

List of the Molecules and their Isotopologues according to the GEISA coding.

NB : A 1.000 as abundance value means that no absolute nor relative isotopic value was taken into account by the data providers.

Abundances are from P. De Bièvre, N.E. Holden, and I.L. Barnes, "Isotopic Abundances and Atomic Weights of the Elements," J.Phys.Chem.Ref.Data 13, 809-891 (1984).

Molecule	Molecule Code	I Code	Formula	Abundance	Since GEISA version
H <sub>2</sub> O	1	161	H <sup>16</sup> OH	0.997317	2003
		181	H <sup>17</sup> OH	0.002000	2003
		171	H <sup>18</sup> OH	3.718840 × 10 <sup>-4</sup>	2003
		262	D <sub>2</sub> <sup>16</sup> O	2.419700 × 10 <sup>-8</sup>	2015
		282	D <sub>2</sub> <sup>18</sup> O	4.852080 × 10 <sup>-11</sup>	2015
		272	D <sub>2</sub> <sup>17</sup> O	9.022841 × 10 <sup>-12</sup>	2019
CO <sub>2</sub>	2	626	<sup>16</sup> O <sup>12</sup> C <sup>16</sup> O	0.9842	2003
		636	<sup>16</sup> O <sup>13</sup> C <sup>16</sup> O	1.106 x 10 <sup>-2</sup>	2003
		628	<sup>16</sup> O <sup>12</sup> C <sup>18</sup> O	3.947 x 10 <sup>-3</sup>	2003
		627	<sup>16</sup> O <sup>12</sup> C <sup>17</sup> O	7.339 x 10 <sup>-4</sup>	2003
		638	<sup>16</sup> O <sup>13</sup> C <sup>18</sup> O	4.434 x 10 <sup>-5</sup>	2003
		637	<sup>16</sup> O <sup>13</sup> C <sup>17</sup> O	8.246 x 10 <sup>-6</sup>	2003
		828	<sup>18</sup> O <sup>12</sup> C <sup>18</sup> O	3.957 x 10 <sup>-6</sup>	2003
		728	<sup>17</sup> O <sup>12</sup> C <sup>18</sup> O	1.472 x 10 <sup>-6</sup>	2011
		727	<sup>17</sup> O <sup>12</sup> C <sup>17</sup> O	1.430 x 10 <sup>-7</sup>	2015
		838	<sup>18</sup> O <sup>13</sup> C <sup>18</sup> O	4.446 x 10 <sup>-8</sup>	2003
		738	<sup>17</sup> O <sup>13</sup> C <sup>18</sup> O	1.654 x 10 <sup>-8</sup>	2015
		737	<sup>17</sup> O <sup>13</sup> C <sup>17</sup> O	1.55 x 10 <sup>-9</sup>	2015
O <sub>3</sub>	3	666	<sup>16</sup> O <sup>16</sup> O <sup>16</sup> O	0.992901	2003
		668	<sup>16</sup> O <sup>16</sup> O <sup>18</sup> O	0.003982	2003
		686	<sup>16</sup> O <sup>18</sup> O <sup>16</sup> O	0.001991	2003
		667	<sup>16</sup> O <sup>16</sup> O <sup>17</sup> O	7.404750 × 10 <sup>-4</sup>	2003
		676	<sup>16</sup> O <sup>17</sup> O <sup>16</sup> O	3.702370 × 10 <sup>-4</sup>	2003
N <sub>2</sub> O	4	446	<sup>14</sup> N <sup>14</sup> N <sup>16</sup> O	0.990333	2003
		448	<sup>14</sup> N <sup>14</sup> N <sup>18</sup> O	0.001986	2003
		456	<sup>14</sup> N <sup>15</sup> N <sup>16</sup> O	0.003641	2003
		546	<sup>15</sup> N <sup>14</sup> N <sup>16</sup> O	0.003641	2003
		458	<sup>14</sup> N <sup>14</sup> N <sup>18</sup> O	7.300807 × 10 <sup>-4</sup>	2011

Molecule	Molecule Code	I Code	Formula	Abundance	Since GEISA version
		548	$^{15}\text{N}^{14}\text{N}^{18}\text{O}$	$7.300807 \times 10^{-4}$	2011
		447	$^{14}\text{N}^{14}\text{N}^{17}\text{O}$	$3.692800 \times 10^{-4}$	2003
		556	$^{15}\text{N}^{15}\text{N}^{16}\text{O}$	$1.338574 \times 10^{-5}$	2011
CO	5	26	$^{12}\text{C}^{16}\text{O}$	0.986544	2003
		36	$^{13}\text{C}^{16}\text{O}$	0.011084	2003
		28	$^{12}\text{C}^{18}\text{O}$	0.001978	2003
		27	$^{12}\text{C}^{17}\text{O}$	$3.678670 \times 10^{-4}$	2003
		38	$^{13}\text{C}^{18}\text{O}$	$2.222500 \times 10^{-5}$	2003
		37	$^{13}\text{C}^{17}\text{O}$	$4.132920 \times 10^{-6}$	2003
CH <sub>4</sub>	6	211	$^{12}\text{CH}_4$	0.988274	2003
		311	$^{13}\text{CH}_4$	0.011103	2003
O <sub>2</sub>	7	66	$^{16}\text{O}^{16}\text{O}$	0.995262	2003
		68	$^{16}\text{O}^{18}\text{O}$	0.003991	2003
		67	$^{16}\text{O}^{17}\text{O}$	$7.422350 \times 10^{-4}$	2003
NO	8	46	$^{14}\text{N}^{16}\text{O}$	0.993974	2003
		56	$^{15}\text{N}^{16}\text{O}$	0.003654	2003
		48	$^{14}\text{N}^{18}\text{O}$	0.001993	2003
SO <sub>2</sub>	9	626	$^{32}\text{S}^{16}\text{O}_2$	0.945678	2003
		646	$^{34}\text{S}^{16}\text{O}_2$	0.041950	2003
NO <sub>2</sub>	10	646	$^{14}\text{N}^{16}\text{O}_2$	0.991616	2003
		656	$^{15}\text{N}^{16}\text{O}_2$		2019
NH <sub>3</sub>	11	411	$^{14}\text{NH}_3$	0.995872	2003
		511	$^{15}\text{NH}_3$	0.003661	2003
PH <sub>3</sub>	12	131	$^{31}\text{PH}_3$	0.999533	2003
HNO <sub>3</sub>	13	146	$\text{H}^{14}\text{N}^{16}\text{O}$	0.989110	2003
		156	$\text{H}^{15}\text{N}^{16}\text{O}$	0.003636	2011
OH	14	61	$^{16}\text{OH}$	0.997473	2003
		81	$^{18}\text{OH}$	0.002000	2003
		62	$^{16}\text{OD}$	$1.553710 \times 10^{-4}$	2003
HF	15	19	$\text{H}^{19}\text{F}$	0.999844	2003
		29	$\text{D}^{19}\text{F}$	$1.557410 \times 10^{-4}$	2019
HCl	16	15	$\text{H}^{35}\text{Cl}$	0.757587	2003
		17	$\text{H}^{37}\text{Cl}$	0.242257	2003
		25	$\text{D}^{35}\text{Cl}$	$1.180050 \times 10^{-4}$	2019
		27	$\text{D}^{37}\text{Cl}$	$3.773500 \times 10^{-5}$	2019
HBr	17	19	$\text{H}^{79}\text{Br}$	0.506781	2003
		11	$\text{H}^{81}\text{Br}$	0.493063	2003
		29	$\text{D}^{79}\text{Br}$	$7.893840 \times 10^{-5}$	2019
		21	$\text{D}^{81}\text{Br}$	$7.680160 \times 10^{-5}$	2019
HI	18	17	$\text{H}^{127}\text{I}$	0.999844	2003
		27	$\text{D}^{127}\text{I}$	$1.557410 \times 10^{-4}$	2019
ClO	19	56	$^{35}\text{Cl}^{16}\text{O}$	0.755908	2003

Molecule	Molecule Code	I Code	Formula	Abundance	Since GEISA version
		76	$^{37}\text{Cl}^{16}\text{O}$	0.241720	2003
OCS	20	622	$^{16}\text{O}^{12}\text{C}^{32}\text{S}$	0.937395	2003
		624	$^{16}\text{O}^{12}\text{C}^{34}\text{S}$	0.041583	2003
		632	$^{16}\text{O}^{13}\text{C}^{32}\text{S}$	0.010531	2003
		623	$^{16}\text{O}^{12}\text{C}^{33}\text{S}$	0.007399	2003
		822	$^{18}\text{O}^{12}\text{C}^{32}\text{S}$	0.001880	2003
		634	$^{16}\text{O}^{13}\text{C}^{34}\text{S}$	$4.671757 \times 10^{-4}$	2003
H <sub>2</sub> CO	21	126	$\text{H}_2^{12}\text{C}^{16}\text{O}$	0.986237	2003
		136	$\text{H}_2^{13}\text{C}^{16}\text{O}$	0.011080	2003
		128	$\text{H}_2^{12}\text{C}^{18}\text{O}$	0.001978	2003
C <sub>2</sub> H <sub>6</sub>	22	226	$^{12}\text{C}_2\text{H}_6$	0.976990	2003
		236	$^{12}\text{C}^{13}\text{CH}_6$	0.021953	2003
CH <sub>3</sub> D	23	212	$^{12}\text{CH}_3\text{D}$	$6.157510 \times 10^{-4}$	2003
		312	$^{13}\text{CH}_3\text{D}$	$6.917850 \times 10^{-6}$	2011
C <sub>2</sub> H <sub>2</sub>	24	221	$^{12}\text{C}_2\text{H}_2$	0.977599	2003
		231	$^{12}\text{C}^{13}\text{CH}_2$	0.021966	2003
C <sub>2</sub> H <sub>4</sub>	25	211	$^{12}\text{C}_2\text{H}_4$	0.977294	2003
		311	$^{12}\text{C}^{13}\text{CH}_4$	0.021959	2003
GeH <sub>4</sub>	26	411	$^{74}\text{GeH}_4$	1.000000	2003
		211	$^{72}\text{GeH}_4$	1.000000	2019
		011	$^{70}\text{GeH}_4$	1.000000	2019
		311	$^{73}\text{GeH}_4$	1.000000	2019
		611	$^{76}\text{GeH}_4$	1.000000	2019
HCN	27	124	$\text{H}^{12}\text{C}^{14}\text{N}$	0.985114	2003
		134	$\text{H}^{13}\text{C}^{14}\text{N}$	0.011068	2003
		125	$\text{H}^{12}\text{C}^{15}\text{N}$	0.003622	2003
		224	$\text{D}^{12}\text{C}^{14}\text{N}$	$1.534456 \times 10^{-4}$	2011
C <sub>3</sub> H <sub>8</sub>	28	221	$^{12}\text{C}_3\text{H}_8$	0.965835	2003
C <sub>2</sub> N <sub>2</sub>	29	224	$^{12}\text{C}_2^{14}\text{N}_2$	0.970752	2003
C <sub>4</sub> H <sub>2</sub>	30	211	$^{12}\text{C}_4\text{H}_2$	0.955998	2003
HC <sub>3</sub> N	31	124	$\text{H}^{12}\text{C}_3^{14}\text{N}$	0.963346	2003
HOCl	32	165	$\text{H}^{16}\text{O}^{35}\text{Cl}$	0.755790	2003
		167	$\text{H}^{16}\text{O}^{37}\text{Cl}$	0.241683	2003
N <sub>2</sub>	33	44	$^{14}\text{N}^{14}\text{N}$	0.992687	2003
CH <sub>3</sub> Cl	34	215	$^{12}\text{CH}_3^{35}\text{Cl}$	0.748937	2003
		217	$^{12}\text{CH}_3^{37}\text{Cl}$	0.239491	2003
H <sub>2</sub> O <sub>2</sub>	35	166	$\text{H}_2^{16}\text{O}^{16}\text{O}$	0.994952	2003
H <sub>2</sub> S	36	121	$\text{H}_2^{32}\text{S}$	0.949884	2003
		141	$\text{H}_2^{34}\text{S}$	0.042137	2003
		131	$\text{H}_2^{33}\text{S}$	0.007498	2003
HCOOH	37	261	$\text{H}^{12}\text{C}^{16}\text{O}^{16}\text{OH}$	0.983898	2003
COF <sub>2</sub>	38	269	$^{12}\text{C}^{16}\text{O}^{19}\text{F}_2$	0.986544	2003

Molecule	Molecule Code	I Code	Formula	Abundance	Since GEISA version
SF <sub>6</sub>	39	29	<sup>32</sup> S <sup>19</sup> F <sub>6</sub>	0.950180	2003
C <sub>3</sub> H <sub>4</sub>	40	341	<sup>12</sup> C <sub>3</sub> H <sub>4</sub>	0.966587	2003
HO <sub>2</sub>	41	166	H <sup>16</sup> O <sub>2</sub>	0.995107	2003
ClONO <sub>2</sub>	42	564	<sup>15</sup> Cl <sup>16</sup> O <sup>14</sup> N <sup>16</sup> O <sub>2</sub>	0.749570	2003
		764	<sup>17</sup> Cl <sup>16</sup> O <sup>14</sup> N <sup>16</sup> O <sub>2</sub>	0.239694	2003
CH <sub>3</sub> Br	43	79	<sup>12</sup> CH <sub>3</sub> <sup>79</sup> Br	0.500995	2011
		81	<sup>12</sup> CH <sub>3</sub> <sup>81</sup> Br	0.487433	2011
CH <sub>3</sub> OH	44	216	<sup>12</sup> CH <sub>3</sub> <sup>16</sup> OH	0.985930	2011
NO <sup>+</sup>	45	46	<sup>14</sup> N <sup>16</sup> O <sup>+</sup>	0.993974	2011
HNC	46	142	H <sup>14</sup> N <sup>12</sup> C	0.985114	2011
C <sub>6</sub> H <sub>6</sub>	47	266	<sup>12</sup> C <sub>6</sub> H <sub>6</sub>	0.934291	2011
C <sub>2</sub> HD	48	122	<sup>12</sup> C <sub>2</sub> HD	3.045500 × 10 <sup>-4</sup>	2011
CF <sub>4</sub>	49	291	<sup>12</sup> C <sup>19</sup> F <sub>4</sub>	0.988890	2011
CH <sub>3</sub> CN	50	234	<sup>12</sup> CH <sub>3</sub> <sup>12</sup> C <sup>14</sup> N	0.973866	2011
HDO	51	162	H <sup>16</sup> OD	3.106930 × 10 <sup>-4</sup>	2015
		182	H <sup>18</sup> OD	6.230030 × 10 <sup>-7</sup>	2015
		172	H <sup>17</sup> OD	1.158530 × 10 <sup>-7</sup>	2015
SO <sub>3</sub>	52	26	<sup>32</sup> S <sup>16</sup> O <sub>3</sub>	0.943400	2015
HONO	53	646	H <sup>16</sup> O <sup>14</sup> N <sup>16</sup> O	0.993710	2019
COFCl	54	265	<sup>12</sup> C <sup>16</sup> O <sup>F35</sup> Cl	1.000000	2019
		267	<sup>12</sup> C <sup>16</sup> O <sup>F37</sup> Cl	1.000000	2019
CH <sub>3</sub> I	55	217	<sup>12</sup> CH <sub>3</sub> <sup>127</sup> I	1.000000	2019
CH <sub>3</sub> F	56	219	<sup>12</sup> CH <sub>3</sub> <sup>19</sup> F	1.000000	2019
RuO <sub>4</sub>	57	102	<sup>102</sup> Ru <sup>16</sup> O <sub>4</sub>	1.000000	2019
		104	<sup>104</sup> Ru <sup>16</sup> O <sub>4</sub>	1.000000	2019
		101	<sup>101</sup> Ru <sup>16</sup> O <sub>4</sub>	1.000000	2019
		99	<sup>99</sup> Ru <sup>16</sup> O <sub>4</sub>	1.000000	2019
		100	<sup>100</sup> Ru <sup>16</sup> O <sub>4</sub>	1.000000	2019
		97	<sup>97</sup> Ru <sup>16</sup> O <sub>4</sub>	1.000000	2019
		98	<sup>98</sup> Ru <sup>16</sup> O <sub>4</sub>	1.000000	2019
		106	<sup>106</sup> Ru <sup>16</sup> O <sub>4</sub>	1.000000	2019
		103	<sup>103</sup> Ru <sup>16</sup> O <sub>4</sub>	1.000000	2019
H <sub>2</sub> C <sub>3</sub> H <sub>2</sub>	58	121	H <sub>2</sub> <sup>12</sup> C <sub>3</sub> H <sub>2</sub>	1.000000	2019