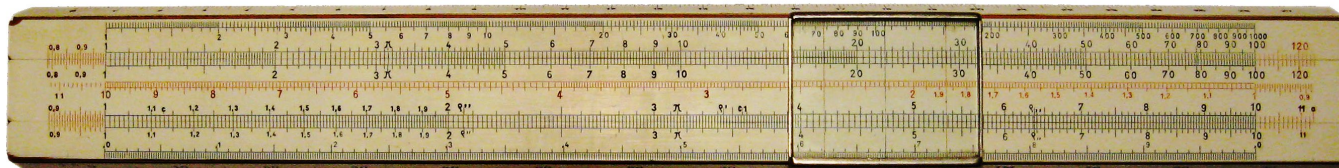
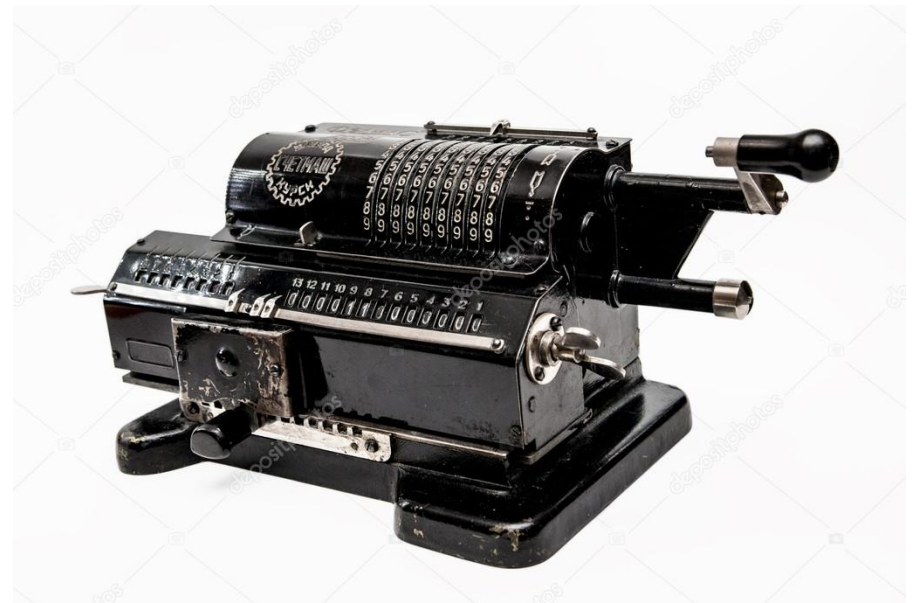
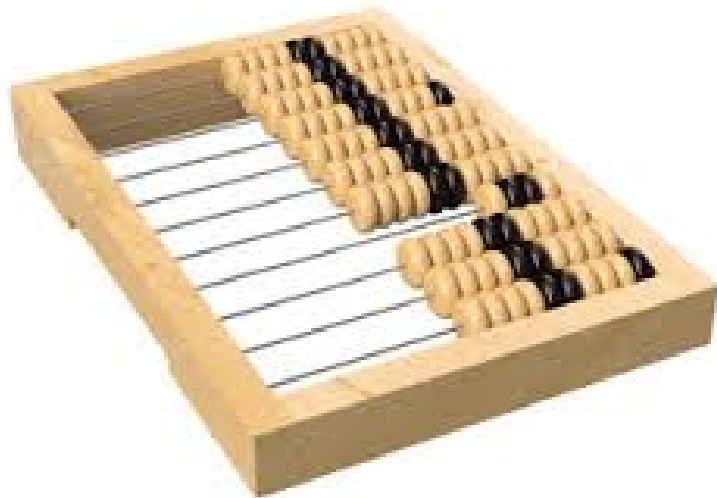


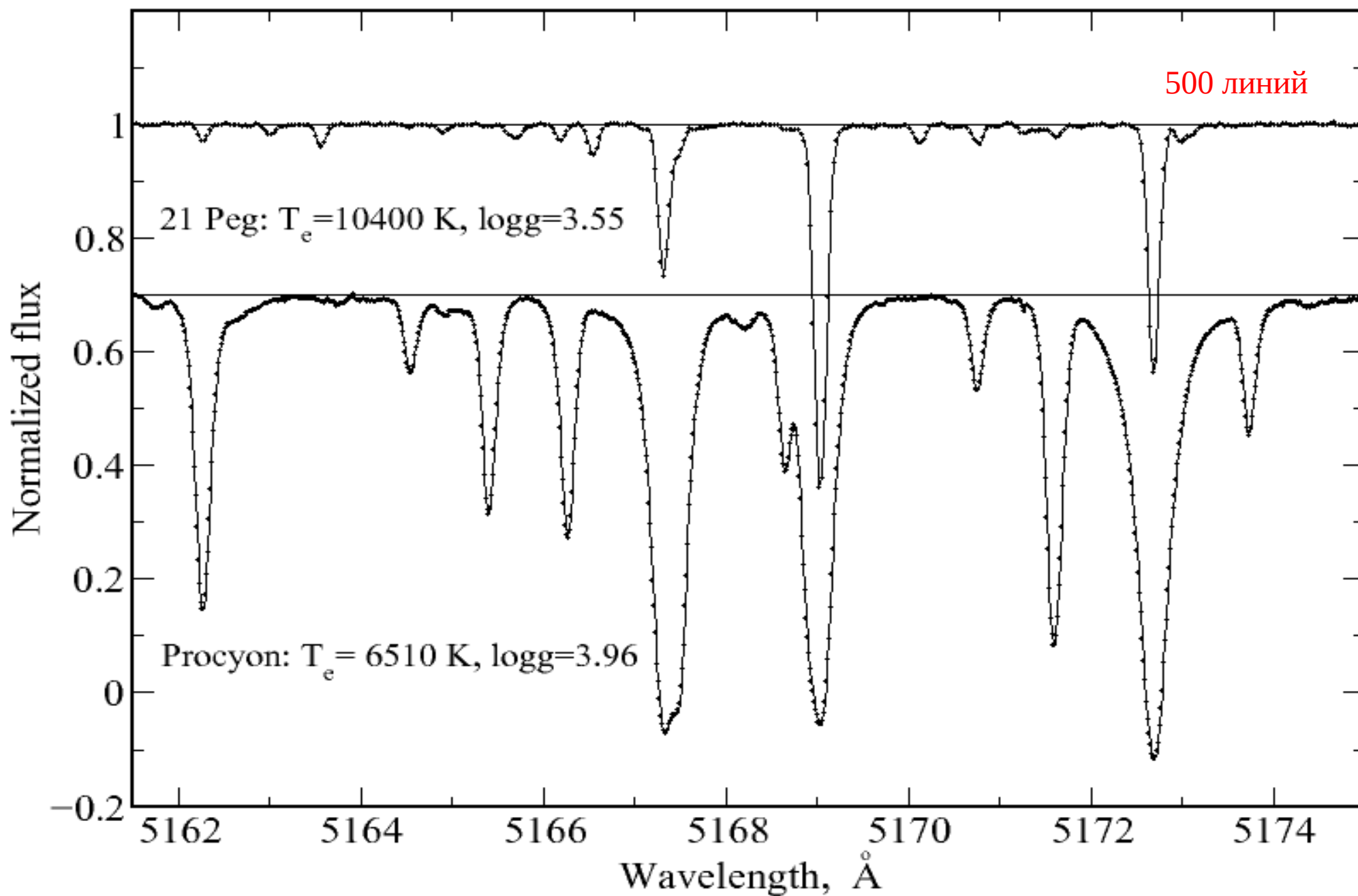
Какие величины нужны для описания спектральной линии

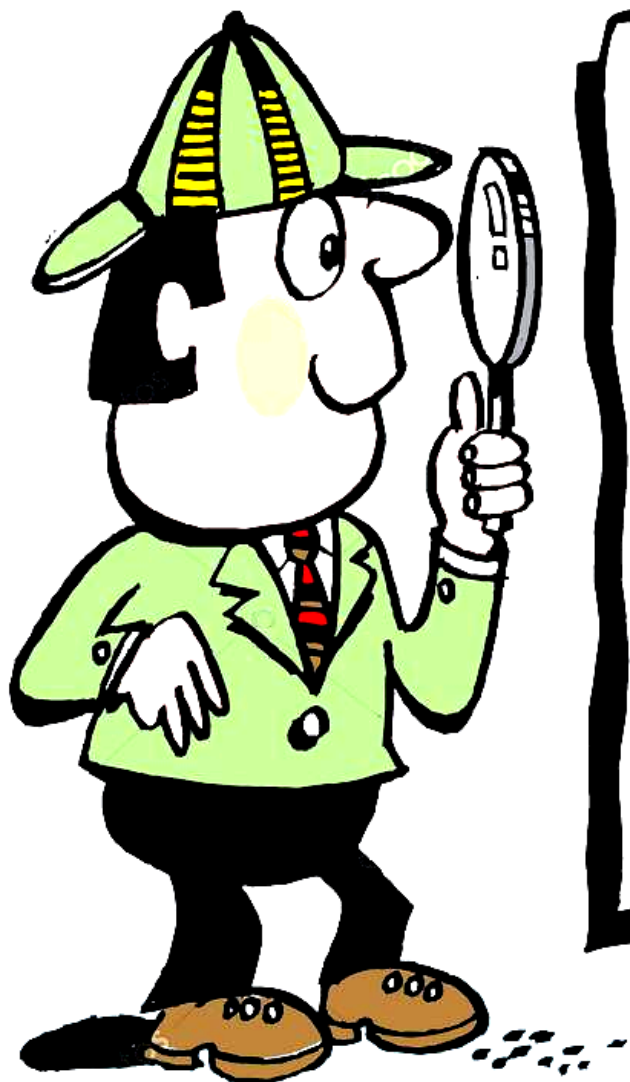


Чтобы описать форму и интенсивность спектральной линии необходимо знать следующие атомные параметры:

- центральную длину волны λ
- энергии возбуждения нижнего и верхнего уровней, E_i и E_j
- потенциалы ионизации χ_n
- полные угловые моменты обоих уровней, J_i и J_j
- вероятности переходов f_{ij} или A_{ji}
- константы затухания $\gamma_R, \gamma_4, \gamma_6$
- hfs-constants A и B для обоих уровней
- магнитный момент ядра I
- факторы Ланде g_i и g_j
- изотопное расщепление и изотопный состав

Нужны данные. Много, точных.





**Где можно найти эти
данные ?**

Как их достать ?

*Некоторые базы данных параметров
спектральных линий*

R.Kurucz database:

<http://kurucz.harvard.edu/>

Kurucz DB содержит практически все данные, необходимые для спектрального анализа:

а. расчет поглощения в линиях для моделей атмосфер

б. спектральный синтез для анализа химического состава

Нет специальных программ выборки

Completed Ions

	config		levels		E1 lines					
	even	odd	even	odd	good	wl	total	old	good	
Fe I	61	50	18655	18850	126290		7501218	789176		25 FEB 2018
Fe II	46	39	19771	19652	124654		7834553	1264969		8 DEC 2013
Fe III	49	41	19720	19820	37093		10799751	1604934		25 JUN 2015
Fe IV	61	54	13767	14211	8408		14617228	1776984		24 AUG 2006
Fe V	61	61	6560	7526	11417		7785320	1008385		21 AUG 2006
Fe VI	73	73	2094	2496	3534		9072714	475750		16 AUG 2010
Fe VII	85	86	7132	7032	2326		2816992	90250		9 JUL 2010
Fe VIII	52	52	1365	1244	233		220166	14561		20 JUL 2010
Fe IX	32	33	245	252	281		123563	39346		11 AUG 2015
Fe X	56	52	1555	1281	346		749848	0		6 APR 2016

[NIST Atomic Spectra database:](https://www.nist.gov/pml/atomic-spectra-database)

<https://www.nist.gov/pml/atomic-spectra-database>

Atomic Spectra Database

NIST Standard Reference Database 78

Version 5.6

Last Update to Data Content: October 2018 | [Version History & Citation Information](#) | [Disclaimer](#) |

DOI: <https://dx.doi.org/10.18434/T4W30F>

Welcome to the NIST Atomic Spectra Database, NIST Standard Reference Database #78. The spectroscopic data may be selected and displayed according to wavelengths or energy levels by choosing one of the following options:

LINES

Spectral lines and associated energy levels displayed in wavelength order with all selected spectra intermixed or in multiplet order. Transition probabilities for the lines are also displayed where available.

LEVELS

Energy levels of a particular atom or ion displayed in order of energy above the ground state.

GROUND STATES & IONIZATION ENERGIES

Ground states and ionization energies of atoms and atomic ions.

LIBS

ASD Interface for Laser Induced Breakdown Spectroscopy (LIBS)

NIST Atomic Spectra database:

<https://www.nist.gov/pml/atomic-spectra-database>

ASD

DATA

Information

LINES

LEVELS

List of SPECTRA

GROUND STATES & IONIZATION ENERGIES

Bibliography

Help

NIST
National Institute of
Standards and Technology
Physical Meas. Laboratory

NIST Atomic Spectra Database Lines Form

Best viewed with the latest versions of Web browsers and JavaScript enabled

Main Parameters		Spectrum		e.g., Fe I or Na;Mg; Al or mg i-iii or 198Hg I
Limits for	Wavelengths ▾	Lower:		
		Upper:		
Wavelength Units:		nm ▾		
Reset input		Retrieve Data	Show Graphical Options	Show Advanced Settings

Can you please provide some [feedback](#) to improve our database?

NIST Atomic Spectra database:

<https://www.nist.gov/pml/atomic-spectra-database>

Wavelength range: 5000 - 5010 Å

Wavelength in: vacuum below 2000 Å, air between 2000 and 20000 Å, vacuum above 20000 Å

Highest relative intensity: 41700

Some data for neutral and singly-charged ions are available in the [Handbook of Basic Atomic Spectroscopic Data](#)

Primary data sources		Query NIST Bibliographic Databases for Fe I (new window)
Energy Levels:	Nave et al. 1994 The wavenumber measurements in Nave et al 1994 were calibrated with respect to Ar II lines measured by Norén 1973 , which were re-measured later by Whaling et al. 1995 and found to be systematically too small. To account for this calibration error, the original measured wavenumbers and energy level values from Nave et al. 1994 have been increased here by 6.7 parts in 10 ⁶ . The ionization energy is from Schoenfeld et al. 1995 , adjusted by the same scaling factor.	Fe I Energy Levels
Lines:	Nave et al. 1994 Observed wavenumbers have been increased by 6.7 parts in 10 ⁶ , similar to the energy levels.	Fe I Line Wavelengths and Classification
Transition Probabilities:	Fuhr and Wiese 2006	Fe I Transition Probabilities

Observed Wavelength Air (Å)	Unc. (Å)	Ritz Wavelength Air (Å)	Unc. (Å)	Rel. Int. (?)	A_{ki} (s ⁻¹)	Acc.	E_i (cm ⁻¹)	E_k (cm ⁻¹)	Lower Level Conf., Term, J	Upper Level Conf., Term, J	Type	TP Ref.	Line Ref.
5 000.210	0.004	5 000.2109	0.0006	65			37 409.555 - 57 403.134	3d ⁶ (⁵ D)4s4p(¹ P°)	y ⁵ P° 1	3d ⁶ 4s(⁶ D)5d ⁵ P 2			L11631
5 001.8633	0.0008	5 001.8631	0.0004	20900	3.7e+07	D+	31 307.245 - 51 294.220	3d ⁶ (⁵ D)4s4p(³ P°)	z ³ F° 4	3d ⁶ (⁵ D)4s(⁴ D)5s e ³ D 3		T2491n	L11631
5 002.581	0.005	5 002.5829	0.0006	79bl*			33 765.306 - 53 749.405	3d ⁸	c ³ F 2	3d ⁶ (³ G)4s4p(³ P°)	x ³ F° 2		L11631
5 002.581	0.005	5 002.5860	0.0006	79bl*			38 995.736 - 58 979.823	3d ⁷ (⁴ F)4p	y ³ D° 1	3d ⁶ 4s(⁴ D)4d ³ D 2			L11631
5 002.7924	0.0008	5 002.7920	0.0004	2570	8.8e+05	D	27 394.691 - 47 377.955	3d ⁶ (⁵ D)4s4p(³ P°)	z ⁵ F° 3	3d ⁷ (⁴ F)5s e ⁵ F 4		T2578n	L11631
5 004.0440	0.0008	5 004.0433	0.0004	468	3.7e+06	E	33 946.933 - 53 925.200	3d ⁶ (⁵ D)4s4p(³ P°)	z ³ P° 2	3d ⁷ (⁴ F)4d f ⁵ P 1		T2578n	L11631
5 004.341	0.004	5 004.3399	0.0004	105			26 623.735 - 46 600.818	3d ⁷ (² D2)4s	a ³ D 2	3d ⁶ (³ P2)4s4p(³ P°)	z ³ S° 1		L11631
5 005.7120	0.0008	5 005.7120	0.0004	15800			31 322.613 - 51 294.220	3d ⁶ (⁵ D)4s4p(³ P°)	z ³ D° 3	3d ⁶ (⁵ D)4s(⁴ D)5s e ³ D 3			L11631
5 006.1188	0.0008	5 006.1184	0.0004	41700	5.87e+06	B+	22 845.869 - 42 815.855	3d ⁶ (⁵ D)4s4p(³ P°)	z ⁷ F° 5	3d ⁶ (⁵ D)4s(⁶ D)5s e ⁷ D 5		T5720	L11631

NIST Atomic Spectra database:

<https://www.nist.gov/pml/atomic-spectra-database>

Данные: по линиям, по уровням, энергиям ионизации, ...

Достоинства:

Проверенные данные, наличие формы запроса

Недостатки:

- Относительно небольшое количество данных. Fe II: 1136 линий vs 124654 в Kurucz DB.
 - Мало данных для тяжелых элементов
 - Не для всех линий даны коэффициенты A
 - Мало функций формы запроса

VALD – Vienna Atomic Line database

<http://vald.astro.uu.se/~vald/php/vald.php>
<http://vald.inasan.ru/~vald3/php/vald.php>

Selected and retrieved **9** abstracts. Total citations: **2575**

#	Bibcode Authors	Cites Title	Date	List of Links Access Control Help
1	☐ 1999A&AS..138..119K Kupka, F.; Piskunov, N.; Ryabchikova, T. A.; Stempels, H. C.; Weiss, W. W.	1235.000 VALD-2: Progress of the Vienna Atomic Line Data Base	07/1999	A E F
2	☐ 1995A&AS..112..525P Piskunov, N. E.; Kupka, F.; Ryabchikova, T. A.; Weiss, W. W.; Jeffery, C. S.	761.000 VALD: The Vienna Atomic Line Data Base.	09/1995	A F G
3	☐ 2000BaltA...9..590K Kupka, F. G.; Ryabchikova, T. A.; Piskunov, N. E.; Stempels, H. C.; Weiss, W. W.	345.000 VALD-2 -- The New Vienna Atomic Line Database	00/2000	A F G
4	☐ 2015PhyS...90e4005R Ryabchikova, T.; Piskunov, N.; Kurucz, R. L.; Stempels, H. C.; Heiter, U.; Pakhomov, Yu; Barklem, P. S.	176.000 A major upgrade of the VALD database	05/2015	A E

1991 – в Вене (Австрия) группа астрофизиков из Австрии, России и Швеции приступила к созданию открытой базы данных атомных параметров VALD

Основа VALD – компиляция данных из разных источников, включая NIST и списки Kurucz.

1994 - VALD-1 содержала данные для около 1 миллионов линий

1999 – VALD-2 более 2 миллионов линий наблюдаемых и более 40 миллионов рассчитанных

2012 – VALD-3 около 250 миллионов линий атомов и около 1.5 миллиардов линий некоторых двухатомных молекул (TiO, CN, CH, C₂, O₂, SiH, FeH, MgH и др.) и воды.

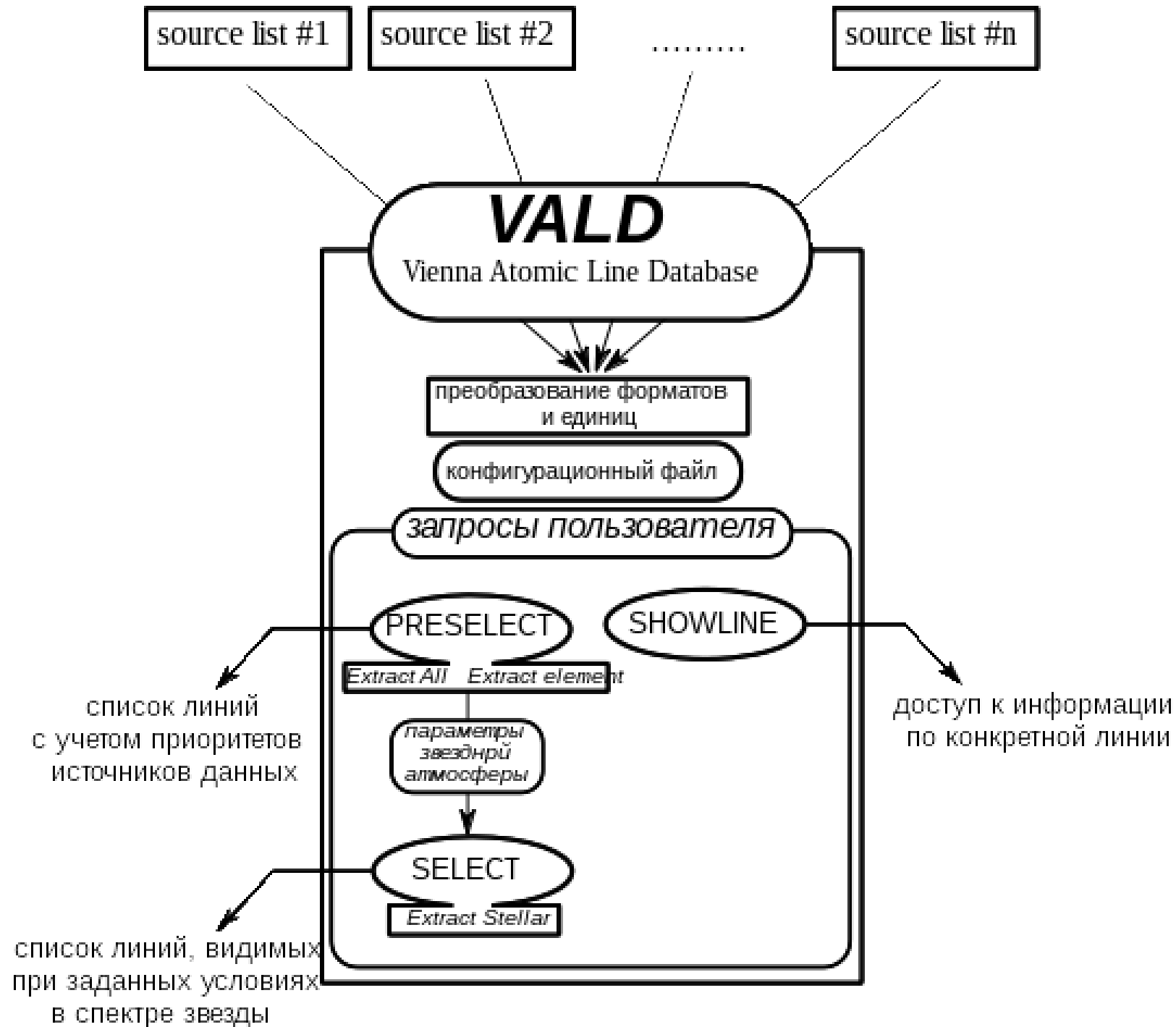
!!! База данных создана теми, кто использует эти данные

VALD

1. Написана с нуля на языках FORTRAN, C
2. Реляционная (табличная)
3. Основана на файлах (каждый файл соответствует конкретной работе, статье, ...)
4. Индексация данных
5. Использует сжатие, бинарный внутренний формат

Отличия от стандартных СУБД SQL

1. Уникальным считается объект — спектральная линия и ее параметры, которые могут содержаться в нескольких записях и, поэтому различаться.
2. Имеет механизм идентификации спектральной линии
3. Имеет систему приоритетов для используемых файлов данных
4. Значительный выигрыш в скорости выполнения запросов и потребляемым ресурсам: память и процессор
5. Выдает данные только по тем спектральным линиям, которые могут наблюдаться



Showline

Пример работы для линии FeI 5162.27A

These are the spectral lines found (VALD ranking is shown in parentheses below each entry):

Database reference for the line	Wavelength [A]	Element Ion	log gf	E _{low} [cm ⁻¹]	J _{low}	E _{up} [cm ⁻¹]	J _{up}	Lande eff	Lande low	Lande up	γ Rad	γ Stark	γ VdW	Lower level coupling electronic configuration Term designation	Upper level coupling electronic configuration Term designation	Source Accuracy Comment
Kurucz obs. energy level: Fe 1	5162.1448 (3)	Fe 1	-4.148 (3)	40871.4120 (3)	2.0	60237.8100 (3)	2.0	1.478 (3)	1.48	1.48	7.550 (3)	-3.900 (3)	-7.060 (3)	LS 3d8 3P	LS 3d6.(5D).4s.(6D).7p 5D*	Kurucz Fe I 2014 (3) Fe
Fe: NBS data	5162.2700 (2)	Fe 1	0.020 (4)	33695.0000 (2)	5.0	53061.0000 (2)	5.0	99.000 (2)	99.00	99.00	0.000 (2)	0.000 (2)	0.000 (2)	LS - y5F*	LS - g5F	ND Fe: NBS data. (3) Fe
Kurucz obs. energy level: Fe 1	5162.2720 (3)	Fe 1	0.362 (3)	33695.3970 (3)	5.0	53061.3180 (3)	5.0	1.394 (3)	1.42	1.37	8.380 (3)	-3.960 (3)	-7.520 (3)	LS 3d7.(4F).4p y5F*	LS 3d7.(4F).4d g5F	Kurucz Fe I 2014 (3) Fe
Fe 1: exp. data	5162.2729 (3)	Fe 1	0.020 (6)	33695.3950 (2)	5.0	53061.3140 (2)	5.0	99.000 (2)	1.42	99.00	0.000 (2)	0.000 (2)	0.000 (2)	LS 3p6.3d7.(a4F).4p y5F*	LS 3p6.3d7.(a4F).4d g5F	N D Fe 1 exp. (2) Fe
Van der Waals data	5162.2920 (0)	Fe 1	0.000 (1)	33697.4920 (1)	5.0	53062.6610 (1)	5.0	99.000 (1)	99.00	99.00	0.000 (1)	0.000 (1)	798.279 (9)			Van der Waals da (1) Fe
Kurucz obs. energy level: Fe 1	5162.3759 (3)	Fe 1	-4.601 (3)	21038.9870 (3)	2.0	40404.5180 (3)	1.0	0.246 (3)	0.66	1.50	8.650 (3)	-5.890 (3)	-7.710 (3)	LS 3d6.4s2 b3F2	LS 3d6.(5D).4s.4p.(1P*) x5D*	Kurucz Fe I 2014 (3) Fe
Kurucz obs. energy level: Fe 1	5162.3927 (3)	Fe 1	-6.640 (3)	39969.8530 (3)	3.0	59335.3210 (3)	2.0	1.676 (3)	1.50	1.33	8.650 (3)	-3.640 (3)	-7.180 (3)	LS 3d6.(5D).4s.4p.(1P*) x5D*	JK 3d6.4s.(6D<9/2>).5g 2[5/2]	Kurucz Fe I 2014 (3) Fe
Kurucz obs. energy level: Fe 1	5162.3930 (3)	Fe 1	-8.955 (3)	39969.8530 (3)	3.0	59335.3200 (3)	3.0	1.512 (3)	1.50	1.52	8.650 (3)	-3.640 (3)	-7.180 (3)	LS 3d6.(5D).4s.4p.(1P*) x5D*	JK 3d6.4s.(6D<9/2>).5g 2[5/2]	Kurucz Fe I 2014 (3) Fe

The data above should be combined to the following set of lines (The output in long format skipping Lande factors is displayed). Numbers in front of the source keys refer to the line list names below.

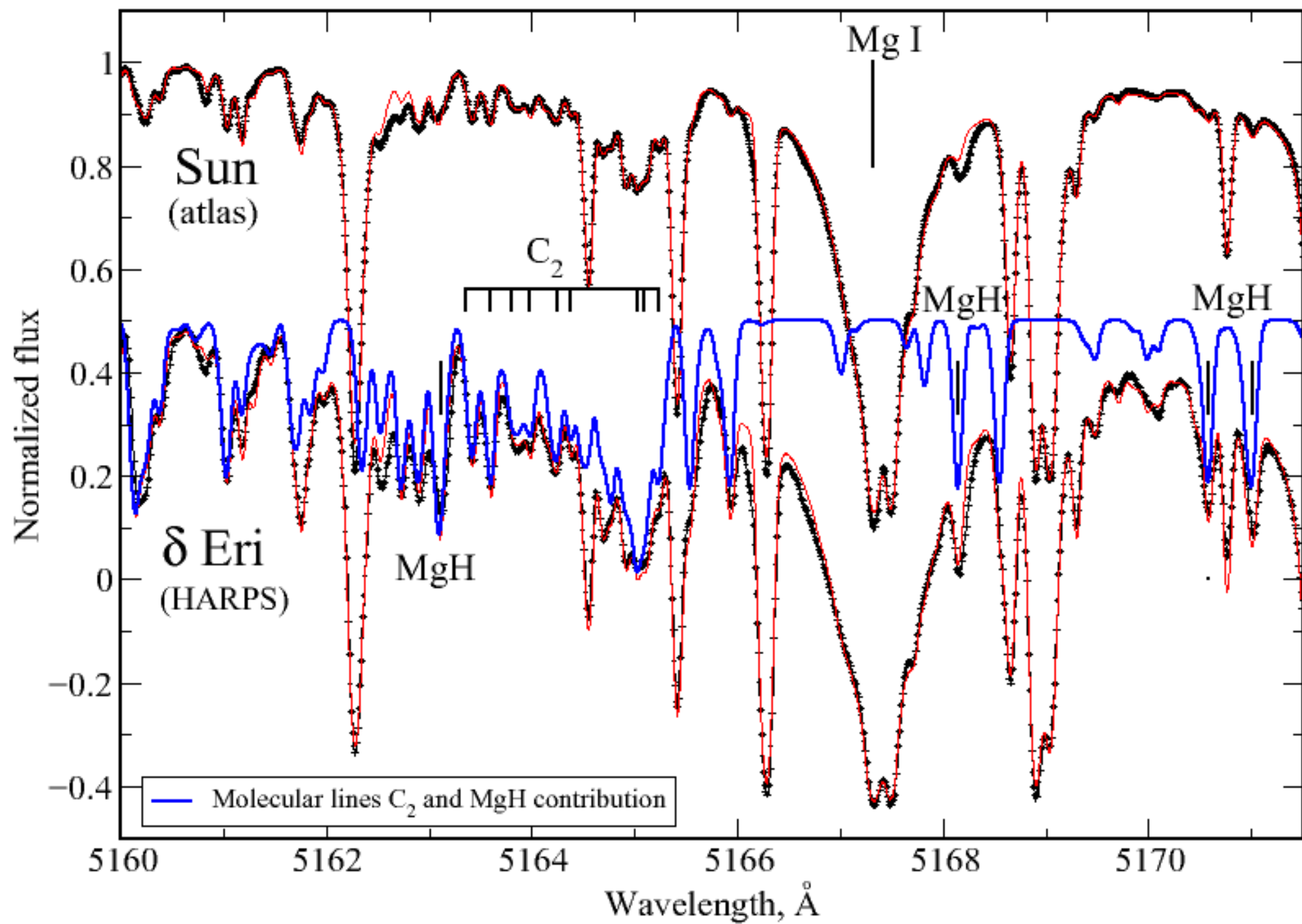
Wavelength [A, air]	Element Ion	log gf	E _{low} [cm ⁻¹]	J _{low}	E _{up} [cm ⁻¹]	J _{up}	Lande	γ Rad	γ Stark	γ VdW	Lower level coupling electronic configuration Term designation	Upper level coupling electronic configuration Term designation	Reference for wavelength
5162.2720 1 wt: K14	Fe 1	0.020 2 gf: FMW	33695.3970 1 K14	5.0	53061.3180 1 K14	5.0	1.39 1 K14	8.380 1 K14	-3.960 1 K14	798.279 3 BPM	LS 3d7.(4F).4p y5F* 1 K14	LS 3d7.(4F).4d g5F 1 K14	N D Kurucz Fe I 2014 Fe

Key to references:

1 Kurucz obs. energy level: Fe 1

2 Fe 1: exp. data

3 Van der Waals data



Welcome to VALD3

Please enter your registered email address :

LoginReset

Documentation

About VALD

Documentation

News

VALD3 Mirror Servers

VALD3 Mirror Uppsala

VALD3 Mirror Vienna

VALD3 Mirror Moscow

Contact / Registration

Contact form

About VALD

The Vienna Atomic Line Database (VALD) is a collection of atomic and molecular transition parameters of astronomical interest. VALD offers tools for selecting subsets of lines for typical astrophysical applications: line identification, preparing for spectroscopic observations, chemical composition and radial velocity measurements, model atmosphere calculations etc.

The VALD Electronic Mail Service (VALD-EMS) is the main data transfer protocol for small data sets. For larger data extraction VALD users are advised to use the 'via ftp' option. This web portal is the main user interface to VALD VALD-EMS. It offers full functionality of the extraction tools and flexibility of data access. An alternative user interface and data transfer protocol are offered via the Virtual Atomic and Molecular Data Center ([VAMDC](#)). This option allows direct computer access to VALD and many other databases but it lacks some of the functionality that is present in the VALD extraction tools.

Below are the main ideas behind VALD concept that may help you using it in the most efficient way:

- VALD extraction tools are constructed for intelligent selection of data relevant for specific astronomical problem.
- Bulk data transfer via remote access is highly inefficient. For massive extraction (e.g. for computing opacity tables) you should consider hosting a mirror site. Contact VALD administrator <- link if you are interested.
- VALD is regularly updated with critically evaluated data sets. The VALD project team experts investigate the statistical properties of the data, extensively compare the results obtained with different data sources, and establish the quality rating for each new source which is a basis for data selection. This portal offers you a possibility to create and save an alternative ranking table that would also ensures reproducibility of the extraction.
- VALD data access is free but requires registration. Registration helps us rejecting spam, collecting statistics and informing you about updates. We do not share your registration information with anyone.

If you have any comments about VALD, or would like to register as a client, please contact us through our [contact pages](#).



VALD в настоящее время

1. Пять зеркал:
 1. Uppsala Universitet (Швеция)
 2. Институт Астрономии РАН (Москва)
 3. Wien Universitat (Австрия)
 4. Goettingen University (Германия)
 5. NASA (США)
2. Сотни зарегистрированных пользователей из 52 стран мира
3. Около 50 запросов в месяц
4. Более 2500 ссылок на статьи по VALD в высокорейтинговых международных журналах
 1. 1006 на VALD-1 (42 ссылки в год или 3.5 в месяц)
 2. 1235 на VALD-2 (65 ссылок в год или >1 в неделю)
 3. 176 на VALD-3a (~ 1 ссылка в неделю)

Короткий формат VALD

- Ион
- Длина волны (Å)
- Энергия нижнего уровня E_{low} (cm⁻¹)
- Квантовое число J_{low}
- Сила осциллятора **log gf**
- Ланде фактор эффективный **g**
- константы уширения
- Ссылки

Длинный формат VALD

- Ион
- Длина волны (Å, вакуум)
- Длина волны (Å, атм)
- Энергия нижнего уровня E_{low} (cm⁻¹)
- Квантовое число J_{low}
- Энергия верхнего уровня E_{up} (cm⁻¹)
- Квантовое число J_{up}
- Сила осциллятора **log gf**
- Ланде фактор эффективный **g**
- Ланде фактор нижнего уровня **g_{low}**
- Ланде фактор верхнего уровня **g_{up}**
- константы уширения
- электронная конфигурация, терм нижнего уровня
- электронная конфигурация, терм верхнего уровня
- Ссылки

VALD output

```

5098.0000,    5300.0000,   312,    4875, 0.5, Wavelength region, lines selected, lines processed, Vmicro
Damping parameters Lande Central
Elm Ion  WL(A)      Excit(eV) Vmic log(gf) Rad.      Stark      Waals factor depth      Reference
'Fe 2', 5160.8390,    5.5690,   0.5,   -2.559,   8.490,   -6.520,   -7.890,   1.140,   0.146,   '  1  1  2  1  1  1  6'
'Fe 2', 5161.1840,    2.8560,   0.5,   -4.573,   8.560,   -6.530,   -7.893,   0.720,   0.051,   '  1  1  2  1  1  1  6'
'Fe 1', 5162.2729,    4.1780,   0.5,    0.020,   8.380,   -3.960,   -7.239,   1.390,   0.072,   '  7  7  7  1  1  1  6'
'Fe 1', 5165.4100,    4.2200,   0.5,   -0.003,   8.380,   -4.710,   -7.510,   1.300,   0.067,   '  1  1  1  1  1  1  1'
'Fe 2', 5166.5550,   10.4550,   0.5,   -0.045,   8.950,   -5.170,   -7.570,   0.730,   0.136,   '  1  1  2  1  1  1  1'
'Mg 1', 5167.3210,    2.7090,   0.5,   -1.030,   7.990,    0.000,   -7.267,  99.000,   0.330,   ' 19 19 19 6 19 19 6'
'Fe 1', 5167.4885,    1.4850,   0.5,   -1.118,   6.750,   -6.150,   -7.687,   1.150,   0.149,   '  7  7  7  1  1  1  6'
'Fe 2', 5167.5310,   10.4800,   0.5,   -0.766,   8.950,   -5.190,   -7.570,   1.190,   0.038,   '  1  1  2  1  1  1  1'
'Fe 2', 5169.0330,    2.8910,   0.5,   -1.250,   8.510,   -6.500,   -7.887,   1.330,   0.713,   '  7  7  7  1  1  1  6'
'Fe 2', 5169.8080,   10.5000,   0.5,   -1.198,   8.920,   -5.110,   -7.570,   1.500,   0.012,   '  1  1  2  1  1  1  1'
'Fe 2', 5170.7770,   10.4550,   0.5,   -0.330,   8.960,   -5.210,   -7.570,   1.460,   0.082,   '  1  1  2  1  1  1  1'
'LL_10400g355.krz',
'H :    0.91', 'He: -1.05',
'Li:-10.90', 'Be:-10.60', 'B : -9.34', 'C : -3.65', 'N : -4.05', 'O : -3.45',
'F :   -7.48', 'Ne:  -3.90', 'Na: -5.62', 'Mg: -4.35', 'Al: -5.89', 'Si: -4.90',
'P :   -6.44', 'S :   -4.95', 'Cl:  -6.54', 'Ar: -5.86', 'K :  -6.96', 'Ca: -5.85',
'Sc: -9.38', 'Ti:  -7.21', 'V :  -8.00', 'Cr: -6.27', 'Mn: -6.53', 'Fe: -4.62',
'Co: -6.85', 'Ni:  -5.71', 'Cu: -7.83', 'Zn: -6.95', 'Ga: -9.16', 'Ge: -8.46',
, 'END'
References:
 1. GFIRON obs. energy level: Fe_2007
 2. Raassen & Uyling: Fe 2
 3. VALD 2: Ni
 4. GFIRON obs. energy level: Ni
 5. NBS: Nickel
 6. VALD 2: VanderWaals_new_corCr
 7. VALD 2: Fe
.....
19. NLTE lines: Mg
20. NLTE lines: Si

```

УДК 524.3-355.3, 539.184.26, 004.65

СВЕРХТОНКОЕ РАСЩЕПЛЕНИЕ В БАЗЕ ПАРАМЕТРОВ СПЕКТРАЛЬНЫХ ЛИНИЙ VALD

© 2019 г. Ю. В. Пахомов^{1*}, Т. А. Рябчикова¹, Н. Е. Пискунов²

¹Институт астрономии Российской академии наук, Москва, Россия

²Институт физики и астрономии, Уппсала, Швеция

Поступила в редакцию 24.06.2019 г.; после доработки 05.07.2019 г.; принята к публикации 22.07.2019 г.

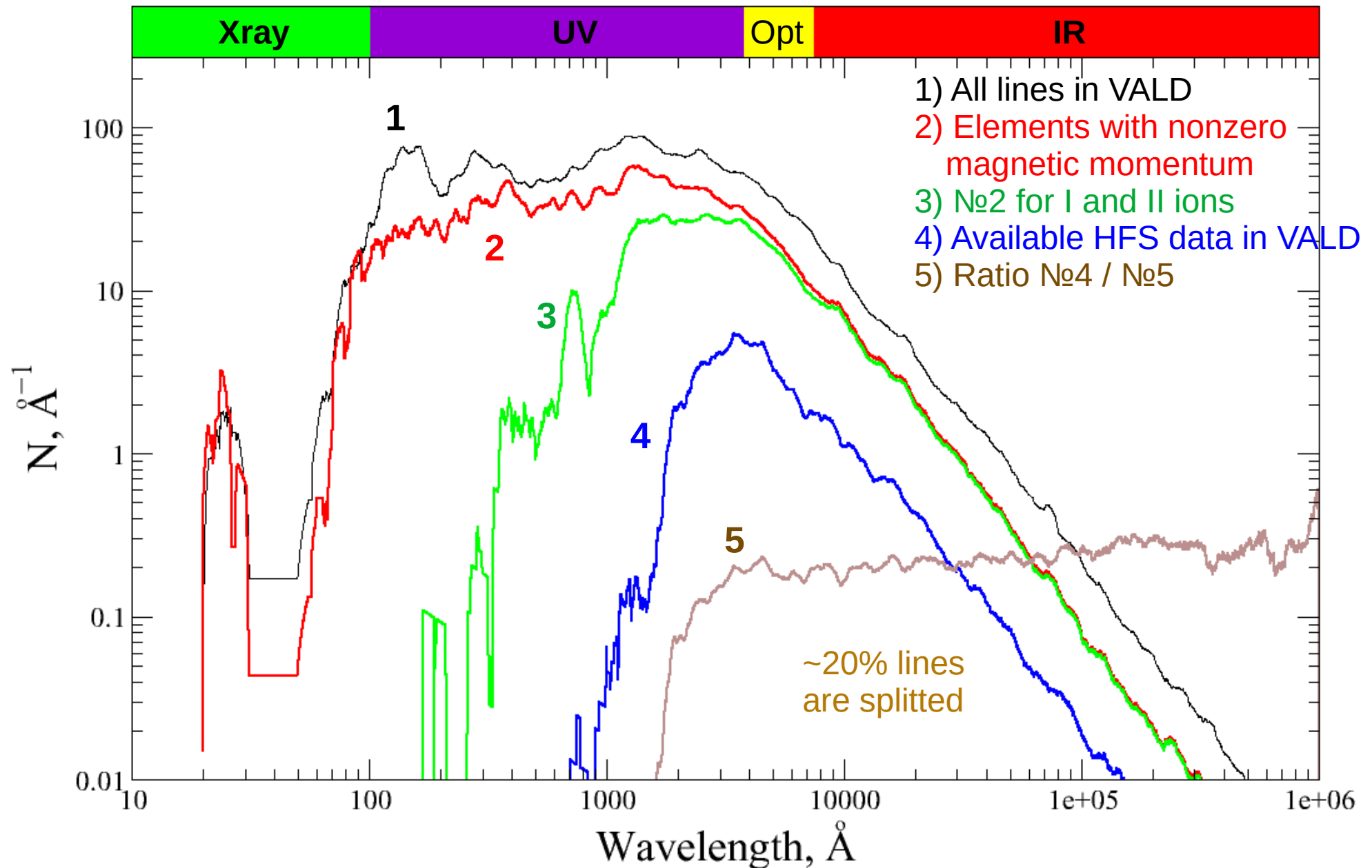
Венская база данных атомных параметров спектральных линий VALD дополняется новыми данными и новой функциональностью — возможностью учета эффекта сверхтонкого расщепления (HFS) при анализе профилей линий. Для этого нами создана вспомогательная SQL база данных с постоянными сверхтонкой структуры для 58 изотопов 30 нейтральных и однократно ионизованных атомов. Проведен анализ полноты собранных данных и новых возможностей при исследовании звезд различных спектральных классов. База данных позволяет учитывать расщепление до 60% линий с измеряемым эффектом в ультрафиолетовом ($\lambda \gtrsim 1000 \text{ \AA}$), и до 100% — в видимом и инфракрасном диапазонах ($\lambda \lesssim 25\,000 \text{ \AA}$) для A–M звезд. В спектрах горячих O–B звезд необходимо привлекать лабораторные измерения для атомов второй и выше стадий ионизации.

DOI: 10.1134/S0004629919120065

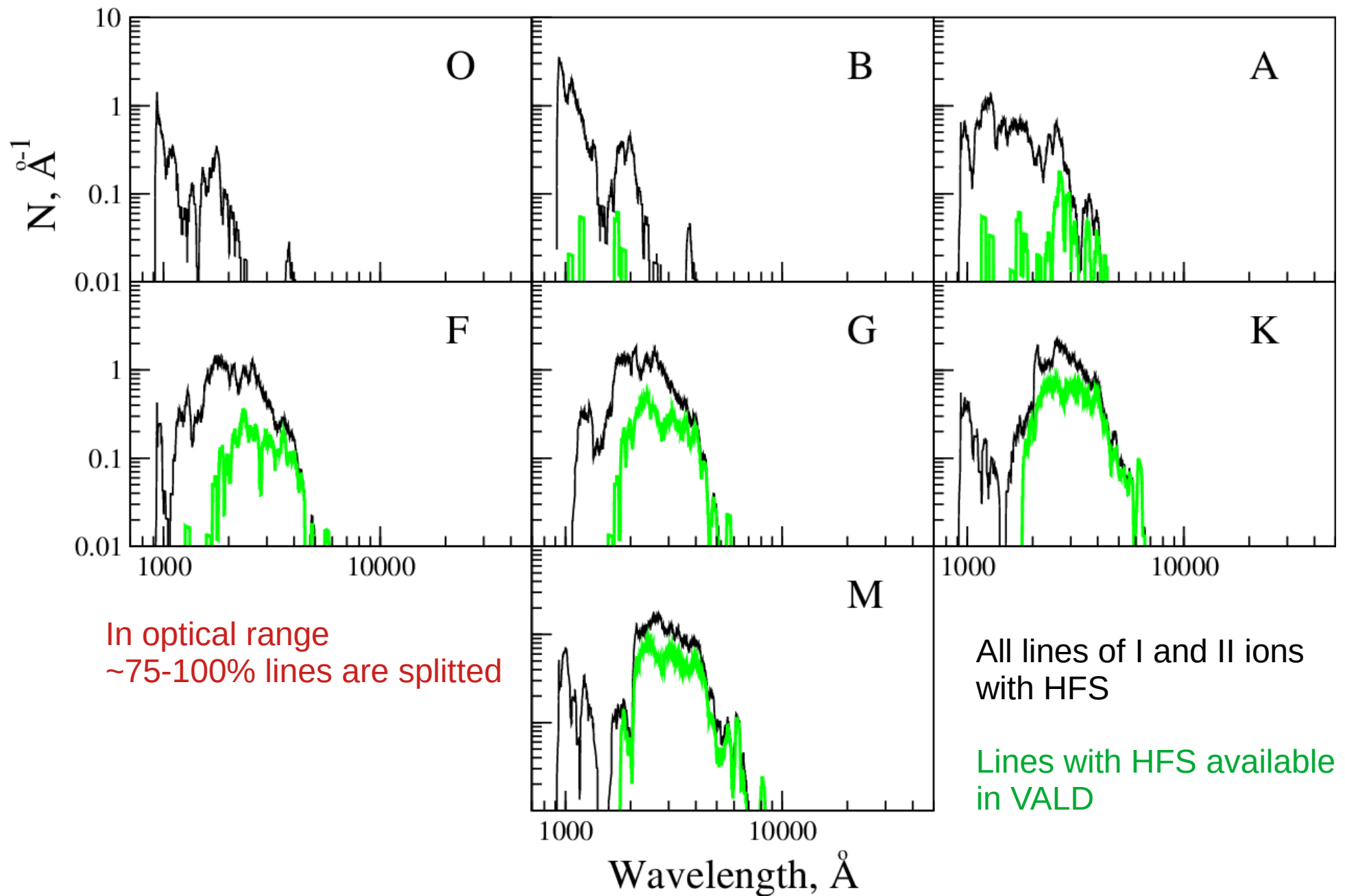
58 isotopes with HFS data and its 3970 levels in VALD

Elem	N	Elem	N	Elem	N	Elem	N	Elem	N	Elem	N
⁶ Li I	3	⁴⁵ Sc II	42	⁵⁷ Fe I	57	⁷¹ Ga I	5	¹³⁵ Ba II	38	¹⁶⁵ Ho I	165
⁷ Li I	3	⁴⁷ Ti I	34	⁵⁹ Co I	371	⁷¹ Ga II	8	¹³⁷ Ba II	38	¹⁷⁵ Lu I	17
²³ Na I	60	⁴⁷ Ti II	80	⁵⁹ Co II	4	⁸⁵ Rb I	3	¹³⁹ La II	108	¹⁷⁵ Lu II	4
²⁷ Al I	23	⁴⁹ Ti I	34	⁶¹ Ni I	6	⁸⁷ Rb I	3	¹⁴¹ Pr I	90	¹⁷⁶ Lu I	19
²⁷ Al II	44	⁴⁹ Ti II	80	⁶³ Cu I	70	⁸⁹ Y II	39	¹⁴¹ Pr II	293	¹⁸¹ Ta I	507
³⁹ K I	21	⁵⁰ V I	11	⁶⁵ Cu I	70	⁹³ Nb II	53	¹⁵¹ Eu II	13	¹⁸¹ Ta II	210
⁴⁰ K I	5	⁵¹ V I	332	⁶⁷ Zn I	13	⁹⁵ Mo II	21	¹⁵³ Eu II	13	²⁰³ Tl I	2
⁴¹ K I	5	⁵¹ V II	116	⁶⁷ Zn II	2	⁹⁷ Mo II	21	¹⁵⁵ Gd II	68	²⁰⁵ Tl I	4
⁴⁵ Sc I	45	⁵⁵ Mn I	144	⁶⁹ Ga I	5	¹²⁷ I I	107	¹⁵⁷ Gd II	67	²⁰⁹ Bi III	5
		⁵⁵ Mn II	221	⁶⁹ Ga II	8	¹²⁷ I II	61	¹⁵⁹ Tb II	79		

Distribution of number of spectral lines in VALD



Distribution of number of spectral lines
with central depth > 0.3 relative continuum level
Only well observed lines



Hyperfine splitting

Spectral line in long VALD format



Searching A,B,I for lower and upper levels in SQLite3 database

Not found



Output as single line

found



Calculations:

- 1) number of components (N)
- 2) wavelength shifts ($\Delta\lambda$)
- 3) relative intensity ($\log gf$)



Output N lines



Простая выборка линий лития

```

6705.00000, 6710.00000, 2, 442, 1.0, Wavelength region, lines selected, lines processed, Vmicro
                                Damping parameters Lande Central
Spec Ion      WL_air(A) Excit(eV) Vmic log gf*  Rad.  Stark  Waals factor depth Reference
'Li 1',       6707.7635,   0.0000, 1.0, -0.036, 7.560, -5.780, 0.000,99.000, 0.012, '   1 YD,REB   1 YD,
'Li 1',       6707.9145,   0.0000, 1.0, -0.337, 7.560, -5.780, 0.000,99.000, 0.006, '   1 YD,REB   1 YD,
'sun_kurucz_p00k2_T05770G44.krz',
'H :  0.91', 'He: -1.05',
'Li:-10.88', 'Be:-10.89', 'B : -9.44', 'C : -3.48', 'N : -3.99', 'O : -3.11',
'F : -7.48', 'Ne: -3.95', 'Na: -5.71', 'Mg: -4.46', 'Al: -5.57', 'Si: -4.49',
'P : -6.59', 'S : -4.83', 'Cl: -6.54', 'Ar: -5.48', 'K : -6.82', 'Ca: -5.68',
'Sc: -8.94', 'Ti: -7.05', 'V : -8.04', 'Cr: -6.37', 'Mn: -6.65', 'Fe: -4.37',
'Co: -7.12', 'Ni: -5.79', 'Cu: -7.83', 'Zn: -7.44', 'Ga: -9.16', 'Ge: -8.63',
'As: -9.67', 'Se: -8.69', 'Br: -9.41', 'Kr: -8.81', 'Rb: -9.44', 'Sr: -9.14',
'Y : -9.80', 'Zr: -9.54', 'Nb:-10.62', 'Mo:-10.12', 'Tc:-20.00', 'Ru:-10.20',
'Rh:-10.92', 'Pd:-10.35', 'Ag:-11.10', 'Cd:-10.18', 'In:-10.58', 'Sn:-10.04',
'Sb:-11.04', 'Te: -9.80', 'I : -10.53', 'Xe: -9.81', 'Cs:-10.92', 'Ba: -9.91',
'La:-10.82', 'Ce:-10.49', 'Pr:-11.33', 'Nd:-10.54', 'Pm:-20.00', 'Sm:-11.04',
'Eu:-11.53', 'Gd:-10.92', 'Tb:-11.94', 'Dy:-10.94', 'Ho:-11.78', 'Er:-11.11',
'Tm:-12.04', 'Yb:-10.96', 'Lu:-11.28', 'Hf:-11.16', 'Ta:-11.91', 'W : -10.93',
'Re:-11.77', 'Os:-10.59', 'Ir:-10.69', 'Pt:-10.24', 'Au:-11.03', 'Hg:-10.95',
'Tl:-11.14', 'Pb:-10.19', 'Bi:-11.33', 'Po:-20.00', 'At:-20.00', 'Rn:-20.00',
'Fr:-20.00', 'Ra:-20.00', 'Ac:-20.00', 'Th:-11.92', 'Pa:-20.00', 'U : -12.51',
'Np:-20.00', 'Pu:-20.00', 'Am:-20.00', 'Cm:-20.00', 'Bk:-20.00', 'Cf:-20.00',
'Es:-20.00', 'END'

```

* oscillator strengths were scaled by the solar isotopic ratios.

References:

1. Li 1 - K 5 Bell

Выборка линий лития с учетом изотопов

```

6705.00000, 6710.00000, 4, 442, 1.0, Wavelength region, lines selected, lines processed, Vmicro
Damping parameters Lande Central
Spec Ion      WL_air(A) Excit(eV) Vmic log gf* Rad. Stark Waals factor depth Reference
'Li 1',       6707.7635,  0.0000, 1.0, -0.036, 7.560, -5.780, 0.000,99.000, 0.012, ' 1 YD,REB 1 YD,
'Li 1',       6707.9145,  0.0000, 1.0, -0.337, 7.560, -5.780, 0.000,99.000, 0.006, ' 1 YD,REB 1 YD,
'Li 1',       6707.9215,  0.0000, 1.0, -1.122, 7.560, -5.780, 0.000,99.000, 0.001, ' 1 YD,REB 1 YD,
'Li 1',       6708.0725,  0.0000, 1.0, -1.423, 7.560, -5.780, 0.000,99.000, 0.001, ' 1 YD,REB 1 YD,
'sun_kurucz_p00k2_T05770G44.krz',
'H : 0.91', 'He: -1.05',
'Li: -10.88', 'Be: -10.89', 'B : -9.44', 'C : -3.48', 'N : -3.99', 'O : -3.11',
'F : -7.48', 'Ne: -3.95', 'Na: -5.71', 'Mg: -4.46', 'Al: -5.57', 'Si: -4.49',
'P : -6.59', 'S : -4.83', 'Cl: -6.54', 'Ar: -5.48', 'K : -6.82', 'Ca: -5.68',
'Sc: -8.94', 'Ti: -7.05', 'V : -8.04', 'Cr: -6.37', 'Mn: -6.65', 'Fe: -4.37',
'Co: -7.12', 'Ni: -5.79', 'Cu: -7.83', 'Zn: -7.44', 'Ga: -9.16', 'Ge: -8.63',
'As: -9.67', 'Se: -8.69', 'Br: -9.41', 'Kr: -8.81', 'Rb: -9.44', 'Sr: -9.14',
'Y : -9.80', 'Zr: -9.54', 'Nb: -10.62', 'Mo: -10.12', 'Tc: -20.00', 'Ru: -10.20',
'Rh: -10.92', 'Pd: -10.35', 'Ag: -11.10', 'Cd: -10.18', 'In: -10.58', 'Sn: -10.04',
'Sb: -11.04', 'Te: -9.80', 'I : -10.53', 'Xe: -9.81', 'Cs: -10.92', 'Ba: -9.91',
'La: -10.82', 'Ce: -10.49', 'Pr: -11.33', 'Nd: -10.54', 'Pm: -20.00', 'Sm: -11.04',
'Eu: -11.53', 'Gd: -10.92', 'Tb: -11.94', 'Dy: -10.94', 'Ho: -11.78', 'Er: -11.11',
'Tm: -12.04', 'Yb: -10.96', 'Lu: -11.28', 'Hf: -11.16', 'Ta: -11.91', 'W : -10.93',
'Re: -11.77', 'Os: -10.59', 'Ir: -10.69', 'Pt: -10.24', 'Au: -11.03', 'Hg: -10.95',
'Tl: -11.14', 'Pb: -10.19', 'Bi: -11.33', 'Po: -20.00', 'At: -20.00', 'Rn: -20.00',
'Fr: -20.00', 'Ra: -20.00', 'Ac: -20.00', 'Th: -11.92', 'Pa: -20.00', 'U : -12.51',
'Np: -20.00', 'Pu: -20.00', 'Am: -20.00', 'Cm: -20.00', 'Bk: -20.00', 'Cf: -20.00',
'Es: -20.00', 'END'

```

* oscillator strengths were scaled by the solar isotopic ratios.

References:

1. Li 1 - K 5 Bell

Выборка линий лития с учетом изотопов и сверхтонкого расщепления

6705.00000, 6710.00000, 19, 442, 1.0, Wavelength region, lines selected, lines processed, Vmicro

Damping parameters Lande Central

Spec Ion

$$WL_{air}(A)$$

Excit (eV)

Vmic

 $\log gf^*$

Rad.

Stark

Waa T

s fac

tor

depth

Refere

rence

'Li 1',	6707.7558,	0.0000,	1.0,	-1.240,	7.560,	-5.780,	0.000,99.000,	0.012,	'	1 YD,REB	1 Y
'Li 1',	6707.7558,	0.0000,	1.0,	-0.842,	7.560,	-5.780,	0.000,99.000,	0.012,	'	1 YD,REB	1 Y
'Li 1',	6707.7559,	0.0000,	1.0,	-0.842,	7.560,	-5.780,	0.000,99.000,	0.012,	'	1 YD,REB	1 Y
'Li 1',	6707.7679,	0.0000,	1.0,	-1.541,	7.560,	-5.780,	0.000,99.000,	0.012,	'	1 YD,REB	1 Y
'Li 1',	6707.7680,	0.0000,	1.0,	-0.842,	7.560,	-5.780,	0.000,99.000,	0.012,	'	1 YD,REB	1 Y
'Li 1',	6707.7681,	0.0000,	1.0,	-0.395,	7.560,	-5.780,	0.000,99.000,	0.012,	'	1 YD,REB	1 Y
'Li 1',	6707.9064,	0.0000,	1.0,	-0.842,	7.560,	-5.780,	0.000,99.000,	0.006,	'	1 YD,REB	1 Y
'Li 1',	6707.9078,	0.0000,	1.0,	-1.541,	7.560,	-5.780,	0.000,99.000,	0.006,	'	1 YD,REB	1 Y
'Li 1',	6707.9185,	0.0000,	1.0,	-0.842,	7.560,	-5.780,	0.000,99.000,	0.006,	'	1 YD,REB	1 Y
'Li 1',	6707.9192,	0.0000,	1.0,	-1.951,	7.560,	-5.780,	0.000,99.000,	0.001,	'	1 YD,REB	1 Y
'Li 1',	6707.9192,	0.0000,	1.0,	-1.854,	7.560,	-5.780,	0.000,99.000,	0.001,	'	1 YD,REB	1 Y
'Li 1',	6707.9199,	0.0000,	1.0,	-0.842,	7.560,	-5.780,	0.000,99.000,	0.006,	'	1 YD,REB	1 Y
'Li 1',	6707.9226,	0.0000,	1.0,	-2.854,	7.560,	-5.780,	0.000,99.000,	0.001,	'	1 YD,REB	1 Y
'Li 1',	6707.9226,	0.0000,	1.0,	-1.951,	7.560,	-5.780,	0.000,99.000,	0.001,	'	1 YD,REB	1 Y
'Li 1',	6707.9227,	0.0000,	1.0,	-1.423,	7.560,	-5.780,	0.000,99.000,	0.001,	'	1 YD,REB	1 Y
'Li 1',	6708.0701,	0.0000,	1.0,	-1.951,	7.560,	-5.780,	0.000,99.000,	0.001,	'	1 YD,REB	1 Y
'Li 1',	6708.0705,	0.0000,	1.0,	-2.854,	7.560,	-5.780,	0.000,99.000,	0.001,	'	1 YD,REB	1 Y
'Li 1',	6708.0735,	0.0000,	1.0,	-1.854,	7.560,	-5.780,	0.000,99.000,	0.001,	'	1 YD,REB	1 Y
'Li 1',	6708.0739,	0.0000,	1.0,	-1.951,	7.560,	-5.780,	0.000,99.000,	0.001,	'	1 YD,REB	1 Y

'sun_kurucz_p00k2_T05770G44.krz',

'H : 0.91', 'He: -1.05',

```
'Li:-10.88', 'Be:-10.89', 'B : -9.44', 'C : -3.48', 'N : -3.99', 'O : -3.11',
```

'F : -7.48', 'Ne: -3.95', 'Na: -5.71', 'Mg: -4.46', 'Al: -5.57', 'Si: -4.49',

'P : -6.59', 'S : -4.83', 'Cl: -6.54', 'Ar: -5.48', 'K : -6.82', 'Ca: -5.68',

'Sc: -8.94', 'Ti: -7.05', 'V : -8.04', 'Cr: -6.37', 'Mn: -6.65', 'Fe: -4.37',

'Co: -7.12', 'Ni: -5.79', 'Cu: -7.83', 'Zn: -7.44', 'Ga: -9.16', 'Ge: -8.63',

'As: -9.67', 'Se: -8.69', 'Br: -9.41', 'Kr: -8.81', 'Rb: -9.44', 'Sr: -9.14',

'Y : -9.80', 'Zr: -9.54', 'Nb: -10.62', 'Mo: -10.12', 'Tc: -20.00', 'Ru: -10.20',

'Rh: -10.92' . 'Pd: -10.35' . 'Ag: -11.10' . 'Cd: -10.18' . 'In: -10.58' . 'Sn: -10.04' .

'Sh': -11.04' - 'Te': -9.80' - 'T': -10.53' - 'Xe': -9.81' - 'Cs': -10.92' - 'Ba': -9.91'

'La:-10.82' 'Ce:-10.49' 'Pr:-11.33' 'Nd:-10.54' 'Pm:-20.00' 'Sm:-11.04'

'Eu': -11.53' 'Gd': -10.92' 'Th': -11.94' 'Dy': -10.94' 'Ho': -11.78' 'Er': -11.11'

'Tm': -12.04' 'Yb': -10.96' 'Lu': -11.28' 'Hf': -11.16' 'Ta': -11.91' 'W': -10.93'

'Re': -11.77' 'Os': -10.59' 'Ir': -10.69' 'Pt': -10.24' 'Au': -11.03' 'Hg': -10.95'

'Tl':-11.14' 'Pb':-10.19' 'Bi':-11.33' 'Po':-20.00' 'At':-20.00' 'Pp':-20.00'

'Fr:-20.00' 'Ba:-20.00' 'Ac:-20.00' 'Th:-11.03' 'Pa:-20.00' 'U:-12.51'

'Nb: 20.00' 'Ru: 20.00' 'Am: 20.00' 'Cm: 20.00' 'Bk: 20.00' 'Cf: 20.00'

```

NP.-20.00 , PD.-20.00 , AM.-20.00 , CM.-20.00 , BK.-20.00 , CL.-20.00 ,
'ES: 20.00' 'END'

```



Виртуальный центр атомных и молекулярных данных

демонстрация работы с порталом пользователя.





Разные лаборатории, предоставляющие данные, публикуют их

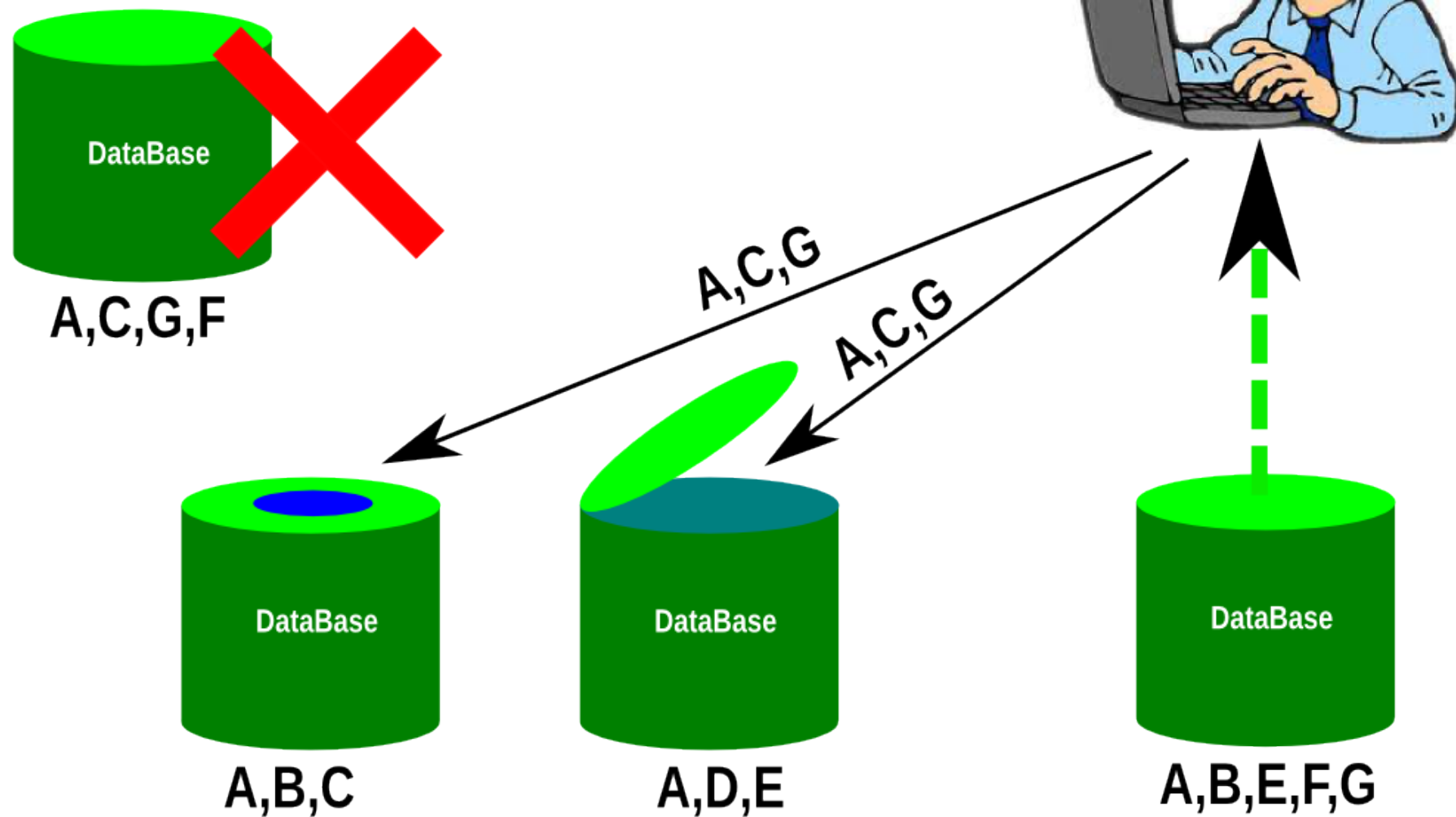
В разных форматах

В разных единицах измерения

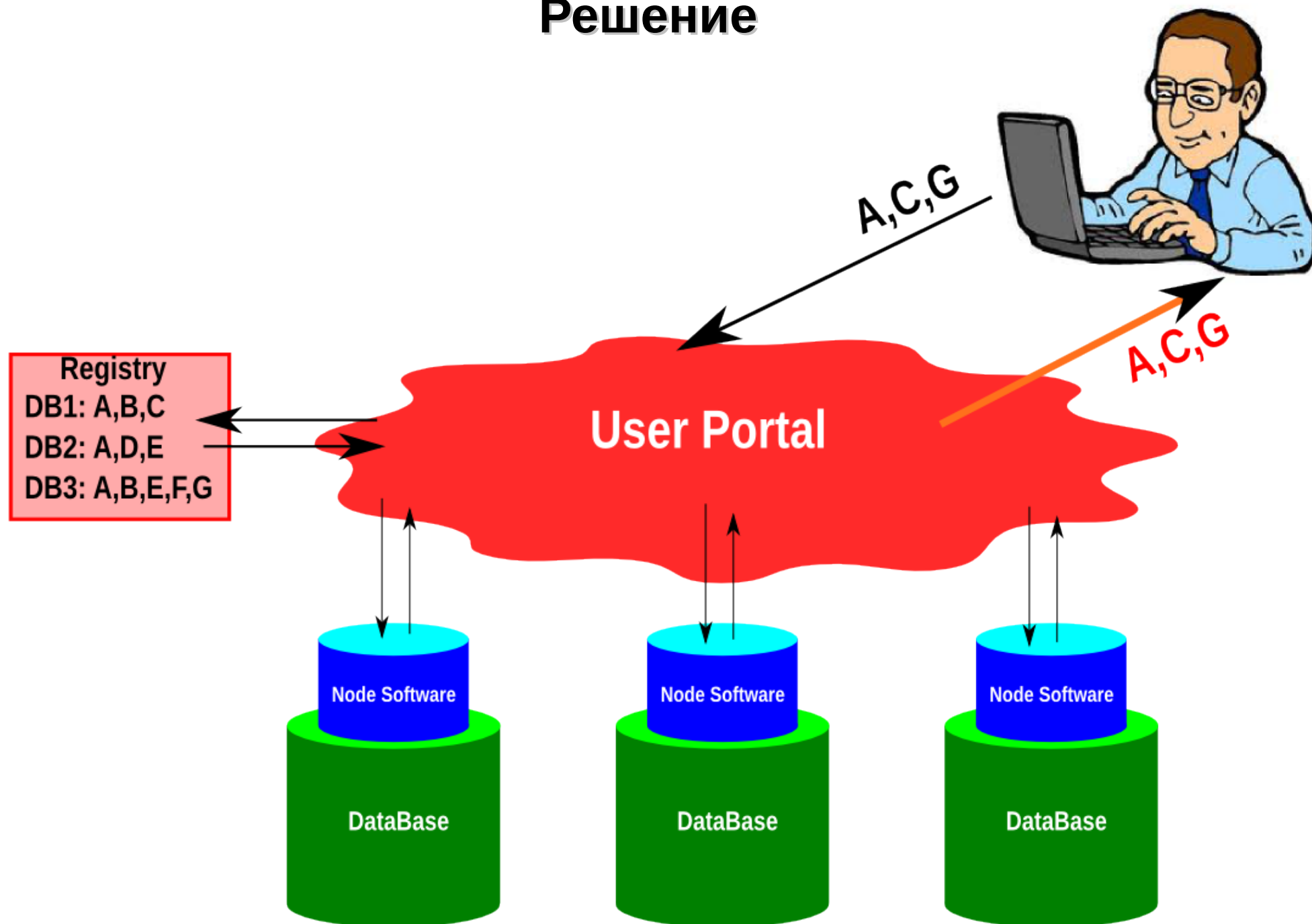


Данные надо собрать и привести в один формат

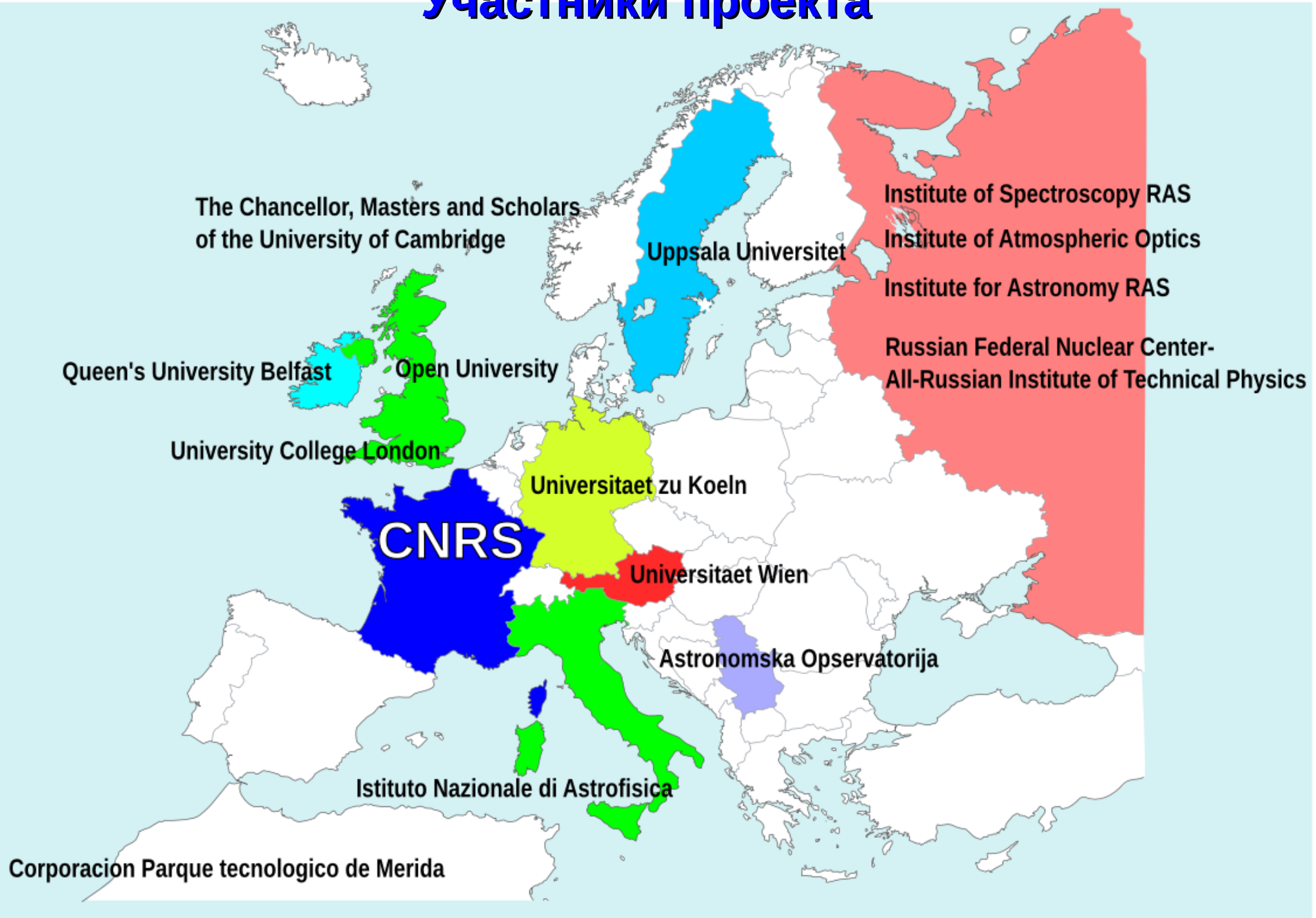
Проблема



Решение



Участники проекта



Базы данных

База Данных	Содержание	Применение
CDMS Cologne Database for Molecular Spectroscopy	Atoms molecules	interstellar or circumstellar medium or in planetary atmospheres.
ICB Dijon Methane	$^{12}\text{CH}_4$ $^{13}\text{CH}_4$ $^{12}\text{CH}_3\text{D}$	
VALD Vienna Atomic Line Database	atoms	Spectroscopy
CDSD Carbon Dioxide Spectroscopic Databank	carbon dioxide molecule	Earth's atmosphere
BASECOL	molecules	Collision with atoms, ions, molecules or electrons
TOPbase	astrophysically abundant ions (Z=1,14; Z=16; Z=18; Z=20; Z=26)	Opacity Project

База Данных	Содержание	Применение
The Cagliari/Toulouse PAH	polycyclic aromatic hydrocarbons	Astrochemistry
Chianti	atomic data	astrophysical plasma
TIPbase	Fe isonuclear sequence	Iron Project
GSMA Reims S&MPO	$^{16}\text{O}_3$, $^{16}\text{O}^{18}\text{O}^{16}\text{O}$, $^{18}\text{O}_3$	Atmosphere
GSMA Reims Ethylene	$^{12}\text{C}_2\text{H}_4$	
GhoSST database	grains	Planetology Solid Spectroscopy
Lund laboratory spectroscopy database	atoms	Experimental data for transitions and lifetimes

База Данных	Содержание	Применение
Stark-b	atoms and ions	Broadening in the impact approximation
Spectr-W3	atoms and ions	spectral properties of multicharged ions
Water	H_2^{16}O , HDO , D_2O , H_2^{17}O , H_2^{18}O	Atmosphere
HITRAN	molecular absorption	Physics of Atmosphere
KIDA	Interstellar and planetary atoms and molecules	astrochemical
...		
...		

Query by...

[Species](#)
[Processes](#)
[Environment](#)
[Advanced](#)

Atoms

[Clear](#) [Remove](#)

Atom symbol

Mass number

 to

Nuclear charge

 to

Ion charge

 to

InChIKey

State energy

 to

Equivalent to

to 1/cm

Radiative

[Clear](#) [Remove](#)

Wavelength

 to

Equivalent Wavelength

5000.0 to 5001.0A

Upper state energy

 to

Equivalent to

to 1/cm

Lower state energy

 to

Equivalent to

to 1/cm

Probability, A

 to 1/s

[Find data](#)
[Save query](#)

Legend

available, can answer

available, don't support query

unsupported keyword

- »  Cologne Database for Molecular Spectroscopy: VAMDC-TAP service
- »  ICB Dijon Methane
- »  VALD (atoms)
- »  Carbon Dioxide Spectroscopic Databank (VAMDC-TAP)
- »  BASECOL: VAMDC-TAP interface
- »  TOPbase : VAMDC-TAP interface
- »  Theoretical spectral database of polycyclic aromatic hydrocarbons
- »  Chianti
- »  TIPbase : VAMDC-TAP interface
- »  GSMA Reims S&MPO
- »  GSMA Reims Ethylene
- »  TAP-XSAMS for GhoSST database
- »  Lund laboratory spectroscopy database
- »  Stark-b
- »  Spectr-W3
- »  Water internet Accessible Distributed Information System
- »  HITRAN-UCL resource
- »  VALD sub-set in Moscow (obs)
- »  KIDA: VAMDC-TAP interface



Done

Modify query

Stop waiting

Save query

select * where (RadTransWavelength >= 5000.0 AND RadTransWavelength <= 5001.0) AND ((AtomSymbol = 'Fe'))

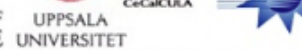
Comments

XSAMS processors

- ☐ BibTeX from XSAMS
- ☐ Table views of XSAMS
- ☐ Xsams2SME

Process

Name	Response	Download	Species	States	Processes	Radiative	Collisions	Non Radiative
☐ VALD (atoms)	OK	XSAMS	7	2265	1331	1331	0	0
☐ VALD sub-set in Moscow (obs)	OK	XSAMS	4	24	12	12	0	0
☐ Chianti	OK	XSAMS	1	6	3	3	0	0
☐ TOPbase : VAMDC-TAP interface	OK	XSAMS	1	2	1	1	0	0
☐ Lund laboratory spectroscopy database	OK	XSAMS	0	0	0	0	0	0
Spectr-W3	EMPTY		0	0	0	0	0	0
Stark-b	EMPTY		0	0	0	0	0	0





TAP — Transport Access Protocol

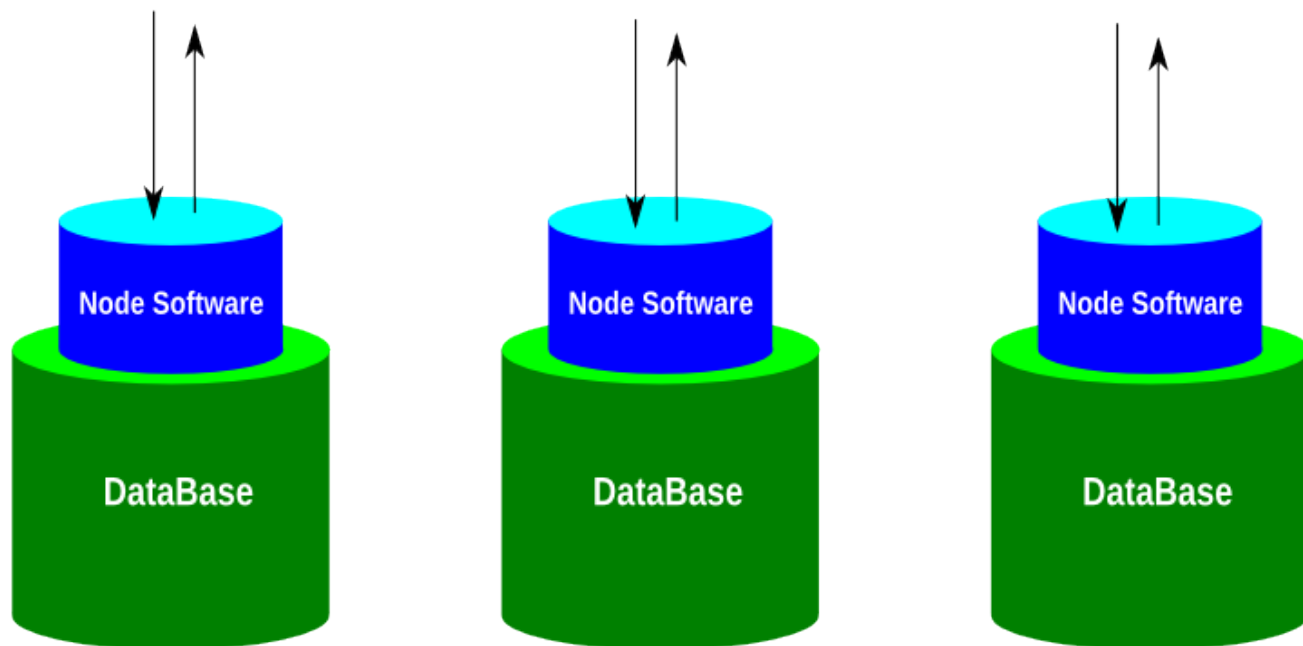
```
select * where (RadTransWavelength >= 5000.0 AND  
RadTransWavelength <= 5001.0) AND ((AtomSymbol = 'Fe'))
```

**X
S
A
M
S**

User Portal

XSAMS

XML
Schema for
Atoms,
Molecules and
Solids



Структура XSAMS

```
<XSAMSData  
  xsi:schemaLocation="http://vamdc.org/xml/xsams/1.0 http://vamdc.org/xml/xsams/1.0">  
  <Sources>Библиография</Sources>  
  <Methods>Описание методов</Methods>  
  <Environments>Параметры внешней  
среды</Environments>  
  <Species>Данные по частицам, атомам, ионам  
и молекулам</Species>  
  <Processes>Данные по процессам (переходы,  
столкновения, ...)</Processes>  
</XSAMSData>
```

Спектральная линия

- Атом
 - Название, обозначение, заряд ядра
 - Изотоп
 - Масса
- Радиативный переход
 - Длина волны
 - А, см, nm, cm^{-1} , Hz, eV
 - Вакуум, воздух
 - Экспериментальная, расчетная, Ritz
 - Вероятность перехода
 - Сила осциллятора
 - Время жизни
 - Коэффициенты Эйнштейна
 - Уширяющие параметры
- Уровень энергии 1 и 2
 - Энергия
 - Квантовые числа
 - Тип связи
 - Терм
 - Конфигурация
- Свойства среды
 - T, P, n

VAMDC производителям данных

