АВТОМАТИЗИРОВАННАЯ ИНТЕРАКТИВНАЯ ВИЗУАЛИЗАЦИЯ НАУЧНЫХ ДАННЫХ В ВЕБ

В.В. Казаков, В.Г. Казаков, О.И. Мешков, А.С. Яценко, К.Б. Жумадилов
Новосибирский государственный университет
Новосибирский государственный университет экономики и управления
Институт ядерной физики им. Г.И. Будкера СО РАН
Институт автоматики и электрометрии СО РАН
Новосибирск

Оптические исследования начались в середине 17 века, когда И. Ньютон и Ф. Гримальди разложили призмой белый свет в спектр. В середине 19 в. изучение спектра излучения Солнца привело к открытию гелия — первого химического элемента, обнаруженного не на Земле. Сейчас спектральный анализ позволяет исследовать химический состав звезд, и даже экзопланет на расстояниях в десятки световых лет от Земли.

Каждая атомная система кроме основного состояния имеет возможность находится в менее энергетически выгодных состояниях с конфигурациями расположения электронов на более удаленных от ядра орбитах — энергетических уровнях. При спонтанном переходе возбужденной атомной системы на уровень с меньшей энергией состояния происходит выделение лишней энергии в виде фотона соответствующей длины волны — радиационные переходы, спектральные линии. Спектр атомной системы это совокупность ее спектральных линий.

Спектральный анализ широко используется в исследованиях по физике плазмы и лазерной физике. По интенсивности и ширине спектральных линий определяют температуру плазмы в термоядерных установках, вплоть до значений в десятки миллионов градусов. Поиск активных лазерных сред продолжается и в наши дни, и для него требуются данные о длинах волн переходов не только в нейтральных атомах, но и в ионах высокой кратности ионизации.

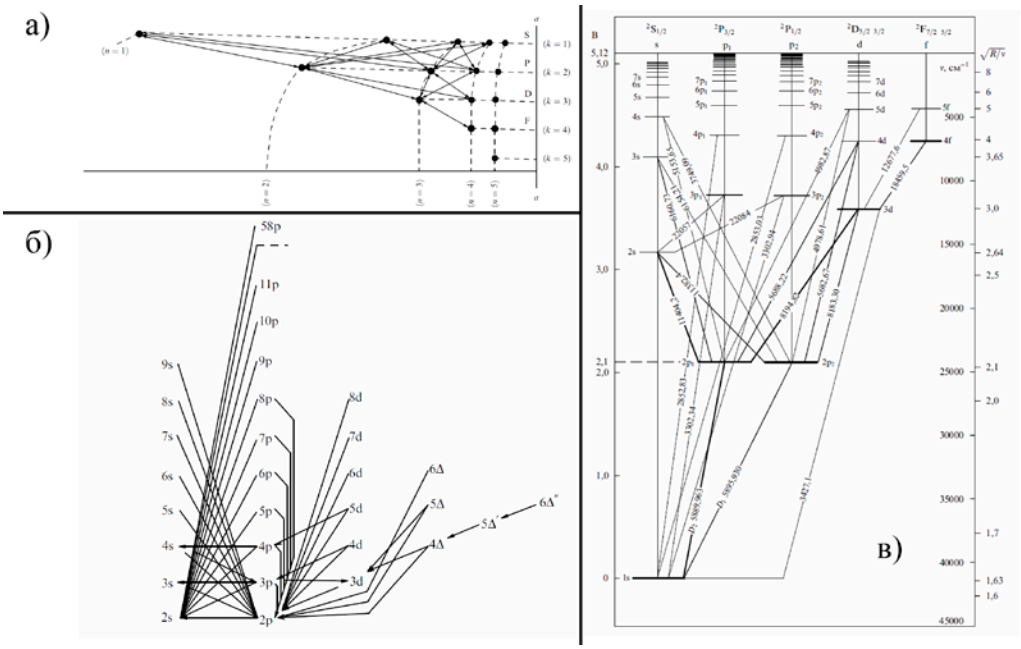


Рис. 1. а) атом натрия по Бору [1], б) схема термов и переходов для атома натрия по Рождественскому [2] в) схема уровней для атома натрия, предложенная В. Гротрианом [3]

Современные справочники и базы данных содержат информацию о сотнях тысяч переходов и энергетических уровней атомов и ионов, как правило, в виде длинных списков и таблиц. Ориентироваться в таких данных под силу только опытным исследователям. С начала 20 века велись попытки графического отображения спектров: Бором в 1923 году (рис.1а), Рождественским в 1921 (рис. 1б), Гротрианом в 1924 (рис. 1в).

Тип диаграмм, предложенный В. Гротрианом стал де-факто стандартом для графического представления спектров атомных систем. Основа построения диаграмм Гротриана следующая (рис. 1в): в общем виде это прямоугольная область, в которой каждому известному электронному состоянию на схеме соответствует отдельная горизонтальная метка. По вертикали она соответствует значению уровня энергии

на вертикальной шкале. Состояния с одинаковым орбитальным моментом l возбужденного электрона сгруппированы в столбцы — s, p, d, f. Последовательность (серия) энергетических состояний сходятся сверху к границе ионизации — энергии отрыва электрона. Наклонными линиями показаны радиационные переходы с обозначением значений длин волн в Å. Показанные линии не исчерпывают всех возможных переходов в данном элементе — они не приведены, чтобы не перегружать рисунок. Количество энергетических уровней и радиационных переходов для элементов с большим кол-вом электронов больше чем у простых, в связи с чем диаграммы с увеличением атомного числа становятся сложнее. В процессе кропотливого ручного труда исследователи составляют диаграммы, оставляя только наиболее важные линии атомной системы для сохранения общей читаемости рисунка.

В отличие от таблиц энергетических уровней и радиационных переходов, на диаграммах Гротриана хорошо видно расщепление спектра по термам, а также тонкое расщепление по числу J. На спектрограммах (кроме спектрограмм очень высокого разрешения) такое расщепление также видно не будет — линии тонкого расщепления будут сливаться в одну. Другим преимуществом диаграммы перед табличными представлениями спектральных данных является возможность использовать её для навигации по спектрам, как по оглавлению в книге. На диаграмме четко разделены энергетические уровни по категориям — четности, мультиплетности, серии, терму, атомному остатку и т.д. Длина линий соединяющих уровни дает понимание о длине волны перехода. После быстрого выявления нужных спектральных данных на диаграмме, точные значения их параметров можно взять из соответствующих таблиц. В некоторых справочных изданиях (например, [4]) таблицы уровней и переходов атомов представляли совместно с диаграммами, что существенно облегчало работу со спектральными данными.

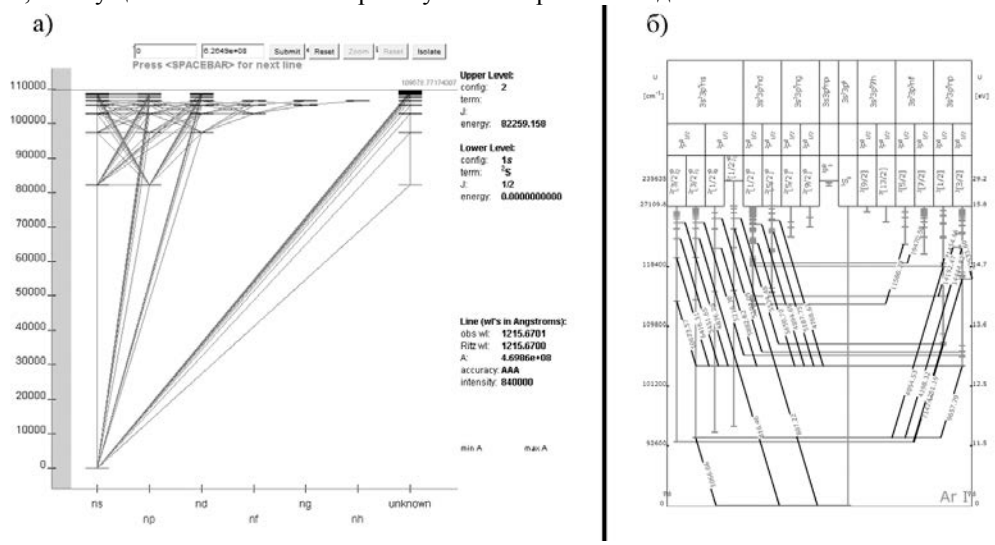


Рис. 2. а) Диаграмма Гротриана для атома водорода ASD NIST б) Диаграмма Гротриана для атома аргона ИС ЭСА

С развитием цифровых технологий появились автоматизированные способы построения диаграмм атомных систем. В некоторых решениях (например, в информационной системе и базе данных по атомной спектроскопии ASD NIST [5]) не реализованы средства отбора линий, в результате чего мы можем видеть, как выглядит диаграмма с полным набором известных спектральных данных (см. рис. 2а).

В свою очередь в информационной системе «Электронная структура атомов» (ИС ЭСА, разработана и поддерживается НГУ и ИАиЭ СО РАН) был предложен оригинальный алгоритм построения диаграмм [6], [7]. Его особенностью является наличие автоматического механизма отбора наиболее значимых линий. Благодаря этому рисунок замусорен меньше, чего в том числе добивались и специалисты, строящие диаграммы вручную.

К сожалению, на данный момент возможности информационных технологий для публикации научных данных не используются в полной мере. При этом, возможности современного веба практически не ограничены для создания двух- и трех- мерной графики и интерактивных средств взаимодействия с пользователем. В этих условиях экспериментирование с формами представления данных представляется естественным процессом. На рисунке 3 представлена оригинальная форма отображения спектров: координаты x, y — значения энергии нижнего и верхнего уровня перехода соответственно, при условии, что верхний уровень нечетный («четность» — одно из квантовых свойств электронной конфигурации). Иначе наоборот: x, y — значения энергии верхнего и нижнего уровня перехода соответственно. На такой диаграмме хорошо видны серии энергетических уровней и радиационных переходов.

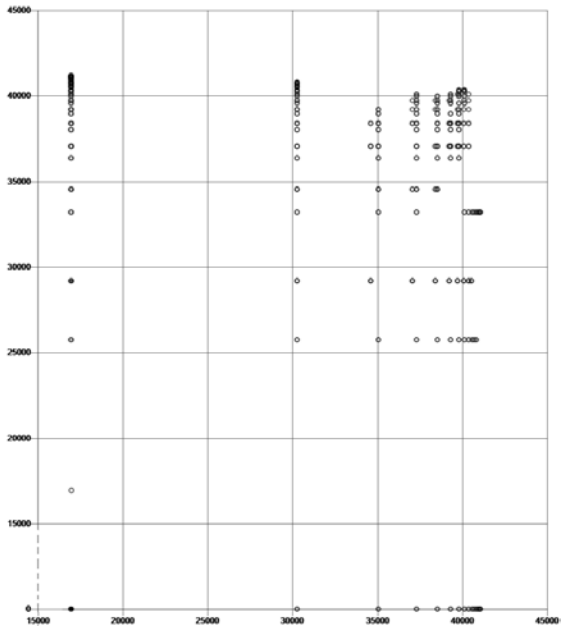
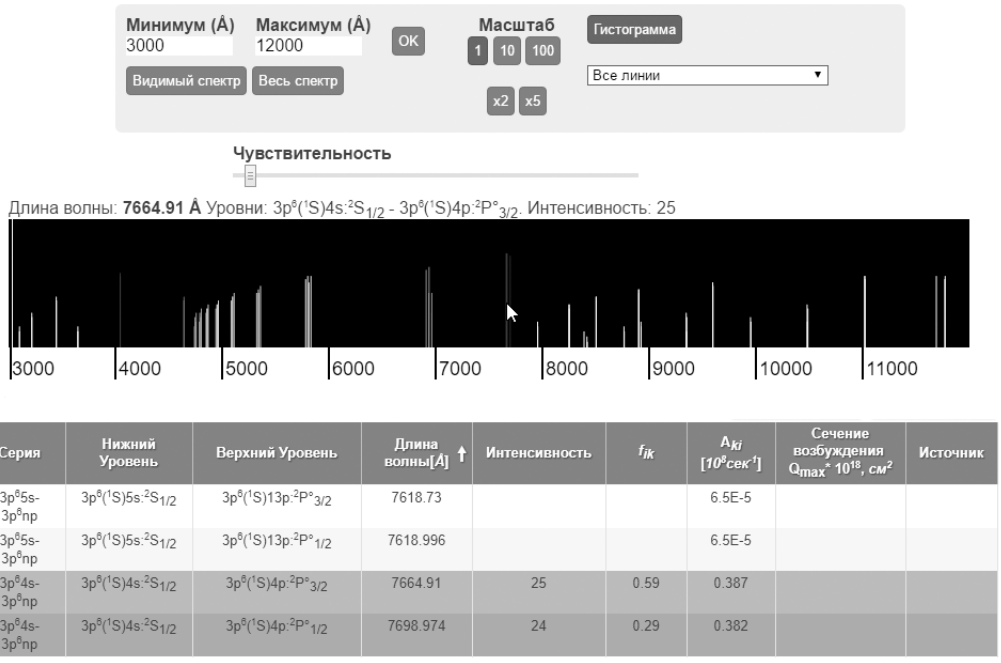


Рис. 3. Экспериментальное представление спектра натрия (ИС ЭСА)

Невозможно оставить в стороне и интерактивные инструменты работы с графическими формами. Так, в НГУ были спроектированы интерактивные многопанельные интерфейсы, которые позволяют легко переключать внимание между различными проекциями спектральных данных — табличными и графическими, что повышает удобство работы с ними. На рисунке 4 представлен прототип интерфейса, в котором одновременно отображается спектр в виде спектрограммы и данные о радиационных переходах в табличной форме, при этом положение указателя на спектре и в таблице синхронизируются, так чтобы обе проекции синхронно отображали просматриваемый участок спектра. Интерактивная синхронизация табличной и графической проекций происходит при наведении мыши на определенную спектральную линию. В дальнейшем, к панелям «спектрограмма» и «таблица переходов» будут добавлены таблица уровней и диаграмм Гротриана, обеспечив таким образом синхронизацию отображения одновременно во всех возможных проекциях.



Серия	Нижний Уровень	Верхний Уровень	Длина волны[Å]	Интенсивность	f_{ik}	A_{ki} [10^8сек$^{-1}$]	Сечение возбуждения Q_{max}· 10^{18}, см^2	Источник
3p^{5}5s-3p^{6}np	3p^6(^{1}S)5s:^{2}S$_{1/2}$	3p^6(^{1}S)13p:^{2}P°$_{3/2}$	7618.73			6.5E-5		
3p^{5}5s-3p^{6}np	3p^6(^{1}S)5s:^{2}S$_{1/2}$	3p^6(^{1}S)13p:^{2}P°$_{1/2}$	7618.996			6.5E-5		
3p^{5}4s-3p^{6}np	3p^6(^{1}S)4s:^{2}S$_{1/2}$	3p^6(^{1}S)4p:^{2}P°$_{3/2}$	7664.91	25	0.59	0.387		
3p^{5}4s-3p^{6}np	3p^6(^{1}S)4s:^{2}S$_{1/2}$	3p^6(^{1}S)4p:^{2}P°$_{1/2}$	7698.974	24	0.29	0.382		

Рис. 4. Прототип интерактивного многопанельного интерфейса ИС ЭСА

Современные цифровые технологии предоставляют широкие возможности для визуализации научных данных. Как наглядное представление оптических спектров атомных систем диаграммы используются для исследования поведения спектров с возрастанием атомного числа: характер распределения возбужденных состояний по основным электронным конфигурациям, изменение схем связи, переход возбужденных

состояний в автоионизационные и т.д. Все это способствует углубленному пониманию систематики электронных уровней. Диаграммы Гротриана для изоэлектронных рядов способствуют нахождению запрещенных переходов в спектрах планетарных туманностей, солнечной короны, новых и пекулярных звезд и других небесных тел. Впервые запрещенные линии были отождествлены Г. Гротрианом в 1924 г. путем анализа спектра с помощью диаграмм. Волновое число исследуемой линии сравнивалось с разностью двух произвольных термов предполагаемого элемента, термы же выбирались на основе предварительного анализа спектра этого элемента. Если эти величины совпадают, то таким образом устанавливается принадлежность линии к этому элементу. При отсутствии спектрального анализа какого-то элемента их термы определялись путем экстраполирования или интерполирования из спектров других элементов, обладающих одинаковой спектральной структурой.

Реализация автоматизированных способов визуализации данных, содержащих интерактивные инструменты управления графикой и выборками данных, обеспечивает более эффективные механизмы исследования спектров. Важным свойством автоматизированной графики является также моментальное реагирование на обновление (актуализацию) исходных данных.

Работа выполняется при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (проект №16-37-60094, проект №16-07-00910).

ЛИТЕРАТУРА

1. Бор Н. Три статьи о спектрах и строении атомов. М.- Пг.: Госиздат, 1923.
2. Рождественский Д.С. «Значение спектральных серий» ЖРФХО. 1921. Т.53, вып. 1.
3. Grotrian W. Graphische Darstellung der Spektren von Atomen und Ionen mit ein, zwei und drei Valenzelektronen. Berlin, 1928, J. Springer, Bd. 2.
4. Bashkin S., Stoner J. Atomic Energy Levels and Grotrian Diagrams. Vols. 1- 4. Amsterdam: North-Holland Publ. Co. 1975-1982
5. Информационная система по атомной спектроскопии NIST Atomic Spectra Database (ver. 5.0). URL: http://www.nist.gov/pml/data/asd.cfm (дата обращения: 01.03.2018).
6. Казаков В.Г., Казаков В.В., Жакупов М.Б., Яценко А.С. Задача автоматического построения диаграмм атомных спектров и опыт ее решения в ИС ЭСА // Вестник НГУ, серия информационная техника. 2010. Т. 8, № 3. С. 66-78.
7. В. В. Казаков, В. Г. Казаков, В. С. Ковалёв, О. И. Мешков, А. С. Яценко. Информационная система «Электронная структура атомов»: текущее состояние и направления развития // Автометрия,. 2017. Том 53, № 2. С. 45-55.