

В. Г. Казаков¹, А. С. Яценко², В. В. Казаков¹

¹ Новосибирский государственный университет
ул. Пирогова, 2, Новосибирск, 630090, Россия

² Институт автоматики и электрометрии СО РАН
пр. Акад. Коптюга, 1, Новосибирск, 630090, Россия

E-mail: kazakov@phys.nsu.ru

ИНФОРМАЦИОННАЯ СИСТЕМА «ЭЛЕКТРОННАЯ СТРУКТУРА АТОМОВ»: ОСНОВНЫЕ ВОЗМОЖНОСТИ И ОСОБЕННОСТИ*

Описывается информационная система «электронная структура атомов» по спектральным данным атомных систем, база данных которой является одной из крупнейших в мире. Кроме представления данных в табличной форме, информационная система реализует уникальную возможность визуализации спектральных данных в виде автоматически генерируемых диаграмм. Информационная система опубликована в открытом доступе в сети Интернет.

Ключевые слова: информационные системы, базы данных, атомная спектроскопия, визуализация, диаграммы Гротриана, нейтральные атомы, ионы.

Введение

Анализ информации об оптических спектрах атомных систем занимает ключевое место в исследованиях в целом ряде научных направлений фундаментальной физики и прикладных областях. Так как в природе существуют сотни атомов и ионов с сотнями и тысячами уровней и разрешенных переходов, то речь идет об информационном массиве объемом в сотни тысяч записей, организация эффективной работы исследователя с которым является сложной задачей. С 1928 г. [1] существуют два способа организации такой информации для работы исследователей – табличные и графические представления в виде диаграмм Гротриана.

В настоящее время наиболее эффективным способом представления спектральной

информации в табличной форме реализуются с помощью информационных систем (ИС), основанных на спектральных базах данных. Такие решения обеспечивают высокую актуальность за счет оперативного ввода результатов последних исследований, предоставляют эффективные механизмы работы с данными, например фильтрации и сортировки, а публикация всех наиболее интересных систем в Интернете с обеспечением к ним открытого доступа открывает широкие возможности их применения.

Сегодня каждая технически развитая страна поддерживает по крайней мере одну такую ИС по атомным спектрам. Так, в США национальным институтом стандартов и технологий (NIST) поддерживается система NIST Atomic Spectral Database (NIST ASD)¹. Аналогичны ей системы NIFS

* Работа выполнена при финансовой поддержке ФЦП «Научные и научно-педагогические кадры инновационной России» на 2009–2012 гг. и Российского фонда фундаментальных исследований (проект № 08-07-0306-а).

¹ *Ralchenko Yu., Kramida A. E., Reader J., and NIST ASD Team / National Institute of Standards and Technology, Gaithersburg, MD, 2008. NIST Atomic Spectra Database (version 3.1.5). URL: <http://physics.nist.gov/asd3>*

(поддерживается Национальным институтом физики, Япония)², AMDIS (Австрийский институт атомной энергии)³, VALD (Австрийский университет)⁴, TOPbase (поддерживают исследовательские группы Франции, Германии, Англии США и Венесуэлы)⁵ и др. Каждая из этих систем имеет обширную базу данных по спектрам атомов и / или ионов.

Другим типом представления спектральных данных служат визуальные представления атомных спектров, на сегодняшний день традиционно реализуемые в виде диаграмм Гротриана [1]. Такие представления незаменимы для общего анализа электронной структуры атомных систем. Построение диаграмм Гротриана являлось сложной интеллектуальной задачей, решение которой до последнего времени было возможно только для квалифицированных специалистов и осуществлялось «вручную». Поскольку построение диаграмм – процесс трудоемкий, требующий большого количества времени квалифицированного специалиста, то ощущался их постоянный дефицит. До последнего времени основным путем публикации диаграмм оставались печатные издания, а большинство диаграмм, которые можно было найти в Интернете, являлись сканированными копиями печатных изданий. Например, все диаграммы из книги [2] были представлены на сайте NASA/IPAC⁶.

В последние годы делались попытки осуществлять построение диаграмм Гротриана автоматически по спектральным данным атомных систем. В настоящее время существуют две ИС по спектрам, которые обеспечивают и табличное представление данных и их визуализацию в виде диаграмм Гротриана. Одной такой системой является уже упоминавшаяся система ASD NIST⁷,

другой – ИС «Электронная структура атомов» (ЭСА), являющаяся предметом данной статьи. Хотя в различных изданиях описывались многие аспекты архитектуры и функциональности данной системы⁸, некоторые стороны ее развития, особенно связанные с последними изменениями, остались не описанными. В данной работе делается попытка устранить наиболее важные из этих пробелов.

Архитектура информационной системы «Электронная структура атомов»

Первая версия ИС ЭСА была опубликована в Интернете в 2005 г. К 2008 г система охватывала все нейтральные атомы и могла автоматически строить для них диаграммы Гротриана [3; 4], а к 2011 г. база данных системы пополнилась однократными ионами.

Система построена в классической трехуровневой архитектуре баз данных. В качестве серверного уровня используется SQL сервер в реализации MS SQL. Промежуточный уровень реализуется Web сервером (Apache) с комплектом PHP скриптов. Клиентский уровень представлен стандартным Web клиентом, на котором выполняются динамические HTML документы. Для представления графики Web клиент расширяется соответствующими программными расширениями. В текущей реализации интерфейс системы оптимизирован для Web браузера Microsoft Internet Explorer (v6.0+) с установленным программным модулем для просмотра графических SVG файлов Adobe SVG viewer (v 3.0.3).

Серверный уровень используется для хранения, выборки и подготовки данных. Для этого реализована база данных спектральной информации. Промежуточный уровень реализует интерфейс ИС. На этом уровне, по требованиям пользователя, формируются запросы к базе данных и на основе полученной информации осуществляется формирование документов с данными и отправка их пользователю. Клиентский уро-

² National Institute for Fusion Science. URL: <http://www.nifs.ac.jp/index.html>

³ IAEA AMDIS ALADDIN Database. URL: <http://www-amdis.iaea.org/ALADDIN/>

⁴ VALD WWW interface. URL: <http://vald.inasan.ru/~vald/php/vald.php?docpage=reqshowlin.html>

⁵ OP TOPbase. URL: <http://cdsweb.u-strasbg.fr/topbase/topbase.html/>

⁶ NASA/IPAC Extragalactic Database. URL: <http://nedwww.ipac.caltech.edu/>

⁷ Ralchenko Yu., Kramida A. E., Reader J., and NIST ASD Team / National Institute of Standards and Technol-

ogy, Gaithersburg, MD, 2008. NIST Atomic Spectra Database (version 3.1.5). URL: <http://physics.nist.gov/asd3>

⁸ Информационная система «Электронная структура атомов». URL: <http://grotrian.nsu.ru/>

Сравнение параметров баз данных информационных систем NIST ASD и ИС ЭСА
(по нейтральным атомам и однократным ионам)*

Сравниваемый параметр	ASD NIST		ИС ЭСА	
Число элементов, информация по которым есть в базе данных				
	Атомы	Ионы	Атомы	Ионы
Всего описано	99	93	112	102
Есть информация по уровням	64	60	112	102
Есть информация по переходам	101	93	102	94
Число уровней				
Всего	24 000	14 500	42 400	21 200
Число переходов				
Всего	55 500	32 700	84 200	39 600
Возможности автоматического построения диаграмм Гротриана				
Отбор размещаемых уровней	имеется	имеется	имеется	имеется
Отбор размещаемых переходов	имеется	имеется	имеется	имеется
Число элементов для которых диаграмма строится, в том числе с размещением переходов	84	80	104	100
	58	96	98	95

* Таблица составлена по: [1] и электронному ресурсу <http://grotrian.nsu.ru/>

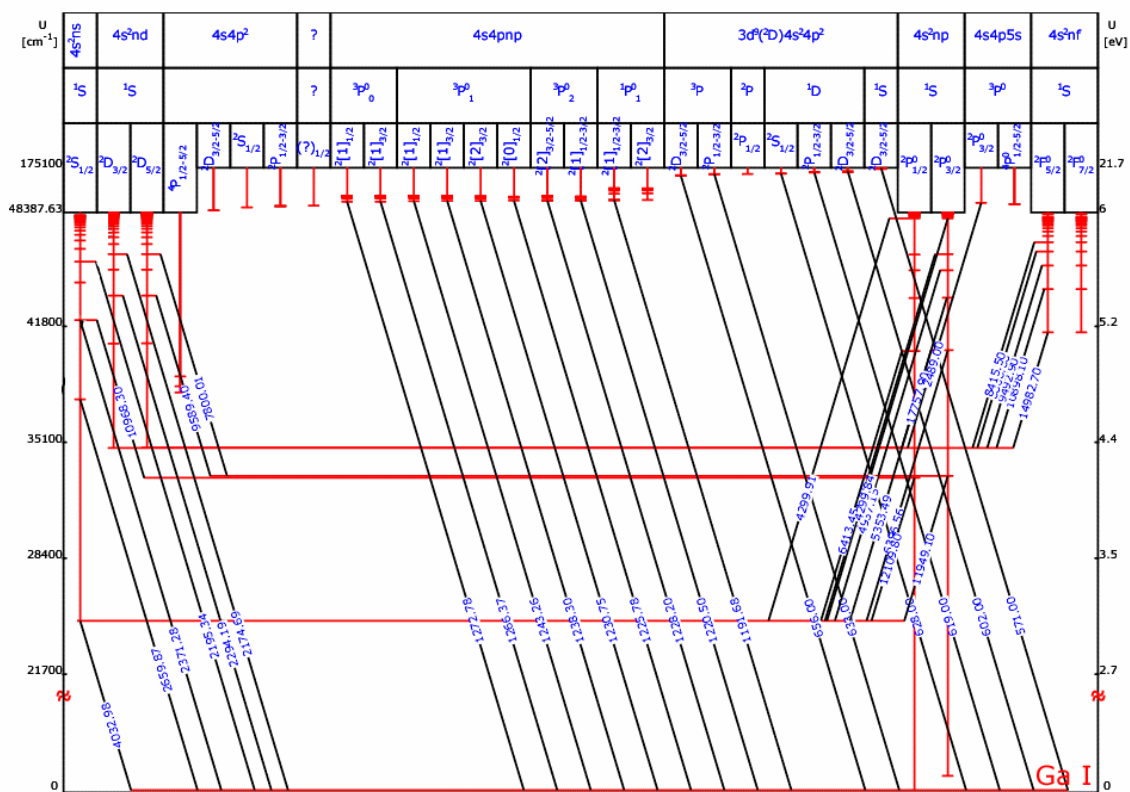


Рис. 1. Диаграмма Гротриана атома Ga I, автоматически построенная ИС ЭСА

вень осуществляет представление переданных ему документов, реализуя заложенную в них интерактивность.

База данных информационной системы

В настоящее время база данных системы включает около 200 000 записей по уровням энергии и радиационным переходам нейтральных атомов и однократных ионов, содержащих широкий перечень фиксируемых параметров. Для уровней это электронная конфигурация, энергия, время жизни. Для переходов – энергия перехода, длина волны, сила осциллятора, интенсивность, вероятность перехода, сечения возбуждения, а также ссылки на образующие переход уровни. В базе данных представлены все элементы периодической таблицы. Основными особенностями базы данных являются большая по сравнению с аналогами полнота представления трансурановых и редкоземельных элементов с большим числом Z , а также то, что все введенные в базу данных уровни и переходы классифицированы.

Ниже приведено сравнение параметров ИС ЭСА с ASD NIST, база данных которой является одной из наиболее полных (см. таблицу).

Встроенные средства построения диаграмм Гротриана

ИС ЭСА обеспечивает возможность автоматического построения диаграмм Гротриана для всех атомных систем, спектральные данные о которых имеются в БД. Общий вид диаграмм Гротриана, автоматически генерируемых ИС ЭСА, а также алгоритм их построения кратко рассмотрены в [3; 4]. На рис. 1 представлена диаграмма для атома галлия Ga I.

Алгоритм размещения данных на диаграмме несколько отличается от наиболее употребительного (и применяемого в ASD). Заголовок диаграммы содержит три строки, ячейки которых задают столбцы для размещения каждого из радиационных уровней. Первая строка задает конфигурации состояний, вторая и третья – атомные остатки и термы соответственно. Уровни изображаются короткими горизонтальными отрезками, размещаемыми каждый в соответст-

вующем столбце и на высоте, соответствующей энергии уровня согласно разметки оси ординат.

На диаграмме важно отобразить резонансные линии (переходы с основного состояния) и линии переходов с этих возбужденных состояний. Также необходимо учитывать длину волны отображаемого перехода. В первую очередь надо отобразить переходы с длиной волны из видимой и ближней ИК областей спектра как наиболее доступные исследователям. Алгоритм показан на рис. 2.

Такая техника построения диаграммы Гротриана позволяет при том же количестве размещаемой информации существенно улучшить читаемость диаграммы за счет исключения скоплений линий в одной точке и сокращения их пересечений.

Для сравнения на рис. 3 приведена первоначальная диаграмма для того же элемента из NIST USA. На ней размещены все переходы, что делает диаграмму совершенно нечитаемой.

Главными особенностями диаграмм Гротриана, генерируемых ИС ЭСА, являются следующие. Во-первых, при построении диаграммы удалось автоматически осуществлять приемлемый отбор переходов для размещения на диаграмме. Во-вторых, диаграммы Гротриана масштабируемы и могут размещаться на полотне или экране любого размера, гибко оптимизируя количество и состав выводимой информации в зависимости от текущих условий. Векторный формат графики позволяет диаграмме одинаково четко прорисовываться на больших и маленьких экранах и других устройствах вывода. В-третьих, у пользователя имеется возможность отбора размещаемых переходов в заданной области длин волн и уровней в заданной области энергий. В-четвертых, в диаграммах, генерируемых ИС ЭСА, возможно размещение неклассифицированных уровней и переходов между ними.

Таким образом, можно констатировать, что развитие в ИС по уровням и радиационным переходам атомов и их ионов средств автоматического построения диаграмм Гротриана является актуальной и решаемой задачей обеспечения широкого спектра фундаментальных и прикладных научных исследований. Особенности построения системы ИС ЭСА, и особенно ранее не опи-

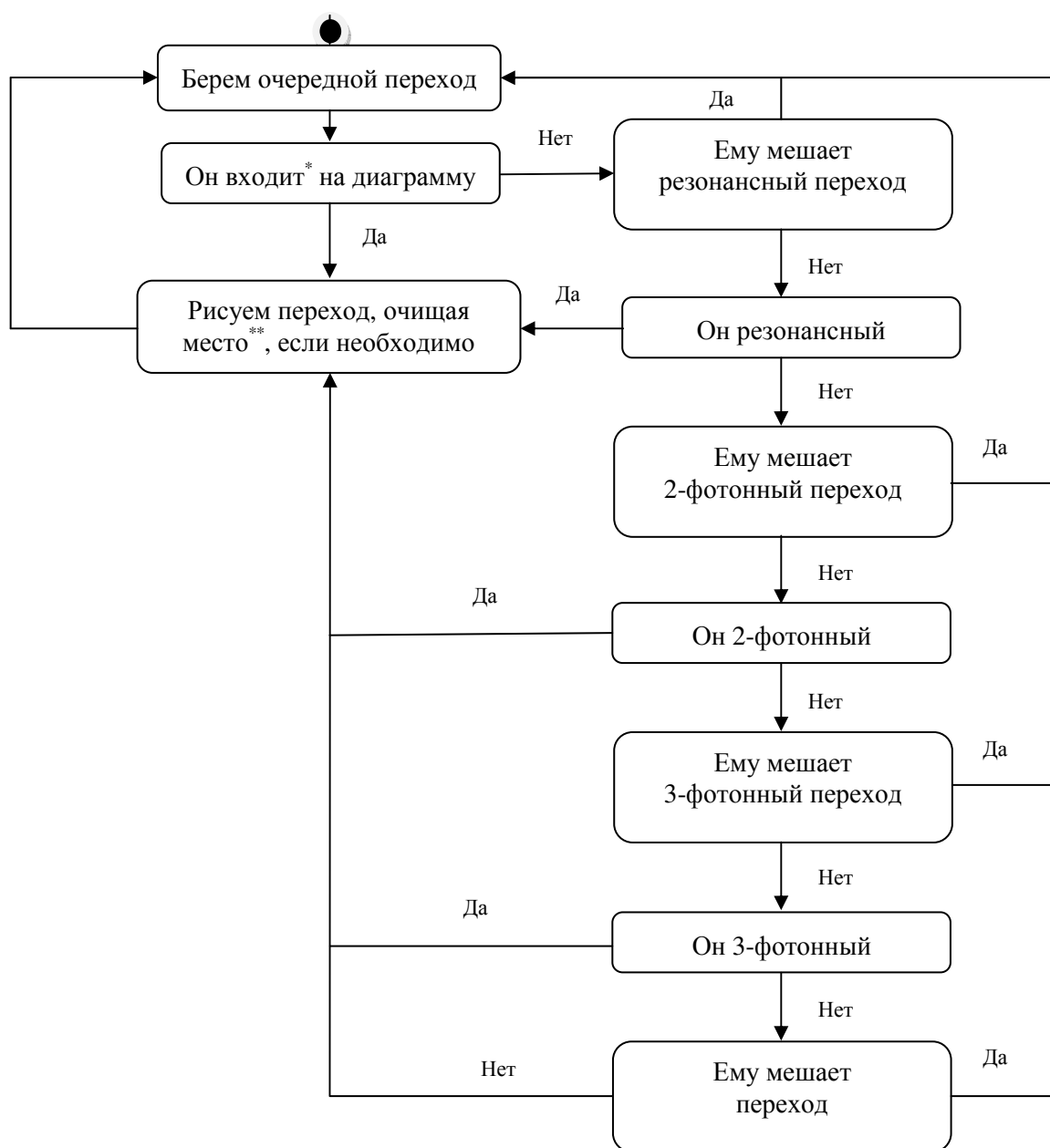


Рис. 2. Алгоритм отбора переходов в ИС ЭСА

(* – переход входит на диаграмму, если он не мешает отображению других переходов, т. е. не находится слишком близко и параллелен ему, или не пересекается под малым углом; ** – т. е. убирая с диаграммы переход, который мешает отображению)

санная техника автоматической генерации диаграмм Гротриана, примененная в ней, может представлять интерес для решения подобных задач в области создания про-

граммных средств для атомной спектроскопии, а также для дальнейших исследований по визуализации атомных спектров. Кроме того, проблема автоматического построения

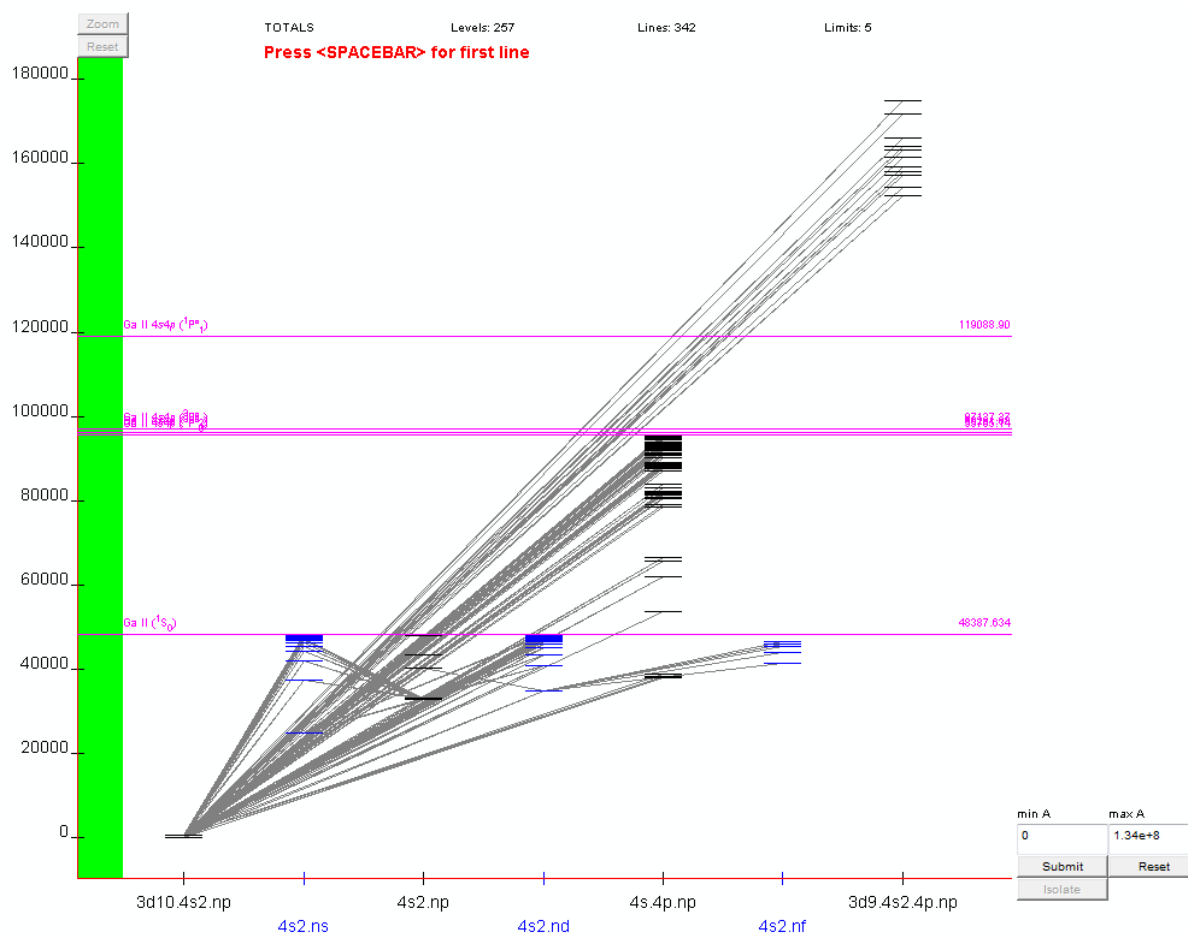


Рис. 3. Диаграмма Гротриана атома Ga I, автоматически построенная ASD NIST

диаграмм Гротриана может быть интересна в качестве задачи когнитивной компьютерной графики.

Заключение

Таким образом, к настоящему времени в Интернете опубликована и находится в открытом доступе отечественная ИС ЭСА по атомным спектральным данным. База данных системы содержит обширный банк данных об энергетических уровнях и радиационных переходах нейтральных атомов и однократных ионов, не уступающий лучшим мировым аналогам. Кроме того, ИС ЭСА обладает уникальной функциональностью построения диаграмм Гротриана с

возможностью автоматического отбора линий на основе интеллектуального анализа данных и строит их динамически по запросам пользователей.

Представленная ИС ЭСА будет полезна студентам, аспирантам, преподавателям и научным работникам, занимающимся вопросами атомной спектроскопии, диагностики плазмы, квантовой электроники и астрофизики, а также в учебном процессе.

Список литературы

1. *Grotrian W.* Graphische Darstellung der Spektren von Atomen und Ionen mit ein, zwei und drei Valenzelektronen // J. Springer. 1928. Bd. 2.

2. Moore Ch., Merrill P. Partial Grotrian Diagrams of Astrophysical Interest. Washington, 1968.

3. Казаков В. Г., Тюменцев А. С., Яценко А. С. Информационная система «Электронная структура атомов» с динамическим построением графического представления спектральных данных // Автометрия. 2005. Т. 41, № 6. С. 115–123.

4. Казаков В. Г., Раутиан С. Г., Яценко А. С. Компьютерное представление электронных оболочек атомов // Оптика и спектроскопия. 2008. Т. 106, № 1. С. 53–58.

Материал поступил в редколлегию 22.06.2011

V. G. Kazakov, A. S. Yatsenko, V. V. Kazakov

INFORMATION SYSTEM «ELECTRONIC STRUCTURE OF ATOMS»

The article describes information system «Electronic structure of atoms» on spectral data of atomic systems. In addition to reporting data in tabular form the information system implements a unique opportunity to visualize the spectral data in the form of automatically generated charts. Information System published on the Internet.

Keywords: information systems, databases, atomic spectroscopy, visualization, Grotrian diagrams, neutral atoms, ions.