



ИНФОРМАЦИОННАЯ СИСТЕМА ПО СПЕКТРОСКОПИИ "ЭЛЕКТРОННАЯ СТРУКТУРА АТОМОВ"

НИУ НГУ
ИАиЭ СО РАН



Современные информационные системы по атомной спектроскопии

- **ASD NIST** (США)
- **NIFS** (Япония), **KAERI AMO** (Корея)
- **VAMDC** (объединённый, европейский)
- **AMIDS** (Австрия) **CHIANITI** (Англия, США, Италия)
- **OPD, GARHYOR** (Франция)
- **COREX** (Швеция) **CamDB** (Китай)
- **SPECTR-W3** (г. Снежинск)
- **ИС ЭСА** (г. Новосибирск)

www.nist.gov/pml/data/asd.cfm

www.vamdc.org

www.grotrian.nsu.ru



Требования к современным информационным системам

- *Полнота* *Актуальность*
- *Целостность* *Достоверность*
- *Визуализация*

- **Источники заполнения**

- *Печатные издания* *БД других систем*



Тенденции развития информационных систем

- Алгоритмы поддержки принятия решений
- Средства научной графики
- Общие стандарты представления данных - XSAMS (XML Schema for Atoms, Molecules and Solids)

www-amdis.iaea.org/xsams/index.html



ИС «Электронная структура атомов»

- **242515 записей** по энергетическим уровням и радиационным переходам нейтральных, однократных, двухкратных и трехкратных ионов атомных систем, содержащих широкий перечень фиксируемых параметров.
- **для уровней (83825)**: полная электронная конфигурация, энергия, время жизни.
- **для переходов (158690)**: энергии перехода, длина волны, сила осциллятора, интенсивность, вероятность перехода, сечения возбуждения.
- **большая**, по сравнению с аналогами полнота представления трансурановых и редкоземельных элементов с большим числом Z .



ИС «Электронная структура атомов»

Уровни атома **Na** ионы **I** **II**

Показать 25 записей на странице

Поиск в таблице

Экспорт в Excel

Тип конфигурации	Конфигурация	Терм	J	Энергия (см ⁻¹) ↑	Время жизни (нс)	Источник
2p ⁶ ns	2p ⁶ 3s	² S	1/2	0		
2p ⁶ np	2p ⁶ 3p	² P ⁰	1/2	16956.17	16.4	
2p ⁶ np	2p ⁶ 3p	² P ⁰	3/2	16973.37	16.4	
2p ⁶ ns	2p ⁶ 4s	² S	1/2	25739.99	38.2	
2p ⁶ nd	2p ⁶ 3d	² D	5/2	29172.84	19.7	
2p ⁶ nd	2p ⁶ 3d	² D	3/2	29172.89	19.7	
2p ⁶ np	2p ⁶ 4p	² P ⁰	1/2	30266.99	10.8	
2p ⁶ np	2p ⁶ 4p	² P ⁰	3/2	30272.58	10.8	
2p ⁶ ns	2p ⁶ 5s	² S	1/2	33200.68	77	
2p ⁶ nd	2p ⁶ 4d	² D	5/2	34548.73	53	
2p ⁶ nd	2p ⁶ 4d	² D	3/2	34548.77	53	
2p ⁶ nf	2p ⁶ 4f	² F ⁰	5/2	34586.92	71	
2p ⁶ nf	2p ⁶ 4f	² F ⁰	7/2	34586.92	71	
2p ⁶ np	2p ⁶ 5p	² P ⁰	1/2	35040.38	37	
2p ⁶ np	2p ⁶ 5p	² P ⁰	3/2	35042.85	37	
2p ⁶ ns	2p ⁶ 6s	² S	1/2	36372.62	148	
2p ⁶ nd	2p ⁶ 5d	² D	5/2	37036.75	110	
2p ⁶ nd	2p ⁶ 5d	² D	3/2	37036.77	110	
2p ⁶ nf	2p ⁶ 5f	² F ⁰	5/2	37057.65	136	
2p ⁶ nf	2p ⁶ 5f	² F ⁰	7/2	37057.65	136	
2p ⁶ ng	2p ⁶ 5g	² G	7/2	37059.54	235	
2p ⁶ ng	2p ⁶ 5g	² G	9/2	37059.54	235	
2p ⁶ np	2p ⁶ 6p	² P ⁰	1/2	37296.32	920	
2p ⁶ np	2p ⁶ 6p	² P ⁰	3/2	37297.61	920	
2p ⁶ ns	2p ⁶ 7s	² S	1/2	38012.04	260	

Записи с 1 до 25 из 758 записей



ИС «Электронная структура атомов»

Переходы атома **Ca** ионы **I** **II** **III**

Показать записей на странице

Поиск в таблице

Экспорт в Excel

Серия	Нижний Уровень	Верхний Уровень	Длина волны[Å] [↑]	Интенсивность	f_{ik}	A_{ki} [10 ⁶ сек ⁻¹]	Сечение возбуждения $Q_{\max} \cdot 10^{18}$, см ²	Источник
3p ⁶ 4s(2S)4p:3P ⁰ ₁ -3p ⁶ 4s(2S)nd:3D ₂	3p ⁶ 4s(2S)4p:3P ⁰ ₁	3p ⁶ 4s(2S)24d:3D ₂	2950.6		0.0009			
3p ⁶ 4s(2S)4p:3P ⁰ ₁ -3p ⁶ 4s(2S)nd:3D ₂	3p ⁶ 4s(2S)4p:3P ⁰ ₁	3p ⁶ 4s(2S)23d:3D ₂	2952.3		0.0009			
3p ⁶ 4s(2S)4p:3P ⁰ ₁ -3p ⁶ 4s(2S)nd:3D ₂	3p ⁶ 4s(2S)4p:3P ⁰ ₁	3p ⁶ 4s(2S)22d:3D ₂	2954.1		0.00106			
3p ⁶ 4s(2S)4p:3P ⁰ ₁ -3p ⁶ 4s(2S)nd:3D ₂	3p ⁶ 4s(2S)4p:3P ⁰ ₁	3p ⁶ 4s(2S)21d:3D ₂	2956.3		0.00112			
3p ⁶ 4s(2S)4p:3P ⁰ ₁ -3p ⁶ 4s(2S)nd:3D ₂	3p ⁶ 4s(2S)4p:3P ⁰ ₁	3p ⁶ 4s(2S)20d:3D ₂	2958.8		0.0012			
3p ⁶ 4s(2S)4p:3P ⁰ ₀ -3p ⁶ 3d ² :3P ₁	3p ⁶ 4s(2S)4p:3P ⁰ ₀	3p ⁶ 3d ² :3P ₁	2994.957	9		0.367		
3p ⁶ 4s(2S)4p:3P ⁰ ₁ -3p ⁶ 3d ² :3P ₂	3p ⁶ 4s(2S)4p:3P ⁰ ₁	3p ⁶ 3d ² :3P ₂	2997.316	8		0.241		
3p ⁶ 4s(2S)4p:3P ⁰ ₁ -3p ⁶ 3d ² :3P ₁	3p ⁶ 4s(2S)4p:3P ⁰ ₁	3p ⁶ 3d ² :3P ₁	2999.645	8		0.279		
3p ⁶ 4s(2S)4p:3P ⁰ ₁ -3p ⁶ 3d ² :3P ₀	3p ⁶ 4s(2S)4p:3P ⁰ ₁	3p ⁶ 3d ² :3P ₀	3000.863	9		1.58		
3p ⁶ 4s(2S)4p:3P ⁰ ₂ -3p ⁶ 3d ² :3P ₂	3p ⁶ 4s(2S)4p:3P ⁰ ₂	3p ⁶ 3d ² :3P ₂	3006.861	10		0.75		
3p ⁶ 4s(2S)4p:3P ⁰ ₂ -3p ⁶ 3d ² :3P ₁	3p ⁶ 4s(2S)4p:3P ⁰ ₂	3p ⁶ 3d ² :3P ₁	3009.21	9		0.43		
3p ⁶ 4s(2S)4p:3P ⁰ ₀ -3p ⁶ 4s(2S)ns:3S ₁	3p ⁶ 4s(2S)4p:3P ⁰ ₀	3p ⁶ 4s(2S)10s:3S ₁	3102.36		0.0008	0.0062		
3p ⁶ 4s(2S)4p:3P ⁰ ₁ -3p ⁶ 4s(2S)ns:3S ₁	3p ⁶ 4s(2S)4p:3P ⁰ ₁	3p ⁶ 4s(2S)10s:3S ₁	3107.39		0.0008	0.01		
3p ⁶ 4s(2S)4p:3P ⁰ ₂ -3p ⁶ 4s(2S)ns:3S ₁	3p ⁶ 4s(2S)4p:3P ⁰ ₂	3p ⁶ 4s(2S)10s:3S ₁	3117.65		0.0008	0.017		
3p ⁶ 4s(2S)4p:3P ⁰ ₀ -3p ⁶ 4s(2S)nd:3D ₁	3p ⁶ 4s(2S)4p:3P ⁰ ₀	3p ⁶ 4s(2S)8d:3D ₁	3136.019	5		0.041		
3p ⁶ 4s(2S)4p:3P ⁰ ₁ -3p ⁶ 4s(2S)nd:3D ₂	3p ⁶ 4s(2S)4p:3P ⁰ ₁	3p ⁶ 4s(2S)8d:3D ₂	3140.786	6		0.049		
3p ⁶ 4s(2S)4p:3P ⁰ ₁ -3p ⁶ 4s(2S)nd:3D ₁	3p ⁶ 4s(2S)4p:3P ⁰ ₁	3p ⁶ 4s(2S)8d:3D ₁	3141.159			0.03		
3p ⁶ 4s(2S)4p:3P ⁰ ₂ -3p ⁶ 4s(2S)nd:3D ₃	3p ⁶ 4s(2S)4p:3P ⁰ ₂	3p ⁶ 4s(2S)8d:3D ₃	3150.75	7		0.086	2.3	
3p ⁶ 4s(2S)4p:3P ⁰ ₂ -3p ⁶ 4s(2S)nd:3D ₂	3p ⁶ 4s(2S)4p:3P ⁰ ₂	3p ⁶ 4s(2S)8d:3D ₂	3151.27			0.018	2.3	
3p ⁶ 4s(2S)4p:3P ⁰ ₂ -3p ⁶ 4s(2S)nd:3D ₁	3p ⁶ 4s(2S)4p:3P ⁰ ₂	3p ⁶ 4s(2S)8d:3D ₁	3151.644			0.0022		
3p ⁶ 4s(2S)4p:3P ⁰ ₀ -3p ⁶ 4s(2S)ns:3S ₁	3p ⁶ 4s(2S)4p:3P ⁰ ₀	3p ⁶ 4s(2S)9s:3S ₁	3164.61		0.0015	0.0053		
3p ⁶ 4s(2S)4p:3P ⁰ ₁ -3p ⁶ 4s(2S)ns:3S ₁	3p ⁶ 4s(2S)4p:3P ⁰ ₁	3p ⁶ 4s(2S)9s:3S ₁	3169.84		0.0015	0.02		
3p ⁶ 4s(2S)4p:3P ⁰ ₂ -3p ⁶ 4s(2S)ns:3S ₁	3p ⁶ 4s(2S)4p:3P ⁰ ₂	3p ⁶ 4s(2S)9s:3S ₁	3180.52	5	0.0015	0.029		

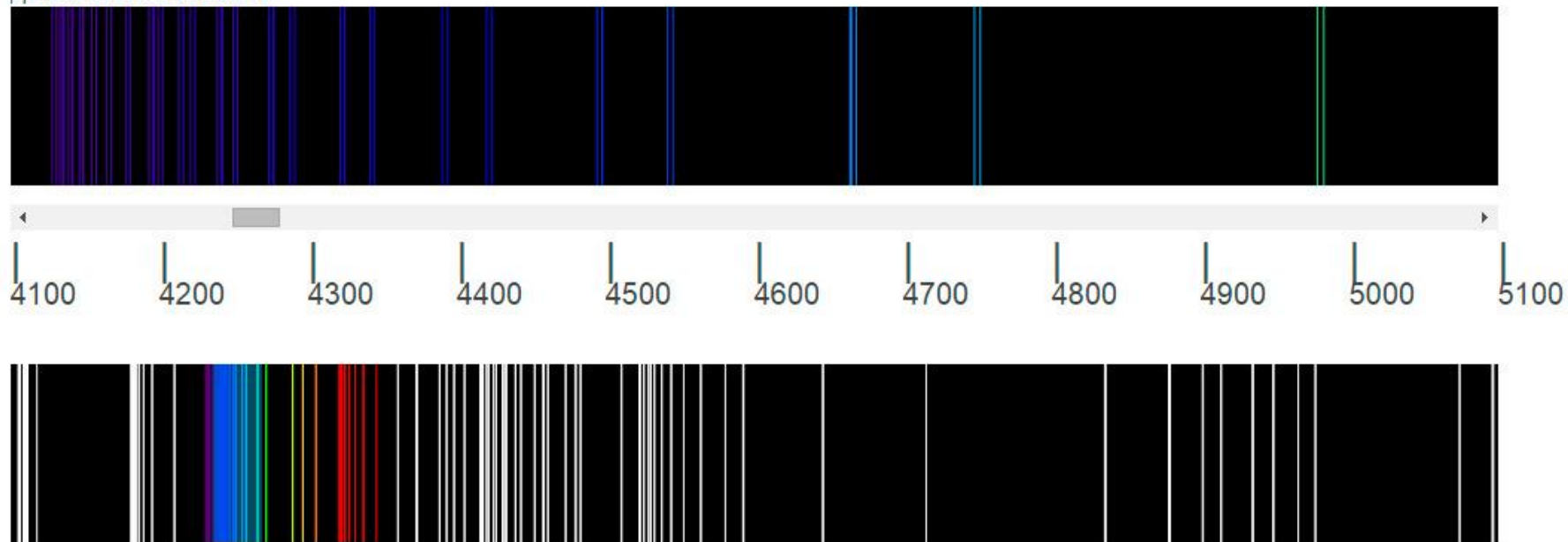


Визуализация спектров ИС «ЭСА»

Спектр излучения Na

Минимум 0	Максимум 30000	Масштаб 1 10 100	Применить
Экспорт в XSAMS	Сравнить	x2 x5	

Длина волны: 4664.811





Сравнение спектрограмм

а - экспериментально полученная

б - эмулированная

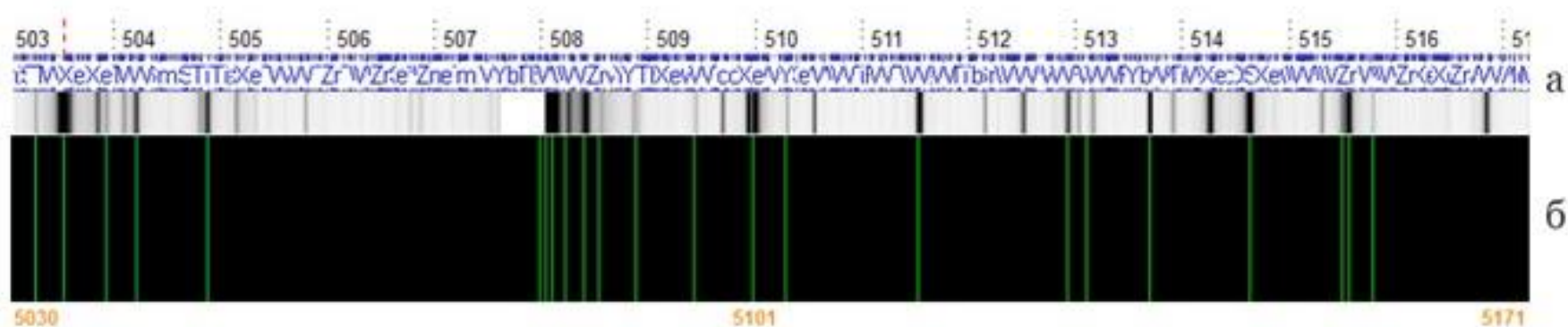




Диаграмма Гротриана ASD NIST

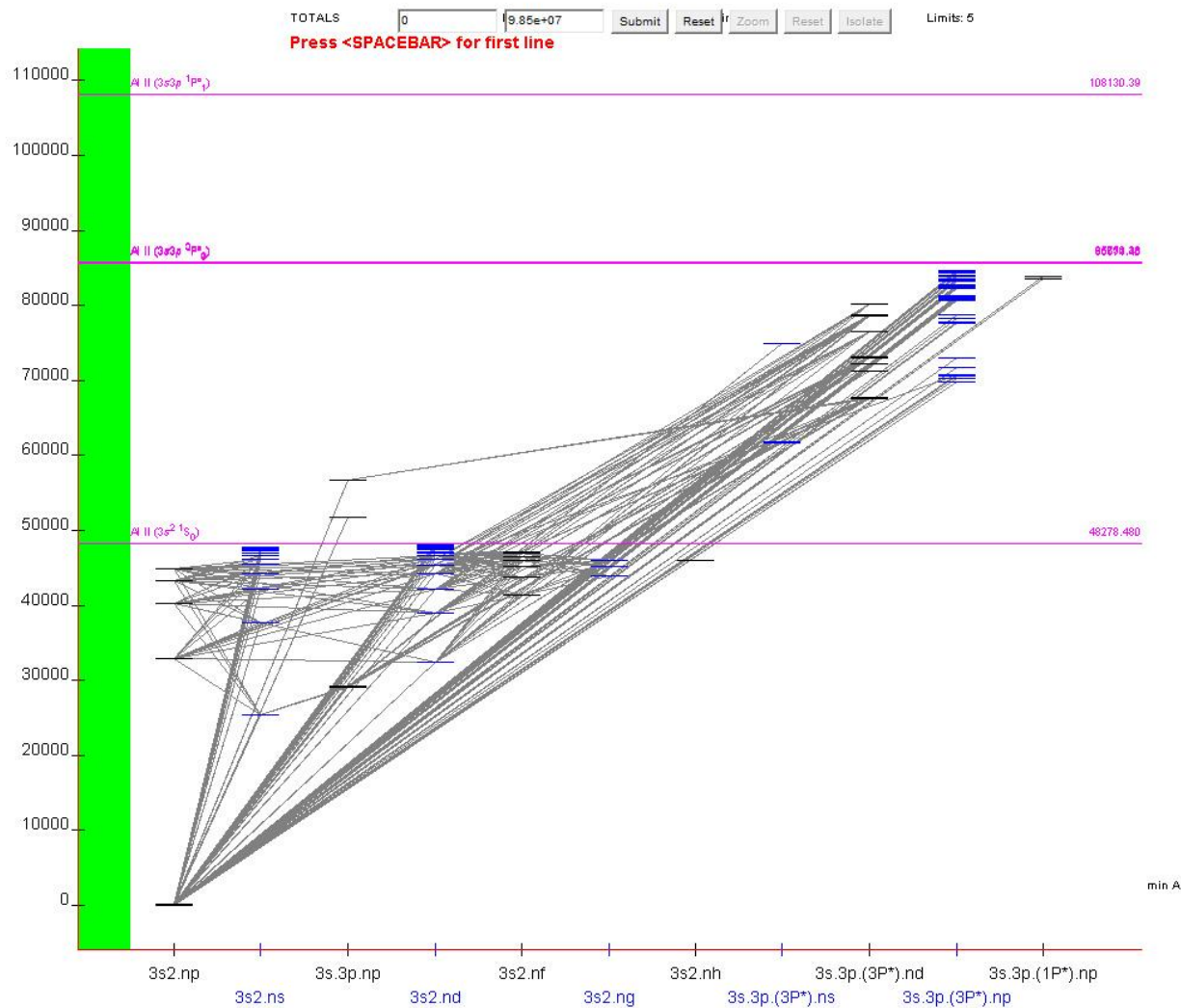
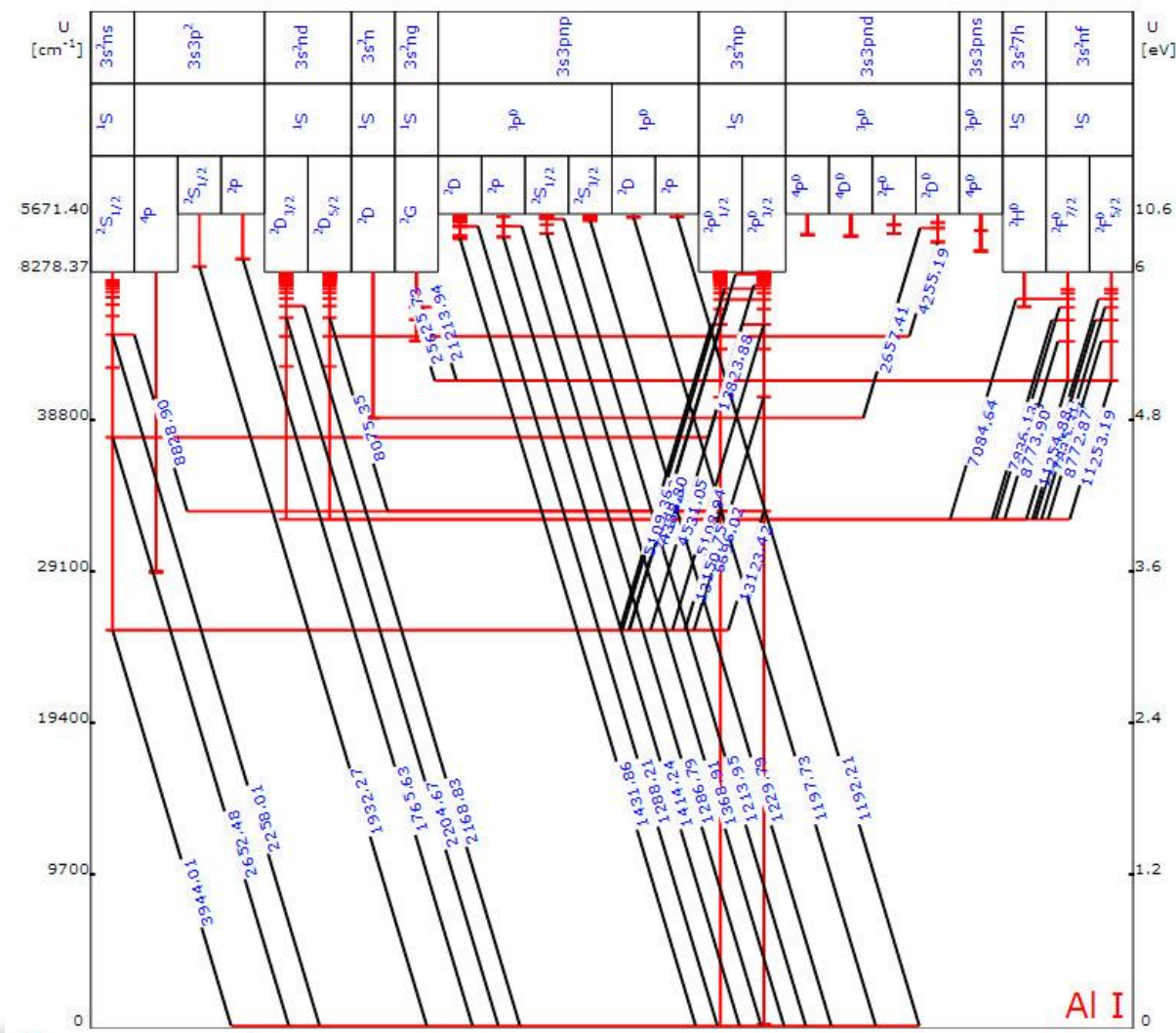




Диаграмма Гротриана ИС «ЭСА»





Задачи развития ИС «Электронная структура атомов»

- Экспорт данных XSAMS (XML Schema for Atoms, Molecules and Solids) для интеграции с VAMDC
- Совершенствование средств обработки и анализа информации для поддержки принятия решений
- Актуализация базы данных — импорт данных в формате XSAMS, сравнение, актуализация.



Список публикаций:

- **Статьи (РИНЦ – 9, ВАК – 6, SCOPUS – 2):**
Оптика и Спектроскопия (1), Автометрия (1)
Вестник НГУ (физика, информационные технологии)
- **Методическое пособие для студентов – 1**
- **Охранные документы:**
Свидетельство о регистрации БД – 1,
Свидетельство о регистрации программного обеспечения – 1,
Патент на полезную модель – 1.

Финансовые гранты

РФФИ – 4 ФЦП - 1



Спасибо за внимание