

Outils pour les données de physique atomique et moléculaire

N.Moreau, M.L. Dubernet

Service dédié au code Molpop

- Service dédié au code Molpop (solves the molecular level population equations, développé par Moshe Elitzur, Department of Physics and Astronomy University of Kentucky)
- Retourne les données de systèmes collisionnels de Basecol utiles pour l'exécution du code :
 - rate coefficients
 - tables d'énergie
 - einstein coefficients
 - références des données

Fonctionnement

- <http://molpop-service.obspm.fr>
- N'utilise pas un protocole IVOA mais suit la même logique
- Le service retourne une votable listant toutes les collisions de Basecol utilisables par le code
- Pour chaque collision une nouvelle requête est lancée
- Elle retourne une table contenant toutes les infos nécessaires

Outil d'accès

- Un script python permet de simplifier l'accès au service :
 - effectue les requêtes
 - formate les sorties de manière à ce qu'elles puissent directement être utilisées par Molpop
 - garde une trace des modifications dans les données au fur et à mesure des updates

Services SLAP

- 2 services différents :
 - un service retournant les raies pour des molécules présentes dans Basecol
 - données provenant de JPL et CDMS
 - environ 38 000 transitions
 - <http://asap.obspm.fr>
 - un service proposant l'accès au catalogue CDMS
 - 570 000 transitions
 - service encore en cours de développement (en ce qui concerne la procédure de mise à jour)
 - <http://slapcdms.obspm.fr/>

Services SLAP (II)

- import des fichiers CDMS/JPL dans une base relationnelle
- identification des nombres quantiques

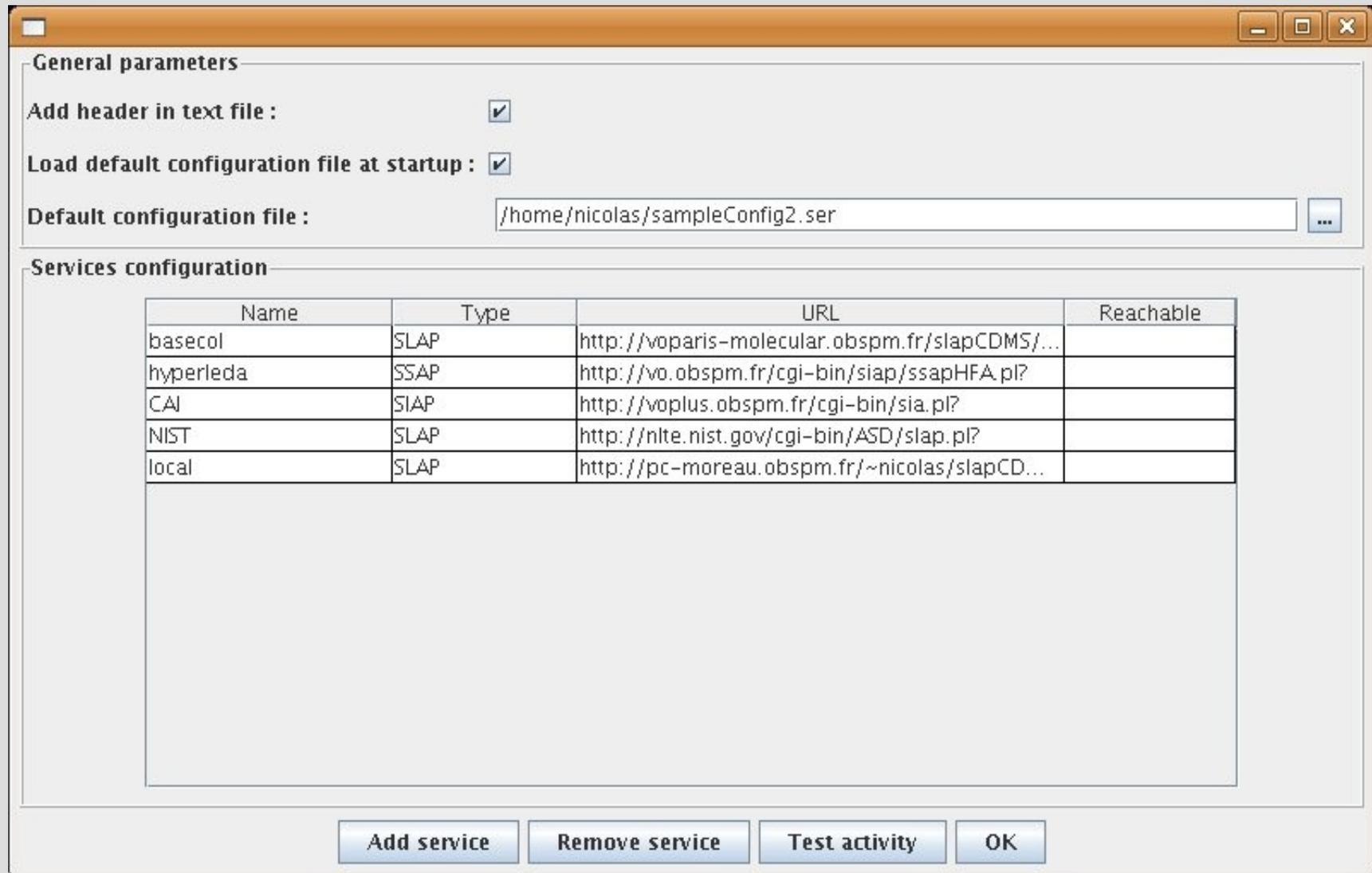
Client java

- Permet de simplifier l'accès aux données
- Offre des possibilités de tri et de formatage des données
- utile dans le cas où on récupère un grand nombre de transitions
- Permet d'interroger des services SLAP mais aussi SIAP, SSAP
- Possibilité de transférer les données en utilisant Plastic

Client java (II)

- Les services sont entrées manuellement par l'utilisateur
- Ils peuvent être sauvegardés
- A terme, interrogation de registry

Configuration



The screenshot shows a configuration window with two main sections: 'General parameters' and 'Services configuration'. The 'General parameters' section includes three options: 'Add header in text file' (checked), 'Load default configuration file at startup' (checked), and 'Default configuration file' (set to '/home/nicolas/sampleConfig2.ser'). The 'Services configuration' section contains a table with columns for Name, Type, URL, and Reachable. The table lists five services: basecol (SLAP), hyperleda (SSAP), CAI (SIAP), NIST (SLAP), and local (SLAP). At the bottom of the window are four buttons: 'Add service', 'Remove service', 'Test activity', and 'OK'.

General parameters

Add header in text file :

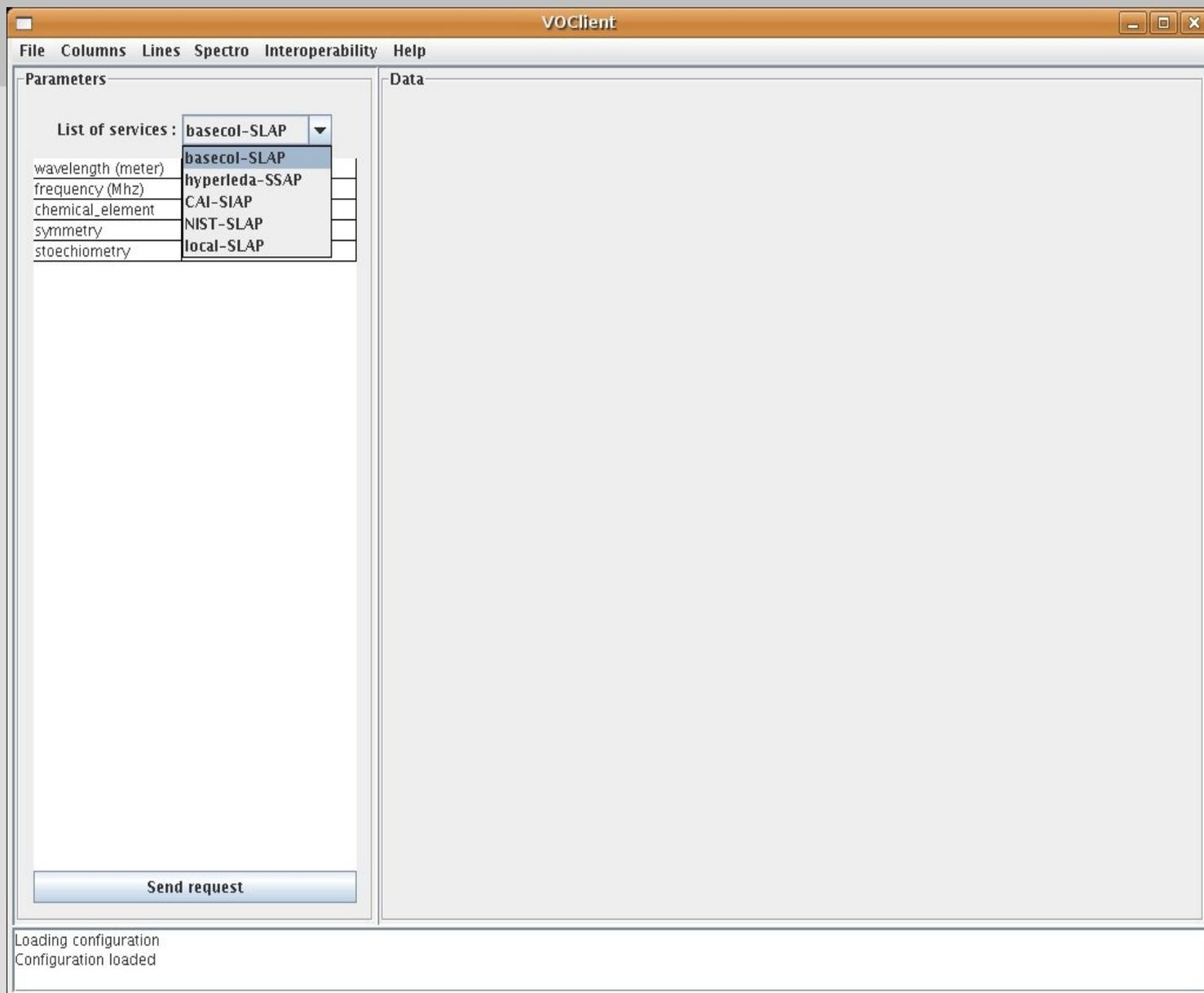
Load default configuration file at startup :

Default configuration file :

Services configuration

Name	Type	URL	Reachable
basecol	SLAP	http://voparis-molecular.obspm.fr/slapCDMS/...	
hyperleda	SSAP	http://vo.obspm.fr/cgi-bin/siap/ssapHFA.pl?	
CAI	SIAP	http://voplus.obspm.fr/cgi-bin/sia.pl?	
NIST	SLAP	http://nlte.nist.gov/cgi-bin/ASD/slap.pl?	
local	SLAP	http://pc-moreau.obspm.fr/~nicolas/slapCD...	

Choix service



Résultat requête

VOclient

File Columns Lines Spectro Interoperability Help

Parameters

List of services: **basecol-SLAP**

wavelength (meter)	
frequency (Mhz)	20000/30000
chemical_element	
symmetry	
stoichiometry	

Send request

Data

wavelength (meter)	frequency (Mhz)	intensity (nm2MHz)	title	chemical
0.0141211	21230.15	-5.9744	H2C34S; symmetry : ortho; dat...	H2C34S
0.0124418	24095.639	-6.8197	H2C34S; symmetry : para; date...	H2C34S
0.0105916	28304.63	-5.8038	H2C34S; symmetry : ortho; dat...	H2C34S
0.0104103	28797.5987	-6.7379	H2C34S; symmetry : para; date...	H2C34S
0.0110044	27242.9101	-4.3387	HC13CCN, v7 = 1; symmetry : ...	HC13CCN, v7
0.0109885	27282.3636	-4.3375	HC13CCN, v7 = 1; symmetry : ...	HC13CCN, v7
0.0109703	27327.7285	-6.1779	HC3N, (1,0,0,1) -v4-v7; symm...	HC3N, (1,0,0
0.0109539	27368.4733	-6.1766	HC3N, (1,0,0,1) -v4-v7; symm...	HC3N, (1,0,0
0.0113212	26480.5842	-5.3716	C4D; symmetry : none; date of i...	C4D
0.0113059	26516.5732	-5.5253	C4D; symmetry : none; date of i...	C4D
0.0112676	26606.5498	-6.6685	C4D; symmetry : none; date of i...	C4D
0.0147825	20280.2895	-4.3694	CaC; symmetry : none; date of i...	CaC
0.0129797	23096.9816	-4.519	CaC; symmetry : none; date of i...	CaC
0.0149518	20050.5977	-9.6343	HDCO; symmetry : none; date o...	HDCO
0.0144665	20723.2135	-9.3547	HDCO; symmetry : none; date o...	HDCO
0.0138824	21595.2085	-6.9677	HDCO; symmetry : none; date o...	HDCO
0.0135836	22070.231	-8.2189	HDCO; symmetry : none; date o...	HDCO
0.0132507	22624.5736	-5.5241	HDCO; symmetry : none; date o...	HDCO
0.0127144	23579.0151	-6.066	HDCO; symmetry : none; date o...	HDCO
0.0119637	25058.4483	-8.0923	HDCO; symmetry : none; date o...	HDCO
0.0117929	25421.539	-7.9599	HDCO; symmetry : none; date o...	HDCO
0.0116371	25761.8555	-7.096	HDCO; symmetry : none; date o...	HDCO
0.0114644	26149.9297	-5.1434	HDCO; symmetry : none; date o...	HDCO
0.0111596	26863.968	-9.5941	HDCO; symmetry : none; date o...	HDCO
0.0108646	27593.3941	-7.1293	HDCO; symmetry : none; date o...	HDCO
0.0106729	28088.9996	-7.4436	HDCO; symmetry : none; date o...	HDCO
0.0106522	28143.8175	-7.1842	HDCO; symmetry : none; date o...	HDCO
0.0102578	29225.7457	-8.3333	HDCO; symmetry : none; date o...	HDCO
0.0100376	29867.02	-6.8383	HDCO; symmetry : none; date o...	HDCO
0.0116248	25788.9577	-4.3449	NaF; symmetry : none; date of i...	NaF
0.0115042	26059.4876	-3.2419	NaF; symmetry : none; date of i...	NaF
0.0112911	26551.227	-4.5906	I-C13CC2H2; symmetry : ortho;...	I-C13CC2H2
0.0112452	26659.589	-5.327	I-C13CC2H2; symmetry : para;...	I-C13CC2H2
0.0112452	26659.6466	-5.327	I-C13CC2H2; symmetry : para;...	I-C13CC2H2
0.0112438	26662.982	-4.9934	I-C13CC2H2; symmetry : para;...	I-C13CC2H2
0.0111975	26773.18	-4.5834	I-C13CC2H2; symmetry : ortho;...	I-C13CC2H2

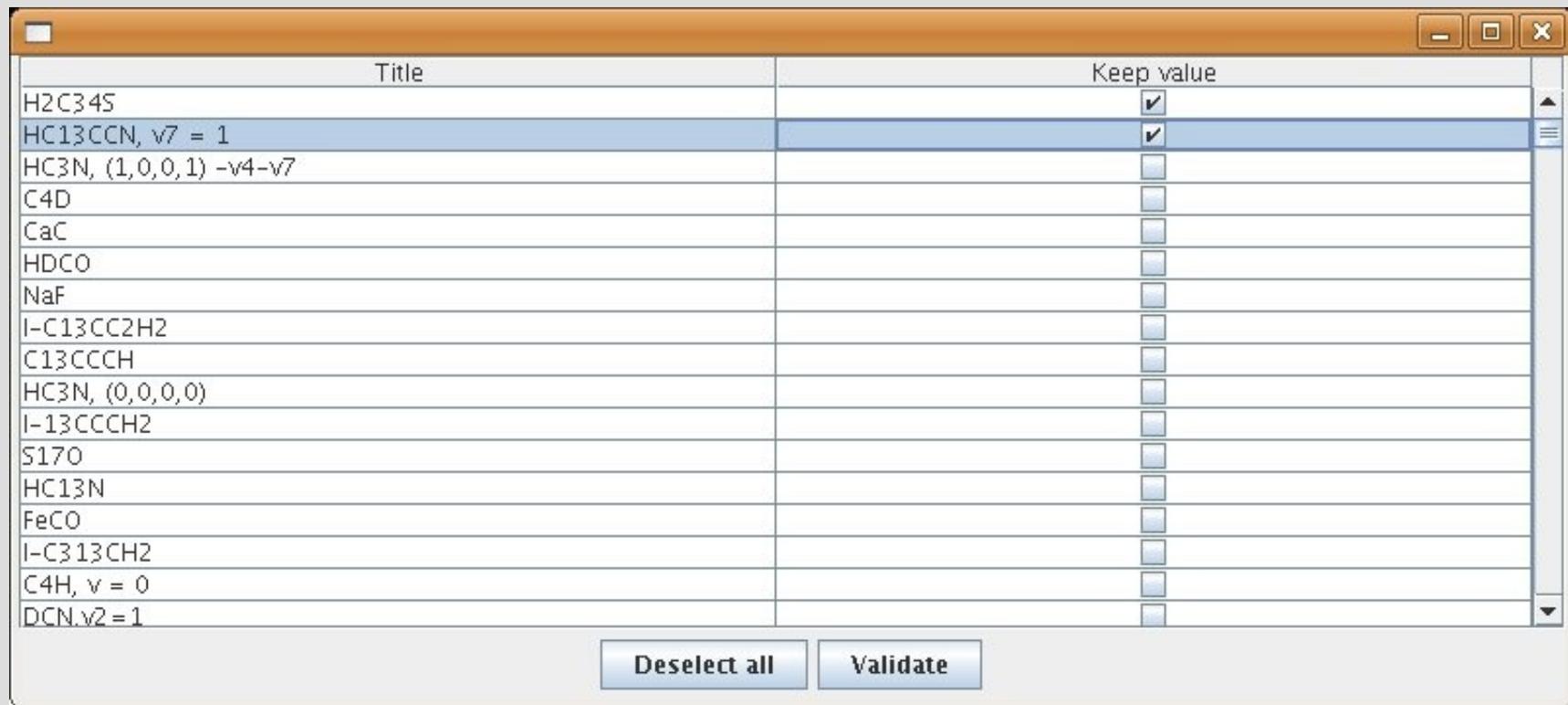
Loading configuration
Configuration loaded
Performing request
Data loaded

Choix éléments

Title	Keep value
H2C34S	<input checked="" type="checkbox"/>
HC13CCN, v7 = 1	<input checked="" type="checkbox"/>
HC3N, (1,0,0,1) -v4-v7	<input checked="" type="checkbox"/>
C4D	<input checked="" type="checkbox"/>
CaC	<input checked="" type="checkbox"/>
HDCO	<input checked="" type="checkbox"/>
NaF	<input checked="" type="checkbox"/>
I-C13CC2H2	<input checked="" type="checkbox"/>
C13CCCH	<input checked="" type="checkbox"/>
HC3N, (0,0,0,0)	<input checked="" type="checkbox"/>
I-13CCCH2	<input checked="" type="checkbox"/>
S17O	<input checked="" type="checkbox"/>
HC13N	<input checked="" type="checkbox"/>
FeCO	<input checked="" type="checkbox"/>
I-C313CH2	<input checked="" type="checkbox"/>

Deselect all Validate

Fonction partition



Title	Keep value
H2C34S	<input checked="" type="checkbox"/>
HC13CCN, v7 = 1	<input checked="" type="checkbox"/>
HC3N, (1,0,0,1) -v4-v7	<input type="checkbox"/>
C4D	<input type="checkbox"/>
CaC	<input type="checkbox"/>
HDCO	<input type="checkbox"/>
NaF	<input type="checkbox"/>
I-C13CC2H2	<input type="checkbox"/>
C13CCCH	<input type="checkbox"/>
HC3N, (0,0,0,0)	<input type="checkbox"/>
I-13CCCH2	<input type="checkbox"/>
S17O	<input type="checkbox"/>
HC13N	<input type="checkbox"/>
FeCO	<input type="checkbox"/>
I-C313CH2	<input type="checkbox"/>
C4H, v = 0	<input type="checkbox"/>
DCN, v2 = 1	<input type="checkbox"/>

Deselect all Validate