

С.Н. Михайленко, Ю.Л. Бабилов, В.Ф. Головкин

Информационно-вычислительная система «Спектроскопия атмосферных газов». Структура и основные функции

Институт оптики атмосферы СО РАН, г. Томск

Поступила в редакцию 30.06.2005 г.

Дается описание структуры и основных функциональных возможностей информационно-вычислительной системы «Спектроскопия атмосферных газов». Система является удобным инструментом доступа через Интернет к результатам исследований в области спектроскопии атмосферных газов и решения ряда спектроскопических задач в интерактивном режиме. Она может быть использована как при проведении научно-исследовательских работ, так и в процессе преподавания курсов оптики и молекулярной спектроскопии в высшей школе.

Введение

Спектроскопическая информация, доступная в сети Интернет, как правило, представлена либо в форме архивов, организованных в виде наборов файлов, либо в виде ресурсов, содержащих средства для выполнения запроса на поиск интересующих пользователя данных, извлечения их из баз данных и отображения на сайте. Примером архивов являются сайты банков HITRAN [1], JPL [2], CDMS [3] и др. В числе Интернет-ресурсов второго типа можно назвать сайты баз данных физической лаборатории Национального института стандартов и технологий США [4], например базу по высокоточным измерениям частот переходов для молекулярных линий [5]. Главным отличием информационно-вычислительной системы «Спектроскопия атмосферных газов», <http://spectra.iao.ru> (ИВС SPECTRA), развиваемой в Институте оптики атмосферы СО РАН с 1999 г., от всех известных нам Интернет-ресурсов в области молекулярной спектроскопии является возможность решения прикладных спектроскопических задач в интерактивном режиме.

Основными целями ИВС SPECTRA является предоставление доступа через Интернет к информации о спектрах поглощения атмосферных газов и решение ряда задач молекулярной спектроскопии в интерактивном режиме. Среди решаемых системой задач можно назвать следующие: 1) поиск, выборка и визуализация данных по параметрам спектральных линий (ПСЛ); 2) создание пользователем собственных смесей газов; 3) моделирование лабораторных спектров высокого и низкого разрешения; 4) решение прямой спектроскопической задачи на основе метода эффективных операторов; 5) загрузка на компьютер пользователя результатов запроса для дальнейшей обработки либо сохранение их в системе для продолжения работы во время последующих сеансов. Регистрация в системе сво-

бодна и необязательна. Работа в системе возможна как для зарегистрированных, так и для не зарегистрированных пользователей. Регистрация позволяет получить доступ к более широкому набору функциональных возможностей.

Частично принципы построения, структура и технологические аспекты реализации первой версии системы (<http://spectra1.iao.ru>) описаны ранее в работе [6]. В статье [7] подробно рассматривался один из разделов системы – «Прямая спектроскопическая задача», позволяющий пользователю самостоятельно проводить расчеты колебательно-вращательных (КВ) спектров молекул воды и озона по заданным параметрам эффективных операторов Гамильтона и дипольного момента перехода. В данной статье этот раздел детально не рассматривается.

Основу базы ПСЛ системы составляют банки данных HITRAN-2004 [8], включая обновления 2005 г., и GEISA-97 [9]. Кроме того, база ПСЛ содержит данные, не представленные в других банках спектроскопической информации для молекул воды, углекислого газа [10] и сероводорода [11]. Данные по шести изотопическим модификациям молекулы воды получены на основе результатов работ [12, 13]. Информация по высокотемпературным спектрам представлена банками HITEMP [14], CDSD-1000 [15] и расчетами на основе [12, 13]. Оригинальные данные, включенные в систему, получены в ИОА СО РАН в кооперации с ведущими специалистами в области молекулярной спектроскопии из Франции, США и Китая.

Система основывается на ранее разработанных в лаборатории теоретической спектроскопии ИОА локальных информационных системах для персональных компьютеров AIRSENTRY [16], TDS [17] и GEISA-PC [18], которые имеют часто более широкие функциональные возможности. Необходимо отметить одно весьма важное обстоятельство. Средства ИВС SPECTRA не позволяют моделировать спектры поглощения/излучения оптически

неоднородных сред. Поэтому название ИВС SPECTRA — «Спектроскопия атмосферных газов», не связано с *атмосферной спектроскопией*. Подобного рода расчеты, например прохождение излучения через атмосферу, могут быть реализованы системой AIRSENTRY.

В заключение упомянем об информационном ресурсе по молекулярной спектроскопии (Атмосферная спектроскопия, <http://saga.atmos.iao.ru>), в рамках портала <http://atmos.iao.ru>, также развиваемого в ИОА СО РАН. Направленность этого ресурса имеет несколько иной характер, по сравнению с системой, представленной в данной статье. Основное внимание авторов указанного ресурса сосредоточено на создании информационной модели предметной области, в качестве которой выбрана молекулярная спектроскопия, и структурированной модели данных этой предметной области, на разработке операций с такими данными, на рассмотрении онтологий и т.д.

Структура системы

ИВС SPECTRA представляет собой программный комплекс для поиска информации в базах данных, ее обработки и отображения результатов в текстовом или графическом формате. Особенностью этого комплекса является то, что интерфейс пользователя реализован на основе Интернет-технологий. Архитектура комплекса традиционна для программных систем такого рода и состоит из основной программы, осуществляющей обработку запросов пользователей и отображение информации и построенной по модульному принципу, библиотеки классов и подпрограмм, базы данных.

База данных (БД) является важной составной частью системы и состоит из трех частей: предметной БД, справочной БД и БД административной информации и метаданных. Содержание всех трех частей БД описано в [6]. База данных функционирует под управлением СУБД *MySQL* [19]. Часть данных, для которых не требуется поиска по различным критериям, хранится в файловой системе. К метаданным относится описание меню, а также справочная информация о данных, хранимых в БД.

Библиотека классов подпрограмм состоит из трех частей: библиотеки вычислительных модулей, библиотеки классов *PHP* [20] и сервисной библиотеки. Вычислительные модули реализованы на языках *C* или *Fortran*. Основными вычислительными модулями системы являются программы расчета различных спектральных функций (реализованы на языке *C*) и программа GIP [7, 21] решения прямой спектроскопической задачи (реализована на языке *Fortran*). Библиотека классов *PHP* представляет собой набор классов, которые являются абстракциями сущностей как предметной области (молекулы и их изотопические производные, спектральные полосы, смеси газов и изотопомеров, спектры и пр.), так и используемых для организации функционирования системы (пользователи и группы, сеансы работы пользователя, меню, гра-

фика). Сервисная библиотека написана на языке *PHP* [22] и включает в себя набор вспомогательных функций, используемых как в классах, так и в основной программе.

Основная программа написана на языке *PHP* и выполняет следующие функции:

- авторизацию пользователей;
- организацию сеанса взаимодействия пользователя системой;
- разбор запроса пользователя (URL) к системе, генерируемого модулем *меню*;
- выполнение запроса путем генерации обращений к БД и выполнение вычислений;
- генерацию HTML-страницы на основе имеющегося шаблона, отображающей результаты запроса.

Для создания шаблонов страниц использован обработчик шаблонов *SMARTY* [22]. Нами в него добавлен новый объект — фрейм, представляющий собой включаемый шаблон. Фрейм, как правило, состоит из двух частей — *PHP*-кода, выполняющего обращение к соответствующим функциям библиотеки классов для получения данных, и собственно шаблона для генерации HTML-кода. Такой подход, на наш взгляд, придает стройность и законченность архитектурному решению системы.

Основные возможности системы

Цель системы — дать пользователю доступ к спектроскопическим данным и решать на основе этой информации некоторый круг прикладных задач. На рис. 1 показана титульная страница системы, какой ее видит зарегистрированный пользователь.

Как видно из рис. 1, пользователь имеет доступ, помимо титульной страницы, к шести разделам системы: *Молекулы*; *Спектры газовых смесей*; *Сечения поглощения*; *Прямая задача*; *Вспомогательные данные*; *Работа со спектрами*.

Доступ к разделам системы осуществляется путем нажатия соответствующей клавиши в меню системы. Для нажатия выбранной клавиши необходимо «щелкнуть» на нее курсором «мыши».

Раздел «*Молекулы*», предназначен для получения информации о параметрах спектральных линий и моделирования спектров в разрезе «*Молекула/Изотопомер/Полоса*». При нажатии на клавишу этого раздела пользователь попадает на страницу «*Молекулы/Обзор*». Вид этой страницы представлен на рис. 2.

Раздел содержит список 45 молекул, для которых в системе имеется информация о ПСЛ (таблица в левой части окна). На рис. 2 показан фрагмент этой таблицы. Выбор интересующей нас молекулы осуществляется щелканьем курсора «мыши» на ее формулу во втором столбце списка. В правой части окна появляется общая информация о выбранной молекуле: номер, код, формула, масса, естественное содержание, статистическая сумма для каждого изотопомера молекулы, а также диапазон температур, для которых возможен расчет спектра. Ниже этой информации расположен список источников, в которых имеются данные о ПСЛ выбранной

english russian **Спектроскопия атмосферных газов**

Титул Молекулы Спектры газовых смесей Сечения поглощения Прямая задача Вспомогательные данные Работа со спектрами

Вход в систему	Общая информация	Новости
<p>Пользователь: Semen Mikhailenko <input type="button" value="Выйти"/> <input type="button" value="Изменить"/></p> <p>Пояснения</p> <ul style="list-style-type: none"> Основные функции системы доступны без регистрации. Регистрация позволит Вам использовать ряд дополнительных возможностей системы. Для регистрации нажмите кнопку "Зарегистрироваться" и заполните появившуюся форму. Регистрация в системе свободна. <p>Соглашение об использовании</p> <p>Пользователи данной системы в своих научных сообщениях согласно ссылаться на информационную систему SPECTRA и на публикации по источникам данных, использованных в ней, если результаты, полученные с ее помощью, можно рассматривать как некоторый вклад в решаемую проблему.</p> <p>Статистика использования</p> <p>Информационной системы "SPECTRA" Справочной системы по "SPECTRA"</p> <p>Версия 1 информационной системы SPECTRA</p>	<p>Обзор возможностей</p> <ul style="list-style-type: none"> Обзор параметров спектральных линий, полученных из различных источников (базы данных HITRAN и GEISA, оригинальные данные, полученные в ИОА в сотрудничестве с другими организациями, данные по молекуле H₂O Парtridge и Швенке и др.) Получение при заданных температуре и атмосферном давлении частотной диаграммы интенсивностей, частотного профиля коэффициента поглощения и спектров пропускания, поглощения и излучения для выбранных молекулы, изотопа, набора спектральных полос или диапазона частот и газовой смеси. Конволюция спектра заданной аппаратной функцией. Решение прямой спектроскопической задачи (моделирование спектра по заданным параметрам гамильтониана и дипольного момента). Загрузка полученных результатов в формате текстовых файлов на компьютер пользователя и отправка их по электронной почте. Приготовление пользователем собственной смеси газов или изотопов (для зарегистрированных пользователей). Сохранение полученных результатов на сервере и их сравнение (для зарегистрированных пользователей). Загрузка спектров пользователя на сервер и их сравнение со спектрами, полученными с помощью системы (для зарегистрированных пользователей). <p>Контактная информация</p> <ul style="list-style-type: none"> Общая структура системы, ее функционирование, ошибки: Юрий Бабиков Данные, представленные в системе: Семен Михайленко Вычислительные алгоритмы: Владимир Головкин <p>Родственные сайты</p> <p>Спектроскопия и молекулярные свойства озона (http://ozone.iao.ru) Carbon Dioxide Spectroscopic Databank (http://cdsd.iao.ru)</p> <p>В 1999-2002 гг. система разрабатывалась при поддержке РФФИ (гранты 99-07-90104-в и 02-07-90139-в)</p>	<p>2005/06/28 В источнике данных HITRAN для молекулы этана (C₂H₆) помещены данные 2005 г.</p> <p>2005/04/08 Параметры спектральных линий в источнике данных HITRAN соответствуют версии HITRAN-2004</p>

Институт оптики атмосферы СО РАН Факс: (3822) 492086 WWW: <http://www.iao.ru>

Рис. 1. Титульная страница системы SPECTRA

english russian **Спектроскопия атмосферных газов**

Титул Молекулы Спектры газовых смесей Сечения поглощения Прямая задача Вспомогательные данные Работа со спектрами

Обзор

Список молекул					Обзор содержания базы данных							
номер	формула	ИМНМа	ИМНМс	Tс	Изотопы молекулы H ₂ S. Общая информация.							
номер	код	формула	масса	отс.содержание	Z ₂₉₆	T _{min}	T _{max}					
1	H ₂ O	0.0800	0.4000	0.65	1	121	H ³² S	33.987720	0.949884000000	503.2	70	3000
2	CO ₂	0.0700	0.1000	0.76	2	141	H ³⁴ S	35.983517	0.042136900000	504.5	70	3000
3	O ₃	0.0700	0.0900	0.76	3	131	H ³³ S	34.987106	0.007497660000	2015.5	70	3000
4	N ₂ O	0.0800	0.1000	0.76	Спектры при нормальной температуре (296K)							
5	CO	0.0600	0.0750	0.69	HITRAN							
6	CH ₄	0.0600	0.0750	0.69	номер	код	полос	линий	WN _{min}	WN _{max}		
7	O ₂	0.0400	0.0400	0.69	1	121	14	12330	2.985300	4256.546810		
8	NO	0.0500	0.0600	0.69	2	141	8	4894	5.614600	4171.175850		
9	SO ₂	0.1100	0.4000	0.75	3	131	8	3564	5.600900	4098.234230		
10	NO ₂	0.0730	0.0950	0.97	Итого:	30	20788	2.985300	4256.546810			
11	NH ₃	0.0900	0.3500	0.80	GEISA							
12	HNO ₃	0.1100	0.7300	0.75	номер	код	полос	линий	WN _{min}	WN _{max}		
13	OH	0.0600	0.0750	0.69	1	121	14	12330	2.985300	4256.546880		
14	HF	0.0500	0.1000	0.50	2	141	8	4894	5.614600	4171.175780		
15	HCl	0.0500	0.1000	0.50	3	131	8	3564	5.600900	4098.234380		
16	HBr	0.0500	0.1000	0.50	Итого:	30	20788	2.985300	4256.546880			
17	HI	0.0500	0.1000	0.50	ИОА							
18	ClO	0.0900	0.1500	0.50	номер	код	полос	линий	WN _{min}	WN _{max}		
19	OCS	0.0900	0.1500	0.60	1	121	35	21905	4471.772110	11329.779860		
20	H ₂ CO	0.1000	0.1500	0.50	2	141	16	5273	4692.087290	11226.586550		
21	HOCl	0.0600	0.1000	0.50	3	131	11	1814	4790.941900	11071.421370		
22	N ₂	0.0400	0.0400	0.50	Итого:	62	28992	4471.772110	11329.779860			
23	HCN	0.1000	0.2000	0.50								
24	CH ₂ Cl	0.1000	0.2000	0.50								
25	H ₂ O ₂	0.1000	0.2000	0.50								
26	C ₂ H ₂	0.0700	0.1300	0.75								
27	C ₂ H ₆	0.1000	0.1500	0.50								
28	PH ₃	0.0750	0.1000	0.50								
29	COF ₂	0.0850	0.1750	0.94								

Рис. 2. Список молекул, представленных в системе, общая информация и список источников данных по ПСЛ для выбранной молекулы на примере молекулы сероводорода

молекулы. Для получения информации о колебательно-вращательных полосах молекулы необходимо выбрать один изотопмер в интересующем пользователе источнике данных. Выбор изотопмера производится путем нажатия клавиши «код» для выбранного источника данных. На рис. 3 показан результат такого выбора для молекулы $H_2^{33}S$ из базы ИОА (страница «Молекулы/Спектральные полосы»).

Раздел «Спектры газовых смесей» предназначен для получения информации о параметрах спектральных линий и для моделирования спектров

в разрезе «Газовая смесь / Диапазон». При нажатии на клавишу этого раздела пользователь попадает на страницу «Спектры газовых смесей / Параметры спектра» (рис. 4).

Задавая параметры в панели запроса параметров спектра путем выбора смеси газов и типа спектральной функции, определения спектрального диапазона, давления, температуры, пути и т.д., пользователь имеет возможность рассчитать спектр интересующей его газовой смеси при определенных условиях в некотором спектральном интервале.

Спектральные полосы изотопа $H_2^{33}S$ из БД ИОА

выб	VS_{up}	VS_{low}	линии	WN_{min}, cm^{-1}	WN_{max}, cm^{-1}	$I_{min}, cm/mol$	$I_{max}, cm/mol$	$S_{v}, cm/mol$
<input type="checkbox"/>	002	000	143	5047.592450	5416.753120	4.165E-27	2.659E-25	7.320E-24
<input type="checkbox"/>	012	000	6	6089.099930	6474.854950	4.145E-27	9.580E-26	2.180E-25
<input type="checkbox"/>	021	000	166	4790.941900	5122.410600	4.193E-27	1.912E-25	7.947E-24
<input type="checkbox"/>	101	000	392	4867.401960	5346.153600	4.290E-27	2.783E-24	1.215E-22
<input type="checkbox"/>	111	000	432	6086.062100	6539.074140	4.076E-27	1.053E-24	6.099E-23
<input type="checkbox"/>	200	000	298	4887.490340	5315.632210	4.048E-27	1.172E-24	5.589E-23
<input type="checkbox"/>	202	000	16	9751.894180	9955.907680	1.100E-28	1.066E-27	5.536E-27
<input type="checkbox"/>	210	000	229	6126.697110	6484.850470	4.117E-27	3.806E-25	1.337E-23
<input type="checkbox"/>	212	000	33	10844.829580	11071.421370	1.370E-28	1.727E-27	1.913E-26
<input type="checkbox"/>	301	000	45	9751.904080	9978.270920	1.030E-28	3.331E-27	4.227E-26
<input type="checkbox"/>	311	000	54	10861.082350	11071.421370	1.240E-28	2.485E-27	3.689E-26
Итого:			1814	4790.941900	11071.421370	1.030E-28	2.783E-24	2.673E-22

(1-11 из 11)

Панель параметров спектра:

- Тип функции: Диаграмма интенсивностей
- Общие параметры: T, K: 296; P, atm: 1; Отн. конц., %: 100
- Параметры контура: Форма: Фойгт; WN_{var}, cm^{-1} : 0.01; Крыло, HW: 50
- Параметры функций: Алл. функ. (АФ): Дирак; Опт. путь, м: 1; Алл. разрешение (АР), cm^{-1} : 0.1; Крыло АФ, АР: 50
- Режимы отображения: Разделять спектральные полосы; Шкала диаграммы интенсивностей: Естественная, Логарифмическая
- Кнопка: Получить спектр

Рис. 3. Список КВ-полос на примере молекулы $H_2^{33}S$ в банке ИОА

Задание параметров моделируемого спектра

Смесь газов: Water Vapor, PS-296, 6 species

Тип функции: Диаграмма интенсивностей

Общие параметры: WN_{min}, cm^{-1} : 4300; WN_{max}, cm^{-1} : 4950; T, K: 296; P, atm: 1; $I_{out}, cm/mol$: 1E-28

Параметры контура: Форма: Фойгт; WN_{var}, cm^{-1} : 0.01; Крыло, HW: 50

Параметры функций: Алл. функ. (АФ): Дирак; Опт. путь, м: 1; Алл. разрешение (АР), cm^{-1} : 0.1; Крыло АФ, АР: 50

Режимы отображения: Разделять молекулы; Шкала диаграммы интенсивностей: Естественная, Логарифмическая

Кнопка: Получить спектр

Рис. 4. Панель задания параметров для расчета спектра выбранной газовой смеси в заданном частотном диапазоне

Раздел «Сечения поглощения» предоставляет пользователю возможность просмотра экспериментальной информации о сечениях поглощения семи молекул: N_2O , SO_2 , NO_2 , SF_6 , $ClONO_2$, HNO_4 и N_2O_5 . В системе содержится информация о сечениях поглощения указанных молекул, соответствующая источнику данных HITRAN. Заметим, что в то время как информация о параметрах спектральных линий этого источника соответствует версии банка HITRAN-2004 (включая обновления 2005 г.), информация о сечениях поглощения соответствует версии HITRAN-2000. На рис. 5 показана страница «Сечения поглощения/Обзор».

В левой части рис. 5 размещен список молекул, для которых имеются данные о сечениях поглощения. В правой части отображен список экспериментальных спектров выбранной молекулы.

Раздел «Прямая задача» позволяет пользователю самостоятельно рассчитывать колебательно-вращательные спектры молекул воды и озона по заданным параметрам гамильтониана и дипольного момента перехода. Описание этого раздела и расчета спектров пользователем дано в [7]. Заметим, что работа с этим разделом предполагает знакомство пользователя с основами теории эффективных операторов и их приложениями к задачам молекулярных спектров.

Раздел «Вспомогательные данные» состоит из двух подразделов: 1) «Вспомогательные данные/Смеси газов» и 2) «Вспомогательные данные/Смеси изотопов». Раздел предназначен для создания пользователем собственных смесей газов, содержащих различные молекулярные компоненты (подразд. 1), и смесей изотопических модификаций выбранной молекулы (подразд. 2). Подразд. 1 со-

держит список общедоступных смесей системы и личные смеси пользователя. Подразд. 2 (рис. 6) содержит список молекул, для которых возможно создание смесей изотопических модификаций (левая часть страницы).

Этот список совпадает со списком молекул раздела «Молекулы/Обзор». В правой части страницы отображен список изотопомеров выбранной молекулы. Смеси изотопических модификаций молекул, так же как и смеси газов подразд. 1, могут быть трех типов:

- 1) стандартные смеси системы (смеси № 1 и 9, рис. 6);
- 2) смеси пользователя, доступные другим пользователям (смеси № 4, 6, 13, 15, 22, 27 и 28, рис. 6);
- 3) персональные смеси пользователя, недоступные другим пользователям (смеси № 5, 7, 10, 16, 18, 23 и 24, рис. 6).

При создании смеси пользователь может сделать ее общедоступной или персональной. Пользователь имеет право модифицировать и удалять смеси второго и третьего типов. Создание смесей доступно зарегистрированным в системе пользователям. Незарегистрированный пользователь имеет возможность лишь просмотреть общедоступные смеси.

З а м е ч а н и е. В списке газовых смесей имеются стандартные смеси, соответствующие 10 моделям атмосферного воздуха (смеси № 1–10 раздела «Вспомогательные данные/Смеси газов»). Еще раз обращаем внимание пользователя на то, что это не означает возможности моделирования атмосферных спектров. Используя эти смеси, пользователь может моделировать лабораторные спектры смесей, соответствующих газовому составу атмосферы.

Список молекул			Обзор содержания базы данных								
номер	название	формула	Сечения поглощения молекулы N_2O_5 . Обзор.								
			выб	WN_{min}, cm^{-1}	WN_{max}, cm^{-1}	T, K	P, torr	WN_{step}, cm^{-1}	точек	ушир.	источник
1	N_2O	N_2O	<input checked="" type="checkbox"/>	555.415	599.771	293.00	0.00	1.000	93		HITRAN
2	SO_2	SO_2	<input type="checkbox"/>	555.415	599.771	273.00	0.00	1.000	93		HITRAN
3	NO_2	NO_2	<input type="checkbox"/>	555.415	599.771	253.00	0.00	1.000	93		HITRAN
4	SF_6	SF_6	<input type="checkbox"/>	555.415	599.771	233.00	0.00	1.000	93		HITRAN
5	$ClONO_2$	$ClONO_2$	<input type="checkbox"/>	555.415	599.771	233.00	0.00	1.000	93		HITRAN
6	HNO_4	HNO_4	<input checked="" type="checkbox"/>	720.304	764.660	293.00	0.00	1.000	93		HITRAN
7	N_2O_5	N_2O_5	<input type="checkbox"/>	720.304	764.660	273.00	0.00	1.000	93		HITRAN
			<input type="checkbox"/>	720.304	764.660	253.00	0.00	1.000	93		HITRAN
			<input type="checkbox"/>	720.304	764.660	233.00	0.00	1.000	93		HITRAN
			<input checked="" type="checkbox"/>	1210.149	1274.755	293.00	0.00	1.000	135		HITRAN
			<input type="checkbox"/>	1210.149	1274.755	273.00	0.00	1.000	135		HITRAN
			<input type="checkbox"/>	1210.149	1274.755	253.00	0.00	1.000	135		HITRAN
			<input type="checkbox"/>	1210.149	1274.755	233.00	0.00	1.000	135		HITRAN
			<input checked="" type="checkbox"/>	1680.227	1764.600	293.00	0.00	1.000	176		HITRAN
			<input type="checkbox"/>	1680.227	1764.600	273.00	0.00	1.000	176		HITRAN
			<input type="checkbox"/>	1680.227	1764.600	253.00	0.00	1.000	176		HITRAN
			<input type="checkbox"/>	1680.227	1764.600	233.00	0.00	1.000	176		HITRAN

(1-16 из 16)
Показать

Рис. 5. Обзор содержания экспериментальных спектров сечений поглощения выбранной молекулы

The screenshot shows the 'Смеси изотопов' (Isotope Mixtures) window. It features a table on the left with columns for 'номер' (number), 'формула' (formula), 'H/MHMa', 'H/MHMs', and 'Tc'. The main area is titled 'Обзор содержания базы данных' (Database Content Overview) and 'Смеси изотопов молекулы H₂O. Приготовление смесей пользователя.' (Isotope Mixtures of H₂O molecule. Preparation of user mixtures). It includes a 'Скопировать из' (Copy from) dropdown menu set to 'Standard' and an 'OK' button. Below is a detailed table of mixtures with columns for 'номер' (number), 'название' (name), 'относительные концентрации компонент, %' (relative component concentrations, %), and 'команда' (command).

номер	формула	H/MHMa	H/MHMs	Tc
1	H ₂ O	0.0800	0.4000	0.65
2	CO ₂	0.0700	0.1000	0.76
3	O ₃	0.0700	0.0900	0.76
4	N ₂ O	0.0800	0.1000	0.76
5	CO	0.0600	0.0750	0.69
6	CH ₄	0.0600	0.0750	0.69
7	O ₂	0.0400	0.0400	0.69
8	NO	0.0500	0.0600	0.69
9	SO ₂	0.1100	0.4000	0.75
10	NO ₂	0.0730	0.0950	0.97
11	NH ₃	0.0900	0.3500	0.80
12	HNO ₃	0.1100	0.7300	0.75
13	OH	0.0600	0.0750	0.69
14	HF	0.0500	0.1000	0.50
15	HCl	0.0500	0.1000	0.50
16	HBr	0.0500	0.1000	0.50
17	HI	0.0500	0.1000	0.50
18	ClO	0.0900	0.1500	0.50
19	OCS	0.0900	0.1500	0.60
20	H ₂ CO	0.1000	0.1500	0.50
21	HOCl	0.0600	0.1000	0.50
22	N ₂	0.0400	0.0400	0.50
23	HCN	0.1000	0.2000	0.50
24	CH ₃ Cl	0.1000	0.2000	0.50
25	H ₂ O ₂	0.1000	0.2000	0.50
26	C ₂ H ₂	0.0700	0.1300	0.75
27	C ₂ H ₆	0.1000	0.1500	0.50
28	PH ₃	0.0750	0.1000	0.50
29	COF ₂	0.0850	0.1750	0.94

номер	название	относительные концентрации компонент, %	команда
1	Standard	H ¹⁶ OH: 99.731700 H ¹⁸ OH: 0.199983 H ¹⁷ OH: 0.037200 H ¹⁶ OD: 0.031069 H ¹⁸ OD: 0.000030	
4	H ₂ ¹⁶ O, PS-296	H ¹⁶ OH: 100.000000	☐
5	HDO, Hit	H ¹⁶ OD: 100.000000	☐☐
6	HD ¹⁶ O, PS-296	H ¹⁶ OD: 100.000000	☐
7	H ₂ ¹⁷ O, PS-1000	H ¹⁷ OH: 100.000000	☐☐
9	Standard (GEISA)	H ¹⁶ OH: 99.731718 H ¹⁸ OH: 0.199983 H ¹⁷ OH: 0.037200 H ¹⁶ OD: 0.031069	
10	H ₂ ¹⁶ O PS-1000	H ¹⁶ OH: 100.000000	☐☐
13	H ₂ ¹⁸ O, PS-296	H ¹⁸ OH: 100.000000	☐
15	Water, PS-296	H ¹⁶ OH: 99.731686 H ¹⁸ OH: 0.199983 H ¹⁷ OH: 0.037188 H ¹⁶ OD: 0.031069 H ¹⁸ OD: 0.000062 H ¹⁷ OD: 0.000012	☐
16	My_Standard	H ¹⁶ OH: 99.731712 H ¹⁸ OH: 0.199983 H ¹⁷ OH: 0.037200 H ¹⁶ OD: 0.031069 H ¹⁸ OD: 0.000030 H ¹⁷ OD: 0.000006	☐☐
18	H ₂ ¹⁸ O, PS-1000	H ¹⁸ OH: 100.000000	☐☐
22	H ₂ ¹⁷ O, PS-296	H ¹⁷ OH: 100.000000	☐
23	H ₂ O, PS, 296	H ¹⁶ OH: 99.731760 H ¹⁸ OH: 0.199983 H ¹⁷ OH: 0.037188 H ¹⁶ OD: 0.031069	☐☐
24	H ₂ ¹⁶ O, Hit	H ¹⁶ OH: 100.000000	☐☐
27	HD ¹⁷ O, PS-296	H ¹⁷ OD: 100.000000	☐
28	HD ¹⁸ O, PS-296	H ¹⁸ OD: 100.000000	☐

Рис. 6. Список смесей изотопических модификаций на примере молекулы воды

The screenshot shows the 'Справочная информация по SPECTRA - Microsoft Internet Explorer' window. It has a table of contents on the left and a main text area. The table of contents includes 'Общие сведения' (General information), 'Введение' (Introduction), 'Информация о версии' (Version information), 'Источники данных' (Data sources), 'Структура окна браузера' (Browser window structure), 'Справка' (Help), and 'Обзор теории' (Theory overview). The main text area is titled 'Информация' (Information) and contains 'Информация о версии' (Version information), which is a list of 10 points detailing system updates and changes.

Информация о версии

1. Обновлена и расширена информационная база системы. В систему включены самые свежие данные БД HITRAN, а также данные о высокотемпературных спектрах из БД HITEMP. Теперь в системе доступны оригинальные данные Парtridge и Швенке по спектрам молекулы H₂O и данные по молекулам CO₂ и H₂S, полученные в ИОА СО РАН в сотрудничестве с французскими коллегами. Все данные включены в систему с согласия их авторов.
2. Полностью изменена внутренняя структура системы и переписан ее код.
3. Интерфейс пользователя стал более простым и понятным. Устранены неудобства, связанные с получением инструментальных спектров (спектров низкого разрешения)
4. В связи с тем, что расширилось число источников данных, сравнение спектров стало отдельной функцией меню верхнего уровня и в настоящее время доступно только зарегистрированным пользователям. Число сравниваемых спектров может быть любым. Мы планируем предоставить возможность сравнения спектров, полученных в ходе сеанса работы с системой, без сохранения их в области данных пользователя.
5. Появилась возможность получать спектры для смесей газов, компоненты которых взяты из разных источников данных. Информация, отображаемая в виде таблиц, может быть упорядочена по различным полям, что облегчает поиск нужной информации.
7. Спектры в виде текстовых файлов теперь могут отображаться в отдельном окне браузера. Мы не рекомендуем использовать эту функцию для больших выборок, так как это может потребовать много времени. Более предпочтительным выбором является загрузка упакованных файлов на компьютер пользователя и отправка их по электронной почте.
8. Данные регистрации пользователей, а также смеси, приготовленные пользователями, перенесены из базы данных предыдущей версии системы. К сожалению, это не удалось сделать для сохраненных спектров пользователей из-за изменения структуры БД спектров пользователей. Они доступны в предыдущей версии системы.
9. Работоспособность системы проверена в браузерах Microsoft Internet Explorer и Netscape.
10. Мы с благодарностью воспримем все ваши замечания по работе системы и предложения по ее развитию, а также сообщения о замеченных ошибках.

Рис. 7. Типичный вид окна со справочной информацией

Раздел «Работа со спектрами» доступен только зарегистрированным пользователям и предназначен для работы со спектрами пользователя. Спектры этого раздела могут быть получены средствами самой системы, а могут быть загружены пользователем в систему со своего компьютера. Раздел предназначен для загрузки и хранения спектров, их сравнения между собой и удаления ненужных спектров.

Справочная система

Кроме перечисленных разделов в ИВС имеется справочная система. Доступ к информации справочной системы осуществляется путем нажатия клавиши «?» в правой части меню системы. Информация отображается в отдельном окне браузера (рис. 7). Окно разделено на две части. В левой части размещено *Содержание*, в правой – собственно информация о выделенном разделе системы.

Справочная система ИВС SPECTRA состоит из трех частей (рис. 7): «Общие сведения»; «Справка»; «Обзор теории».

В «Общих сведениях» дана краткая аннотация по ИВС («Введение»), информация о версии системы («Информация о версии»), представлены шесть источников ПСЛ – HITRAN, GEISA, HITEMP, CDS, PS и ИОА («Источники данных») и описана структура окна браузера («Структура окна браузера»).

В «Справке» дано подробное описание всех шести разделов системы. Названия соответствующих разделов этой части справочной системы полностью совпадают с названиями разделов ИВС.

В части «Обзор теории» даны определения и основные формулы для расчета спектральных функций (разделы «Спектральные функции» и «Коэффициент поглощения»), контуров спектральных линий («Форма контура»), зависимости рассчитываемых величин от температуры и давления («Зависимость от температуры и давления»), свертки спектра высокого разрешения с аппаратной функцией («Конволюция спектров»).

Наиболее часто задаваемые вопросы

Как отмечалось в предыдущих разделах статьи, главными целями системы являются: предоставление доступа к спектроскопической информации и решение ряда спектроскопических задач в интерактивном режиме. Освещение основных возможностей системы по реализации ее целей будет дано в форме ответов на ряд вопросов, возникающих, как правило, при обращении к системам подобного рода.

Прежде всего, в разделах «Введение» и «Структура системы» уже было сказано о том, что в настоящей версии системы возможно проведение расчетов спектров лишь для оптически однородных сред. Таким образом, моделирование в рамках системы атмосферных спектров либо спектров газовых сред с неоднородным распределением температуры,

давления, концентраций и т.д. в настоящей версии не предполагается.

Для каких молекул и какая спектроскопическая информация имеется в системе?

В системе есть два сорта спектроскопической информации – параметры спектральных линий (как расчетные, так и экспериментальные) и экспериментальные спектры низкого разрешения (сечения поглощения). Список молекул, для которых в системе имеется информация по ПСЛ, представлен в разделе «Молекулы/Обзор» (см. рис. 2). Для каждой молекулы представлены набор изотопомеров и перечень источников данных ПСЛ. Банки HITEMP, CDS и PS содержат исключительно расчетную информацию. Банки HITRAN, GEISA и ИОА являются компиляциями, содержащими как расчетные, так и экспериментальные данные.

Молекулы, для которых имеется информация об экспериментальных сечениях поглощения, представлены в разделе «Сечения поглощения/Обзор» (см. рис. 5). Данные этого раздела могут быть загружены на компьютер пользователя только в графическом виде.

Как получить информацию о параметрах спектральных линий отдельной полосы для выбранной молекулы?

Для получения ПСЛ отдельной полосы (или группы полос) выбранной молекулы необходимо воспользоваться разделом «Молекулы». Например, «кликнув мышкой» на формулу молекулы сероводорода (молекула № 31 списка молекул на странице «Молекулы/Обзор»), получаем информацию о том, что данные по ПСЛ искомой молекулы содержатся в трех банках данных: HITRAN, GEISA и ИОА (см. рис. 2). Далее, «кликнув мышкой» на код «131» изотопомера $H_2^{33}S$ из банка ИОА, получаем информацию об 11 спектральных полосах выбранной молекулы из этого банка (см. рис. 3). Выбор интересующих нас полос производится путем их отметки «мышкой» в левом столбце (поле «выб») списка полос. Ниже списка полос размещена панель запроса параметров спектра. Для получения информации о ПСЛ значение поля «Тип функции» в левой части панели («Параметры спектра») должно быть «Диаграмма интенсивностей». Если в списке полос отмечено более одной полосы, то в правой части панели («Режимы отображения»), для удобства отображения информации, можно поставить отметку в поле «Разделять спектральные полосы». После этого нужно нажать клавишу «Получить спектр» в нижней части панели запроса параметров спектра. Результат запроса отображается на странице «Молекулы/Спектр» (рис. 8).

Как видно из рис. 8, разделение полос заключается в отображении соответствующих линий различным цветом.

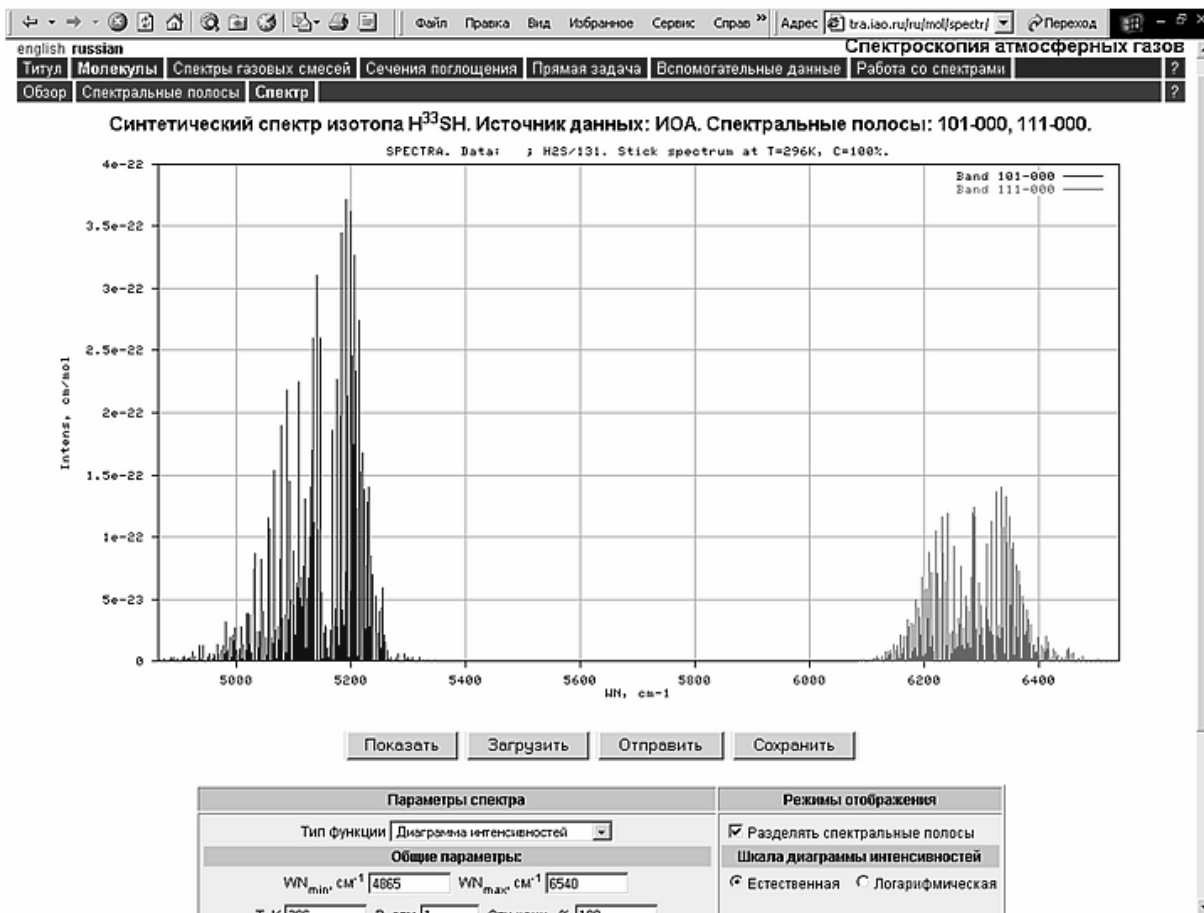


Рис. 8. Результат расчета спектра (диаграмма интенсивностей) выбранных спектральных полос молекулы H_2^{33}S

Как получить информацию о параметрах спектральных линий для смеси газов в некотором частотном интервале?

Для получения ПСЛ для смеси газов в некотором спектральном диапазоне необходимо воспользоваться разделом «Спектры газовых смесей» и сформировать задание, используя панель запроса параметров моделируемого спектра (см. рис. 4). Для того чтобы сформировать задание для системы, необходимо указать интересующую пользователя смесь газов. Смесь выбирается из выпадающего списка смесей (параметр панели «Смесь газов»). На рис. 4 показан пример задания для получения информации о шести изотопических модификациях молекулы воды (смесь «Water Vapor, PS-296, 6 species») из банка данных PS в диапазоне частот 4300–4950 cm^{-1} . Результат выполнения запроса отображается на странице «Спектры газовых смесей/Спектр». Вид этой страницы аналогичен странице «Молекулы/Спектр» на рис. 8. Если в смеси газов присутствуют различные молекулярные компоненты, то их линии могут быть отображены различными цветами, подобно линиям различных полос рис. 8.

Как получить информацию о параметрах спектральных линий в текстовом формате?

В текстовом формате информация о ПСЛ может быть получена со страниц «Молекулы/Спектр» (рис. 8) или «Спектры газовых смесей/Спектр» путем нажатия кнопки «Показать», расположенной между графическим изображением спектра и панелью запроса параметров спектра. Текстовый файл загружается в отдельное окно браузера. Если файл достаточно велик, то его загрузка может потребовать длительного времени. Текстовый файл, упакованный в формате *zip*, можно также загрузить на компьютер пользователя. Для этого используется кнопка «Загрузить». Третья возможность получения запрашиваемой информации – отправить файл, упакованный в формате *zip*, по электронной почте, используя кнопку «Отправить».

Как рассчитать спектр пропускания (поглощения, излучения) или коэффициент поглощения?

Все четыре спектральные функции можем рассчитать, используя панель запроса параметров для

расчета спектра либо в разделе «Молекулы» (см. рис. 3 и 8), либо в разделе «Спектры газовых смесей» (см. рис. 4).

Для расчета спектра в некотором частотном диапазоне в панели задания необходимо выбрать газовую смесь в поле «Смесь газов», задать тип моделируемой функции, выбирая ее из выпадающего списка в поле «Тип функции», и частотный диапазон (параметры WN_{\min} и WN_{\max} , см^{-1}). Температура, давление, длина пути и отсечка по интенсивности для линий, которые берутся в расчет для моделирования спектра, размещены в соответствующих полях панели задания. При расчете коэффициента поглощения, поглощения, пропускания и излучения нужно обратить внимание на «Параметры контура» – форму контура, величину крыла линии (в полуширинах) и шаг, с которым необходимо моделировать спектр. Если задан достаточно большой спектральный диапазон и в него попадает большое число линий газовой смеси, то при очень малом шаге моделирование спектра может занять много времени. Возможности системы позволяют учесть влияние аппаратной функции. Тип функции выбирается из выпадающего списка поля «Апп. функ. (АФ)». В этом случае нужно указывать аппаратное разрешение в поле «Апп. разрешение (АР), см^{-1} ». На рис. 9 показан результат расчета спектра пропускания смеси «Water Vapor, PS-296, 6 species»

в диапазоне $4600\text{--}4650\text{ см}^{-1}$. Расчет произведен для нормальной температуры (296 К), давления 0,2 атм и длины пути 100 м. В расчете использовался контур Фойгта с величиной крыла в 50 полуширин и учитывались все линии с интенсивностью выше $1 \times 10^{-28}\text{ см}^2/\text{молек}$, шаг по частоте равнялся $0,001\text{ см}^{-1}$. Влияние аппаратной функции не учитывалось (аппаратная функция «Дирак»). Время расчета при этом составляет 3–4 с. Результат расчета отображен на рис. 9. Между рисунком спектра и панелью задания помещен уменьшенный по высоте график диаграммы интенсивностей.

Аналогичным образом рассчитываются спектральные функции в разделе «Молекулы» для группы выбранных полос. Панели запроса параметров для моделирования спектра в этих разделах совпадают, как это видно из рис. 3 и 4.

Как сохранить полученную информацию на сервере?

Как отмечалось выше, эта возможность доступна только зарегистрированным пользователям – одним из атрибутов сохраняемой информации является имя пользователя. Сохранить полученную информацию на сервере можно со страниц «Молекулы/Спектр» (см. рис. 8) и «Спектры газовых смесей/Спектр» (см. рис. 9) путем нажатия кнопки

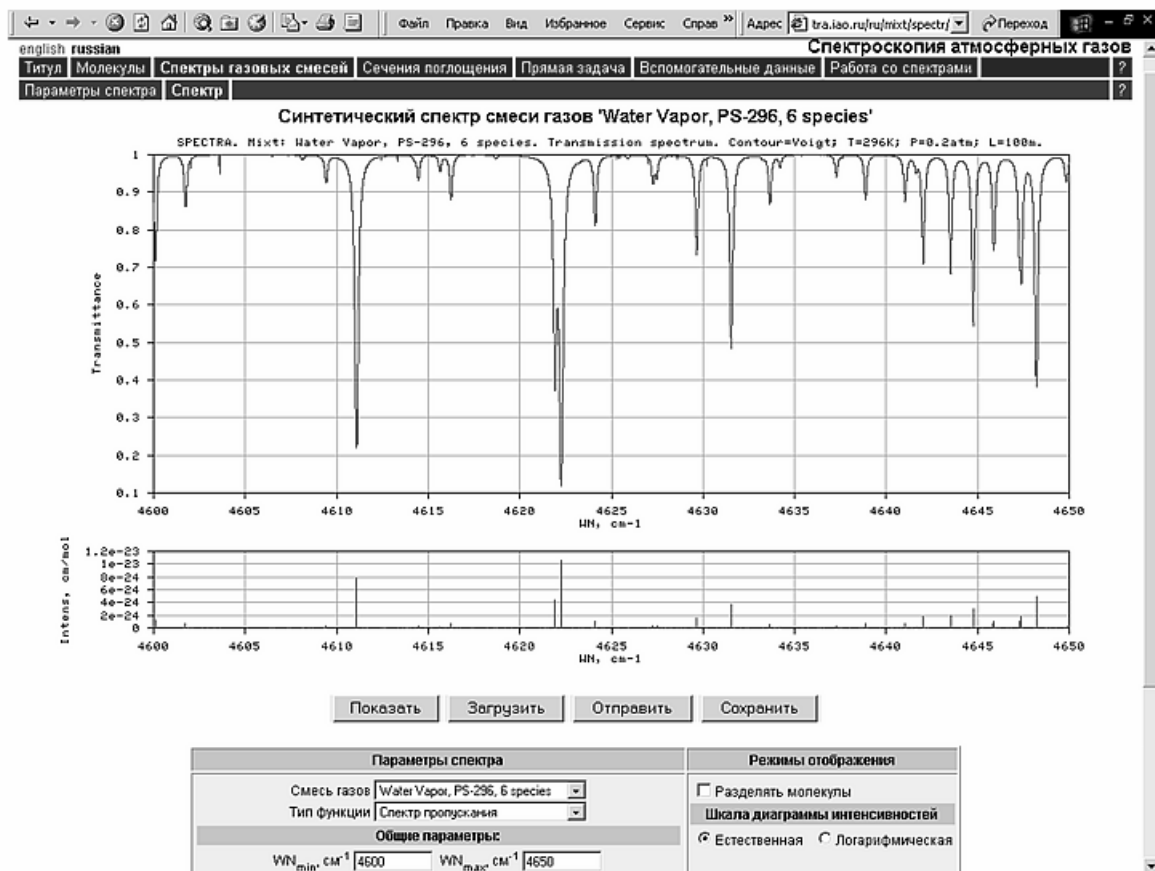


Рис. 9. Результат расчета спектра пропускания выбранной газовой смеси в заданном частотном диапазоне

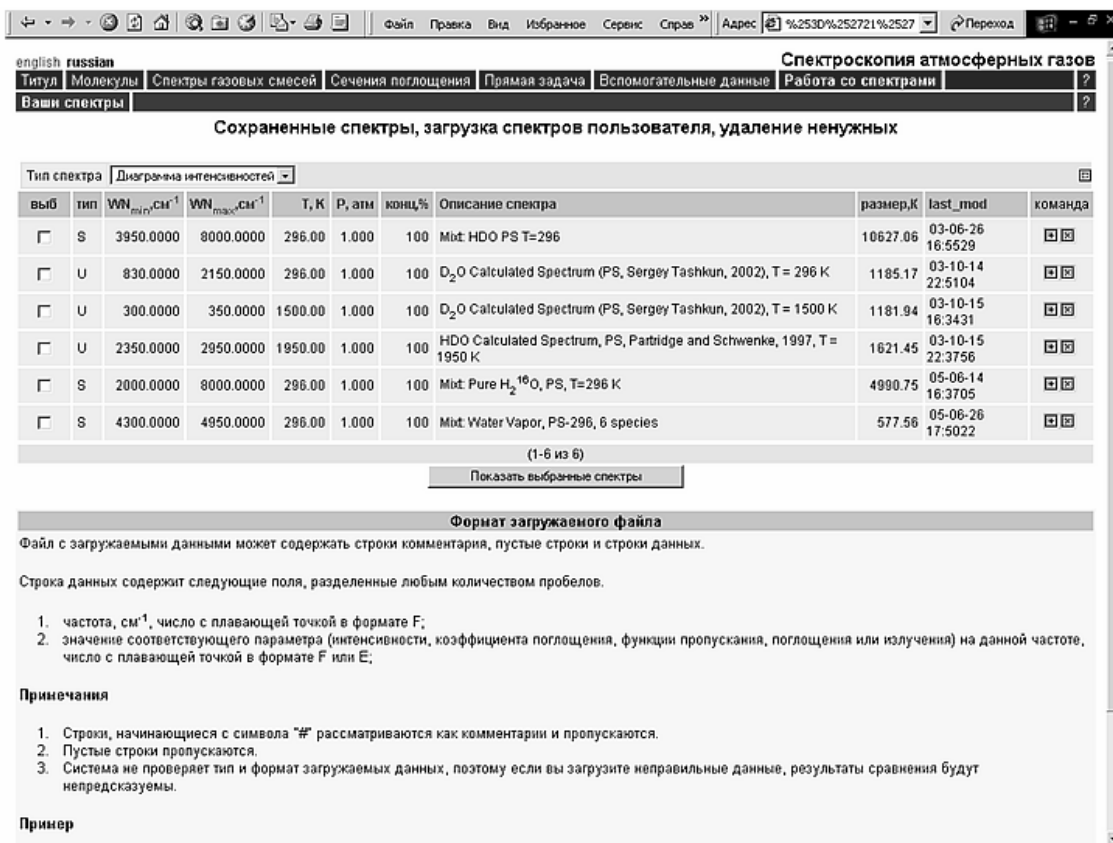


Рис. 10. Пример списка сохраненных спектров пользователя (диаграммы интенсивностей)

«Сохранить», расположенной между графическим изображением спектра и панелью запроса параметров спектра. Доступ к сохраненной информации осуществляется через раздел «Работа со спектрами», показанный на рис. 10. Сохраняемые спектры классифицируются по шести типам (поле «Тип спектра» на рис. 10) и соответствуют шести типам спектральных функций панели запроса параметров (см. рис. 3 и 4). Так, например, спектр рис. 8 сохранен в указанном разделе как «Диаграмма интенсивностей» – последняя запись списка на рис. 10. Спектр, отображенный на рис. 9, может быть сохранен как «Спектр пропускания» в разделе «Работа со спектрами». Символом «S» на рис. 10 отмечены спектры, полученные средствами системы. Символом «U» отмечены спектры, загруженные в систему пользователем со своего компьютера.

Как приготовить смесь изотопмеров выбранной молекулы?

Этот сервис доступен зарегистрированным пользователям. Для приготовления смеси изотопмеров пользователь должен перейти в раздел «Вспомогательные данные/Смеси изотопов», показанный на рис. 6. Выбор интересующей пользователя молекулы производится путем нажатия клавиши, соответствующей формуле этой молекулы, в списке молекул. Приготовление новой смеси про-

изводится либо копированием уже существующей смеси (выбирается из выпадающего списка в поле «Скопировать из»), либо созданием новой, с использованием клавиши «Добавить». Клавиша расположена в верхнем правом углу списка смесей. При нажатии клавиши «Добавить» на экране появляется форма «Добавление новой смеси пользователя». В форме перечислены все изотопмеры выбранной молекулы и соответствующие им источники ПСЛ. Пользователь должен заполнить поле «название», ввести значения относительных концентраций интересующих его изотопических модификаций молекулы и указать источники данных ПСЛ.

После заполнения формы и нажатия клавиши «OK» в списке смесей появится новая запись. Напротив названия личной смеси пользователя имеются кнопки изменения и удаления этой смеси (в поле «команда»). При нажатии кнопки «Изменить» появляется форма «Изменение смеси пользователя», идентичная форме «Добавление новой смеси пользователя». Внесенные в форму изменения сохраняются нажатием клавиши «OK».

Приготовив изотопическую смесь всех необходимых молекул, пользователь может переходить к составлению газовой смеси.

Как приготовить газовую смесь?

Этот сервис доступен зарегистрированным пользователям. Для приготовления газовой смеси поль-

зователь должен перейти в раздел «*Вспомогательные данные/Смеси газов*». На этой странице отображается список всех газовых смесей, доступных пользователю. Процедура создания новой смеси газов аналогична вышеописанной процедуре приготовления изотопических смесей молекул. При нажатии клавиши «*Добавить*» на экране появляется форма «*Добавление новой смеси пользователя*». В форме перечислены все 45 молекулярных компонент, перечисленных в списках молекул (см. рис. 2 и 6).

Заполнение и сохранение формы производится аналогично тому, как это делалось при составлении смеси изотопомеров отдельной молекулы. Смесь изотопомеров для каждой молекулы выбирается из выпадающего списка «*смесь изотопов*», расположенного напротив формулы каждой из молекул. После заполнения формы и нажатия клавиши «*OK*» в списке газовых смесей появится новая запись. Новая запись появится также и в выпадающем списке поля «*Смесь газов*» в форме запроса параметров для моделирования спектра (см. рис. 4 и 9).

Заключение

Информационно-вычислительная система SPECTRA предоставляет доступ через Интернет не только к данным известных спектроскопических банков [8, 9, 14], но и к данным, не представленным в других банках [10, 11, 15]. Существенной особенностью данной системы является возможность интерактивного решения ряда спектроскопических задач по моделированию спектров высокого и низкого разрешения для широкого круга молекул атмосферных газов.

Решение прямой спектроскопической задачи в рамках системы позволяет пользователю рассчитывать спектры молекул для тех спектральных диапазонов и условий, которые не представлены в базе данных системы по ПСЛ.

Использование системы может быть полезным для специалистов в области молекулярной спектроскопии, атмосферной оптики и иных направлений, связанных с использованием данных о спектральных свойствах газовых сред.

Кроме того, система может использоваться в качестве инструмента обучения при чтении курсов лекций и проведении практических занятий по оптике и молекулярной спектроскопии в высших учебных заведениях (факультетах, кафедрах) физического и химического профилей.

Авторы статьи выражают благодарность своим коллегам – С.А. Ташкуну, В.И. Перевалову и Вл.Г. Тютереву за сотрудничество и вклад в развитие системы, а также Ю.А. Поплавскому и В.А. Капитанову за полезные замечания и обсуждения, способствовавшие исправлению ряда ошибок моделирования спектров.

Работа выполняется при частичной поддержке из программы РАН 2.10 «Оптическая спектроскопия и стандарты частоты».

1. <http://www.hitran.com>
2. <http://spec.jpl.nasa.gov>

3. <http://www.cdms.de>
4. <http://physics.nist.gov>
5. <http://physics.nist.gov/PhysRefData/wavenum/html/spect.html>
6. *Бабиков Ю.Л., Барб А., Головки В.Ф., Михайленко С.Н., Тютерев Вл.Г.* Интернет-коллекции по молекулярной спектроскопии // Сб. трудов Третьей Всерос. конф. «Электронные библиотеки: перспективные методы и технологии, электронные коллекции» RCDL-2001. Сентябрь 2001. Петрозаводск: Изд-во Карел. науч. центра РАН, 2001. С. 183–187.
7. *Михайленко С.Н., Ташкун С.А., Бабиков Ю.Л., Головки В.Ф., Тютерев Вл.Г.* Прямая спектроскопическая задача в рамках ИВС «Спектроскопия атмосферных газов» // Оптика атмосф. и океана. 2004. Т. 17. № 11. С. 927–938.
8. *Rothman L.S., Jacquemart D., Barbe A., Benner D.C., Birk M., Brown L.R., Carleer M.R., Chackerian C., Jr., Chance K., Dana V., Malathy Devi V., Flaud J.-M., Gamache R.R., Goldman A., Hartmann J.-M., Jucks K.W., Maki A.G., Mandin J.-Y., Massie S.T., Orphal J., Perrin A., Rinsland C.P., Smith M.A.H., Tennyson J., Tolchenov R.N., Toth R.A., Vander Auwera J., Varanasi P., Wagner G.* The HITRAN 2004 molecular spectroscopic database // J. Quant. Spectrosc. and Radiat. Transfer. *in press*.
9. *Jacquinot-Husson N., Arie E., Ballard J., Barbe A., Bjaraker G., Bonnet B., Brown L.R., Camy-Peyret C., Champion J.-P., Chedin A., Chursin A., Clerbaux C., Duxbury G., Flaud J.-M., Fourrie N., Fayt A., Graner G., Gamache R.R., Goldman A., Golovko V., Guelachvili G., Hartmann J.-M., Hilico J.-C., Hillman J., Lefevre G., Lellouch E., Mikhailenko S.N., Naumenko O.V., Nemtchinov V., Newnham D.A., Nikitin A., Orphal J., Perrin A., Reuter D.C., Rinsland C.P., Rosenmann L., Rothman L.S., Scott N.A., Selby J., Sinitza L.N., Sirota J.M., Smith M.A.H., Smith K.M., Tyuterev V.I.G., Tipping R.H., Urban S., Varanasi P., Weber M.* The 1997 spectroscopic GEISA databank // J. Quant. Spectrosc. and Radiat. Transfer. 1999. V. 62. N 2. P. 205–254.
10. *Tashkun S.A., Perevalov V.I., Teffo J.-L.* CDS-296, the carbon dioxide spectroscopic databank: Version for atmospheric applications // J. Quant. Spectrosc. and Radiat. Transfer. *in preparation*.
11. *Науменко О.В., Половцева Е.Р.* База данных по поглощению сероводорода в области 4400–11400 см⁻¹ // Оптика атмосф. и океана. 2003. Т. 16. № 11. С. 985–991.
12. *Partridge H., Schwenke D.W.* The determination of an accurate isotope dependent potential energy surface for water from extensive *ab initio* calculations and experimental data // J. Chem. Phys. 1997. V. 106. N 11. P. 4618–4639.
13. *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. 2000. V. 113. N 16. P. 6592–6597.
14. *Rothman L.S., Camy-Peyret C., Flaud J.-M., Gamache R.R., Goorvitch D., Goldman A., Hawkins R.L., Schroeder J., Selby J.E.A., Watson E.B.* HITRAN, the high-temperature molecular spectroscopic database // J. Quant. Spectrosc. and Radiat. Transfer. *in preparation*.
15. *Tashkun S.A., Perevalov V.I., Teffo J.L., Bykov A.D., Lavrentieva N.N.* CDS-1000, the high-temperature

- carbon dioxide spectroscopic databank // J. Quant. Spectrosc. and Radiat. Transfer. 2003. V. 82. N 1–4. P. 165–197.
16. *Golovko V.F., Nikitin A.V., Chursin A.A., Tyuterev V.I.G.* Information system AIRSENTRY for modeling atmospheric infra-red spectra and radiation transmission in the atmosphere // Proc. of the 2nd Intern. Workshop ADBIS95. Moscow: Phasis Publishing House, 1995. V. 2. P. 12–14.
 17. *Tyuterev V.I.G., Babikov Yu.L., Tashkun S.A., Perevalov V.I., Nikitin A.V., Champion J.-P., Wenger Ch., Pierre C., Pierre G., Hilico J.-C., Loete M.* T.D.S. spectroscopic databank for spherical tops: DOS version // J. Quant. Spectrosc. and Radiat. Transfer. 1994. V. 52. N 3/4. P. 459–479.
 18. *Husson N., Bonnet B., Chedin A., Scott N.A., Chursin A.A., Golovko V.F., Tyuterev V.I.G.* The GEISA data bank in 1993: A PC/AT compatible computers new version // J. Quant. Spectrosc. and Radiat. Transfer. 1994. V. 52. N 3/4. P. 425–438.
 19. <http://www.mysql.org>
 20. <http://www.php.net>
 21. *Tashkun S.A., Tyuterev V.I.G.* GIP: a program for experimental data reduction in molecular spectroscopy // Proc. SPIE. 1994. V. 2205. P. 188–191.
 22. <http://smarty.php.net>

S.N. Mikhailenko, Yu.L. Babikov, V.F. Golovko. **Information-computation system «Spectroscopy of Atmospheric Gases». Structure and main functions.**

This paper describes the structure and main functional capabilities of the information-computation system «Spectroscopy of Atmospheric Gases». The system is a convenient tool for the Internet access to the results of investigation in spectroscopy of atmospheric gases and for the interactive solution of some spectroscopic problems. The system can be used both for research purposes and for teaching the courses of optics and molecular spectroscopy in the higher school.