для каждой молекулы (изотополога молекулы) с указанием источника данных (публикации).

Действия, которые может выполнять исследователь с помощью этого приложения, включают в себя определение варианта выборки данных, настройку допустимых значений погрешностей при анализе согласования данных, вида сортировки при табличном отображении переходов в мультимножестве, а также выделение рассогласованных значений волновых чисел и экспорт мультимножества или его части.

Из базы данных выбираются параметры спектральных линий в заданном диапазоне волновых чисел (или для заданной колебательной полосы). При формировании списка линий возможно несколько вариантов упорядочения параметров спектральных линий в формируемой таблице:

A1) по вакуумным волновым числам;

A2) по названиям источников данных (принята аббревиатура названий источников данных CCYY\_AbCdEfGh\_MM (CCYY – год публикации, AbCdEfGh – первые две буквы фамилий авторов, MM – стехиометрическая формула молекулы));

A3) по квантовым числам (набор квантовых чисел (верхнее и нижнее состояние) рассматривается как набор символов).

Отображение списка линий (мультимножества переходов) в таблицу с упорядочением A1 предполагает выявление разных типов рассогласования. Рассогласование данных может быть связано с двумя механизмами. Поясним термин «рассогласование данных». Пусть данные измерений не совпадают для идентичных переходов, а допустимая величина их расхождения равна  $\Delta\omega$ . Если разница вакуумных волновых чисел идентичных переходов превышает  $\Delta\omega$ , то волновые числа идентичных переходов несогласованы. Возможны два случая: 1) если эта разница небольшая, то причина может быть в калибровке данных некоторых источников; 2) если разница значительная, то причины могут быть некорректный лейбelling (приписывание квантовых чисел), неправильная идентификация или опечатка. Второй механизм проявляется при упорядочении по квантовым числам (A3), идентичные переходы в таблице объединены в группы, и легко выделяются несогласованные данные, у которых различие достигает  $1 \text{ см}^{-1}$  и более. Приложение позволяет экспортировать мультимножество в разных форматах (txt, pdf, xls).

На рис. 2 показан интерфейс приложения для формирования мультимножества волновых чисел.

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

Молекула	HDS	Таблица значений $\Delta\omega$			
Диапазон изменения вакуумных волновых чисел ( $\text{см}^{-1}$ )	0 - 60000	Название	Минимальное значение вакуумных волновых чисел ( $\omega_{\text{max}} \text{ см}^{-1}$ )	Максимальное значение вакуумных волновых чисел ( $\omega_{\text{max}} \text{ см}^{-1}$ )	$\Delta\omega$
Выбор спектральной полосы (Поглощение - $(\nu_1, \nu_2, \nu_3)_{\text{пр}}^{(i)}$ - $(\nu_1, \nu_2, \nu_3)_{\text{отв}}^{(i)}$ Испускание - $(\nu_1, \nu_2, \nu_3)_{\text{отв}}^{(i)}$ - $(\nu_1, \nu_2, \nu_3)_{\text{пр}}^{(i)}$ )		Radio	0	0.1	1.0E-6
Округление значений вакуумной частоты (число знаков после запятой) при отображении	без округления	Microwave	0.1	10	1.0E-5
Выбор одной из трех сущностей (волновые числа, источник данных или квантовые числа), по которой проводится сортировка при отображении (A-Z). Задание величин интервалов $\Delta\omega$ .	<input checked="" type="radio"/> по значению вакуумных волновых чисел <input type="radio"/> по источнику данных <input checked="" type="radio"/> по квантовым числам <input type="radio"/> Нотация HITRAN <input type="radio"/> Нотация HITRAN (по полосам)	FarInfrared	10	630	0.005
		.....			
		NearInfrared	7000	13500	0.005
		Visible	13500	24000	0.005

В табличном виде

Показать 6 строк от 40 Всего строк: 3056 « < > » Настройки / экспорт

3056 переходов в 8 источниках данных Число уникальных переходов - 3023 Свойства мультимножества

Вакуумные волновые числа ( $\text{см}^{-1}$ )	Неопределенность значения вакуумных волновых чисел ( $\text{см}^{-1}$ )	Квантовые числа состояния в представлении нормальных мод (NM ( $\nu_1, \nu_2, \nu_3, J, K_a, K_c$ )). i - начальное и f - конечное состояние												Источник данных
		$\nu_1^f$	$\nu_2^f$	$\nu_3^f$	$J^f$	$K_a^f$	$K_c^f$	$\nu_1^i$	$\nu_2^i$	$\nu_3^i$	$J^i$	$K_a^i$	$K_c^i$	
4.7711247 ( $\pm 1.0E-5$ )	0.000007	0	0	0	4	2	2	0	0	0	4	2	3	1985_CaFfLeJo_HDS.18
5.10950679 ( $\pm 1.0E-5$ )	-	0	0	0	2	1	1	0	0	0	2	1	2	1970_Burrus_HDS.1
5.1095068 ( $\pm 1.0E-5$ )	0.000007	0	0	0	2	1	1	0	0	0	2	1	2	1985_CaFfLeJo_HDS.19
6.5231434 ( $\pm 1.0E-5$ )	0.000007	0	0	0	1	1	0	0	0	0	1	0	1	1985_CaFfLeJo_HDS.20
6.52314342 ( $\pm 1.0E-5$ )	-	0	0	0	1	1	0	0	0	0	1	0	1	1970_Burrus_HDS.2
8.15749608 ( $\pm 1.0E-5$ )	-	0	0	0	1	0	1	0	0	0	0	0	0	1970_Burrus_HDS.3

Рис. 2. Интерфейс для формирования списка измеренных линий (мультимножества)

В его верхней части представлены параметры, задаваемые исследователем, и поверх интерфейса размещена таблица интервальных значений экспериментальных погрешностей  $\Delta\omega$ , которые могут быть заданы исследователем. Выбор сделан для интервала  $0-60000\text{ см}^{-1}$  для всех колебательных полос с предельными значениями  $\Delta\omega$ , показанными на рис. 2, и сортировкой по значениям вакуумных волновых чисел при отображении мультимножества переходов. В нижней части таблицы представлен фрагмент сформированного мультимножества переходов для изотополога HDS.

### 3. Описание экспериментальных данных

Экспериментальная информация по спектральным переходам и уровням энергии молекул  $D_2^{32}S$ ,  $HD^{32}S$ ,  $HD^{34}S$ ,  $D_2^{34}S$ , размещенная в ИС W@DIS, суммирована в табл. 2. Она включает данные об источниках информации, тип экспериментальных установок, диапазон регистрации экспериментальных спектров, количество идентифицированных переходов, количество уровней энергии, экспериментальную точность для центров линий, указанную

Таблица 2

Перечень публикаций, содержащих результаты измерений по уровням энергии и вакуумным волновым числам, для молекул сероводород- $d_1$  и сероводород- $d_2$

Публикация	Год	Тип установки	Спектральный диапазон, $\text{см}^{-1}$	$\Delta\nu$ , $10^{-6}\text{ см}^{-1}$	$\nu_1\nu_2\nu_3$ $\nu_1'\nu_2'\nu_3'$	Число переходов	Число уровней
<b><math>D_2^{32}S</math></b>							
[14]	1968	СИР	6,67–33,3	40000	000		120
[12]	1969	ДВДС	30,24–134,69	50000	000–000	73	
[15]	1970	Perkin–Elmer–E–13 монохроматор	3,0474–11,1861		000–000	11	
[16]	1971	ММПМД	3,047412		000–000	1	
[17]	1972	ПМС	4,1300–22,4268		000–000	57	
[13]	1985	Фурье	3,0474–231,44247	300	000–000	407	
[18]	1988	Фурье	750–1300, 1800–2200	270	001, 100, 010		3
[19]	1995	Фурье	2300–3100	139	011, 110		300
[20]	2006	Фурье	2000–9000	3000	001, 010, 011, 012, 021, 030, 031, 100, 102, 110, 111, 121, 200, 201, 210, 300		2972
[11]	2008	Фурье	1800–3000	50	100–000, 001–000	318	
[21]	2009	Фурье	2608–3135	100	030, 110, 011		135
<b><math>HD^{32}S</math></b>							
[22]	1951		0,2647–2,5201	3	000–000	12	
[15]	1970		5,1095–11,1170	3	000–000	6	
[23]	1971	СК	0,2618–21,0546	3	000–000	27	
[24]	1973		0,2799–1,4264		000–000	5	
[13]	1985	Фурье	0,26474115–267,612	300	000–000	580	
[19]	1995	Фурье	2300–3100	200	001–000, 110–000	69	344
[25]	1995	Фурье	1032–2717*	200	010		229
[26]	1998	Фурье	1750–2550, 2740–3840	2000	020, 030		266
[27]	1998	Фурье	1750–2550, 2740–3840	350	011, 100, 200		644
[28]	2005	Фурье	5070–8576	2000	002–000, 003–000, 012–000, 013–000	132	746
[29]	2006	Фурье	2000–9000	3000	120, 101, 021, 210, 111, 300, 102, 022	2525	760
<b><math>HD^{34}S</math></b>							
[24]	1973		1,358121		000–000	1	
[13]	1985	Фурье	0,25–280	300	000–000	94	
[25]	1995	Фурье	1031–2045*	10	010		118
[19]	1995	Фурье	2300–3100	300	110		68
<b><math>D_2^{34}S</math></b>							
[13]	1985	Фурье	31,726–136,258	300	000–000	64	
[18]	1988	Фурье	853,9885	240	010		1

Примечания: 1)  $\Delta\nu$  – экспериментальная точность центров линий, указанная в работах;  $\nu_1\nu_2\nu_3$  – квантовые числа для верхнего колебательного состояния;  $\nu_1'\nu_2'\nu_3'$  – квантовые числа для нижнего колебательного состояния; 2) Фурье – Фурье-спектрометр; СИР – спектрометр с изменяющейся решеткой; ДВДС – двухлучевой вакуумный дифракционный спектрометр с Ebert–Fasti-монохроматором; ММПМД – мазер на молекулярном пучке миллиметрового диапазона; ПМС – перестраиваемый микроволновой спектрометр; СК – спектрометр на клистроне; \* – спектральный диапазон для уровней энергии (нет информации о спектральном диапазоне для переходов).

в работах. Также здесь показаны имена верхних колебательных состояний для уровней энергии, для переходов указаны названия полос.

В большинстве работ по исследованию дейтерозамещенных изотопологов сероводорода использовались методы Фурье-спектроскопии. Для регистрации вращательных переходов основного состояния применялись различные приборы, в том числе дифракционные спектрометры, спектрометры с клистроном в качестве источника излучения, что позволяет определять параметры спектральных линий молекул с очень высокой точностью. В работах [19, 28, 29] для молекулы  $\text{HD}^{32}\text{S}$  представлены как экспериментальные переходы, так и экспериментальные уровни энергии, полученные в результате идентификации спектра, в остальных работах приводится информация либо только об уровнях энергии, либо о переходах. Точность определения центров КВ-переходов варьировалась от 0,000003 до 0,002  $\text{см}^{-1}$ .

Экспериментальные интенсивности 318 линий измерены и смоделированы только в работе [11] для двух полос  $\nu_1$  и  $\nu_3$  молекулы  $\text{D}_2^{32}\text{S}$  с использованием Фурье-спектрометра. Расчетные интенсивности переходов в полосе (000)–(000), основанные на значении постоянного дипольного момента, приводятся в [13] для молекул  $\text{D}_2^{32}\text{S}$ ,  $\text{HD}^{32}\text{S}$ ,  $\text{HD}^{34}\text{S}$ ,  $\text{D}_2^{34}\text{S}$ . В [28] представлены относительные интенсивности для 104 КВ-переходов молекулы  $\text{HD}^{32}\text{S}$ , измеренные из поглощения в пике линий и нормированные на длину пути и давление газа. Для всех переходов верхнее вращательное квантовое число равно 3.

Переходы принадлежат полосам поглощения (002)–(000), (012)–(000), (003)–(000) и (013)–(000). В остальных работах данные об интенсивностях КВ-переходов отсутствуют. Остановимся более подробно на некоторых наиболее значимых, на наш взгляд, исследованиях. Высокоточные спектроскопические константы для ключевого основного состояния (000) всех четырех рассмотренных изотопологов определены в [13] с использованием гамильтониана Уотсона из подгонки к 115 микроволновым и 1029 инфракрасным переходам в диапазоне 25–280  $\text{см}^{-1}$ . Фундаментальные полосы поглощения  $\nu_1$ ,  $\nu_2$  и  $\nu_3$  для  $\text{D}_2^{32}\text{S}$  и  $\nu_2$  для  $\text{D}_2^{34}\text{S}$  были проанализированы в [18] в диапазоне 750–1300 и 1800–2200  $\text{см}^{-1}$ . Восстановлены 790 и 112 экспериментальных уровней энергии соответственно, определены вращательные и центробежные параметры гамильтониана Уотсона. К сожалению, информация об экспериментальных переходах и уровнях энергии не приводится.

Переходы, принадлежащие полосам  $\nu_1 + \nu_2$ ,  $\nu_2 + \nu_3$   $\text{D}_2^{32}\text{S}$ ,  $\nu_3$ ,  $\nu_1 + \nu_2$   $\text{HD}^{32}\text{S}$  и  $\nu_1 + \nu_2$   $\text{HD}^{34}\text{S}$ , зарегистрированы и идентифицированы в [19] в диапазоне 2400–3000  $\text{см}^{-1}$ . Из подгонки к экспериментальным уровням энергии (см. табл. 2) определены спектроскопические константы верхних колебательных уровней энергии. Отметим, что значительное число экспериментальных уровней (около 120) было, на наш взгляд, неоправданно исключено из подгонки. Фундаментальная полоса  $\nu_2$  молекул  $\text{HD}^{32}\text{S}$  и  $\text{HD}^{34}\text{S}$  исследована в [25]. Существенно

уточнены спектроскопические константы состояния (010)  $\text{HD}^{32}\text{S}$  из подгонки к 226 экспериментальным уровням, и впервые восстановлены вращательные и центробежные константы для (010)  $\text{HD}^{34}\text{S}$ .

Большое количество новой информации по высоковозбужденным КВ-уровням энергии молекулы  $\text{D}_2^{32}\text{S}$  получено в [20] при анализе Фурье-спектра в области 2000–9000  $\text{см}^{-1}$ . Впервые исследованы колебательные состояния (030), (021), (200), (031), (012), (210), (102), (121), (201), принадлежащие второй триаде, первой и второй гексадам и первой декаде взаимодействующих состояний. Выполнена совместная подгонка около 3000 экспериментальных уровней энергии, при этом моделировалась колебательная зависимость вращательных констант, что позволило существенно уменьшить число подгоночных параметров и улучшить их предсказательную способность.

Вращательная структура колебательных состояний (020), (030), (011), (100) и (200)  $\text{HD}^{32}\text{S}$  была впервые восстановлена в [26, 27] из анализа Фурье-спектра в области 1750–2550 и 2740–3840  $\text{см}^{-1}$ . Полученные уровни энергии использовались для определения спектроскопических параметров верхних колебательных состояний. При этом учитывались резонансы типа Ферми и Кориолиса между состояниями (011) и (200), тогда как (100), (020) и (030) рассматривались как изолированные.

Экспериментальные уровни энергии  $\text{HD}^{32}\text{S}$  для колебательных состояний (002), (003), (012) и (013) впервые определены из анализа Фурье-спектра в области 5000–8600  $\text{см}^{-1}$  [28]. Более 1600 КВ-переходов были идентифицированы в спектре, но экспериментальная информация о них не приводится. Идентификация линий проводилась на основе расчета по эффективному гамильтониану, при этом все исследованные состояния рассматривались как изолированные, что могло привести к неправильным отнесениям, а также ограничило предсказательную способность полученных спектроскопических параметров.

Наконец, в работе [29] приводятся экспериментальные КВ-уровни энергии для ряда новых, ранее не исследованных колебательных состояний  $\text{HD}^{32}\text{S}$ : (120), (101), (021), (210), (111), (300), (102), (022). Они получены из анализа Фурье-спектра поглощения в диапазоне 2000–9000  $\text{см}^{-1}$ . Около 3000 новых и известных из литературы экспериментальных КВ-уровней энергии включены в совместную подгонку. Как и в [20], моделировалась колебательная зависимость вращательных и центробежных параметров. В работе также приводятся около 2525 экспериментальных КВ-переходов.

Несмотря на то что было исследовано около 40 литературных источников для четырех изотопологов сероводорода, количественная информация по КВ-переходам, которая является наиболее востребованной, содержалась только в девяти публикациях. В частности, для молекулы  $\text{D}_2^{32}\text{S}$  в работах [12, 14] следует считать устаревшими вследствие низкой точности измерения центров линий 0,04–0,05  $\text{см}^{-1}$ , они представляют интерес только в историческом плане. Данные из этих работ замещены более точной

информацией, представленной в [13]. КВ-переходы из [15, 17] также включены в компиляцию [13]. Таким образом, результирующий экспертный массив данных для  $D_2^{32}S$  состоит из 723 КВ-переходов из [11, 13, 15, 17]. Стоит также отметить, что работа Онопенко [21], в которой приводятся вращательные уровни энергии и спектроскопические параметры состояний второй триады  $D_2S$ : (011), (030), (110), полностью повторяет ранее опубликованные результаты [20], причем без ссылки на этот источник.

Высокоточные микроволновые данные для молекулы HDS из работ [15, 22, 23] в количестве 45 переходов включены в компиляцию [13], еще пять переходов приведены в [24]. Всего для HDS в базе данных содержится 2878 экспертных переходов из работ [13, 15, 19, 22–24, 28, 29]. Для молекул  $D_2^{34}S$  и  $HD^{34}S$  64 и 95 КВ-переходов соответственно взяты из одного источника [13].

Наибольшее число КВ-переходов дейтерозамещенных модификаций сероводорода идентифицировано в работах Уленикова с соавт. [19, 20, 25, 27, 29] из анализа Фурье-спектров. К сожалению, только в двух из них [19, 29] приводятся экспериментальные волновые числа. Нет экспериментальной информации и о КВ-переходах в фундаментальных полосах (100)–(000), (001)–(000), (010)–(000)  $D_2^{32}S$ , обширно исследованных в [18].

#### 4. Экспертная проверка и определение согласованных экспериментальных уровней энергии

После контроля загруженных массивов КВ-переходов дейтерозамещенных модификаций сероводорода средствами ИС проводилась также эксперт-

ная проверка согласованности КВ-идентификации. В данном случае конфликтные идентификации практически отсутствовали вследствие малого количества пересекающихся экспериментальных данных, принадлежащих разным авторам.

Результирующие массивы данных для  $D_2^{32}S$  и  $HD^{32}S$  (723 и 2878 соответственно) послужили исходной информацией для определения согласованных наборов уровней энергии. При этом использовался программный код MARVEL [30], основанный на решении системы линейных уравнений, построенных по принципу Ридберга–Ритца. Подобный подход к определению экспериментальных уровней энергии успешно использовался для изотопологов водяного пара [31–34]. Конечно, вследствие ограниченного набора доступных экспериментальных КВ-переходов (особенно для молекулы  $D_2^{32}S$ ) число полученных в результате уровней значительно уступает известным из литературы наборам уровней (см., например, [20] и [29]). Вместе с тем впервые получены экспериментальные уровни энергии для ключевого состояния (000)  $D_2^{32}S$  и  $HD^{32}S$ , которые лучше описывают высокоточные экспериментальные переходы по сравнению с расчетными уровнями [13].

Для молекулы HDS уровни энергии состояния (000), полученные в нашей работе, позволяют описать высокоточные микроволновые и ИК-переходы из [13] со среднеквадратическим отклонением  $0,00020 \text{ см}^{-1}$ , тогда как расчетные уровни [13] восстанавливают экспериментальные данные с заметно меньшей точностью  $0,00029 \text{ см}^{-1}$ , что проиллюстрировано на рис. 3. Наибольшие отклонения расчета [13] от эксперимента наблюдаются для КВ-переходов в коротковолновом конце спектра.

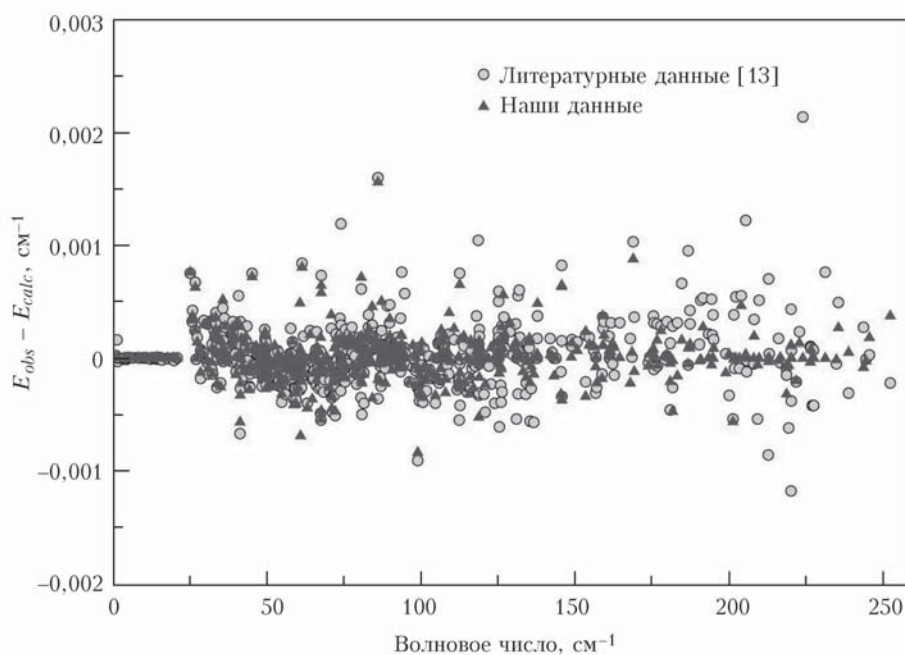


Рис. 3. Восстановление экспериментальных КВ-переходов молекулы HDS с использованием уровней энергии основного (000) состояния, полученных в нашей статье и в [13]



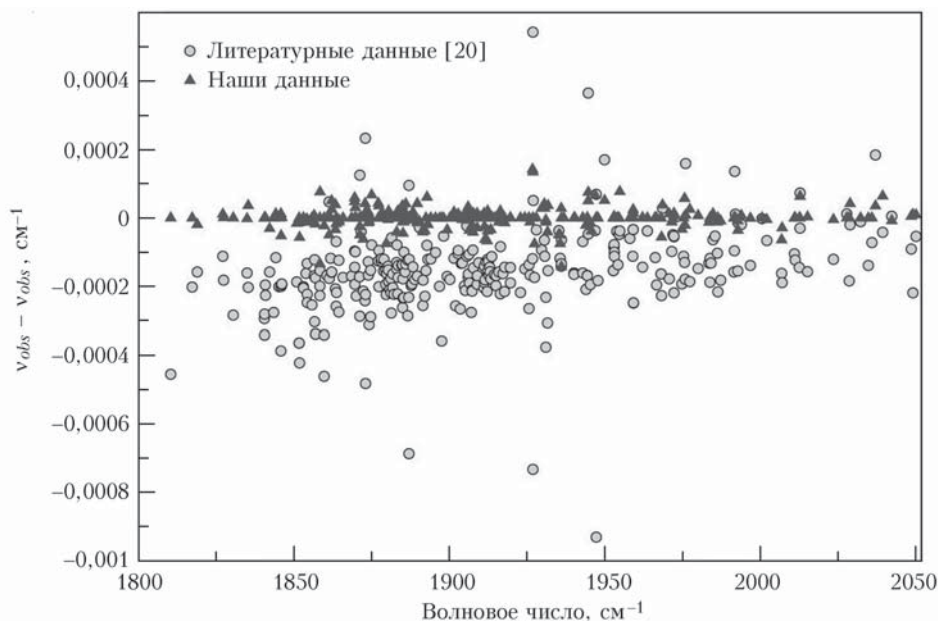


Рис. 4. Восстановление экспериментальных КВ-переходов молекулы  $D_2^{32}S$  из [11] с набором уровней, полученных в нашей статье и в [20]

Для молекулы  $D_2^{32}S$  использование высокоточных ИК-переходов из работы [11] дополнительно к микроволновым и ИК-данным [13] позволило уточнить ряд вращательных уровней основного состояния (000) по сравнению с теми же уровнями в [13]. При сравнении уровней энергии колебательных состояний (100) и (001), полученных в нашей статье, с набором, представленным в [20], был выявлен калибровочный сдвиг порядка  $-0,00015 \text{ см}^{-1}$ . На рис. 4 приведены отклонения экспериментальных центров [11] от расчетных на основе уровней энергии, полученных в нашей статье и в [20]. Из рис. 4 видно, что даже при учете калибровочного сдвига уровни энергии [20] не обеспечивают необходимую точность ( $0,00005 \text{ см}^{-1}$ ) центров КВ-переходов из [11].

### Заключение

В ИС W@DIS импортировано 38 источников информации о четырех изотопологах молекулы сероводорода. Для каждого из источников вычислены значения свойств, характеризующих качество данных при проверках по критериям достоверности. В дополнение к формализованным критериям проверки и согласования данных, реализованным в ИС, проведена экспертная проверка правильности идентификации КВ-переходов и точности полученных в литературе уровней энергии на основании расчетов по методу эффективного гамильтониана и выполнения фундаментального принципа Ридберга–Ритца.

При сравнении уровней энергии состояний (100) и (001) молекулы  $D_2^{32}S$ , полученных в данной статье и в [20], обнаружен явный калибровочный сдвиг  $0,00015 \text{ см}^{-1}$ . Для молекулы HDS был получен набор точных уровней энергии, который в комбинации с корректным расчетом интенсивностей линий позволяет сгенерировать подробные

лайн-листы с центрами линий, образованных переходами на уровни энергии с наилучшей экспериментальной точностью, так называемые *reference spectra*, которые могут быть полезны для различных научных приложений.

Авторы благодарны РФФИ за финансирование работы (грант № 13-07-00411).

1. Vastel C., Phillips T.G., Ceccarelli C., Pearson J. First detection of doubly deuterated hydrogen sulfide // *Astrophys. J.* 2003. V. 593. N 2. P. L97–L100.
2. 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 атмосф. 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.
3. Voronina S.S., Naumenko O.V., Polovtseva E.R., Fazliev A.Z. Systematization of published spectral data on deuterated isotopologues of hydrogen sulfide molecule // *Proc. SPIE.* 2014. V. 9292. P. 92920B.
4. 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 библиотеки.* 2013. Т. 16, № 4. URL: <http://www.elbib.ru/index.phtml?page=elbib/rus/journal/2013/part4/AKLPF>
5. Лаврентьев Н.А., Макогон М.М., Фазлиев А.З. Сравнение спектральных массивов данных HITRAN и GEISA с учетом ограничения на опубликование спектральных данных // *Оптика атмосф. и океана.* 2011. Т. 24, № 4. С. 279–292; *Lavrentiev N.A., Makogon M.M., Fazliev A.Z.* Comparison of the HITRAN and GEISA spectral databases taking into account the restriction on publication of spectral data // *Atmos. Ocean. Opt.* 2011. V. 24, N 5. P. 436–451.

6. *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 / Eds. P. Klinov, D. Mourontsev. Berlin; Heidelberg: Springer, 2013. V. 394. P. 15–28.
7. *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.
8. *Привезенцев А.И., Царьков Д.В., Фазлиев А.З.* Базы знаний для описания информационных ресурсов в молекулярной спектроскопии 3. Базовая и прикладная онтологии // Электронные библиотеки. 2012. Т. 15, вып. 2. URL: <http://elbib.ru/index.phtml?page=elbib/rus/journal/2012/part2>
9. *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 // Электронные библиотеки. 2012. Т. 15, вып. 3. URL: <http://elbib.ru/index.phtml?page=elbib/rus/journal/2012/part3/AKLPF>
10. *Vykov A.D., Kozodoev A.V., Privezentsev A.I., Sinitisa L.N., Tonkov M.V., Filippov N.N., Fazliev A.Z., Tretyakov M.Yu.* Distributed information system on molecular spectroscopy // Proc. SPIE. 2006. V. 6580. P. 65800W.
11. *Lamouroux J., Régalia-Jarlot L., Tyuterev V.I.G., Thomas X., Von der Heyden P., Tashkun S.A., Borkov Yu.* Measurements of line intensities and determination of transition moment parameters from experimental data for the  $\nu_1$  and  $\nu_3$  bands of  $D_2^{32}S$  // J. Mol. Spectrosc. 2008. V. 250, iss. 2. P. 117–125.
12. *Miller R.E., Leroi G.E., Hard T.M.* Analysis of the Pure Rotational Absorption Spectra of Hydrogen Sulfide and Deuterium Sulfide // J. Chem. Phys. 1969. V. 50, iss. 2. P. 677–684.
13. *Camy-Peyret C., Flaud J.-M., Lechuga-Fossat L., Johns J.W.C.* The far-infrared spectrum of deuterated hydrogen sulfide: The ground state rotational constants of  $D_2^{32}S$ ,  $D_2^{34}S$ ,  $HD^{32}S$ , and  $HD^{34}S$  // J. Mol. Spectrosc. 1985. V. 109, iss. 2. P. 300–333.
14. *Toshiaki Ōsaka, Shin-ichi Takahashi.* Far Infrared Absorption Spectra of  $H_2S$  and  $D_2S$  // Int. J. Quant. Chem. 1968. V. 25. P. 1654–1663.
15. *Burrus C.A.* Private communications, 1970 (cited from Robert L. Cook, Frank C. De Lucia, and Paul Helminger, Millimeter and submillimeter wave rotational spectrum and centrifugal distortion effects of  $D_2S$  // J. Mol. Spectrosc. 1972. V. 41, iss. 1. P. 123–136).
16. *De Lucia F.C., Cederberg J.W.* Hyperfine spectra and molecular constants of  $D_2S$  // J. Chem. Phys. 1971. V. 40, iss. 1. P. 52–58.
17. *Cook R.L., De Lucia F.C., Helminger P.* Millimeter and submillimeter wave rotational spectrum and centrifugal distortion effects of  $D_2S$  // J. Mol. Spectrosc. 1972. V. 41, iss. 1. P. 123–136.
18. *Camy-Peyret C., Flaud J.-M., N'Gom A., Johns J.W.C.* The three fundamental bands  $\nu_2$ ,  $\nu_1$  and  $\nu_3$  of  $D_2^{32}S$  and the  $\nu_2$  band of  $D_2^{34}S$  // Mol. Phys. 1988. V. 65, iss. 3. P. 649–657.
19. *Ulenikov O.N., Tolchenov R.N., Melekhina E.N., Koivusaari M., Alanko S., Anttila R.* High Resolution Study of Deuterated Hydrogen Sulfide in the Region 2400–3000  $cm^{-1}$  // J. Mol. Spectrosc. 1995. V. 170, iss. 2. P. 397–416.
20. *Liu A.-W., Ulenikov O.N., Onopenko G.A., Gromova O.V., Bekhtereva E.S., Wan L., Hao L.-Y., Hu S.-M., Flaud J.-M.* Global fit of the high-resolution infrared spectrum of  $D_2S$  // J. Mol. Spectrosc. 2006. V. 238, iss. 1. P. 11–28.
21. *Onopenko G.A.* High-resolution spectrum of the first triad of  $D_2^{32}S$  interacting states // Rus. Phys. J. 2009. V. 52, N 2. P. 113–118.
22. *Hillger R.E., Strandberg M.W.P.* Centrifugal distortion in asymmetric molecules. II. HDS // Phys. Rev. 1951. V. 83, iss. 3. P. 575–581.
23. *Helminger P., Cook R.L., De Lucia F.C.* Microwave spectrum and centrifugal distortion effects of HDS // J. Mol. Spectrosc. 1971. V. 40, iss. 1. P. 125–136.
24. *Steenbeckeliers G.* Private Communications. 1973. (cited from Frank J. Lovas, Microwave Spectral Tables II. Triatomic Molecules // J. Phys. Chem. Ref. Data. 1978. V. 7, N 4. P. 1445–1750).
25. *Ulenikov O.N., Tolchenov R.N., Koivusaari M., Alanko S., Anttila R.* Study of the fine rotational structure of the  $\nu_2$  band of HDS // J. Mol. Spectrosc. 1995. V. 170, iss. 1. P. 1–9.
26. *Ulenikov O.N., Ditenberg E.A., Olekhovitch I.M., Alanko S., Koivusaari M., Anttila R.* Isotope Substitution in near Local Mode Molecules: Bending Overtones  $\nu_2$  ( $n = 2, 3$ ) of the HDS Molecule // J. Mol. Spectrosc. 1998. V. 191, iss. 2. P. 239–247.
27. *Ulenikov O.N., Onopenko G.A., Olekhovitch I.M., Alanko S., Horneman V.-M., Koivusaari M., Anttila R.* High-Resolution Fourier Transform Spectra of HDS in the Regions of the Bands  $\nu_1$  and  $2\nu_1/\nu_2 + \nu_3$  // J. Mol. Spectrosc. 1998. V. 189, iss. 1. P. 74–82.
28. *Liu A.-W., Gao B., Cheng G.-S., Qi F., Hu S.-M.* High-resolution rotational analysis of HDS:  $2\nu_3$ ,  $\nu_2 + 2\nu_3$ ,  $3\nu_3$ , and  $\nu_2 + 3\nu_3$  bands // J. Mol. Spectrosc. 2005. V. 232, iss. 2. P. 279–290.
29. *Ulenikov O.N., Liu A.-W., Bekhtereva E.S., Onopenko G.A., Gromova O.V., Wan L., Hu S.-M., Flaud J.-M.* Joint ro-vibrational analysis of the HDS high resolution infrared data // J. Mol. Spectrosc. 2006. V. 240, iss. 1. P. 32–44.
30. *Furtenbacher T., Császár A., Tennyson J.* MARVEL: measured active rotational-vibrational energy levels // J. Mol. Spectrosc. 2007. V. 245, iss. 2. P. 115–125.
31. *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.
32. *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 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.
33. *Tennyson J., Bernath P., Brown L., Campargue A., Császár A.G., Daumont L., Gamache R., Hodges J., Naumenko O., Polyansky O., Rothman L., Vandaele A.*

- Zobov N., Derzia A., Fábri C., Fazliev A., Furtenbacher T., Gordon I., Lodi L., Mizus I. IUPAC Critical Evaluation of the Rotational-Vibrational Spectra of Water Vapor. Part III. Energy Levels and Transition Wavenumbers for H<sub>2</sub><sup>16</sup>O // J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer. 2013. V. 117. P. 29–58.
34. Tennyson J., Bernath P., Brown L., Campargue A., Császár A.G., Daumont L., Gamache R., Hodges J., Naumenko O., Polyansky O., Rothman L., Vandaele A., Zobov N., Denes N., Fábri C., Fazliev A., Furtenbacher T., Gordon I., 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<sub>2</sub><sup>16</sup>O, D<sub>2</sub><sup>17</sup>O, and D<sub>2</sub><sup>18</sup>O // J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer. 2014. V. 142. P. 93–108.

*A.Yu. Akhlestin, S.S. Voronina, O.V. Naumenko, E.R. Polovtseva, A.Z. Fazliev.* **Information system for molecular spectroscopy. 6. Systematization of spectral data on deuterio-substituted isotopologues of hydrogen sulfide molecule.**

The description of published data on properties of spectral line parameters for deuterio-substituted isotopologues of hydrogen sulfide molecule (HDS, HD<sup>34</sup>S, D<sub>2</sub>S и D<sub>2</sub><sup>34</sup>S) is given. The majority of the properties characterize the results of vacuum wavenumber quality analysis. Two applications used for data quality analysis in information system W@DIS are described. The results of computed data quality analysis of vacuum wavenumbers are completed by the expert assessment of quality of the same set of data. The data sources containing parameters of vibration-rotational transitions and energy levels deuterio-substituted isotopologues of hydrogen sulphide molecule acquired from publications are stored in databases of information system W@DIS and provided the formal description of their properties. The properties and their values are represented in ontological knowledge base and accessed in W@DIS (<http://wadis.saga.iao.ru/>) via Internet.