

В. Г. Казаков, А. С. Тюменцев, А. С. Яценко
(Новосибирск)

ИНФОРМАЦИОННАЯ СИСТЕМА
«ЭЛЕКТРОННАЯ СТРУКТУРА АТОМОВ»
С ДИНАМИЧЕСКИМ ПОСТРОЕНИЕМ ГРАФИЧЕСКОГО
ПРЕДСТАВЛЕНИЯ СПЕКТРАЛЬНЫХ ДАННЫХ*

Рассмотрены вопросы создания информационной системы, обеспечивающей графическое представление атомных уровней и переходов по информации, хранящейся в базе данных. Предложен алгоритм построения такого представления в виде диаграмм Гротриана, спроектированы архитектура и пользовательский интерфейс.

Введение. В работе исследователей важное место занимает сбор и анализ информации о свойствах определенных физических систем. Например, для газовых или плазменных систем эта информация часто касается параметров атомов, молекул, ионов – характеристик энергетических уровней и радиационных переходов между ними. Наиболее традиционным способом представления таких данных является издание таблиц. Так, в работе [1] представлены таблицы, содержащие информацию об энергетических уровнях атома или его иона, которые отсортированы по возрастанию энергии. В [2] приведены все разрешенные переходы между различными уровнями.

Точные и обширные данные об оптических спектрах атомных систем принято представлять в виде таблиц, а для общего анализа строения электронной структуры ядер, атомов или молекул давно и успешно используются графические представления.

В работе [3] рассмотрены основные этапы эволюционного развития графического представления атомных систем в виде диаграмм, назначение которых – наглядно показать распределение возбужденных состояний по электронным конфигурациям и отметить наиболее интенсивные переходы. Диаграмма Гротриана [4] имеет вид прямоугольника с заданными размерами, внутри которого с помощью линий, букв и чисел представлена электронная структура атомной системы. Уровни энергий отмечены по оси ординат, а обозначения термов – по оси абсцисс. При этом четные и нечетные состояния чередуются между собой. На вертикальных шкалах отложена энергия в

* Работа выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (грант № 05-07-90220-в), Государственного контракта «Ведущие научные школы» (№ 02.445.11.7202).

обратных сантиметрах (см^{-1}) и электронвольтах (эВ). Наклонными линиями показаны радиационные переходы.

Техника построения диаграмм Гротриана претерпела определенные изменения, и в настоящее время имеется несколько их видов. Так, для задач астрофизики применяются диаграммы [5, 6], которые отличаются от гротриановских тем, что показывают запрещенные переходы. Проблема построения диаграмм для атомов с большим зарядом ядра Z (от H до Mn) решена авторами [7], которые при описании полного электронного строения одного элемента использовали несколько диаграмм с различными электронными конфигурациями. Еще одним решением этой проблемы стало применение вместе с диаграммой Гротриана сопровождающей таблицы, в которой размещается информация об уровнях и переходах, не поместившихся на диаграмме. Такой подход использован в [8], где имеется информация о спектрах атомов и ионов от $Z = 26$ (Fe) до $Z = 42$ (Mo).

В работах [9, 10] приведены диаграммы для большинства элементов Периодической таблицы. В них использована техника построения, несколько отличающаяся от упомянутых выше [7, 8]. В первой (верхней) строке диаграммы дается обозначение всех существующих электронных конфигураций nl^k , во второй представлены термы атомных остатков, в третьей – термы энергетических состояний атома. В последней строке четные и нечетные термы разнесены относительно основного состояния по краям диаграммы. По сравнению с диаграммами из [7, 8] данная диаграмма, как и первоначальная гротриановская, помещена на одной странице, содержит достаточно полную информацию и удобна в обращении.

Сегодня в сети Интернет можно найти табличную информацию и диаграммы Гротриана (данные из печатных изданий). Так, таблицы из [11] приведены в [12] виде текста, а в работе [13] представлены диаграммы из [6] в виде растровых рисунков. Отдельные диаграммы имеются также в [14]. Такое копирование позволяет постоянно актуализировать информацию, но данный способ не интерактивен и не может обеспечить механизмы отбора и детализации информации.

Существует ряд систем с разными функциональными возможностями, обеспечивающими пользователя необходимыми средствами поиска и подготовки информации. Например, программа ASDB работает с табличными данными и позволяет делать выборку и сортировку по параметрам. Демонверсия программы доступна в [15]. Наиболее сложными в реализации, но наиболее привлекательными являются информационные системы (ИС) на основе баз данных (БД) с публикацией в сети Интернет. Эти системы позволяют получать часть информации в виде таблицы или всю базу целиком, а также в интерактивном режиме делать SQL-запросы [16]. В настоящее время в мире существует целый ряд таких систем, предоставляющих доступ к информации по различным протоколам (http, ftp, telnet), обзор которых можно найти в работе [17]. Одной из наиболее полных БД является база ASD NIST USA, содержащая информацию о радиационных переходах 99 элементов и уровнях энергии 52 элементов [12]. Имеется еще ряд систем с аналогичными возможностями: NIFS, AMDIS, OPD, COREX, адреса доступа к которым приведены в [18].

Представленные выше системы полно удовлетворяют потребности исследователей в табличной информации, однако не могут способствовать преодолению дефицита графических представлений, поскольку они пока не в

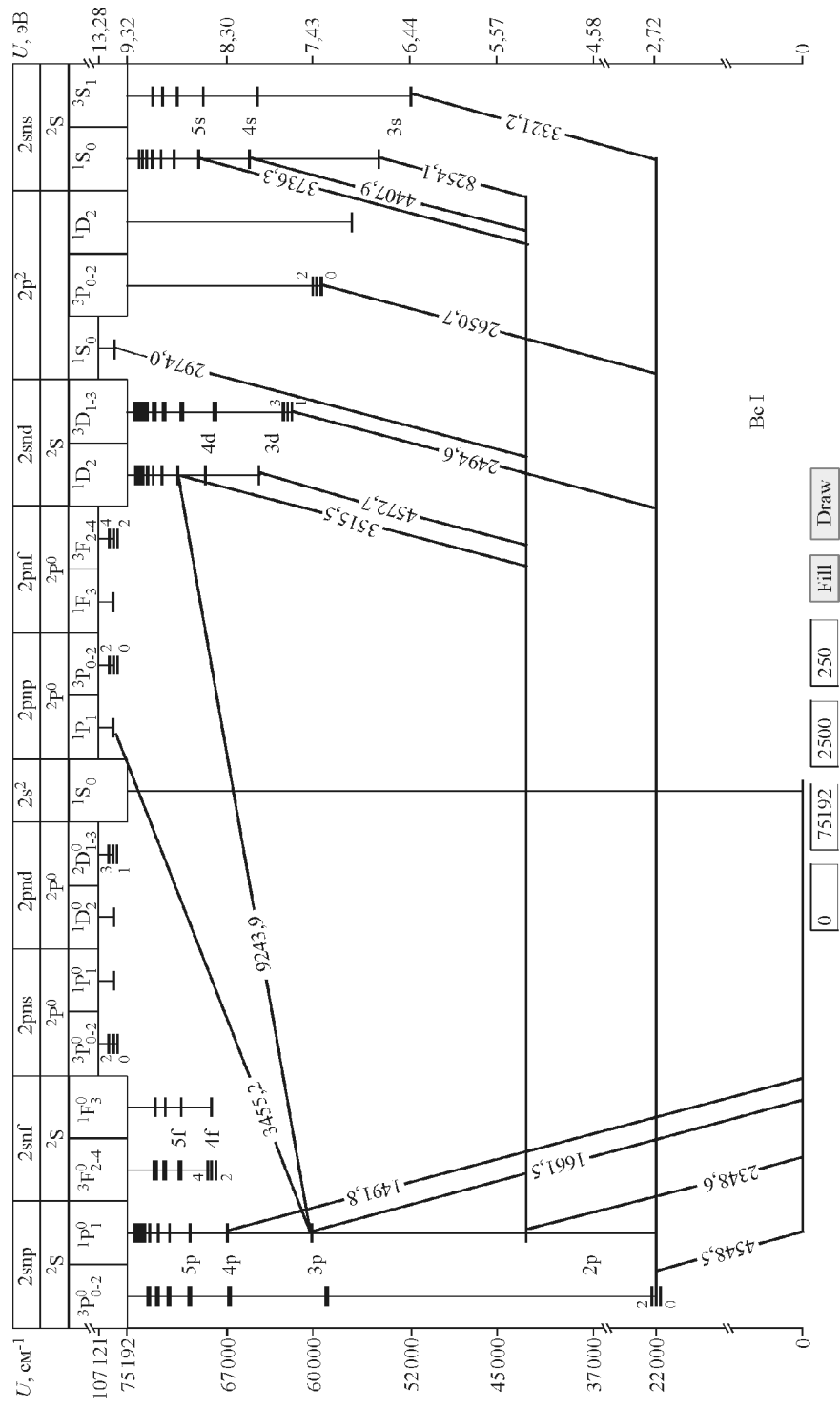
состоянии строить диаграммы Гротриана автоматически. До сих пор существующие в компьютерной среде графические представления просто копируют диаграммы книжных изданий, не расширяя их список или функциональность. Эффективным способом решения данной проблемы является динамическое построение требуемых пользователю диаграмм компьютерной системой на основе обширной БД. Этот способ до сих пор не был реализован. Единственная известная нам попытка построения диаграммы с помощью специальной программы “Multi-Photon Grotrian Diagram” представлена в [15]. Однако автоматическое построение здесь отсутствует: переходы для отображения выбираются вручную. Кроме того, в программе можно построить только частичную диаграмму.

Таким образом, актуальной является задача построения ИС по спектральным данным атомов, обеспечивающей, помимо функций выборки, сортировки и табличного представления данных, динамическое построение диаграмм Гротриана с необходимой степенью детализации. Решению этой задачи посвящена данная работа.

Автоматическое построение диаграмм Гротриана. Построение удобной для работы диаграммы Гротриана до сих пор решалось квалифицированным специалистом. Одним из важных этапов создания является отбор уровней и переходов, наилучшим образом отображающих свойства атома. Хотя для решения этой задачи имеются такие критерии, как интенсивность или длина волны, экспертная оценка ситуации присутствует в значительной мере. Другим этапом работы является размещение информации на диаграмме, обеспечивающее ее наилучшую «читаемость». При этом помимо формализуемых критериев присутствует авторский взгляд. Ситуация осложняется тем, что на практике зачастую поиски решения на втором этапе ведут к пересмотру результатов первого. Для автоматического построения необходим строгий алгоритм, который обеспечил бы приемлемое качество получаемых диаграмм.

При построении алгоритма был выбран подход из работы [9], в котором разделяются четные и нечетные атомные состояния, что позволяет увеличить плотность информации. Резонансные переходы с основного состояния на возбужденные и последующие интенсивные переходы отображаются следующим образом. Энергетические уровни и переходы между ними представлены в виде графа (уровни – это вершины, переходы – ребра) [19]. Использована схема «граф–дерево» (ствол и ветви). В качестве ствола берется основное состояние, параллельные ветви – возможные переходы на возбужденные состояния, позволяющие уменьшить длины отрезков и исключить пересечения. В соответствии с [9, 10] общий вид автоматически построенной диаграммы представлен на рисунке. В первой строке размещены электронные конфигурации состояний, во второй – атомные остатки, а в третьей – все возможные термы. Каждой конфигурации соответствует несколько термов. По оси ординат отложены уровни энергии, а по оси абсцисс – обозначения термов.

Рассмотрим алгоритм отбора отображаемых переходов для начального построения диаграммы. На ней важно представить резонансные линии (переходы с основного состояния) и линии переходов с возбужденных состояний. При этом необходимо учитывать длину волны отображаемого перехода. В первую очередь надо представить переходы с длиной волны из видимой и ближней ИК-областей спектра как наиболее доступные исследователям. Трудности начинаются, когда эти требования вступают в противоречие друг с другом. Визуально установлено, что при отображении одновременно более



Начальный вид графического представления атома Be I

30 линий переходов диаграмма становится запутанной, а линий, подходящих под начальные критерии, может быть более 100. В сложных элементах проблема отбора отображаемых переходов также тесно связана с их возможным наложением.

Опишем используемый нами алгоритм отбора уровней.

1. Для рисования отбираются резонансные линии с основного состояния с наибольшей длиной волны (не более 20 линий).

2. Из всего набора переходов выбираются самые длинноволновые и интенсивные. Из них же добирается число линий, недостающее до 30. В среднем получается примерно одинаковое количество на каждую вершину графа.

3. Проверяется, как линии будут размещаться на диаграмме. Если какой-нибудь из выбранных переходов будет накладываться на другие элементы диаграммы, то этот переход временно исключается из рассмотрения и выбирается следующий из списка (см. п. 2).

Далее возникает задача такого размещения информации на диаграмме, которое обеспечило бы читаемость. Проблема, связанная с наложением отображаемых элементов диаграммы, решается разными методами. Исходя из общих соображений можно указать, куда переместить и как конкретно отобразить определенный переход, если решение вообще существует. Однако, не представляя, как будет выглядеть диаграмма в целом, сделать это достаточно трудно. Если одна линия перехода накладывается на другую, параллельную первой (расстояние между ними меньше высоты цифр, обозначающих длину волны), то имеется несколько возможностей размещения. Во-первых, можно сдвинуть линию перехода вправо или влево, продлив при этом отрезки, изображающие уровни, если это необходимо. Во-вторых, можно рисовать переход в виде двух и более соединенных между собой отрезков. При реализации первой возможности необходимо учитывать наличие переходов слева и справа. Если, двигая линию, мы попадаем на другой переход, то надо реализовывать вторую возможность либо убирать линию с диаграммы (см. п. 3 алгоритма отбора уровней). Таков начальный вид диаграммы (см. рисунок).

Пользователь может построить диаграмму с собственными настройками, более полно и точно отображающими необходимую ему часть данных. Это можно сделать, пользуясь параметризацией алгоритма. Для масштабирования и более точного позиционирования можно ввести максимальную и минимальную энергию уровня, размещенную на диаграмме.

Программа, написанная на языке Java, реализующая вышеприведенный алгоритм, на своем рабочем поле создает диаграмму Гротриана. Данные, необходимые для построения диаграммы, содержатся в XML-документе [20], ссылку на который программа получает в виде параметра. В документе содержатся: обозначения электронных конфигураций и термов для развертки по горизонтали, разрывы вертикальной шкалы энергии, данные об энергетических уровнях и ионизационных пределах и данные о переходах. Внизу диаграммы есть поля ввода для задания пределов максимальной и минимальной энергии, а также два поля для выделения переходов из определенного диапазона. Можно также построить детальную частичную диаграмму.

Архитектура ИС с поддержкой динамического построения диаграмм Гротриана. Представленная методика автоматического построения диаграмм Гротриана создает предпосылки для организации ИС, обеспечивающей их динамическое построение по запросам пользователей. Такая систе-

ма, прежде всего, должна реализовывать уже отработанные на целом ряде подобных систем возможности:

- 1) хранение большого массива информации (сотни тысяч записей) по энергетическим уровням и атомным переходам элементов Периодической таблицы и их ионов;

- 2) эффективную организацию этого информационного массива, обеспечивающую быструю реакцию на запросы;

- 3) пополнение ИС новыми данными;

- 4) представление данных по уровням и спектрам в табличной форме с инструментами отбора, сортировка отбора.

Помимо этого, ИС должна обеспечивать динамическое создание графического представления данных в виде диаграмм Гротриана, реализуя следующие возможности:

- 1) наилучший выбор числа и состава линий и переходов для отображения в каноническом виде (по умолчанию);

- 2) пользовательскую настройку свойств диаграммы;

- 3) выборку из БД необходимой информации и динамическое («на лету») построение изображения диаграммы с оптимизацией читаемости.

В основе ИС лежит система управления базами данных (СУБД), которая обеспечивает стандартные средства для доступа к большим объемам однотипных единиц информации, позволяет создавать общие процедуры для доступа к данным, выполнять запросы и т. д.

ИС строится в трехуровневой архитектуре клиент-сервер.

Серверный уровень системы представлен SQL-сервером, обеспечивающим хранение данных и их отбор по SQL-запросам. В качестве клиентского уровня используется стандартное программное обеспечение web-браузер с поддержкой языка Java.

Основная функциональность системы сосредоточена на промежуточном уровне, который обеспечивает предметную логику системы, формирует SQL-запросы, реализует web-шлюз к системе и предоставляет ему интерфейс. Основой промежуточного уровня является сервер приложений ЛЕММА разработки Новосибирского государственного университета [21]. Этот сервер фактически применяет собственную метамоделю БД, которая содержит элементы объектного подхода и механизмы поддержки слабоструктурированных данных (XML-поля), и позволяет строить сложные пользовательские интерфейсы на основе методов классов объектов, определенных в концептуальной модели данных. Каждая страница пользовательского интерфейса вызывается http-запросом и запускает определенный метод конкретного объекта с передачей ему параметров. Вызванный метод в соответствии с пользовательским запросом организует SQL-запрос к БД. На основании полученных данных метод «на лету» формирует HTML/XML-страницу, которая и передается клиенту.

Динамическое построение и отображение диаграмм Гротриана реализовано следующим образом. По запросу на построение диаграммы вызывается метод класса, экземпляры которого соответствуют атомам и ионам. Данный метод формирует страницу и размещает на ней Java-апплет, созданный на основе вышеописанной Java-программы. В качестве ссылки на документ, содержащий необходимую для отрисовки диаграммы информацию, апплету передается строка вызова сопряженного метода (включая параметры), который и отвечает за формирование требуемого документа со спектральными данными.

Построенный на основе вышепредставленных технологий интуитивно понятный пользовательский интерфейс обеспечивает возможность получения данных в соответствии с наиболее часто требуемыми запросами, в том числе:

- получение информации по уровням одного или нескольких элементов в табличном виде;
- получение информации по переходам одного или нескольких элементов в табличном виде;
- получение диаграмм Гротриана по заданному элементу и набору параметров.

Основу интерфейса составляют три страницы, каждая из которых отвечает за определенный тип запроса. Страница «Уровни» обеспечивает возможность пользователю составить детальный запрос на получение информации об энергетических уровнях атома или иона и представляет результаты такого запроса. Форма запроса определяет выбор его параметров: максимальную и минимальную энергию, конфигурацию или терм, энергетические единицы измерения (эВ, см⁻¹), список отображаемых полей, высоту страниц вывода. Такие данные размещаются в таблице. Дополнительные механизмы обеспечивают настройку представления (сортировку по энергии и конфигурации) на компьютере клиента уже после получения данных.

Страница «Переходы» формирует запрос на получение соответствующей информации. В параметрах запроса можно выбрать элементы, длину волны и разброс (если поле пусто, то выводятся все переходы), единицы измерения (нанометры, ангстремы), разрешение на показ полной информации об уровнях. Результаты также можно отсортировать по различным параметрам.

На странице «Графика» представлена форма отбора таких параметров диаграммы Гротриана, как минимум и максимум интенсивности показываемых переходов, минимальный и максимальный уровни энергии. Сама диаграмма открывается в отдельном окне «Вывести диаграмму».

Опыт построения информационной системы. В настоящее время построен прототип ИС «Электронное строение атомов», реализующий указанную функциональность. Система опубликована в сети Интернет [22]. Для апробации система была заполнена новейшими данными по атому бериллия [12], электронная структура которого описывается с помощью LS-связи.

Особое внимание при апробации уделялось графическому представлению. Диаграмма Гротриана, полученная для атома бериллия по умолчанию, показана на рисунке.

Возможны настройки: выбор диапазона энергии показываемых уровней и выделение переходов с определенной длиной волны, которые облегчают чтение и понимание информации с диаграммы. Так, выбор диапазона по энергии позволяет четко выделять ридберговские и автоионизационные состояния. Используя частичную диаграмму, можно показать все известные линии переходов. Есть возможность выделять определенные длины волн другим цветом. Для этого необходимо ввести значение длины волны и диапазон выделения.

На основании работы с другими диаграммами выяснилось, что используемый алгоритм отбора обеспечивает правильный подбор отображаемых уровней и хорошую читаемость диаграмм для отдельной группы атомов щелочных и щелочно-земельных элементов. Для остальных групп атомов требуется дополнительная проверка.

Закключение. В работе предложена схема построения ИС, обеспечивающей хранение, обработку, представление данных об электронном строении атомов – характеристиках энергетических уровней (конфигурация, терм, энергия, время жизни) и радиационных переходах (наблюдаемая и расчетная длина волны, вероятность перехода, относительная интенсивность). Особенностью системы является возможность динамической визуализации атомной структуры на основе автоматического построения диаграмм Гротриана по информации БД. ИС ориентирована на работу через web-сервер Интернет, что позволяет исследователю в настоящее время получать необходимые данные. Реализован прототип системы, позволяющий строить графическое представление в виде диаграмм Гротриана. Система функционирует в сети Интернет [22] и частично заполнена новейшими данными по атомам щелочных элементов, а также бериллия, кальция, магния, неона, иттербия.

Система предназначена для специалистов и студентов, занимающихся вопросами атомной спектроскопии, плазмы, квантовой электроники и астрофизики.

Авторы выражают благодарность С. Г. Раутиану, Д. А. Шапиро за полезные обсуждения работы.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Moore Ch. Atomic Energy Levels. Washington: NSRDS – NBS 35, 1971. Vol. 1–3.
2. Одинцова Г. А., Стриганов А. Р. Таблицы спектральных линий нейтральных и ионизованных атомов. М.: Энергоиздат, 1982.
3. Раутиан С. Г., Яценко А. С. Диаграммы Гротриана // УФН. 1999. 169, № 2. С. 217.
4. Grotrian W. Graphische Darstellung der Spektren von Atomen und Ionen mit ein, zwei und drei Valenzelektronen. Berlin: Springer, 1928. Bd. 2.
5. Yokozawa M., Matsuzaki M., Kamegaya T., Nakajima M. Grotrian Charts of Neutral and Singly Ionized Rare Gases in Vacuum UV-region (NHK Laboratories, ser.183). Tokyo: NHK Laboratories note, 1974.
6. Moore Ch., Merrill P. Partial Grotrian Diagrams of Astrophysical Interest. Washington: NSRDS-NBS 23, 1968.
7. Baskin S., Stoner J. Atomic Energy Levels and Grotrian Diagrams. Amsterdam: North Holland, 1975–1982. Vol. 1–4.
8. Shirai T., Sugar J., Wiese W. et al. Spectral Data for Highly Ionized Atoms: Ti, V, Cr, Mn, Fe, Co, Ni, Cu, Kr, Mo. N.-Y.: AIP, JPCRD, 2000. Monograph N 8.
9. Яценко А. С. Диаграммы Гротриана нейтральных атомов. Новосибирск: Наука, 1993.
10. Яценко А. С. Диаграммы Гротриана однократных ионов. Новосибирск: Наука, 1996.
11. Kramida A., Martin W. A compilation of energy levels and wavelengths for the spectrum of neutral beryllium (Be I) // Journ. Phys. and Chem. Ref. Data. 1997. 26, N 5. P. 1185.
12. <http://physics.nist.gov> (сайт Национального института стандартов и технологий, США).
13. <http://nedwww.ipac.caltech.edu/level5/Ewald/Grotrian/grotrian.html> (сайт NASA/IPAC Partial Grotrian of Astrophysical Interest).
14. <http://physics.unl.edu/~tgay/ns/grotrian.html> (сайт Университета Небраска, факультет физики и астрономии).
15. <http://www.atomicengineeringcorp.com> (сайт компании “Atomic Engineering Corp.”).

16. Селко Дж. SQL для профессионалов: Программирование /Пер. с англ. И. Афанасьева. М.: Лори, 2004.
17. <http://plasma-gate.weizmann.ac.il/Pubs.html> (Ralchenko Yu. V. Atomic Data and Data- base on the Internet. 1996. (Prepr.; WIS-96/4/Jan-PH)).
18. <http://plasma-gate.weizmann.ac.il/DBfApp.html> (сайт лаборатории плазмы Института Вайцмана, Израиль).
19. Яценко А. С. Графические представления спектральных данных атомов и молекул: Автореф. дис. ... канд. техн. наук /ИАиЭ СО РАН. Новосибирск, 2003. 20 с.
20. Овчинников С. М. XML: Язык форматирования документов World Wide Web. М.: Майор, 2001.
21. Казаков В. Г. Исследование, разработка и применение курсового обеспечения с использованием мультимедиа технологий в учебном процессе вуза: Автореф. дис. ... канд. физ.-мат. наук /НГУ. Новосибирск, 1999. 22 с.
22. <http://asd.nsu.ru> (сайт НГУ «Информационная система “Электронная структура атомов”»).

Институт автоматики и электрометрии СО РАН,
Новосибирский государственный университет,
E-mail: wwinc@ngs.ru,
kazakov@phys.nsu.ru

Поступила в редакцию
23 апреля 2004 г.