FORUM VO 2014

ACCES AUX DONNEES DE PHYSIQUE ATOMIQUE ET MOLECULAIRE

l'Observatoire de Paris
LERMA
Laboratoire d'Étude du Rayonnement et de la Matière en Astrophysique

VO Paris Data Centre

Utiliser les données de physique A & M

- Les données des différents services sont stockées dans des bases relationnelles (amélioration des fonctions de recherche, intégration à VAMDC)

- Elles sont accessibles de 2 façons :
  - Site web classique
  - Service VAMDC-TAP lorsqu'il a été implémenté

- Utiliser les accès VAMDC de ces bases de données permet de profiter des outils développés spécifiquement

- Les services disponibles sont listés dans le registry VAMDC (registry.vamdc.eu)

- C'est le point d'accès central qu'utilisent les éléments de l'infrastructure VAMDC :
  - Le portail : site web permettant d'interroger toutes les bases simultanément avec une requête identique

  - Specview : application dédiée à la visualisation de spectres 1D, développée au STSCI étendue avec fonctionnalités VAMDC pour l'identification de raies

  - Spectcol : application permettant d'extraire et de combiner des taux de collisions et des coefficients d'Einstein provenant de diverses sources

Le portail VAMDC (portal.vamdc.eu)

- Accès unifié aux bases de données de physique atomique et moléculaire

- Principales fonctionnalités :
  - **Liste les bases de données disponibles (actuellement 27 dont 5 de l'Observatoire de Paris et les principales bases de spectroscopie : CDMS, JPL, VALD)**

Name	Description	Maintainer	Status	Availables species
Chianti	Chianti consists of a critically evaluated set of up-to-date atomic data, together with user-friendly programs written in Interactive Data Language (IDL), to analyse the spectra from astrophysical plasmas. The VAMDC interface presents just the data from the Chianti-v7 release.	gtr@ast.cam.ac.uk	OK	Show
GSMA Reims S&MPO	Calculated line lists for ozone (16O3, 16O18O16O and 18O3). The data on methane contain the vibration-rotation energy levels, line positions and line strengths in the range from 0 to 8000 cm-1.	ylb@iao.ru, vladimir.tyuterev@univ-reims.fr	OK	Show
ECaSDa - Ethene Calculated Spectroscopic Database	Calculated data of ethylene (12C2H4). The data on ethylene contain the vibration-rotation energy levels, line positions and line intensities in the range from 500 to 7500 cm-1	ludovic.daumont@univ-reims.fr, maud.rotger@univ-reims.fr	OK	Show
GhoSST	The GhoSST database ("Grenoble Astrophysics and Planetology Solid Spectroscopy and Thermodynamics" database service) provides laboratory data on spectra (from UV to FIR) of natural and synthetic solids (ices, molecular solids, minerals, salts, inorganic materials, organic materials, meteorites, adsorbed molecules, hydrated solids,?) of space sciences, Earth sciences and astrophysical interest. It is completed with band list data (NIR to FIR) on molecular solids and adsorbed/hydratation molecules. The GhoSST data come from laboratory experiments performed since 1989 at IPAG (and formerly at LGGE and LPG) with different spectroscopy techniques (transmission, bidirectional reflection, micro-spectroscopy, ATR, Raman, Fluorescence, ...).	damien.albert@obs.ujf-grenoble.fr	OK	Show
Stark-b	Database for "Stark" broadening of isolated lines of atoms and ions in the impact approximation	sylvie.sahal-brechot@obspm.fr	OK	Show
JPL database: VAMDC-TAP service	The JPL database contains a catalog of radio frequency and microwave to far-infrared spectral lines of atomic and molecular species that (may) occur in the interstellar or circumstellar medium or in planetary atmospheres. The catalog is continuously updated. THIS IS JUST FOR DEVELOPMENT	endres@ph1.uni-koeln.de	OK	Show

Le portail VAMDC (portal.vamdc.eu)

- Accès unifié aux bases de données de physique atomique et moléculaire

- Principales fonctionnalités :
  - Liste les bases de données disponibles (actuellement 27 dont 5 de l'Observatoire de Paris et les principales bases de spectroscopie : CDMS, JPL, VALD)
  - **Liste les espèces disponibles dans chaque base de données**

CDMS species

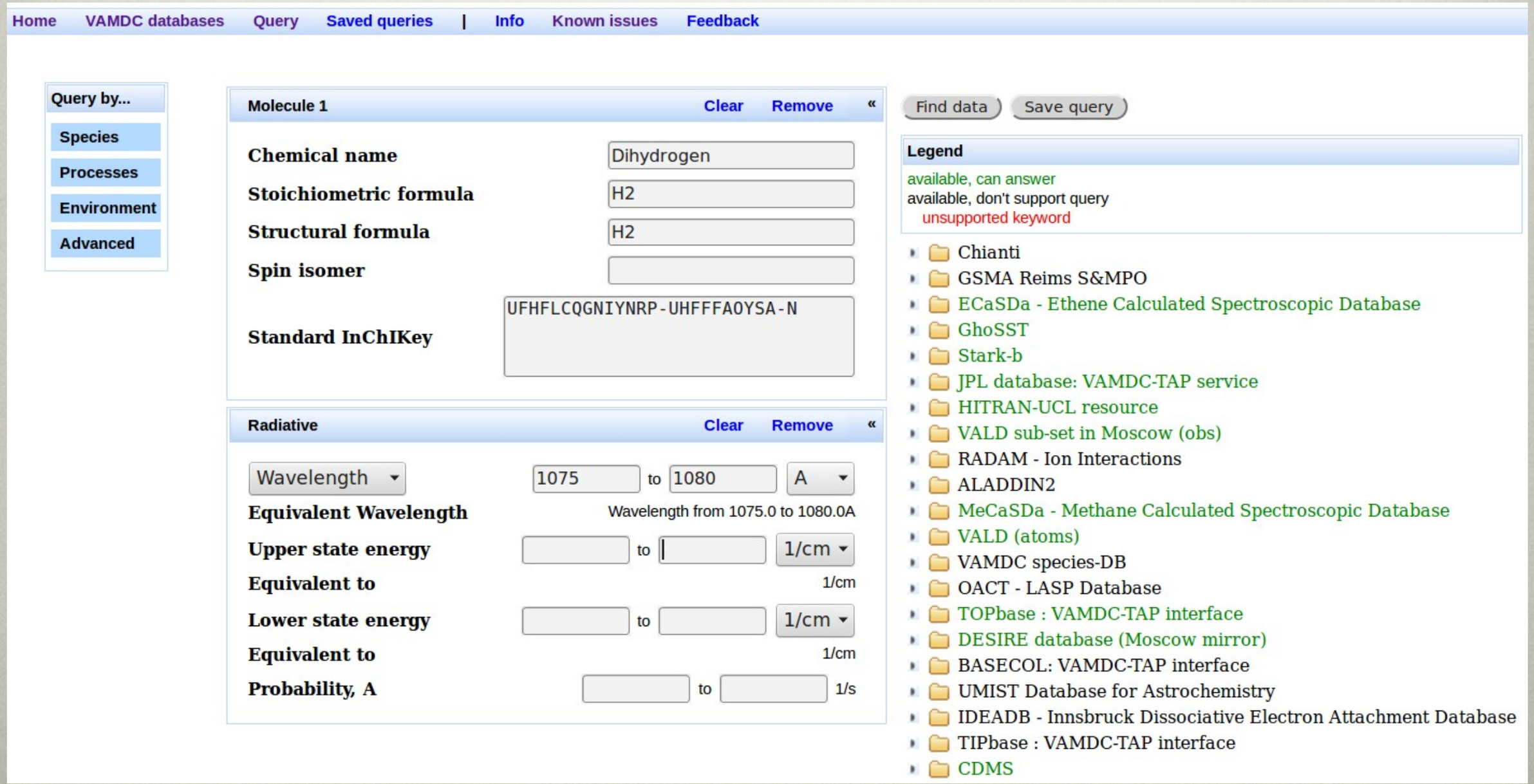
Go to molecules

Atoms				
Element symbol	**Nuclear charge**	**Ion charge**	**InChI**	**InChIKey**
Al	13	0	1/Al	XAGFODPZIPBFFR-UHFFFAOYNA-N (Search in NIST database)
C	6	0	1S/C	OKTJSMMVPCPJKN-UHFFFAOYSA-N (Search in NIST database)
C	6	0	1S/C/i1+1	OKTJSMMVPCPJKN-OUBTZVSYSA-N (Search in NIST database)
C	6	1	1S/C/q+1	GKDCRJWYAGBLFY-UHFFFAOYSA-N (Search in NIST database)
C	6	1	1S/C/q+1/i1+1	GKDCRJWYAGBLFY-OUBTZVSYSA-N (Search in NIST database)
Fe	26	0	1/Fe	XEEYBQQBJWHFJM-UHFFFAOYNA-N (Search in NIST database)
Fe	26	1	1/Fe/q+1	WZGNVVUXVXNNOX-UHFFFAOYNA-N (Search in NIST database)
N	7	1	1S/N/q+1	DELRCXTYJVVNEW-UHFFFAOYSA-N (Search in NIST database)
O	8	0	1S/O	QVGXLLKOCUKJST-UHFFFAOYSA-N (Search in NIST database)
S	16	0	1S/S	NINIDFKCEFEMDL-UHFFFAOYSA-N (Search in NIST database)
Si	14	0	1S/Si	XUIMIQQOPSSXEZ-UHFFFAOYSA-N (Search in NIST database)
Si	14	1	1S/Si/q+1	FSLGCYNKXXIWGJ-UHFFFAOYSA-N (Search in NIST database)

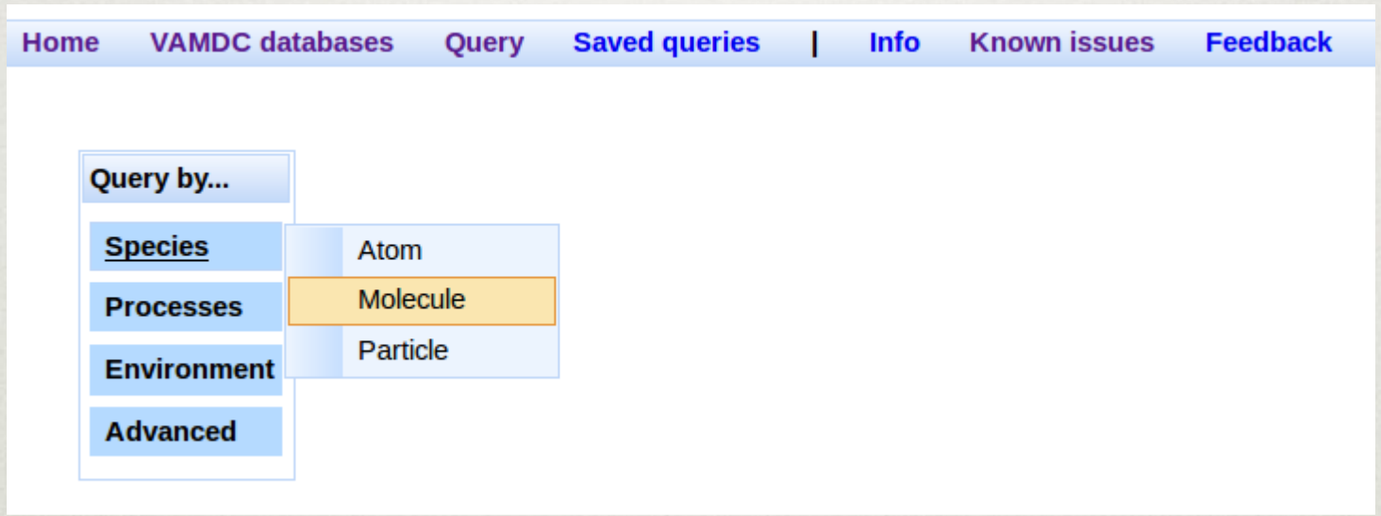
Le portail VAMDC (portal.vamdc.eu)

- Accès unifié aux bases de données de physique atomique et moléculaire

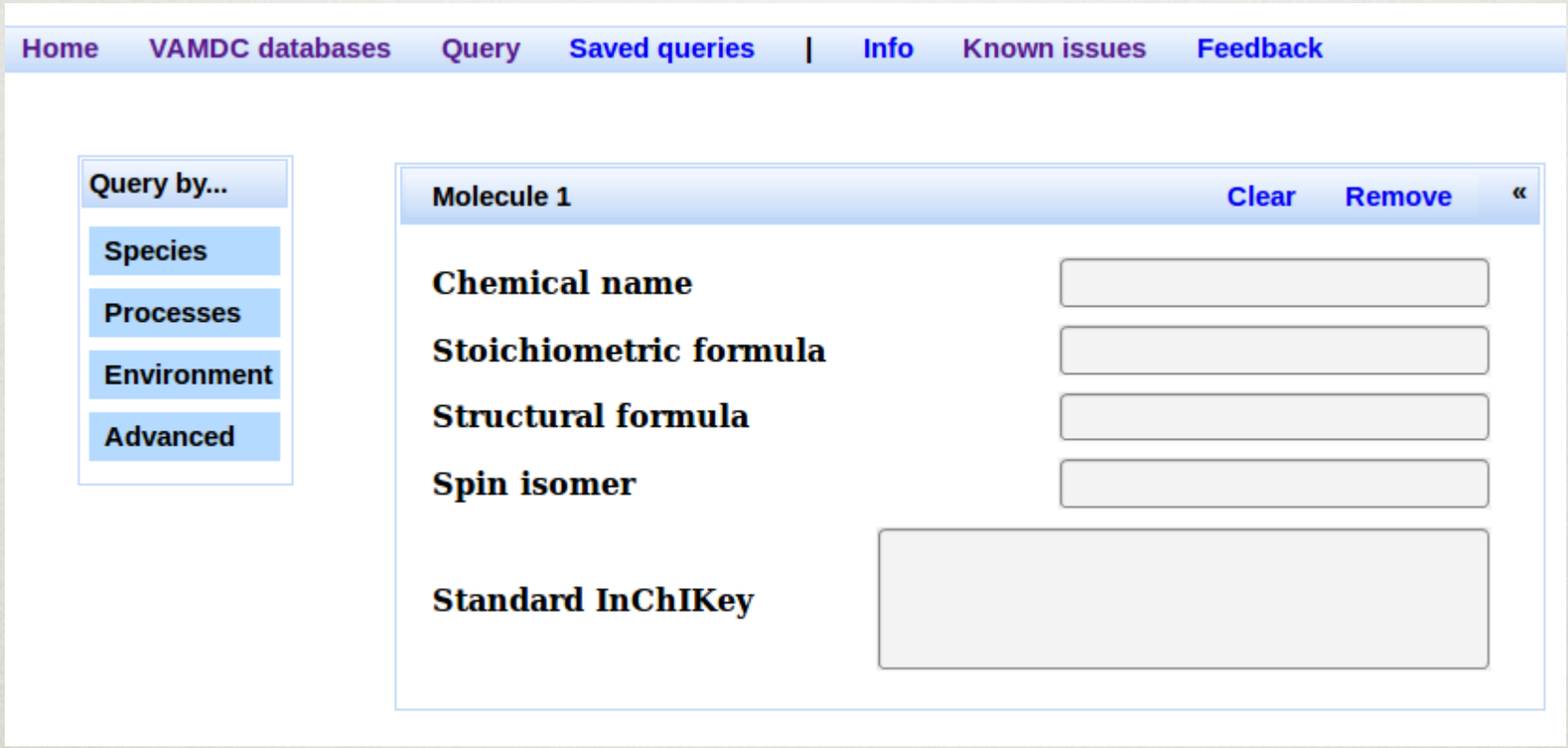
- Principales fonctionnalités :
  - Liste les bases de données disponibles (actuellement 27 dont 5 de l'Observatoire de Paris et les principales bases de spectroscopie : CDMS, JPL, VALD)
  - Liste les espèces disponibles dans chaque base de données
  - **Permet de contruire et d'exécuter des requêtes au format VAMDC**



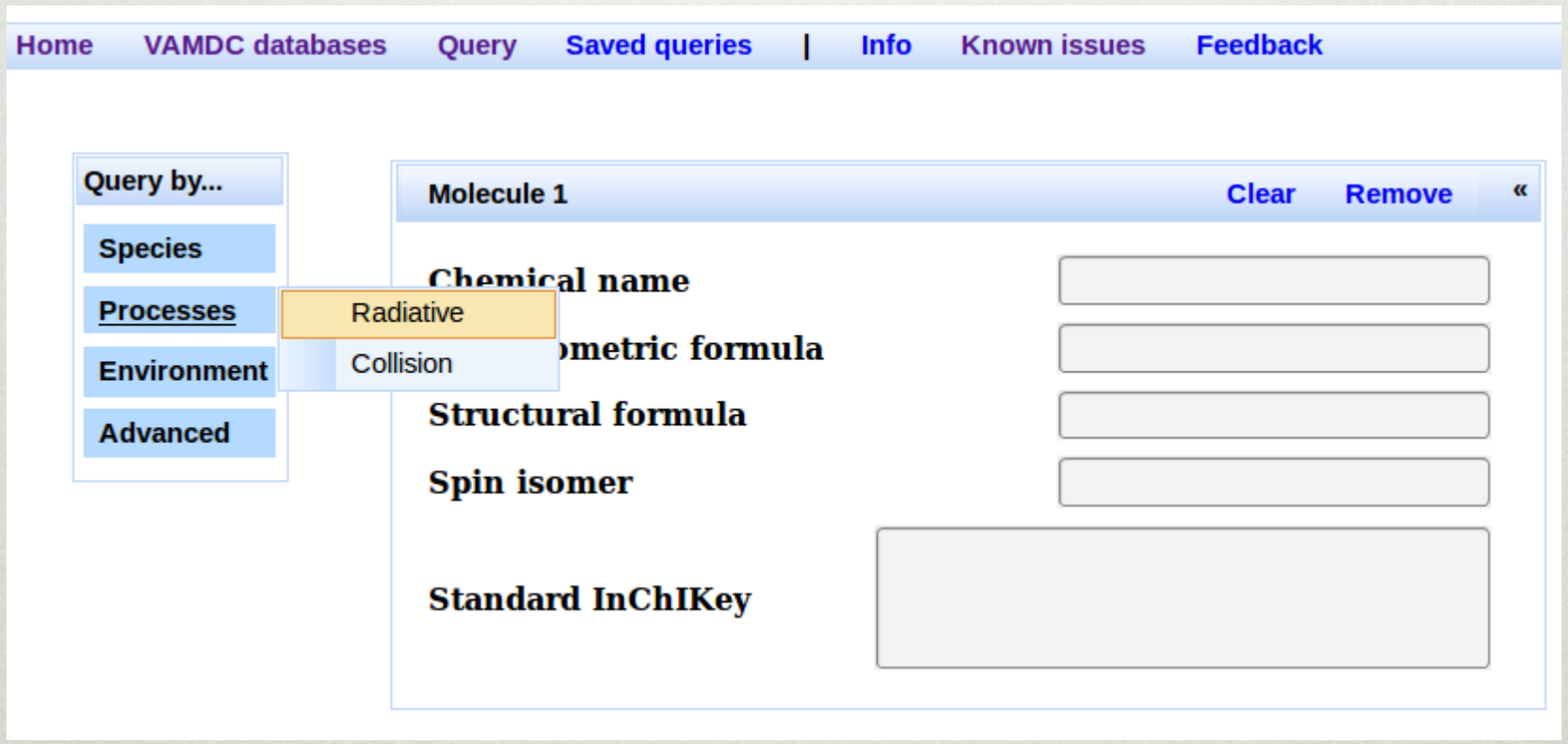
Utilisation du portail : construire la requête 1/4



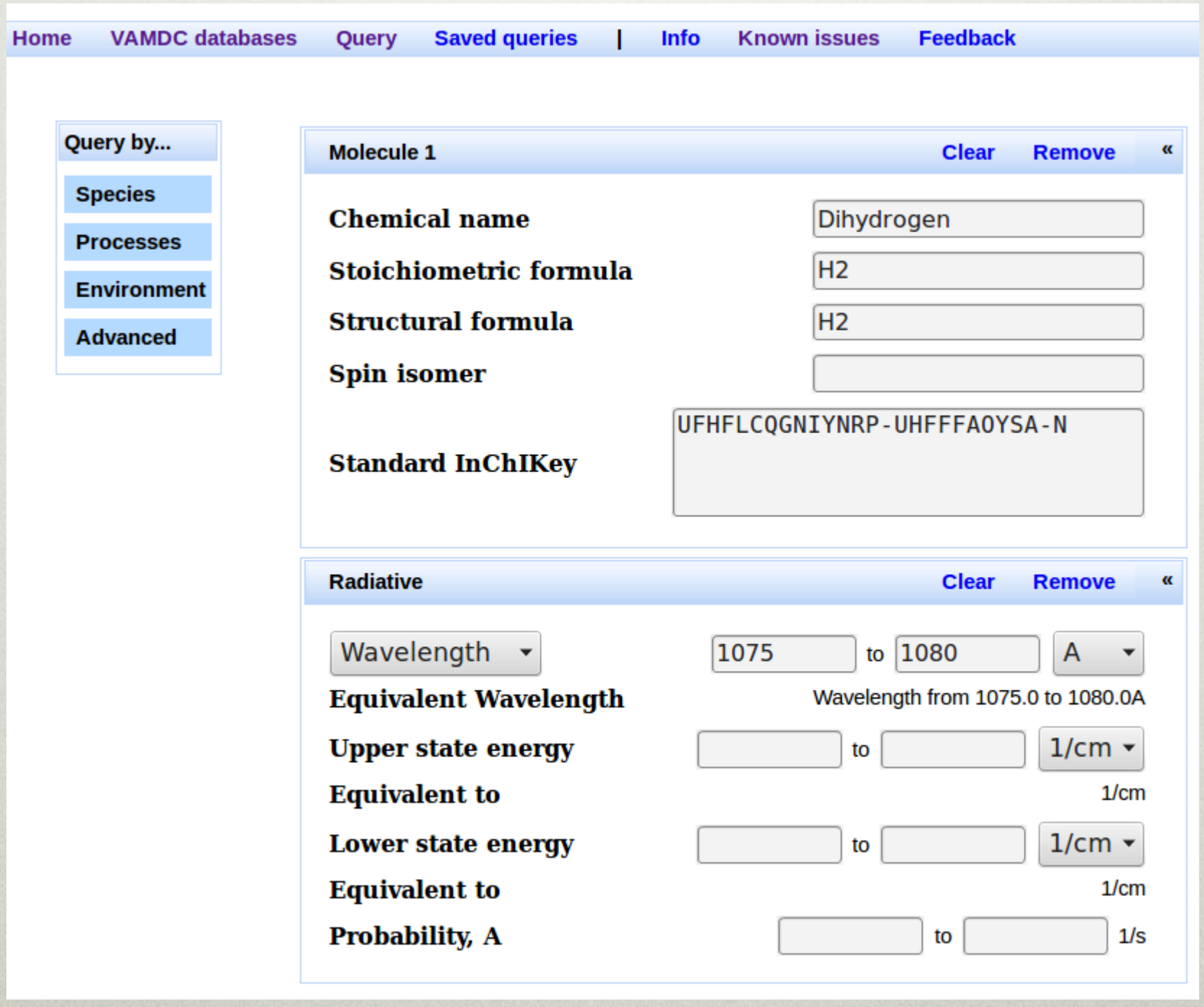
Utilisation du portail : construire la requête 2/4



Utilisation du portail : construire la requête 3/4



Utilisation du portail : construire la requête 4/4



Utilisation du portail : résultats 1/4

1 : Query Execution

Done

Modify query | Stop waiting | Save query

select * where (RadTransWavelength >= 1075.0 AND RadTransWavelength <= 1080.0) AND ((InchiKey = 'UFHFLCQGNIYNRP-UHFFFAOYSA-N'))

Comments

3 : Results Conversion (select in table below)

- BibTeX from XSAMS
- Table views of XSAMS
- Xsams2SME
- Atomicxsams2HTML
- Molecular Spectroscopy XSAMS to HTML
- XSAMS multiplexor

Process

2 : Results by node

Name	Convert	Response	Download	Species	States	Processes	Radiative	Collisions	Non Radiative
SpEctroScopy of Atoms and Molecules	☐	OK	XSAMS	1	426	311	311	0	0
GhoSST	☐	OK	XSAMS	0	0	0	0	0	0
Water internet Accessible Distributed Information System	☐	OK (06/12/2012 18:00)	XSAMS	0	0	0	0	0	0
JPL database: VAMDC-TAP service	☐	TRUNCATED (02/07/2014 11:19) (1%)	XSAMS	0	0	0	0	0	0
CDMS	☐	TRUNCATED (02/07/2014 11:19) (1%)	XSAMS	0	0	0	0	0	0
DESIRE database (Moscow mirror)		EMPTY		0	0	0	0	0	0
TOPbase : VAMDC-TAP interface		EMPTY		0	0	0	0	0	0
Carbon Dioxide Spectroscopic Databank 1000K (VAMDC-TAP)		EMPTY		0	0	0	0	0	0
Carbon Dioxide Spectroscopic Databank 296K (VAMDC-TAP)		EMPTY		0	0	0	0	0	0

Utilisation du portail : résultats 2/4

- On transforme les résultats en utilisant un processeur

1 : Query Execution

Done

Modify query | Stop waiting | Save query

select * where (RadTransWavelength >= 1075.0 AND RadTransWavelength <= 1080.0) AND ((InchiKey = 'UFHFLCQGNIYNRP-UHFFFAOYSA-N'))

Comments

3 : Results Conversion (select in table below)

- BibTeX from XSAMS
- Table views of XSAMS
- Xsams2SME
- Atomicxsams2HTML
- Molecular Spectroscopy XSAMS to HTML
- XSAMS multiplexor

Process

XSAMS processor converting a XSAMS file containing molecular spectroscopy data into a HTML file

2 : Results by node

Name	Convert	Response	Download	Species	States	Processes	Radiative	Collisions	Non Radiative
SpEctroScopy of Atoms and Molecules	☒	OK	XSAMS	1	426	311	311	0	0
GhoSST	☐	OK	XSAMS	0	0	0	0	0	0
Water internet Accessible Distributed Information System	☐	OK (06/12/2012 18:00)	XSAMS	0	0	0	0	0	0
JPL database: VAMDC-TAP service	☐	TRUNCATED (02/07/2014 11:19) (1%)	XSAMS	0	0	0	0	0	0
CDMS	☐	TRUNCATED (02/07/2014 11:19) (1%)	XSAMS	0	0	0	0	0	0
DESIRE database (Moscow mirror)		EMPTY		0	0	0	0	0	0
TOPbase : VAMDC-TAP interface		EMPTY		0	0	0	0	0	0
Carbon Dioxide Spectroscopic Databank 1000K (VAMDC-TAP)		EMPTY		0	0	0	0	0	0
Carbon Dioxide Spectroscopic Databank 296K (VAMDC-TAP)		EMPTY		0	0	0	0	0	0
MeCaSDa - Methane Calculated Spectroscopic Database		EMPTY		0	0	0	0	0	0
HITRAN-UCL resource		EMPTY		0	0	0	0	0	0

Les processeurs XSAMS

- Ce sont des services web qui transforment un ou plusieurs fichiers XSAMS en entrée en un unique fichier de sortie (qui aura un format quelconque, XML, HTML, texte …)

- Ils sont enregistrés dans le registry VAMDC

- Ils ont deux objectifs :
  - Simplifier l'utilisation des fichiers XSAMS en les rendant plus faciles à lire
  - Combiner / Comparer des fichiers (rechercher des transitions identiques dans des bases de données différentes par exemple)

- Ils sont accesibles depuis le portail VAMDC ou via une adresse qui leur est propre

Utilisation du portail : résultats 3/4

- Conversion de données moléculaires en page HTML

Sources

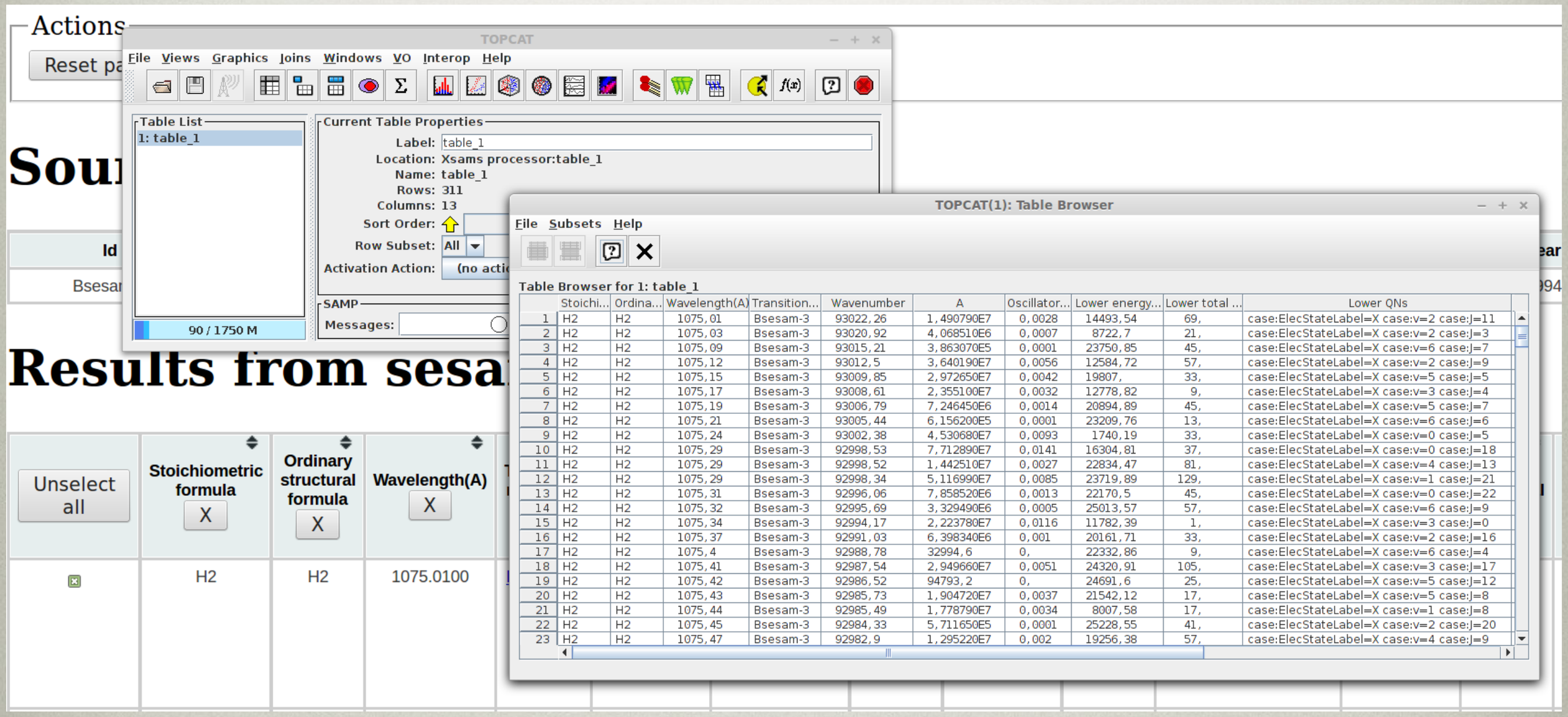
Id	Title	Origin	Authors	Year	Link
Bsesam-3		journal (Vol : 72)	Abgrall, H.; Roueff, E.; Launay, F.; Roncin, J.-Y;	1994	

Results from sesam VAMDC node

Unselect all	Stoichiometric formula X	Wavelength(A) X	Transition reference X	Wavenumber X	Oscillator Strength X	Lower energy(1/cm) X	Lower QNs X	Upper energy(1/cm) X	Upper QNs X
	H2	1075.0100	Bsesam-3	93022.2600	0000.0028	14493.5400	case:ElecStateLabel=X case:v=2 case:J=11	107515.8000	case:ElecStateLabel=C case:elecInv=u case:elecRefl=+ case:Lambda=1 case:S=0 case:v=2 case:J=12 case:kronigParity=e
	H2	1075.0300	Bsesam-3	93020.9200	0000.0007	8722.7000	case:ElecStateLabel=X case:v=2 case:J=3	101743.6200	case:ElecStateLabel=C case:elecInv=u case:elecRefl=- case:Lambda=1 case:S=0 case:v=1 case:J=3 case:kronigParity=f
	H2	1075.0900	Bsesam-3	93015.2100	0000.0001	23750.8500	case:ElecStateLabel=X case:v=6 case:J=7	116766.0600	case:ElecStateLabel=B case:elecInv=u case:elecRefl=+ case:Lambda=0 case:S=0 case:v=30 case:J=6 case:kronigParity=e
	H2	1075.1200	Bsesam-3	93012.5000	0000.0056	12584.7200	case:ElecStateLabel=X case:v=2 case:J=9	105597.2200	case:ElecStateLabel=B case:elecInv=u case:elecRefl=+ case:Lambda=0 case:S=0 case:v=13 case:J=8 case:kronigParity=e

Utilisation du portail : résultats 4/4

- Possibilité d'export en format texte des données séléctionnées
- Possibilité d'envoyer les données vers d'autres applications grâce au protocole SAMP (protocole de l'IVOA pour l'echange de données entre applications)



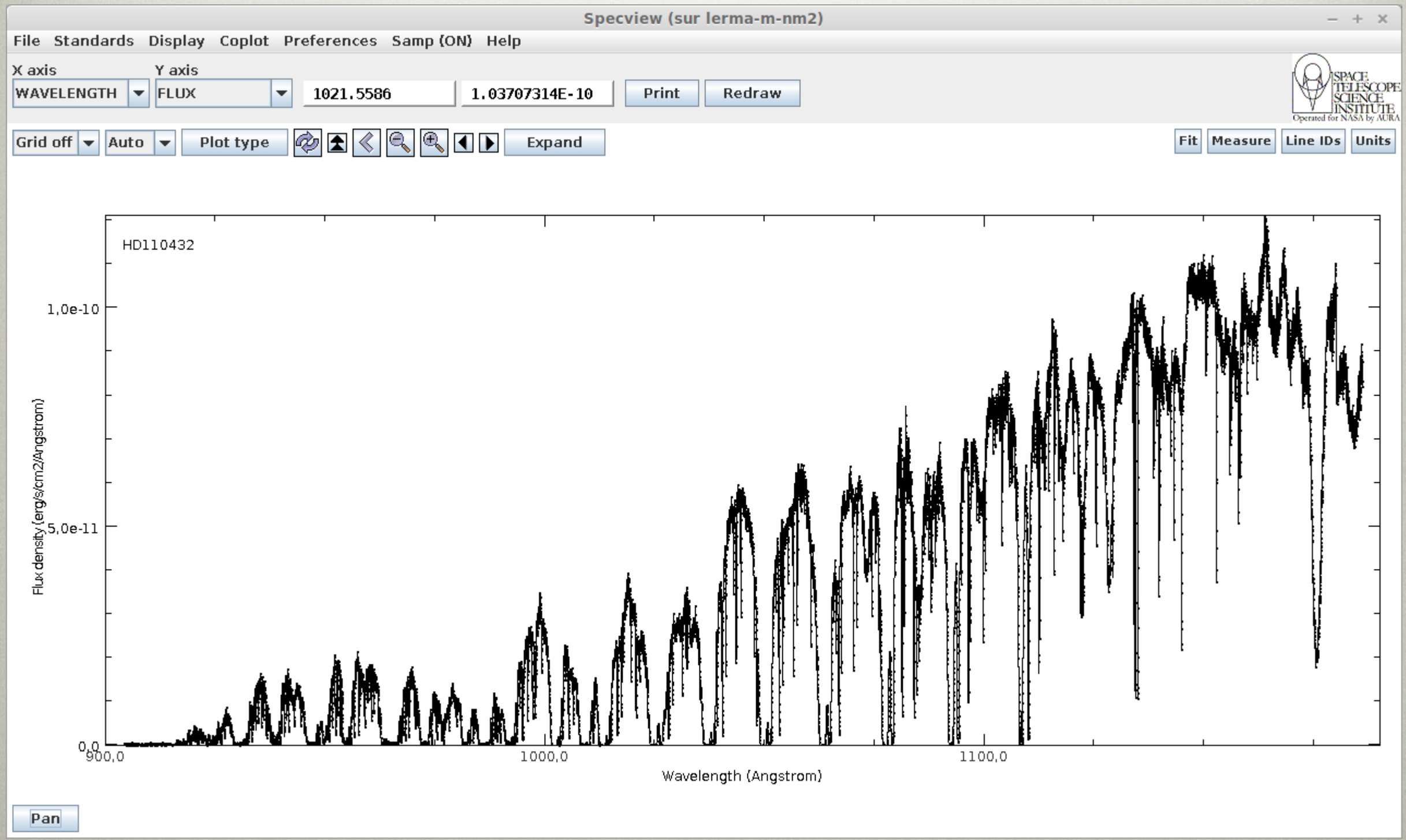
	Stoichi...	Ordina...	Wavelength(A)	Transition...	Wavenumber	A	Oscillator...	Lower energy...	Lower total ...	Lower QNs
1	H2	H2	1075,01	Bsesam-3	93022,26	1,490790E7	0,0028	14493,54	69,	case:ElecStateLabel=X case:v=2 case:J=11
2	H2	H2	1075,03	Bsesam-3	93020,92	4,068510E6	0,0007	8722,7	21,	case:ElecStateLabel=X case:v=2 case:J=3
3	H2	H2	1075,09	Bsesam-3	93015,21	3,863070E5	0,0001	23750,85	45,	case:ElecStateLabel=X case:v=6 case:J=7
4	H2	H2	1075,12	Bsesam-3	93012,5	3,640190E7	0,0056	12584,72	57,	case:ElecStateLabel=X case:v=2 case:J=9
5	H2	H2	1075,15	Bsesam-3	93009,85	2,972650E7	0,0042	19807,	33,	case:ElecStateLabel=X case:v=5 case:J=5
6	H2	H2	1075,17	Bsesam-3	93008,61	2,355100E7	0,0032	12778,82	9,	case:ElecStateLabel=X case:v=3 case:J=4
7	H2	H2	1075,19	Bsesam-3	93006,79	7,246450E6	0,0014	20894,89	45,	case:ElecStateLabel=X case:v=5 case:J=7
8	H2	H2	1075,21	Bsesam-3	93005,44	6,156200E5	0,0001	23209,76	13,	case:ElecStateLabel=X case:v=6 case:J=6
9	H2	H2	1075,24	Bsesam-3	93002,38	4,530680E7	0,0093	1740,19	33,	case:ElecStateLabel=X case:v=0 case:J=5
10	H2	H2	1075,29	Bsesam-3	92998,53	7,712890E7	0,0141	16304,81	37,	case:ElecStateLabel=X case:v=0 case:J=18
11	H2	H2	1075,29	Bsesam-3	92998,52	1,442510E7	0,0027	22834,47	81,	case:ElecStateLabel=X case:v=4 case:J=13
12	H2	H2	1075,29	Bsesam-3	92998,34	5,116990E7	0,0085	23719,89	129,	case:ElecStateLabel=X case:v=1 case:J=21
13	H2	H2	1075,31	Bsesam-3	92996,06	7,858520E6	0,0013	22170,5	45,	case:ElecStateLabel=X case:v=0 case:J=22
14	H2	H2	1075,32	Bsesam-3	92995,69	3,329490E6	0,0005	25013,57	57,	case:ElecStateLabel=X case:v=6 case:J=9
15	H2	H2	1075,34	Bsesam-3	92994,17	2,223780E7	0,0116	11782,39	1,	case:ElecStateLabel=X case:v=3 case:J=0
16	H2	H2	1075,37	Bsesam-3	92991,03	6,398340E6	0,001	20161,71	33,	case:ElecStateLabel=X case:v=2 case:J=16
17	H2	H2	1075,4	Bsesam-3	92988,78	32994,6	0,	22332,86	9,	case:ElecStateLabel=X case:v=6 case:J=4
18	H2	H2	1075,41	Bsesam-3	92987,54	2,949660E7	0,0051	24320,91	105,	case:ElecStateLabel=X case:v=3 case:J=17
19	H2	H2	1075,42	Bsesam-3	92986,52	94793,2	0,	24691,6	25,	case:ElecStateLabel=X case:v=5 case:J=12
20	H2	H2	1075,43	Bsesam-3	92985,73	1,904720E7	0,0037	21542,12	17,	case:ElecStateLabel=X case:v=5 case:J=8
21	H2	H2	1075,44	Bsesam-3	92985,49	1,778790E7	0,0034	8007,58	17,	case:ElecStateLabel=X case:v=1 case:J=8
22	H2	H2	1075,45	Bsesam-3	92984,33	5,711650E5	0,0001	25228,55	41,	case:ElecStateLabel=X case:v=2 case:J=20
23	H2	H2	1075,47	Bsesam-3	92982,9	1,295220E7	0,002	19256,38	57,	case:ElecStateLabel=X case:v=4 case:J=9

Specview (http://www.stsci.edu/institute/software_hardware/specview)

- Specview est un outil dédié à la visualisation de spectre 1D
- C'est une application Java développée au STSCI
- Elle a été étendue dans le cadre du projet VAMDC
- Elle a été choisie car elle proposait déjà une fonction d'identification de raies
  - Via des fichiers locaux de données
  - Via le protocole SLAP de l'IVOA (protocole dédié à la recherche de raies dans les bases de données mais peu usité)
- Specview peut accéder à la même liste de services que le portail

Visualisation d'un spectre

- On charge un spectre au format FITS, ici HD 110432

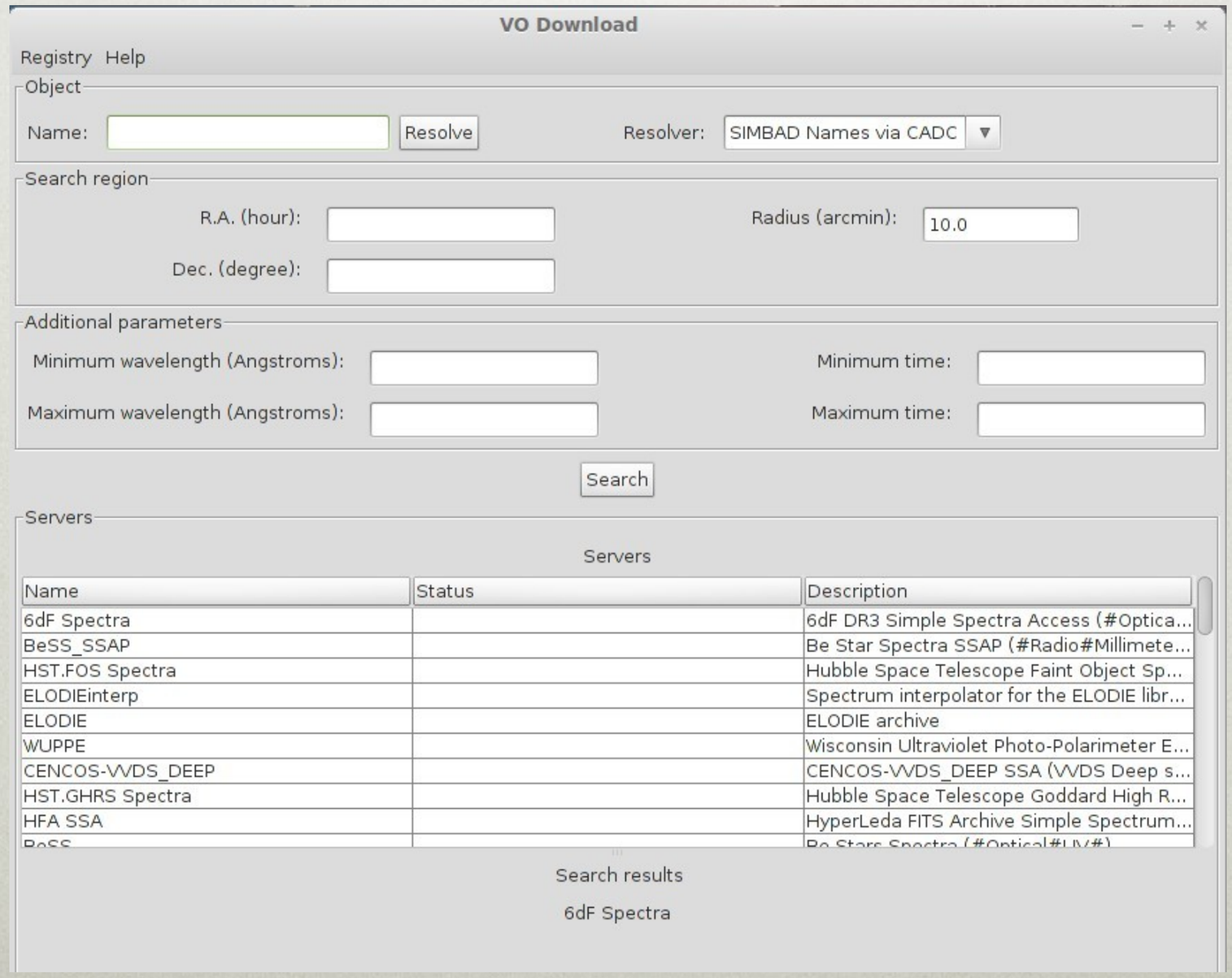


Visualisation d'un spectre

- Plusieurs moyens d'ouvrir un spectre :
  - Ouvrir directement le fichier
  - Via le protocole SAMP (par exemple depuis la base APIS)
  - Rechercher des spectres en utilisant le protocol SSA
    - Specview intègre une interface pour interroger les services SSA disponibles

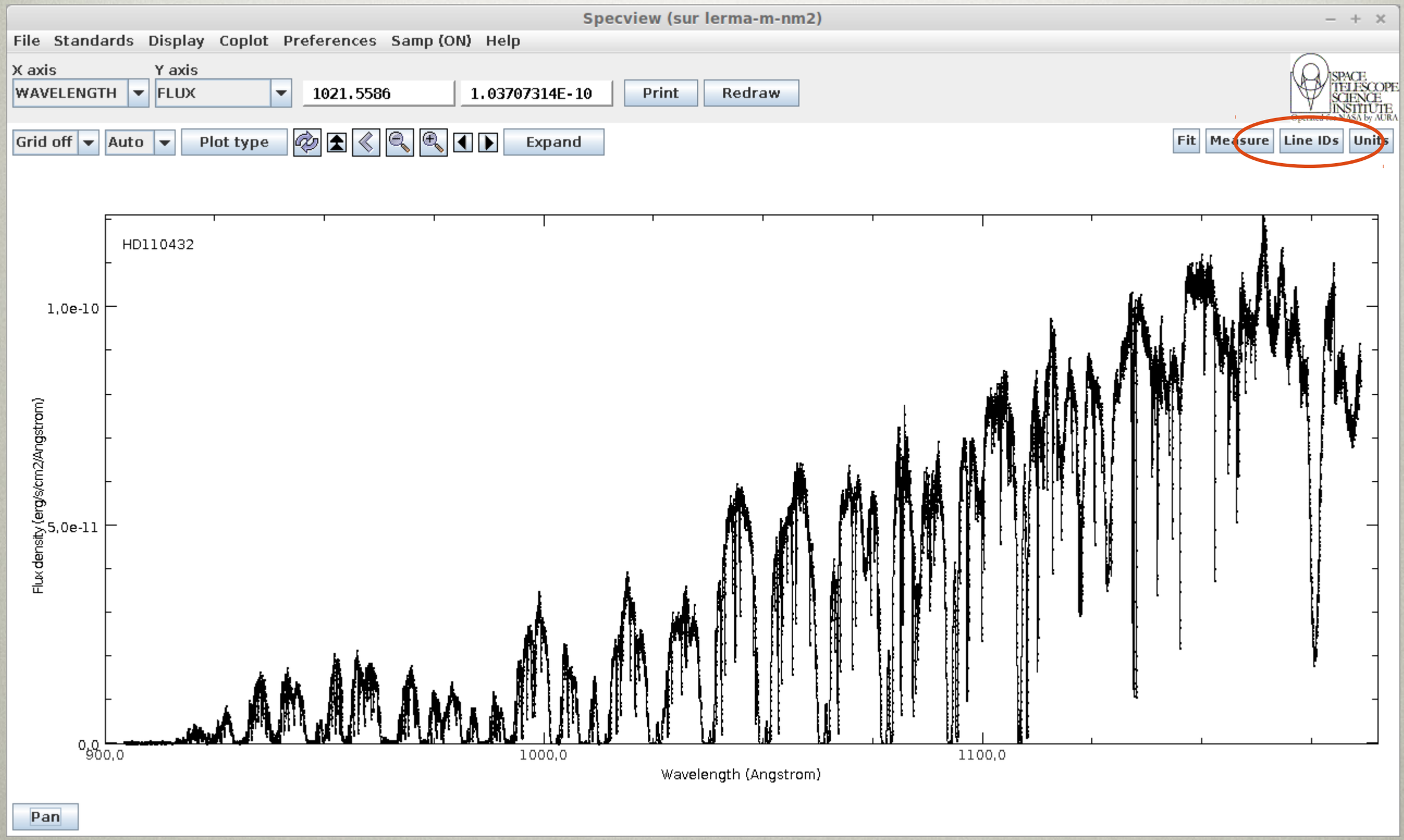
Visualisation d'un spectre

- Plusieurs moyens d'ouvrir un spectre :
  - Ouvrir directement le fichier
  - Via le protocole SAMP (par exemple depuis la base APIS)
  - Rechercher des spectres en utilisant le protocol SSA
    - Specview intègre une interface pour interroger les services SSA disponibles



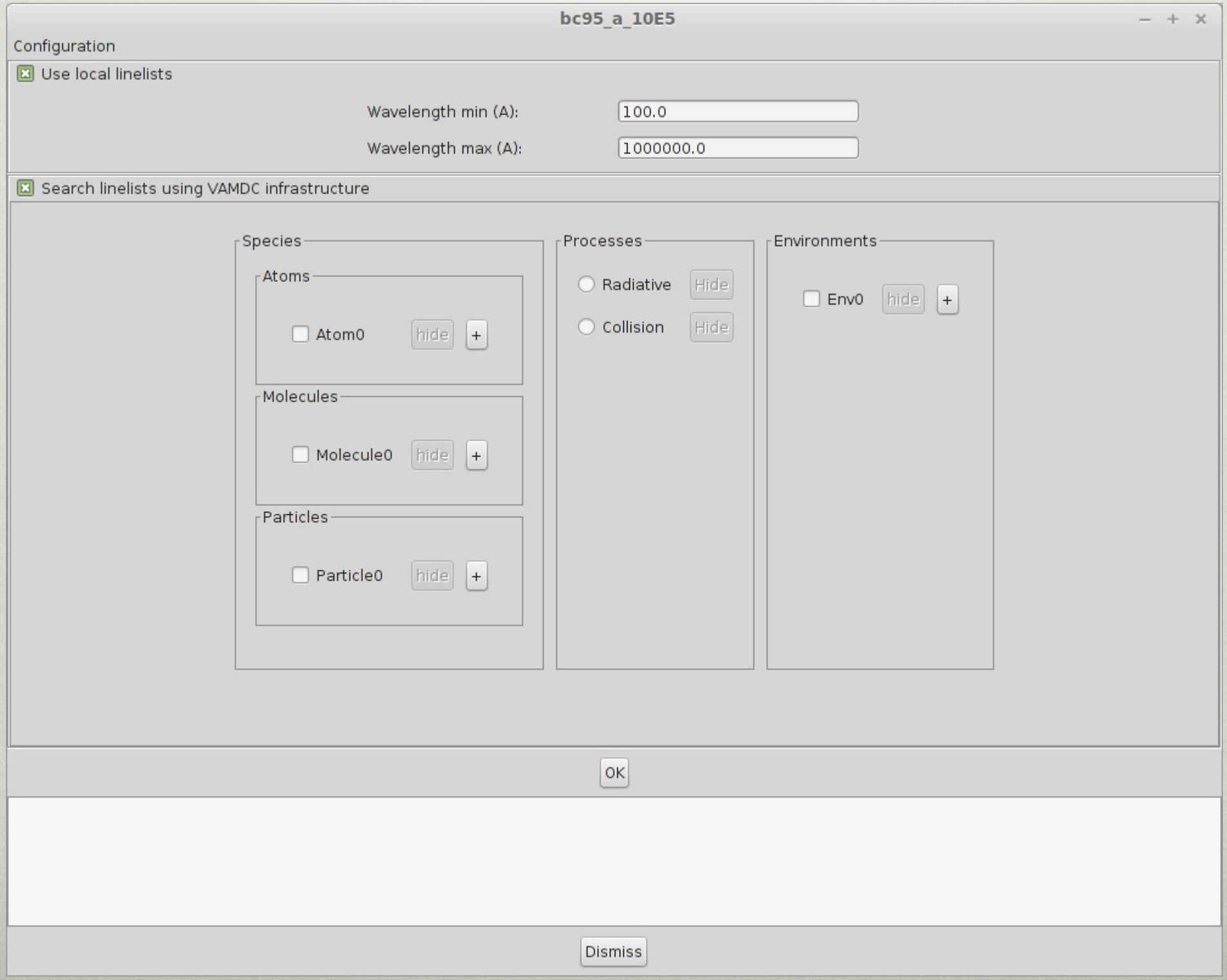
Visualisation d'un spectre

- On charge un spectre FITS d'un objet, ici HD 110432



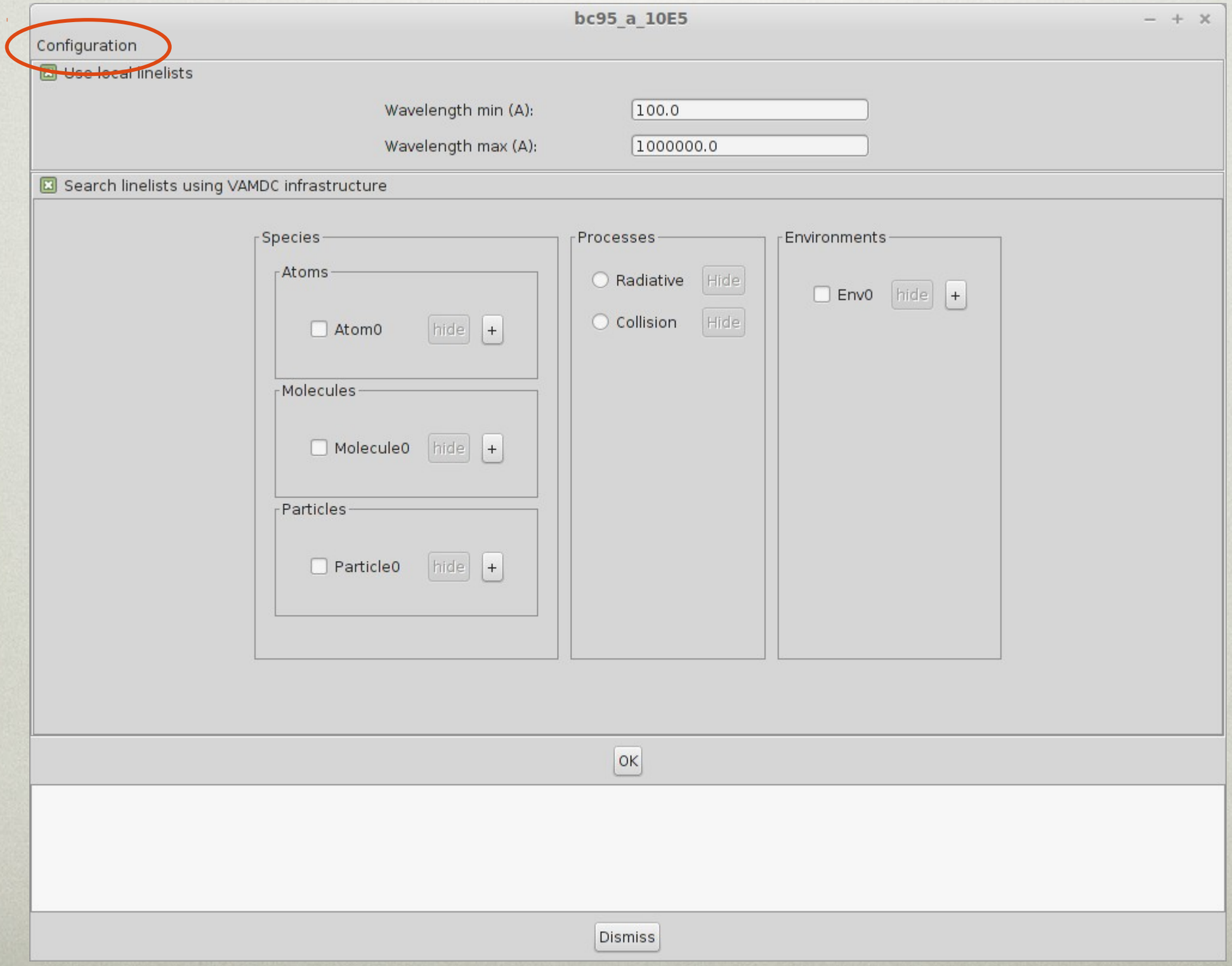
Identification de raies

- On ouvre l'interface d'identification de raies
- Cette interface est un composant Java qui peut être facilement intégrée ailleurs



Identification de raies

- On configure la liste des services à interroger



Identification de raies

- On configure la liste des services à interroger

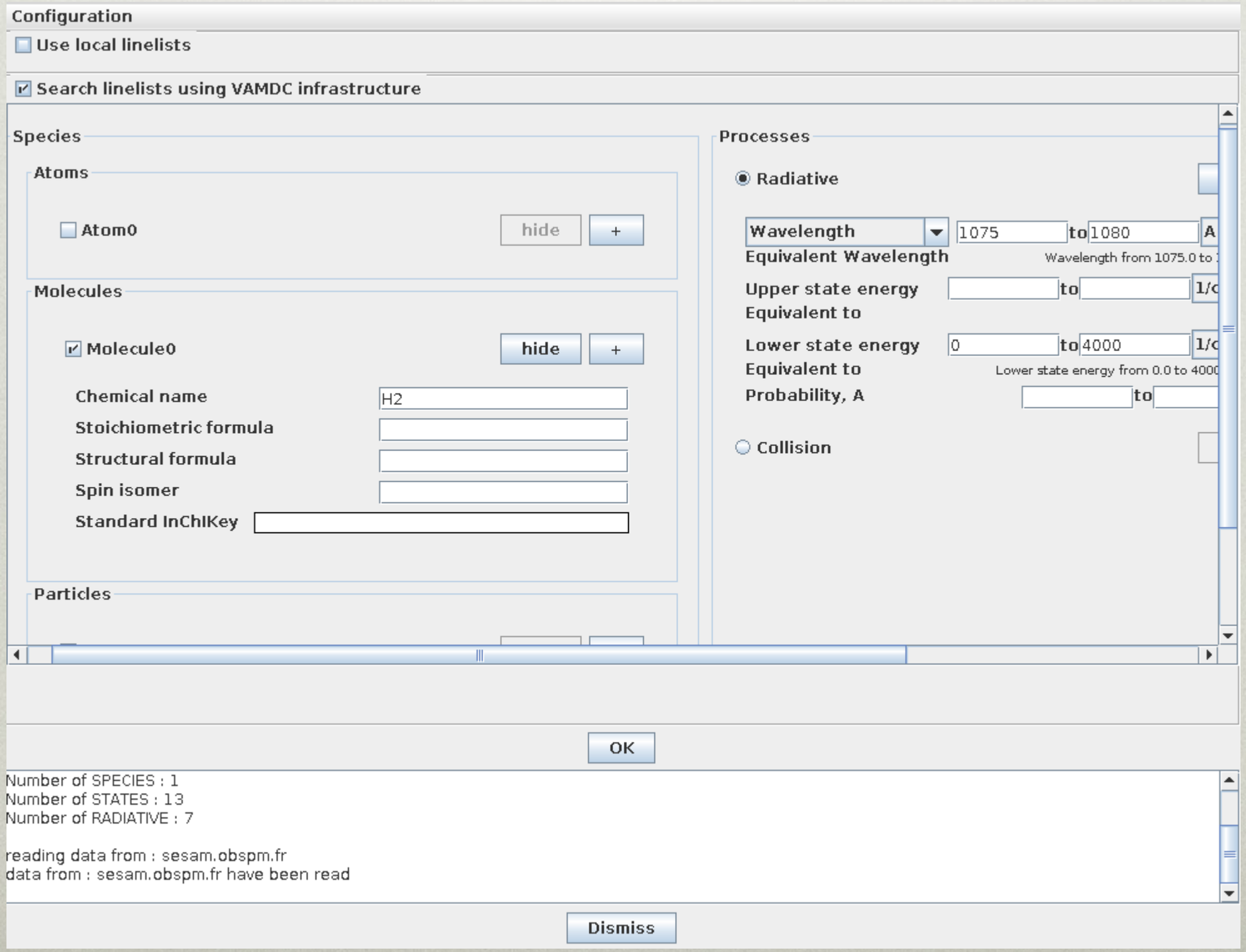
Title	Description	Status	Selected
ALADDIN2	A subset of the IAEA ALADDIN...	active	☐
BASECOL: VAMDC-TAP interface	This database, called BASEC...	active	☐
Carbon Dioxide Spectroscopi...	Carbon Dioxide spectroscopi...	active	☐
Carbon Dioxide Spectroscopi...	Carbon Dioxide spectroscopi...	active	☐
CDMS	The Cologne Database for M...	active	☐
Chianti	Chianti consists of a critically...	active	☐
DESIRE database (Moscow mi...	The main purpose of D.E.S.I....	active	☐
ECaSDa - Ethene Calculated ...	Calculated data of ethylene (...	active	☐
GhoSST	The GhoSST database ("Gren...	active	☐
GSMA Reims S&MPO	Calculated line lists for ozone...	active	☐
HITRAN-UCL resource	The HITRAN database - trunc...	active	☐
IDEADB - Innsbruck Dissociati...	This database contains infor...	active	☐
JPL database: VAMDC-TAP ser...	The JPL database contains a ...	active	☐
KIDA: VAMDC-TAP interface	KIDA is a database of kinetic ...	active	☐
MeCaSDa - Methane Calculat...	Calculated line lists for meth...	active	☐
OACT - LASP Database	Laboratorio di Astrofisica Sp...	active	☐
RADAM - Ion Interactions	Database for Radiation dama...	active	☐
SpEctroScopy of Atoms and ...	Sesam is a joined project of L...	active	☒
Spectr-W3	The information accumulated...	active	☐
Stark-b	Database for "Stark" broade...	active	☐
TIPbase : VAMDC-TAP interface	TIPbase lists fine-structure le...	active	☐
TOPbase : VAMDC-TAP interfa...	TOPbase lists LS-coupling en...	active	☐
UMIST Database for Astroche...	Reaction rate coefficients for...	active	☐
VALD (atoms)	The Vienna Atomic Line Data...	active	☐
VALD sub-set in Moscow (obs)	The part of Vienna Atomic Lin...	active	☐
VAMDC species-DB	This Database contains all th...	active	☐
Water internet Accessible Dis...	Database containing informa...	active	☐

active

OK QUIT

Identification de raies

- Ecriture d'une requête équivalent à celle passée sur le portail précédemment :
  - H2, longueur d'onde entre 1075 et 1080 A, énergie du niveau bas ≤ 4000 cm-1



Identification de raies

- Résultat de la requête

File

SpEctroScopy of Atoms and Molecules

Line list

SpEctroScopy of Atoms and Molecules

Set 1

Wavelength	All Wavelengths	Wavenumbers	Transition Probability A	Oscillator strength	Lower state energy	Upper state energy	Lower state quantum nu...	Upper state quantum nu...	ID
1075.24	1075.24 (A)	theory : 93002.38 (1/cm)	4.53068E7 (1/s)	0.009286	1740.19 (1/cm)	94742.57 (1/cm)	ElecStateLabel=X; v=0; J...	ElecStateLabel=B; elecl...	H2
1077.14	1077.14 (A)	theory : 92838.78 (1/cm)	2.2357E7 (1/s)	0.01167	0.0 (1/cm)	92838.78 (1/cm)	ElecStateLabel=X; v=0; J...	ElecStateLabel=B; elecl...	H2
1077.7	1077.7 (A)	theory : 92790.52 (1/cm)	2.65141E7 (1/s)	0.007699	118.49 (1/cm)	92909.01 (1/cm)	ElecStateLabel=X; v=0; J...	ElecStateLabel=B; elecl...	H2
1078.26	1078.26 (A)	theory : 92741.84 (1/cm)	6.58081E7 (1/s)	0.009947	3187.47 (1/cm)	95929.31 (1/cm)	ElecStateLabel=X; v=0; J...	ElecStateLabel=B; elecl...	H2
1078.92	1078.92 (A)	theory : 92685.0 (1/cm)	6.74254E7 (1/s)	0.003924	118.49 (1/cm)	92803.49 (1/cm)	ElecStateLabel=X; v=0; J...	ElecStateLabel=B; elecl...	H2
1079.22	1079.22 (A)	theory : 92659.29 (1/cm)	2.78944E7 (1/s)	0.006823	354.37 (1/cm)	93013.66 (1/cm)	ElecStateLabel=X; v=0; J...	ElecStateLabel=B; elecl...	H2
1079.4	1079.4 (A)	theory : 92644.31 (1/cm)	5.48224E7 (1/s)	0.007839	1740.19 (1/cm)	94384.5 (1/cm)	ElecStateLabel=X; v=0; J...	ElecStateLabel=B; elecl...	H2

Select all | Unselect all | Constant height

Add set

0 lines selected | Draw | Erase selection | Erase all | Dismiss

Identification de raies

- Superposition des raies sur le spectre