

УДК 539.184

**ИНФОРМАЦИОННАЯ СИСТЕМА
«ЭЛЕКТРОННАЯ СТРУКТУРА АТОМОВ»:
ТЕКУЩЕЕ СОСТОЯНИЕ И НАПРАВЛЕНИЯ РАЗВИТИЯ***

**В. В. Казаков^{1,2}, В. Г. Казаков^{1,2}, В. С. Ковалев¹,
О. И. Мешков^{1,3}, А. С. Яценко^{1,4}**

¹*Новосибирский государственный университет,
636090, г. Новосибирск, ул. Пирогова, 2*

²*Новосибирский государственный университет экономики и управления,
630099, г. Новосибирск, ул. Каменская, 52*

³*Институт ядерной физики им. Г. И. Буджера СО РАН,
630090, г. Новосибирск, просп. Академика Лаврентьева, 11*

⁴*Институт автоматики и электрометрии СО РАН,
630090, г. Новосибирск, просп. Академика Коптюга, 1*

E-mail: grotrian@nsu.ru

Предлагается информационная система по атомной спектроскопии «Электронная структура атомов». Приводятся сведения об объёме и характерных особенностях базы данных интернет-ресурса, сравниваются параметры базы данных с авторитетными мировыми аналогами. Рассматриваются средства визуализации научных данных, реализованные в системе в виде спектрограмм и диаграмм Гротриана. Показано, что классифицированные уровни и переходы в табличном и графическом видах представлены наиболее полно в сравнении с аналогичными информационными системами. Обсуждается эффективность применения информационной системы «Электронная структура атомов» для различных научных задач, в том числе анализа электронной структуры атомных систем, и для подготовки специалистов.

Ключевые слова: информационные системы, базы данных, спектроскопия, визуализация, диаграммы Гротриана, сравнительный анализ.

DOI: 10.15372/AUT20170205

Введение. Обеспечение доступа учёных и разработчиков к информации о спектрах атомных систем является одной из наиболее сложных и актуальных задач поддержки исследований в целом ряде научных и технических направлений фундаментальной физики и прикладных областях от астрофизики и физики газовых лазеров до элементного анализа и археологии. Информационные ресурсы по атомной спектроскопии прошли длительный путь эволюции от справочных табличных до компьютерных систем и представлены сегодня, прежде всего, интернет-ресурсами, организованными как информационно-поисковые системы с веб-интерфейсом [1].

Известен целый ряд таких систем, развиваемых и поддерживаемых ведущими научными организациями мира, например система ASD (Национальный институт стандартов и технологий (NIST), США) [2] и аналогичные ей системы NIFS (Япония) [3], AMODS (Корея) [4], VALD (Австрия) [5] и другие. Каждая из систем имеет обширную базу данных

*Работа выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (проекты № 16-37-60094, № 16-07-00910).

(БД) по спектрам атомов и/или ионов. В настоящее время также развивается направление агрегации имеющихся БД для информационного поиска одновременно по многим ресурсам по атомной спектроскопии. Одним из таких решений является портал европейского консорциума VAMDC [6].

В России один из известных информационных ресурсов — банк данных по спектроскопическим свойствам атомов и ионов SPECTR-W3, созданный и развивающийся в Российском федеральном ядерном центре (г. Снежинск) [7]. С 2002 года ресурс размещён в открытом доступе в сети Интернет и является сегодня одним из наиболее авторитетных и часто используемых отечественных информационных интернет-ресурсов по атомной спектроскопии. Кроме того, с 2005 года опубликована в Интернете и активно развивается информационная система по атомной спектроскопии «Электронная структура атомов» (ИС ЭСА), сопоставимая по основным параметрам с ведущими мировыми аналогами [8, 9].

Информационные системы по атомной спектроскопии, как правило, решают общую задачу предоставления пользователю максимально точных и достоверных данных об энергетических уровнях и радиационных переходах атомных систем. В то же время создание исчерпывающего информационного ресурса по атомной спектроскопии представляется сложной задачей в связи с большим объёмом и разрозненностью исходных данных, и в действительности мы наблюдаем определённую специализацию каждого из информационных ресурсов.

В основном ресурсы по атомной спектроскопии имеют возможность предоставлять по запросам пользователя данные об уровнях и переходах, включая фильтрацию и сортировку в табличном виде. Однако помимо этого в их состав входят средства научной графики, моделирования, анализа данных, опирающиеся на сложные алгоритмы их обработки, и если функциональность табличных представлений приблизительно равнозначна у всех таких ресурсов, то в области визуализации и анализа они различаются весьма существенно. Одной из систем, обладающей подобными средствами, является ASD NIST, в которой на основе информации БД строятся спектрограммы и диаграммы Гроттриана, в графической форме отражающие электронную структуру атомной системы.

В информационной системе «Электронная структура атомов» также присутствует и активно развивается ряд сервисов визуализации и анализа данных, которые могут быть полезны при решении широкого круга научных и инженерных задач. Особенности ИС ЭСА во многом определяются тем, что она создаётся и поддерживается на базе классического университета (Новосибирский государственный университет) и институтов Сибирского отделения РАН и в значительной мере ориентируется на подготовку специалистов-физиков. В частности, ИС ЭСА является единственной из ведущих мировых информационных систем по атомной спектроскопии, поддерживающей, наряду с англоязычным, интерфейс на русском языке. Это имеет важное значение для учебных заведений, осуществляющих учебный процесс на русском языке.

База данных информационной системы ЭСА. Объём, полнота и достоверность БД — важнейшие свойства информационных систем в целом и систем по атомной спектроскопии в частности. В связи со значительными объёмами спектральных данных, сложностью их обработки и поддержания в актуальном состоянии среди существующих систем наблюдается определённая специализация на отдельных группах элементов, параметрах уровней и переходов.

Приоритеты ИС ЭСА определяются задачами общей аналитики и подготовки специалистов и состоят в поддержке базы данных экспериментально полученных параметров энергетических уровней и радиационных переходов нейтральных атомов и атомных ионов всех элементов периодической таблицы. Особое внимание уделяется равномерному заполнению базы данных по всем величинам атомных чисел Z , в том числе представлению

Таблица 1

Сравнение основных параметров баз данных информационных систем

Сравниваемый параметр	Ресурс			
	ASD NIST	VALD	SPECTR-W3	ИС ЭСА
Число записей по уровням				
всех элементов	106522	> 550000	58723	83823
трансурановых элементов	3300	0	170	4969
редкоземельных элементов	18516	333000	6091	17887
Число записей по переходам				
всех элементов	224521	255000000	371906	158814
трансурановых элементов	865	0	1667	4033
редкоземельных элементов	16681	3146000	49318	23589

спектров редкоземельных и трансурановых элементов, что отличает ИС ЭСА от ряда других ресурсов. Кроме того, при заполнении БД приоритет отдаётся классифицированным данным.

В табл. 1 приведены результаты сравнения по объёму и полноте БД ИС ЭСА с авторитетными в мире и часто используемыми на практике информационными ресурсами. Были выбраны ресурсы с обширными базами экспериментальных данных: ASD NIST, VALD и SPECTR-W3. В настоящее время база данных ИС ЭСА включает более 234000 записей по энергетическим уровням и радиационным переходам атомных систем, что превосходит объёмы баз данных большинства других ресурсов по атомной спектроскопии. Хотя общее число хранимых записей об уровнях и переходах в БД VALD существенно выше, чем в ИС ЭСА и других сравниваемых системах, это является результатом включения в VALD больших массивов расчётных данных, не обладающих точностью, необходимой для многих задач.

В базе данных ИС ЭСА представлены элементы периодической таблицы с атомным числом Z от 1 до 110. При этом для всех элементов имеются данные и по уровням, и по переходам, в то время как в других ИС, в том числе ASD NIST, для элементов с большим Z приведены только данные переходов. В информационной системе ЭСА в число параметров энергетических уровней входят электронная конфигурация, запись терма и его энергетическое значение, внутреннее квантовое число J , время жизни уровня, а для переходов — конфигурации верхнего и нижнего уровней, значение длины волны, интенсивность линии, сила осциллятора, вероятность перехода и сечение возбуждения, что в основном соответствует структуре данных других информационных ресурсов.

Для ряда задач существенно, насколько ресурс заполнен информацией об электронных конфигурациях и термах уровней, а также известны ли для радиационных переходов конфигурации и термы верхнего и нижнего уровней. В информационной системе ЭСА классифицирована существенно большая часть уровней и переходов в сравнении с остальными рассматриваемыми системами, что является важным преимуществом ресурса.

Представление спектров в виде спектрограмм и виртуальный спектроскоп ИС ЭСА. Важной характеристикой эффективности научного информационного ресурса являются возможности представления данных средствами научной графики. Наиболее стандартный способ визуального отображения спектров — спектрограммы. В табл. 2 сравниваются некоторые значимые для пользователей характеристики спектрограмм, генерируемых рядом информационных ресурсов по атомной спектроскопии (ИС ЭСА, ASD NIST, SPECTR-W3 и VAMDC). Образцы спектрограмм приведены на рис. 1–3.

Таблица 2

**Сравнение некоторых свойств спектрограмм,
генерируемых информационными ресурсами по атомной спектроскопии**

Сравниваемый параметр	Ресурс			
	SPECTR-W3	ASD NIST	VAMDC	ИС ЭСА
Полнота по элементам	Только по элементам, для которых загружены рисунки	На элементах с большим количеством линий не работает	Строится для всех элементов	Строится для всех элементов
Актуальность	Автоматически не обновляется, базе данных не соответствует	Автоматическое построение по БД	Автоматическое построение по БД	Автоматическое построение по БД
Разрешение	Растровый рисунок максимально 800 пикселей по оси	Растровый рисунок 796 пикселей по оси	Векторный рисунок, масштабируется по экрану	Векторный рисунок плюс инструменты масштабирования
Цветность	Чёрно-белая (определяется загруженным рисунком)	Чёрно-белая	Чёрно-белая	Цветная в оптическом диапазоне
Информация о параметрах	Соответствует загруженному рисунку	Только шкала оси	Только значение длин волн переходов	Шкала оси плюс отображение длины волны при наведении на линию
Информация об интенсивности	Имеется	Отсутствует	Отсутствует	Имеется возможность усилить слабые переходы с помощью инструмента «чувствительность»
Настройка диаграммы	Не предусмотрена	Выбор диапазона, фильтрация линий при генерации	Выбор диапазона, фильтрация линий при генерации	Выбор диапазона, фильтрация линий в интерактивном режиме, скроллинг

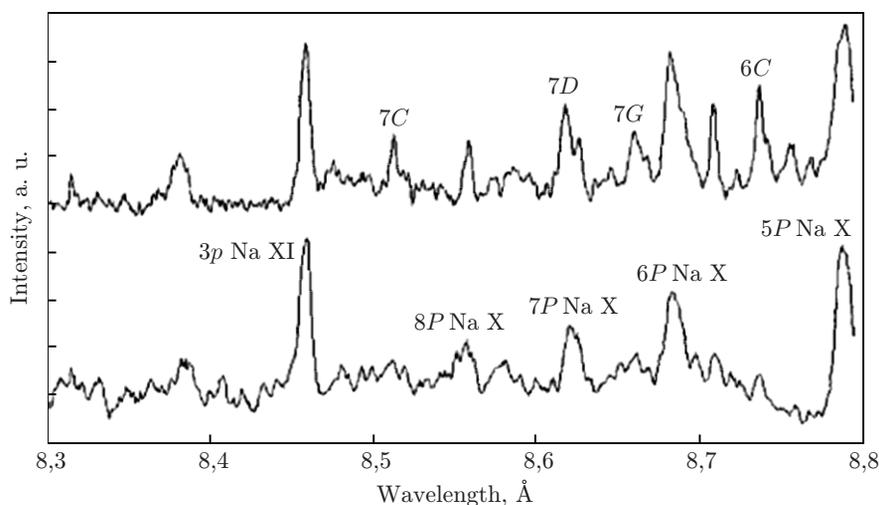
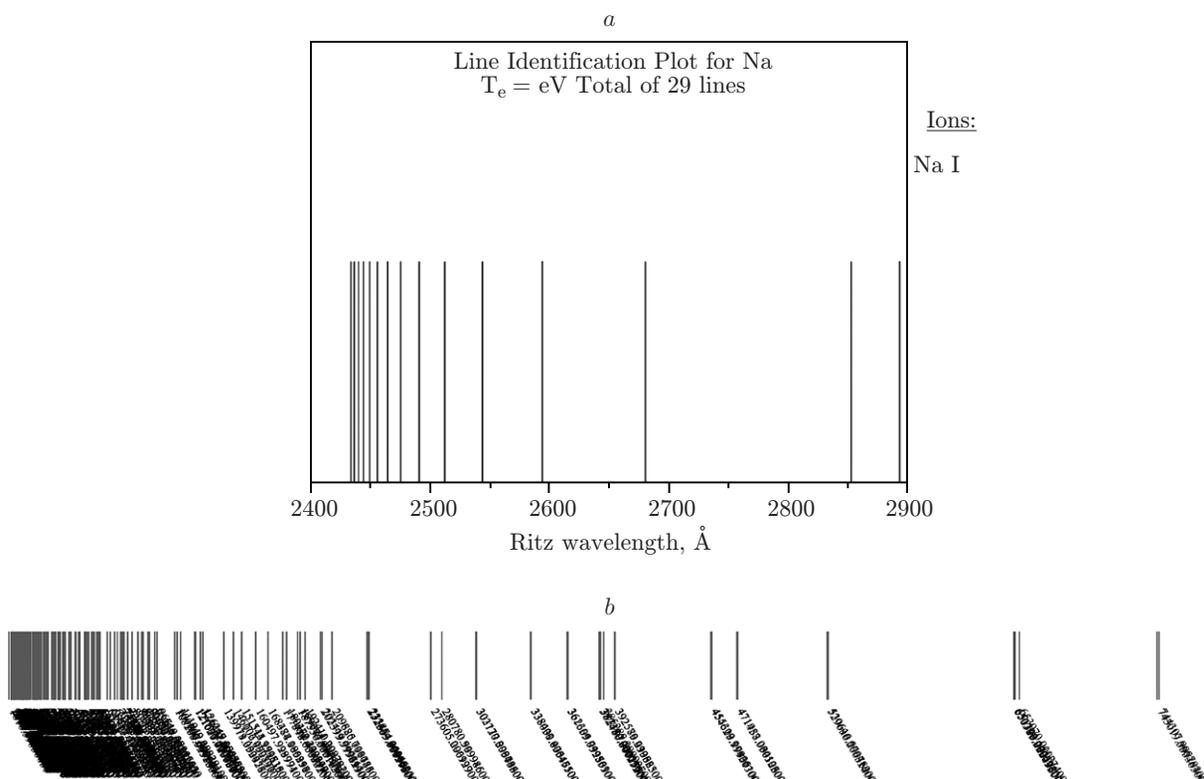


Рис. 1. Денситограмма в системе SPECTR-W3 [7]

Существует два принципиально разных подхода к выводу спектральных данных в графическом виде. Так, в системе SPECTR-W3 спектрограммы являются растровыми изображениями, не связанными с БД. Эти спектрограммы строятся вручную специалистами и имеют высокое качество исполнения, однако построение диаграмм трудоёмко и на практике приводит к их дефициту и невозможности автоматической актуализации. В системе SPECTR-W3 подобных спектрограмм очень мало: всего около 50 для почти 1500 атомных систем, представленных в базе данных. В информационных ресурсах ASD NIST, VAMDC, ИС ЭСА спектрограммы генерируются автоматически по спектральной информации, хранящейся в БД системы, в любом количестве, с учётом дополнительных условий,



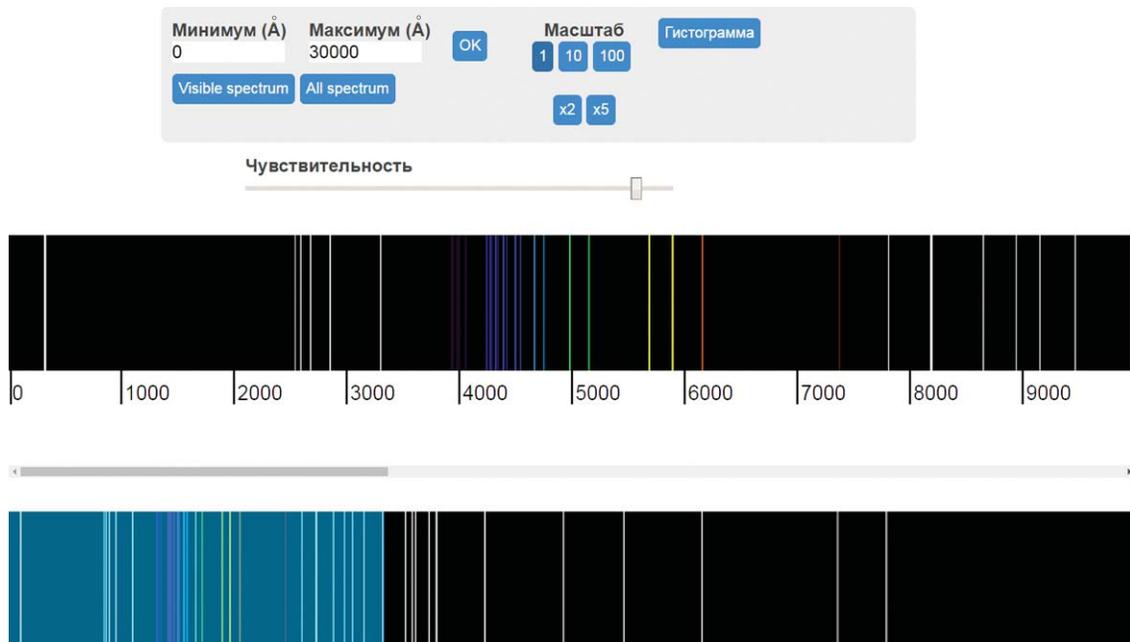


Рис. 3. Интерфейс виртуального спектрокопа ИС ЭСА при работе со спектром Na I [9]: инструментальная панель (окна выбора участка спектра, кнопки выбора масштаба увеличения, переключение в режим гистограммы, «чувствительность» — инструмент усиления слабых линий); увеличенный фрагмент спектрального диапазона; скроллер настройки окна масштабированного спектра; спектрограмма полного диапазона линий

накладываемых пользователем. Однако качество таких спектрограмм зависит от алгоритмов, заложенных в эти программы, и во многих случаях сегодня уступает выполненным специалистами «вручную».

Существенным параметром является разрешение диаграмм спектров, напрямую связанное с количеством информации, которая может быть размещена на диаграмме. В отличие от аналогов в ИС ЭСА векторная графика дополнена инструментами скроллинга и масштабирования, позволяющими увеличивать выбранный участок спектра для возможности отображения тонких и сверхтонких структур линий даже на небольших экранах. Грамотное применение цветовых решений может существенно облегчить работу пользователя с научной графикой. В информационной системе ЭСА в отличие от других ИС спектральные линии оптического диапазона изображаются соответствующим цветом аналогично оптическим призматическим спектрокопам, используемым повсеместно в учебном процессе [10].

Значимым преимуществом ИС ЭСА является наличие информации о параметрах переходов. В системе SPECTR-W3 спектрограммы выполняются специалистом, который размещает информацию о параметрах перехода и прежде всего о длине волны в соответствии с собственными представлениями об оптимальном размещении (см. рис. 1). Попытки автоматизировать этот процесс часто приводят к потере информативности, например, в ASD NIST и VAMDC. Отсутствие информации о длинах волн, как в ASD NIST (размечена только шкала), снижает информативность диаграммы, а размещение информации о длине волны каждого перехода, как в VAMDC, в случае большого числа переходов приводит к наложению информации и запутанности (см. рис. 2). Такая информация в ИС ЭСА присутствует на спектрограмме в виде шкалы длин волн (см. рис. 3), а также длина волны конкретного перехода появляется при наведении курсора на соответствующую линию.

На эффективность работы со спектрограммой влияют возможности её настройки на конкретную задачу: выбор диапазона спектра и фильтрация отображаемых переходов по определённым параметрам, например по интенсивностям. В системах ASD NIST, VAMDC, ИС ЭСА возможность настройки спектрограммы присутствует, однако в ИС ЭСА она наиболее удобна за счёт использования интерактивного режима без перезагрузки страницы при изменении параметров фильтрации и отображения.

Таким образом, мы видим, что пользовательские свойства спектрограмм ИС ЭСА по многим параметрам превосходят спектрограммы, автоматически генерируемые в других ресурсах, и не уступают спектрограммам, реализованным специалистами.

Построение диаграмм Гротриана. Другим способом визуализации спектров атомных систем является представление электронной структуры атома в виде диаграмм Гротриана, удобных в задачах общего анализа электронной структуры атомов и ионов [8].

Диаграмма Гротриана представляет собой сложную графическую конструкцию и до последнего времени создавалась специалистами вручную. Процесс создания диаграмм трудоёмок, в связи с чем постоянно наблюдается их дефицит. Существуют и программные реализации алгоритмов построения диаграмм Гротриана, на сегодняшний день такая возможность есть в двух информационных интернет-ресурсах по атомной спектроскопии: ASD NIST и ИС ЭСА.

На рис. 4 приведён пример диаграммы Гротриана, автоматически построенной системой ASD NIST для W II. Видно, что чтение диаграммы затруднено в связи с отсутствием механизма отбора линий. При построении диаграммы Гротриана вручную специалисты проводят сложную работу по отбору наиболее важных переходов для размещения на диаграмме. Такой отбор, с одной стороны, должен дать набор линий, обеспечивающих максимально полное представление об электронной структуре атомной системы, а с другой стороны, обеспечить хорошую читаемость диаграммы. Недостатком ASD NIST является неоптимальный алгоритм расположения информации на графике, когда многочисленные пересечения линий создают неразборчивую «паутину». Кроме того, полное построение диаграмм проводится только для атомов и ионов с малым Z . Для больших Z в диаграммах ASD отображаются только уровни, а для трансурановых элементов диаграммы Гротриана вообще не строятся.

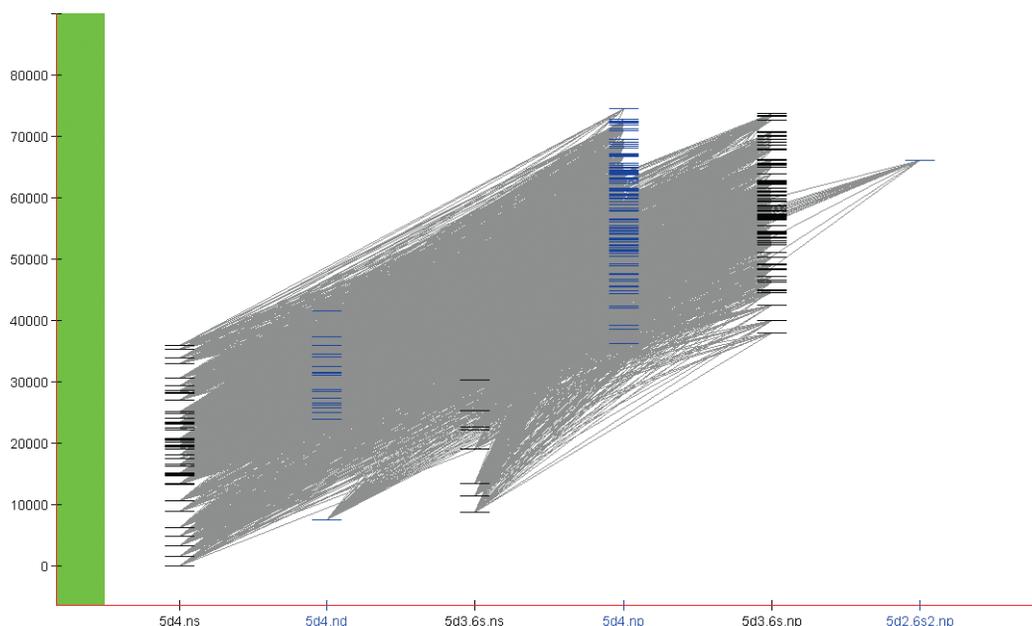


Рис. 4. Диаграмма атома W II в системе ASD NIST [2]

В системе ЭСА построение диаграмм Гротриана также осуществляется динамически на основе спектральной информации, хранящейся в базе данных уровней и переходов атомных систем. В этой системе могут быть построены диаграммы 98 нейтральных атомов (для Pa, Fm, Md, No, Lr на диаграммах не будут отражены переходы, поскольку данных о классифицированных переходах на сегодняшний день нет). Диаграммы также строятся для однократных и многократных переходов.

Ряд решений, применённых в ИС ЭСА, обеспечивает лучшее в сравнении с ASD NIST качество получаемых диаграмм [11]. Главным и наиболее принципиальным отличием является использование специального алгоритма, обеспечивающего отбор информации для размещения на диаграмме. Алгоритм классифицирует уровни и переходы по ряду признаков и затем отбирает из каждой группы для размещения на диаграмме такое их количество, чтобы при соблюдении общей читаемости представить все основные особенности отображаемого спектра.

Другой важной особенностью ИС ЭСА является алгоритм размещения данных на диаграмме, несколько отличающийся от наиболее употребительного (и применяемого в ASD NIST). Вид диаграммы Гротриана, автоматически построенной в ИС ЭСА, представлен на рис. 5. Техника построения опирается на разнесение чётных и нечётных уровней вправо

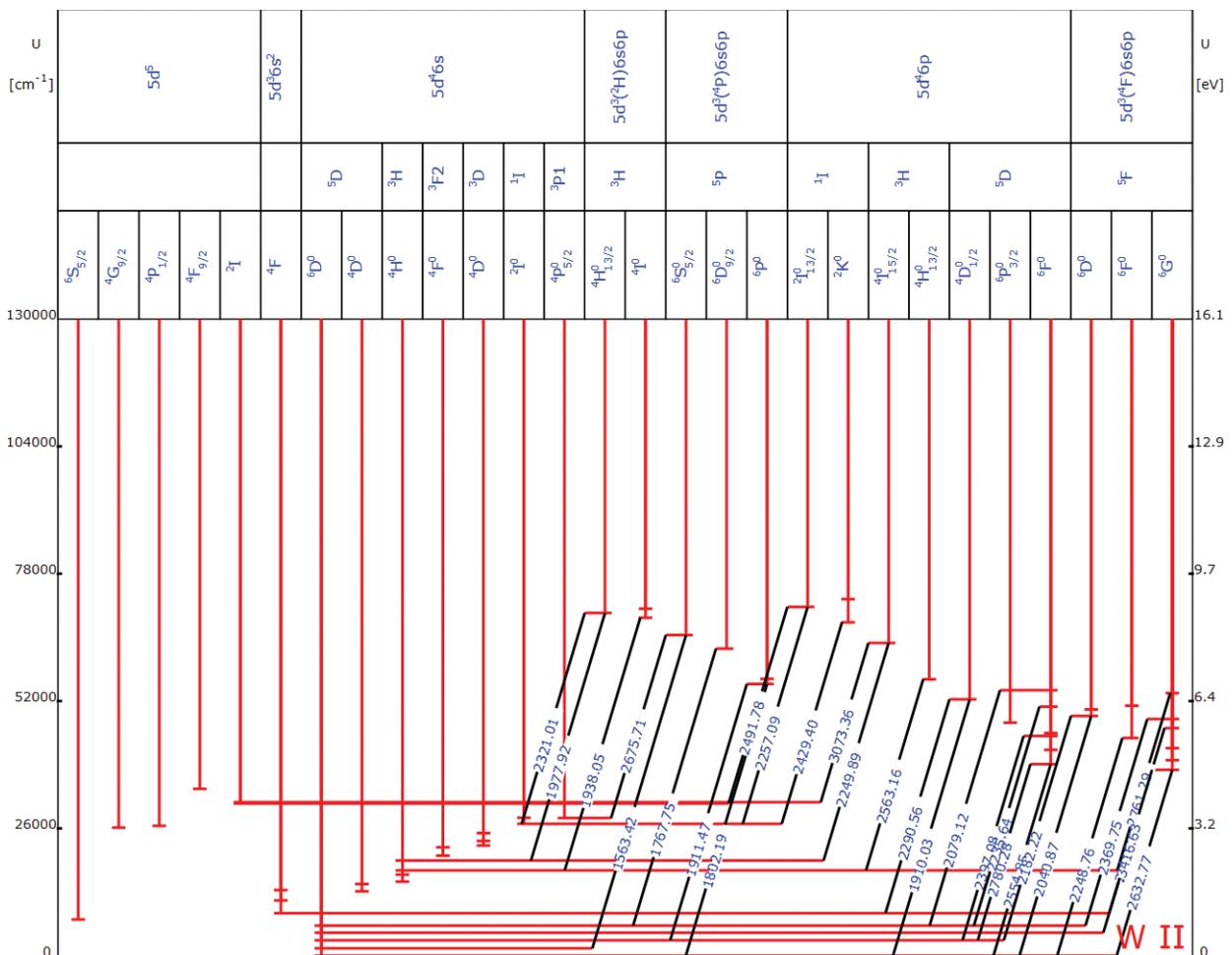


Рис. 5. Диаграмма Гротриана для атома W II в ИС «Электронная структура атомов» [9]. При генерации диаграммы автоматически произведён отбор уровней и переходов. Энергетические уровни разбиты на группы по типу атомного остатка и подгруппы по термам

Таблица 3

Сравнение основных характеристик сервисов построения диаграмм Гротриана для различных информационных ресурсов по атомной спектроскопии

Сравниваемый параметр	Ресурс	
	ASD NIST	ИС ЭСА
Формат и область отображения	Векторная графика, 1280 × 1024 точек	Векторная графика, масштабируемая по размеру окна
Читаемость	Низкая: размещаются все линии спектра, что ведёт к их наложению друг на друга	Высокая: автоматический отбор необходимого для сохранения читаемости числа линий
Технология и установка	Java-апплет, требуется установка Java с ручной настройкой системы безопасности	JavaScript + SVG, установка не требуется
Возможности интерактивной работы	Отображение информации об уровнях и переходах	Отображение информации об уровнях и переходах, фильтрация по длине волны перехода, энергиям уровней
Группировка уровней по конфигурации и сериям	Настраивается пользователем перед построением диаграммы	Настраивается автоматически на основе размера экрана и количества данных
Возможность открытия диаграммы по ссылке	Через заполнение формы на сайте	По адресу URL. Достаточно ввести ссылку в адресную строку браузера. Ссылкой можно «поделиться» с другими пользователями

и влево от центральной линии диаграммы. Такой способ построения обеспечивает возможность размещения существенно большего по сравнению с традиционным числа линий при сохранении читаемости диаграммы за счёт исключения скопления линий в одной точке и сокращения их пересечений.

Сочетание этих двух алгоритмов позволило реализовать в ИС ЭСА программные средства, которые обеспечивают построение диаграмм достаточно высокого качества для нейтральных атомов всех элементов периодической таблицы. Экспертная оценка показывает хорошее соответствие получаемой диаграммы требованиям специалистов как по эффективности отбора линий, так и по плотности размещения информации на диаграмме и её общей читаемости.

В табл. 3 приведены данные сравнения инструментов построения диаграмм Гротриана в ASD NIST и ИС ЭСА по ряду параметров. Сервис ИС ЭСА, представляющий электронную структуру атомных систем в виде диаграмм Гротриана, позволяет строить диаграммы для большего числа таких систем и обеспечивает лучшую читаемость.

Заключение. Информационная система ЭСА является одним из наиболее полных информационных интернет-ресурсов по спектрам атомных систем. При этом ряд особенностей базы данных ИС ЭСА, в том числе значительная доля классифицированных уровней и переходов и лучшая проработка спектров с большим атомным числом, позволяют рекомендовать её для задач образовательного характера и целей общей аналитики, в которых речь идёт о работе с электронной структурой атомных систем во всём диапазоне атомных чисел Z .

Средства визуализации атомных спектров в виде спектрограмм, реализованные в ИС ЭСА, существенно превосходят соответствующие средства в аналогичных ресурсах по удобству их использования за счёт построения в виде интерактивных приложений и векторной графики. Особенно эффективным их применение будет при анализе спектров и в задачах подготовки кадров в спектроскопии и смежных областях. Из-за простоты и интуитивной понятности интерфейса работа со спектрограммами может быть рекомендована даже при обучении в средней школе.

Представление атомных спектров в виде автоматически генерируемых на основе базы данных диаграмм Гротриана, реализованное в ИС ЭСА, является мощным инструментом для теоретического анализа спектров и подготовки специалистов в областях атомной физики и спектроскопии. На сегодняшний день, помимо ИС ЭСА, автоматическое построение диаграмм Гротриана используется в ASD NIST. Однако алгоритмы построения, реализованные в ИС ЭСА, более соответствуют методике построения диаграмм специалистами вручную, более удобны и лучше подходят для анализа электронной структуры атомной системы, и для обучения.

Таким образом, информационная система «Электронная структура атомов» обеспечивает поддержку научных исследований спектральными данными по атомным системам, предоставляя исследователю большой объём актуальной информации по широкому спектру параметров энергетических уровней и радиационных переходов в табличной форме, а также в графической форме в виде спектрограмм и диаграмм Гротриана. При этом общий уровень сервисов сопоставим с лучшими мировыми аналогами, а для некоторых целей, в частности общей аналитики электронной структуры атомных систем и подготовки специалистов в областях, связанных со спектроскопией, использование ИС ЭСА представляется предпочтительным.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Казаков В. Г., Яценко А. С. Структура, хранение и представление данных о спектрах атомных систем. Новосибирск: Изд-во НГУ, 2011. 66 с.

2. **Информационная** система по атомной спектроскопии NIST Atomic Spectra Database (ver. 5.0). URL: <http://www.nist.gov/pml/data/asd.cfm> (дата обращения: 06.02.2017).
3. **Информационная** система по спектрам атомов и молекул NIFS Database. URL: <http://dbshino.nifs.ac.jp/> (дата обращения: 06.02.2017).
4. **Информационная** система по спектрам атомов и молекул AMODS. URL: <http://amods.kaeri.re.kr/> (дата обращения: 06.02.2017).
5. **Информационная** система по спектрам атомов и молекул VALD. URL: <http://vald.astro.uu.se/> (дата обращения: 06.02.2017).
6. **Портал** европейского консорциума VAMDC. URL: <http://portal.vamdc.org> (дата обращения: 06.02.2017).
7. **База данных** по спектральным свойствам атомов и ионов SPECTR-W3. URL: <http://spectr-w3.snz.ru/index.phtml> (дата обращения: 06.02.2017).
8. **Казаков В. Г., Раутиан С. Г., Яценко А. С.** Компьютерное представление характеристик электронных оболочек атомов // Оптика и спектроскопия. 2008. **105**, № 1. С. 53–58.
9. **Информационная** система «Электронная структура атомов». URL: <http://grotrian.nsu.ru> (дата обращения: 06.02.2017).
10. **Казаков В. В., Яценко А. С., Ковалев В. С., Казаков В. Г.** Цифровая эмуляция спектрографа // Вестн. НГУ. Сер. Информационные технологии. 2011. **9**, вып. 3. С. 30–36.
11. **Казаков В. Г., Яценко А. С., Казаков В. В., Жакупов М. Б.** Задача автоматического построения диаграмм атомных спектров и опыт её решения в информационной системе «Электронная структура атомов» // Вестн. НГУ. Сер. Информационные технологии. 2010. **8**, вып. 3. С. 66–78.

Поступила в редакцию 2 ноября 2016 г.
