

XX СИМПОЗИУМ ПО МОЛЕКУЛЯРНОЙ СПЕКТРОСКОПИИ
ВЫСОКОГО РАЗРЕШЕНИЯ (HIGHRUS-2023)

УДК 539.184

ИНФОРМАЦИОННАЯ СИСТЕМА ПО АТОМНОЙ СПЕКТРОСКОПИИ
«ЭЛЕКТРОННАЯ СТРУКТУРА АТОМОВ»¹

© 2024 г. В. В. Казаков^{a, b}, В. Г. Казаков^{b, a}, О. И. Мешков^{a, c, *}, А. С. Яценко^{a, d}

^aНовосибирский национальный исследовательский государственный университет, 636090, Новосибирск, Россия

^bНовосибирский государственный университет экономики и управления, 630099, Новосибирск, Россия

^cИнститут ядерной физики им. Г. И. Будкера СО РАН, 636090, Новосибирск, Россия

^dИнститут автоматики и электрометрии СО РАН, 636090, Новосибирск, Россия

*e-mail: O.I.Meshkov@inp.nsk.su

Поступила в редакцию 26.10.2023 г.

После доработки 26.10.2023 г.

Принята к публикации 05.11.2023 г.

Представлена российская информационно-справочная система по атомной спектроскопии «Электронная структура атомов». Описаны ее основные характеристики и возможности для поддержки научных исследований и подготовки специалистов. Массив данных содержит более 234000 уровней, при этом большое внимание уделяется экспериментальным данным и равномерному заполнению по Z , включая классифицированные уровни и переходы всех редкоземельных и трансурановых элементов, а также их ионов. Предложены оригинальные средства визуализации научных данных в виде спектрограмм, квантограмм и диаграмм Гротриана. Представление спектральных данных в виде цветных интерактивных диаграмм способствует пониманию и анализу свойств атомной системы. Использование спектральных данных информационной системы «Электронная структура атомов» совместно с ее функциональными возможностями эффективно для решения различных научных задач и для подготовки специалистов.

Ключевые слова: атомная спектроскопия, научная визуализация, диаграммы Гротриана, спектрограммы, квантограммы

DOI: 10.31857/S0044453724050039, EDN: PKUNMB

ВВЕДЕНИЕ

Обеспечение доступа ученых и разработчиков к информации по спектрам атомных систем является одной из наиболее сложных и актуальных задач поддержки исследований в целом ряде научных и технических направлений фундаментальной физики и прикладных областях от астрофизики и физики газовых лазеров до элементного анализа и археологии. Информационные ресурсы по атомной спектроскопии прошли длительный путь от справочных табличных до компьютерных систем и представлены сегодня, прежде всего, интернет-ресурсами, организованными как информационно-поисковые системы с веб-интерфейсом [1].

В настоящее время известен целый ряд таких систем, развиваемых и поддерживаемых ведущими научными организациями мира. Например, в США национальным институтом стандартов и технологий (NIST) поддерживается система

ASD [2]. Аналогичны ей системы NIFS (Япония) [3], AMODS (Корея) [4], VALD (Австрия) [5]. Каждая из систем имеет обширную базу данных по спектрам атомов и/или ионов. В настоящее время также развивается направление агрегации имеющихся баз данных для информационного поиска одновременно по многим ресурсам по атомной спектроскопии. Одним из таких решений является портал европейского консорциума VAMDC [6].

В России одним из известных информационных ресурсов является банк данных по спектроскопическим свойствам атомов и ионов SPECTR-W3, созданный и развивающийся в Российском Федеральном Ядерном центре (г. Снежинск) [7]. С 2002 г. ресурс размещен в открытом доступе в Веб и является в настоящее время одним из наиболее авторитетных и часто используемых отечественных информационных интернет-ресурсов по атомной спектроскопии. Кроме того, в России с 2005 г. опубликована в Интернет и активно развивается информационная система по атомной спектроскопии «Электронная структура атомов» (ИС ЭСА),

¹ Иркутская обл., пос. Чара, 3–7 июля 2023 года.

сопоставимая по основным параметрам с ведущими мировыми аналогами [8, 9].

Информационные системы по атомной спектроскопии, как правило, имеют много общего, что связано с общей задачей предоставления пользователю максимально точных и достоверных данных об энергетических уровнях и радиационных переходах атомных систем. В то же время создание исчерпывающе полного информационного ресурса по атомной спектроскопии представляется сложной задачей в связи с большим объемом и разрозненностью исходных данных, и в действительности мы наблюдаем определенную специализацию каждого из информационных ресурсов.

В основном ресурсы по атомной спектроскопии имеют возможность предоставлять по запросам пользователя данные об уровнях и переходах в табличном виде, включая фильтрацию и сортировку. Однако помимо этого в их состав включают средства научной графики, моделирования, анализа данных, опирающиеся на сложные алгоритмы их обработки и если функциональность табличных представлений приблизительно равнозначна у всех таких ресурсов, то в области визуализации и анализа они отличаются весьма существенно.

В информационной системе «Электронная структура атомов» также присутствует и активно развивается ряд сервисов визуализации и анализа данных, которые могут быть полезны при решении широкого круга научных и инженерных задач. Особенностью ИС ЭСА во многом определяются тем, что она создается и поддерживается на базе классического университета (Новосибирский государственный университет) и институтов Сибирского отделения РАН и в значительной мере ориентируется на подготовку специалистов-физиков. В частности, ИС ЭСА является единственной из ведущих мировых информационных систем по атомной спектроскопии, имеющей, наряду с англоязычным, интерфейс на русском языке. Это имеет существенное значение для учебных заведений, осуществляющих учебный процесс на русском языке.

БАЗА ДАННЫХ ИНФОРМАЦИОННОЙ СИСТЕМЫ ЭСА

Объем, полнота и достоверность баз данных являются одним из важнейших свойств информационных систем вообще, и систем по атомной спектроскопии в частности. В связи со значительными объемами спектральных данных, сложностью их обработки и поддержания в актуальном состоянии, среди существующих систем наблюдается определенная специализация на отдельных группах элементов, параметрах уровней и переходов.

Приоритеты ИС ЭСА определяются задачами общей аналитики и подготовки специалистов и состоят

в поддержке базы данных экспериментально полученных параметров энергетических уровней и радиационных переходов нейтральных атомов и атомных ионов всех элементов периодической таблицы. Особое внимание уделяется равномерному заполнению базы данных по всем величинам атомных чисел Z , в том числе представлению спектров редкоземельных и трансурановых элементов, что отличает ИС ЭСА от ряда других ресурсов, в том числе и ASD NIST. Кроме того, при заполнении БД приоритет отдается классифицированным данным.

В табл. 1 приведены данные сравнения по объему и полноте БД ИС ЭСА с авторитетными в мире и часто используемыми на практике информационными ресурсами. Были выбраны ресурсы с обширными базами экспериментальных данных: ASD NIST, VALD, и SPECTR-W3. В настоящее время база данных ИС ЭСА включает более 234000 записей по энергетическим уровням и радиационным переходам атомных систем, что превосходит объемы баз данных большинства других ресурсов по атомной спектроскопии. Хотя общее число хранимых записей об уровнях и переходах в БД VALD существенно выше, чем в ИС ЭСА и других сравниваемых системах, однако это является результатом включения в БД VALD больших массивов расчетных данных, не обладающих точностью, необходимой для многих научных задач.

В БД ИС ЭСА представлены элементы периодической таблицы с Z от 1 до 110. В числе параметров, определяемых для уровней, приведены электронная конфигурация, запись терма и его энергетическое значение, внутреннее квантовое число J , время жизни уровня. Для переходов – конфигурация верхнего и нижнего уровней, значение длины волны, интенсивность линии, сила осциллятора, вероятность перехода и сечение возбуждения, что в основном соответствует структуре данных других информационных ресурсов.

Для ряда задач существенным является то, насколько в информационном ресурсе заполнена информация об электронных конфигурациях и термах уровней, а также известны ли для радиационных переходов конфигурации и термы верхнего и нижнего уровней. В ИС ЭСА классифицирована существенно большая часть уровней и переходов по сравнению с остальными сравниваемыми системами, что является важным преимуществом ресурса.

ПРЕДСТАВЛЕНИЕ СПЕКТРОВ В ВИДЕ СПЕКТРОГРАММ И ВИРТУАЛЬНЫЙ СПЕКТРОСКОП ИС ЭСА

Важной характеристикой эффективности начального информационного ресурса являются возможности представления данных средствами научной графики. Наиболее стандартным способом визуального представления спектров являются

Таблица 1. Сравнение основных параметров баз данных информационных систем

Сравниваемый параметр	ASD NIST	VALD	SPECTR-W3	ИС ЭСА
Число записей по уровням				
Всех уровней	106 522	>550 000	30 000	83 823
Для трансурановых	3300	0	51	4969
Для редкоземельных элементов	18 516	333 000	1834	17 887
Число записей по переходам				
Всех переходов	224 521	255 000 000	80 000	158 814
Для трансурановых элементов	865	0	54	4033
Для редкоземельных	16 681	3 146 000	2250	23 589

Таблица 2. Сравнение некоторых свойств спектрограмм, генерируемых информационными ресурсами по атомной спектроскопии

Параметр	SPECTR-W3	ASD NIST	VAMDC	ИС ЭСА
Для каких элементов строится	Только для элементов, для которых загружены рисунки	На элементах с большим количеством линий не работает	Строится для всех элементов	Строится для всех элементов
Актуальность	Автоматически не обновляется, бд не соответствует	Автоматическое построение по бд	Автоматическое построение по бд	Автоматическое построение по бд
Разрешение	Растровый рисунок мах 800 пикселей по оси	Растровый рисунок 796 пикселей по оси	Векторный рисунок, масштабируется по экрану	Векторный рисунок + инструменты масштабирования
Цветность	Черно-белая (определяется загруженным рисунком)	Черно-белая	Черно-белая	Цветная в оптическом диапазоне
Информация о параметрах	Соответствует загруженному рисунку	Только шкала оси	Только значение длин волн переходов	Шкала оси + отображение длины волны при наведении на линию
Информация об интенсивности	Имеется	Отсутствует	Отсутствует	Имеется возможность отбросить слабые переходы с помощью инструмента «чувствительность»
Настройка диаграммы	Не предусмотрена	Выбор диапазона, фильтрация линий при генерации	Выбор диапазона, фильтрация линий при генерации	Выбор диапазона, фильтрация линий в интерактивном режиме, скроллинг

спектрограммы. В табл. 2 приводится сравнение некоторых значимых для пользователей характеристик спектрограмм, генерируемых рядом информационных ресурсов по атомной спектроскопии.

Для сравнения были выбраны ИС ЭСА, ASD NIST, SPECTR-W3 и VAMDC. Образцы спектрограмм, представленные рассматриваемыми системами, приведены на рис. 1–3.

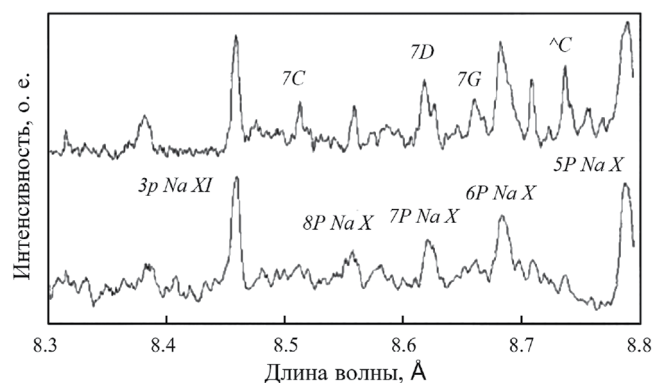


Рис. 1. Денситограмма в системе SPECTR-W3.

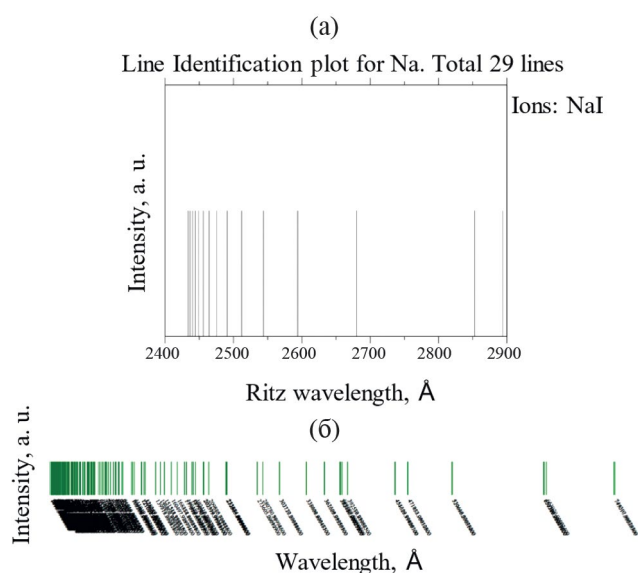


Рис. 2. Спектрограмма атома натрия в системе ASD NIST(a) и VAMDC(b).

Существует два принципиально разных подхода к выводу спектральных данных в графическом виде. Так, в SPECTR-W3 спектрограммы являются растровыми изображениями, не связанными с данными в БД. Такие спектрограммы строятся вручную специалистами и имеют высокое качество исполнения, однако построение таких диаграмм трудоемко и на практике приводит к их дефициту и невозможности автоматической актуализации. В SPECTR-W3 таких спектрограмм очень мало: всего около 50 для почти 1500 атомных систем, представленных в базе данных. В ASD NIST, VAMDC, ИС ЭСА спектрограммы генерируются автоматически по спектральной информации, хранящейся в БД системы, в любом количестве, с учетом дополнительных условий, накладываемых пользователем. Однако качество

таких спектрограмм зависит от алгоритмов, заложенных в эти программы, и, во многих случаях, сегодня уступает выполненным «вручную» специалистами.

Существенным параметром является разрешение диаграмм спектров, напрямую связанное с количеством информации, которое может быть размещено на диаграмме. В отличие от аналогов, в ИС ЭСА векторная графика дополнена инструментами скроллинга и масштабирования, позволяющими увеличивать выбранный участок спектра, для возможности отображения тонких и сверхтонких структуры линий даже на небольших экранах. Грамотное использование цветовых решений может существенно облегчать работу пользователя с научной графикой. В ИС ЭСА, в отличие от других ИС, спектральные линии оптического диапазона изображаются соответствующим цветом, аналогично оптическим призматическим спектроскопам, использующимся повсеместно в учебном процессе [10].

Существенным плюсом ИС ЭСА является наличие информации о параметрах переходов. В ИС ЭСА такая информация присутствует на спектрограмме в виде шкалы длин волн, а также длина волны конкретного перехода появляется при наведении на соответствующую линию (см. рис. 3).

На эффективность работы со спектрограммой влияют возможности ее настройки на конкретную задачу — выбор диапазона спектра и фильтрация отображаемых переходов по определенным параметрам, например, по интенсивностям. В ИС ЭСА она наиболее удобна за счет использования интерактивного режима без перезагрузки страницы при изменении параметров фильтрации и отображения.

Таким образом, мы видим, что пользовательские свойства спектрограмм ИС ЭСА по многим параметрам превосходят спектрограммы, автоматически генерируемые в других ресурсах, и не уступают спектрограммам, реализованным специалистами.

ПОСТРОЕНИЕ ДИАГРАММ ГРОТРИАНА

Другим способом визуализации спектров атомных систем являются представление электронной структуры атома в виде диаграмм Гротриана, удобных в задачах общего анализа электронной структуры атомов и ионов [8].

Диаграмма Гротриана является сложной графической конструкцией и до последнего времени создавались «вручную» специалистами. Процесс создания диаграмм трудоемок, в связи с чем постоянно наблюдается их дефицит. Существуют и программные реализации алгоритмов построения диаграмм Гротриана: на сегодняшний день

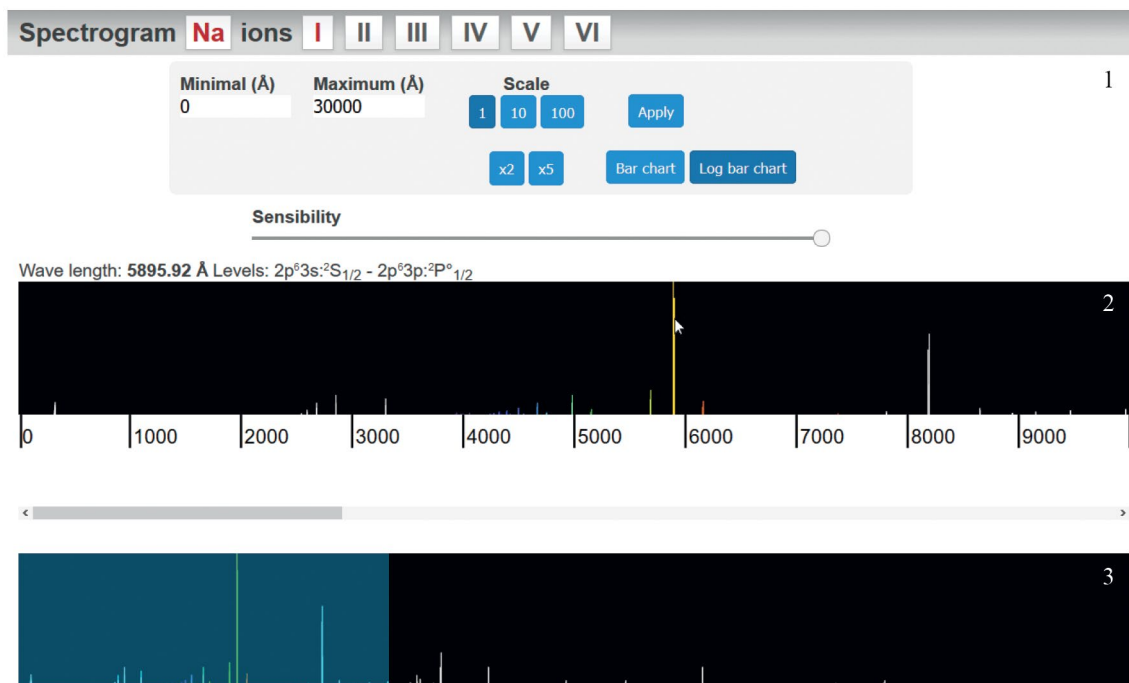


Рис. 3. Интерфейс виртуального спектрографа ИС ЭСА при работе со спектром Na I. На рисунке сверху вниз: 1 – панель инструментов управления виртуальным спектрометром: окна выбора участка спектра, кнопки выбора масштаба увеличения, «чувствительность» – инструмент отсека слабых линий; 2 – фрагмент спектрального диапазона, рассматриваемый с увеличением, определяемым коэффициентом масштабирования; 3 – спектрограмма полного диапазона линий и скроллер настройки окна масштабированного спектра.

такая возможность присутствует в двух информационных интернет ресурсах по атомной спектроскопии: ASD NIST и ИС ЭСА.

На рис. 4 приведен пример диаграммы Гротриана, автоматически построенной системой ASD NIST для W II. Видно, что чтение диаграммы затруднено в связи с отсутствием механизма отбора линий. В ИС ЭСА построение диаграмм Гротриана осуществляется динамически на основе спектральной информации, хранящейся в базе данных уровней и переходов атомных систем. В ИС ЭСА могут быть построены диаграммы 98 нейтральных атомов (для Pa, Fm, Md, No, Lg на диаграммах не будут отражены переходы, поскольку данных о классифицированных переходах на сегодняшний день не имеется). Диаграммы также строятся для однократных и многократных переходов.

Ряд решений, примененных в ИС ЭСА, обеспечивает лучшее, по сравнению с ASD NIST, качество получаемых диаграмм [11]. Главным и наиболее принципиальным отличием является использование специального алгоритма, обеспечивающего отбор информации для размещения на диаграмме. Алгоритм классифицирует уровни и переходы по ряду признаков и затем отбирает из каждой группы для размещения на диаграмме такое количество, чтобы при соблюдении общей читаемости

представить все основные особенности отображаемого спектра.

Вид диаграммы Гротриана, автоматически построенной в ИС ЭСА, представлен на рис. 5. Техника построения опирается на разнесение четных и нечетных уровней вправо и влево от центральной линии диаграммы. Такой способ построения обеспечивает возможность размещения существенно большего, по сравнению с традиционным, числа линий при сохранении читаемости диаграммы за счет исключения скоплений линий в одной точке и сокращения их пересечений.

В табл. 3 приведены данные по сравнению сервисов построения диаграмм Гротриана в ASD NIST и ИС ЭСА по ряду параметров. Сервис ИС ЭСА, представляющий электронную структуру атомных систем в виде диаграмм Гротриана, позволят строить диаграммы для большего числа таких систем, при этом обеспечивает лучшую читаемость.

КВАНТОГРАММЫ

Изменение пользовательских свойств диаграмм при переходе к их компьютерному исполнению позволяет применить новые, ранее не использовавшиеся техники диаграмм, с возможностью когнитивной визуализации электронной

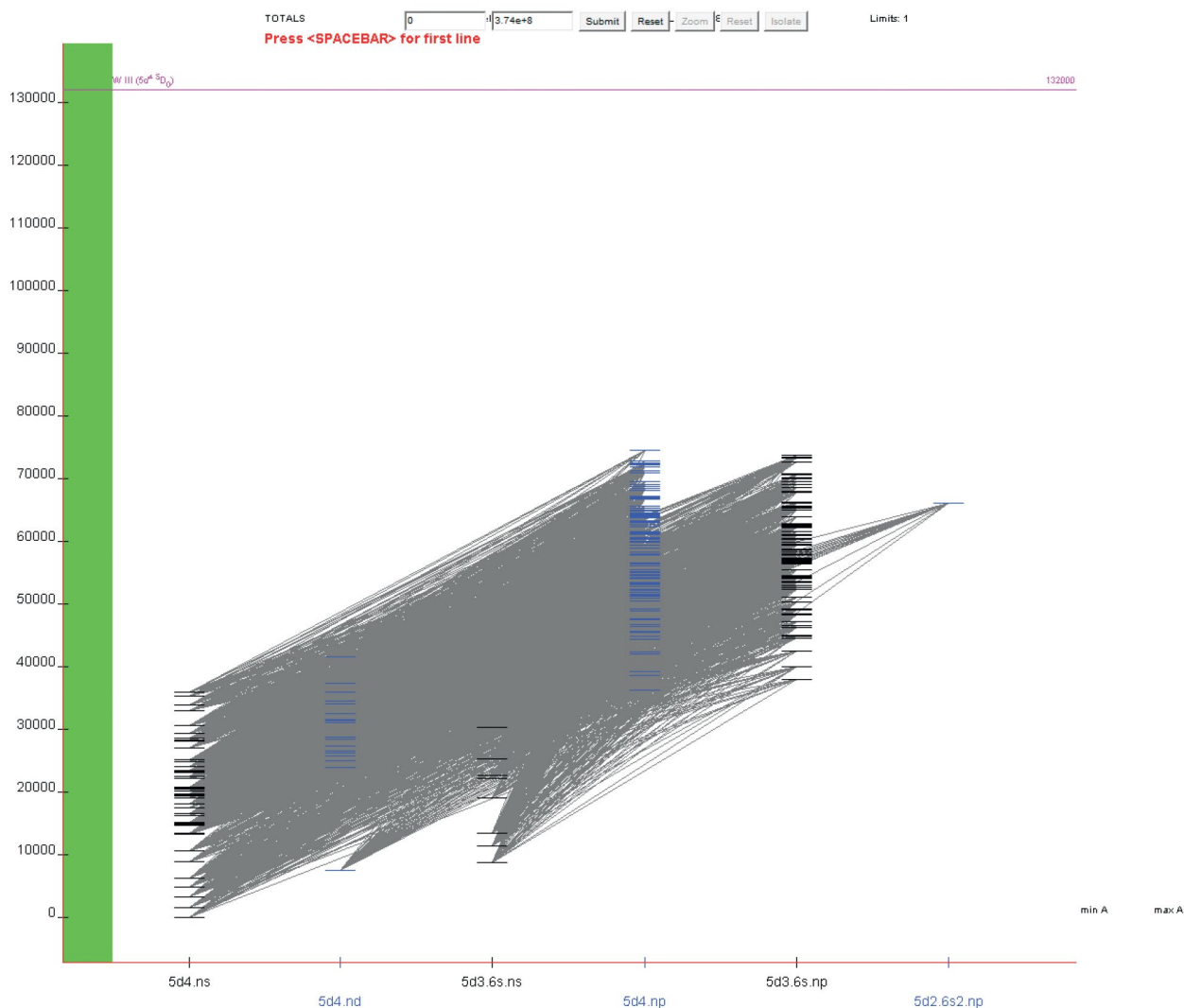


Рис. 4. Диаграмма атома W II в системе ASD NIST.

структуры атомов, интерактивностью и динамикой. Авторами предложен один из вариантов такой диаграммной техники, называемый ими квантограммами [12].

Для построения квантограмм выбрана несколько иная, по сравнению с диаграммами Гротриана, система координат: и по оси X , и по оси Y откладываются энергии уровней атомной системы. Переход в такой системе координат отображается точкой, координата X которой соответствует энергии нижнего уровня, а координата Y – энергии верхнего уровня. Благодаря этому на квантограмме, в отличие от диаграмм Гротриана, могут быть размещены все известные переходы атомной структуры без потери читаемости. Кроме того, для работы с отдельными участками электронной структуры (например, мультиплетами), поле квантограммы можно

масштабировать, тогда как для диаграммы Гротриана, в связи с размерами отрезков, отображающих переходы, масштабирование бессмысленно.

Серии переходов между энергетическими уровнями на квантограмме легко находятся как группы точек, изображающих переходы, расположенные на одной вертикали. Незначительная модификация координат квантограммы в $X=X$, $Y=Y-X$ позволяет визуально сравнивать энергии переходов: переходы с близкими энергиями будут располагаться вблизи одной горизонтальной линии (рис. 6).

То, что радиационный переход на квантограмме представлен точкой, открывает широкие возможности для связывания с ним пиктограмм, привязывания к ним надписей, цветовых значений и подобных приемов усиления информативности. В частности, для отображения синглетных линий

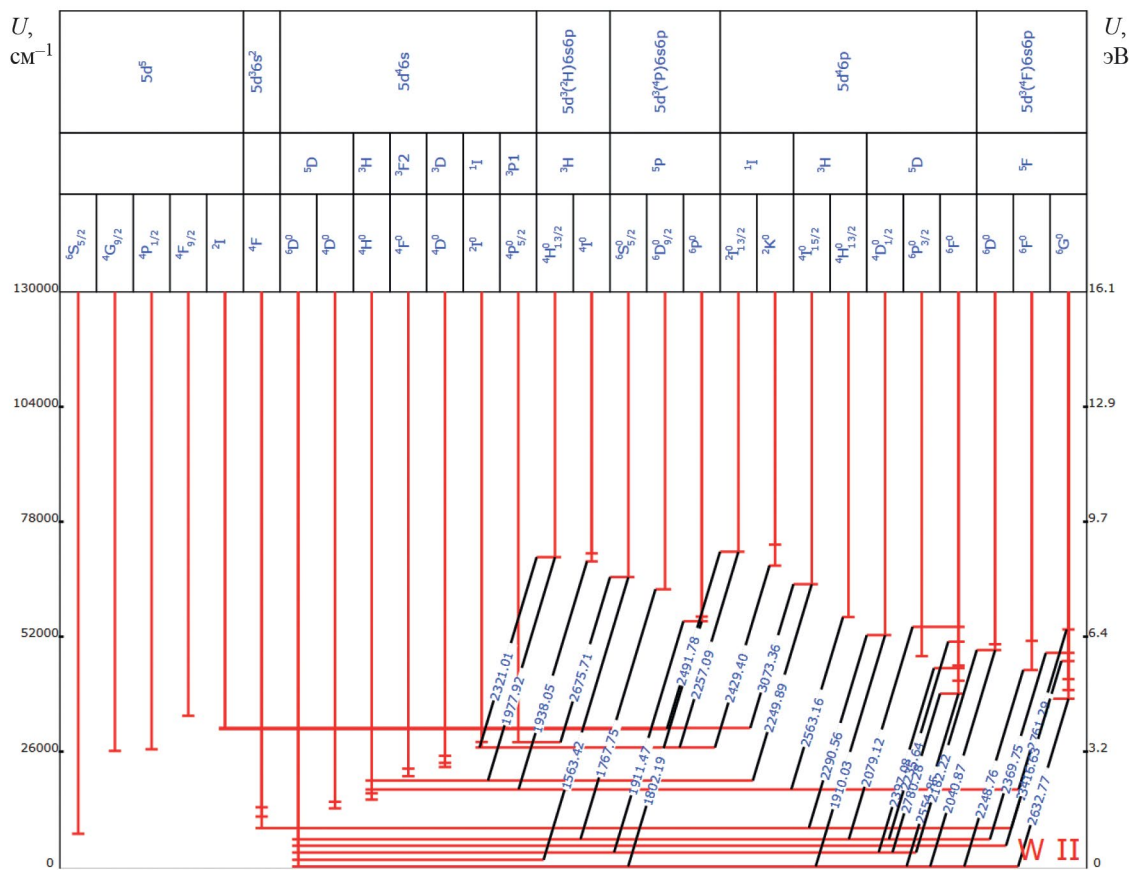


Рис. 5. Диаграмма Гротриана для атома W II в информационной системе «Электронная структура атомов». При генерации диаграммы автоматически произведен отбор уровней и переходов. Применена техника разнесения четных и нечетных термов по разные стороны диаграммы от центрального основного состояния. Энергетические уровни разбиты на группы по типу атомного остатка и подгруппы по термам.

используются окружности, дублетов — «линзы», триплетов — треугольники и т.д.

При наведении на любой переход всплывает подсказка с отображением термов и конфигурации верхнего и нижнего уровней, длины волны, интенсивности и координат перехода. При клике на переход отображаются все переходы тонкого расщепления терма. Также диаграмма легко масштабируется.

Для отображения выбранного мультиплета используется отдельное окно. При наведении курсора на выбранный переход происходит выделение всех переходов, которые принадлежат данному мультиплету. (рис. 7).

Образец программы, генерирующий квантограммы, реализован и встроен в информационную систему ИС ЭСА. Программа способна генерировать квантограммы для всех нейтральных атомов, а также ионов кратности 1–7, содержащихся в базе данных системы. Все программное обеспечение размещено в Интернет в открытом доступе и может

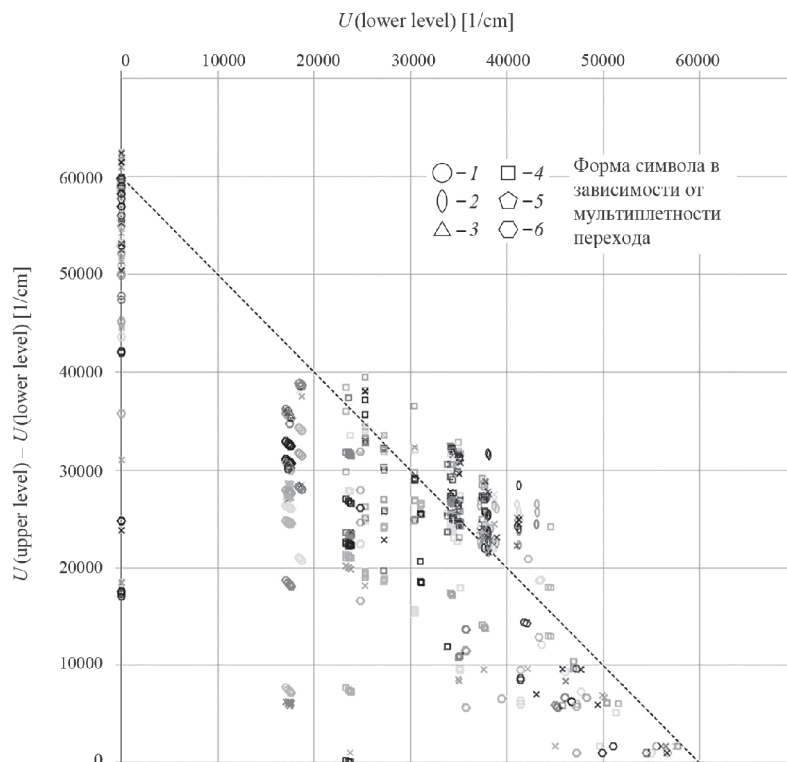
использоваться для решения научно-технических и образовательных задач. Опыт работы с квантограммами показывает их преимущество в наглядности и читаемости перед другими типами визуализации электронной структуры атомов в целом ряде случаев и задач. Предполагается дальнейшее повышение функциональности квантограмм, что выгодно отличает новый вид графического представления атомных систем от традиционных диаграмм Гротриана.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

База данных ИС ЭСА является одним из наиболее полных информационных интернет-ресурсов по спектрам атомных систем. При этом ряд особенностей базы данных ИС ЭСА, в том числе значительная доля классифицированных уровней и переходов и лучшая проработка спектров с большим атомным числом, позволяют рекомендовать ее для задач образовательного характера и целей общей аналитики, в которых речь идет о работе

Таблица 3. Сравнение основных характеристик сервисов построения диаграмм Гротриана для различных информационных ресурсов по атомной спектроскопии

Параметр	ASD NIST	ИС ЭСА
Формат и область отображения	Векторная графика, 1280×1024 точек	Векторная графика, масштабируемая по размеру окна
Читаемость	Низкая: размещаются все линии спектра, что ведет к их наложению друг на друга	Высокая: автоматический отбор необходимого для сохранения читаемости числа линий
Технология и установка	Java апплет, требуется установка Java с ручной настройкой системы безопасности	Javascript + SVG, установка не требуется
Возможности интерактивной работы	Отображение информации об уровнях и переходах	Отображение информации об уровнях и переходах, фильтрация по длине волны перехода, энергиям уровней
Группировка уровней по конфигурации и сериям	Настраивается пользователем перед построением диаграммы	Настраивается автоматически на основе размера экрана и кол-ва данных
Возможность открытия диаграммы по ссылке	Через заполнение формы на сайте	По URL-адресу. Достаточно ввести ссылку в адресную строку браузера. Ссылкой можно «поделиться» с другими пользователями

**Рис. 6.** Квантограмма Mn I, построенная в координатах ось X – энергия нижнего уровня, ось Y – разность энергий верхнего и нижнего уровней переход. Пунктирная линия – граница ионизации. Выше границы ионизации расположены автоионизационные переходы. Обозначения: ○ – синглет, ◊ – дублет, △ – триплет, □ – квартет, ◑ – пентет, ◒ – секстет, × – запрещенные переходы.

с электронной структурой атомных систем во всем диапазоне атомных чисел Z .

Средства визуализации атомных спектров в виде спектрограмм, реализованные в ИС ЭСА существенно превосходят соответствующие средства в аналогичных ресурсах в части удобства работы за счет реализации в виде интерактивных приложений и использования векторной графики. Особенно эффективным их использование будет для целей аналитической работы со спектрами и в задачах подготовки кадров в спектроскопии и смежных областях. Из-за простоты и интуитивной понятности интерфейса работа со спектрограммами может быть рекомендована даже при обучении в средней школе.

Представление атомных спектров в виде автоматически генерируемых по базе данных системы диаграмм Гротриана, реализованное в ИС ЭСА, является мощным инструментом для теоретического анализа спектров и подготовки специалистов в области атомной физики и спектроскопии. На сегодняшний день, помимо ИС ЭСА, автоматическое построение диаграмм Гротриана реализовано в ASD NIST. Однако алгоритмы построения, реализованные в ИС ЭСА, более соответствуют методике построения диаграмм специалистами «вручную», более читаемы и лучше подходят как для целей анализа электронной структура атомной системы, так и для целей обучения.

Таким образом, информационная система «Электронная структура атомов» обеспечивает поддержку научных исследований спектральными данными по атомным системам, предоставляя исследователю большой объем актуальной информации по широкому спектру параметров энергетических уровней и радиационных переходов в табличной форме, а также в графической форме в виде спектрограмм и диаграмм Гротриана. При этом общий уровень сервисов сопоставим с лучшими мировыми аналогами, а для некоторых целей, в том числе общей аналитики электронной структуры атомных систем и подготовки специалистов в областях, связанных со спектроскопией, использование ИС ЭСА представляется предпочтительным.

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

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Казаков В.Г., Яценко А.С. Структура, хранение и представление данных о спектрах атомных систем. Новосибирск, НГУ. Учебное пособие. 2011.
2. NIST ASD (ver. 5.0). URL: <http://www.nist.gov/pml/data/asd.cfm> (дата обращения: 21.10.2016)
3. NIFS Database. URL: <http://dbshino.nifs.ac.jp/> (дата обращения: 21.10.2016)
4. AMODS. URL: <http://amods.kaeri.re.kr/> (дата обращения: 21.10.2016)
5. VALD. URL: <http://vald.astro.uu.se/> (дата обращения: 21.10.2016)
6. VAMDC. URL: <http://portal.vamdc.org> (дата обращения: 21.10.2016)
7. SPECTR-W3. URL: <http://spectr-w3.snz.ru/index.phtml> (дата обращения: 21.10.2016)
8. Казаков В.Г., Раутиан С.Г., Яценко А.С. // Оптика и Спектроскопия. 2008. Т. 106. С. 53.
9. Информационная система «Электронная структура атомов». URL: <http://grottrian.nsu.ru> (дата обращения: 21.10.2016)
10. Казаков В.Г., Казаков В.В., Ковалев В.С., Яценко А.С. // Вестник НГУ, серия информационные технологии. 2001. Т. 9. № 3. С. 30.
11. Казаков В.Г., Казаков В.В., Жакупов М.Б., Яценко А.С. // Вестн. НГУ. серия информационная техника. 2010. Т. 8. № 3. С. 66.
12. Мешков О.И., Казаков В.Г., Казаков В.В., и др. // Автометрия. Т. 57. № 2. 2021. С. 73.

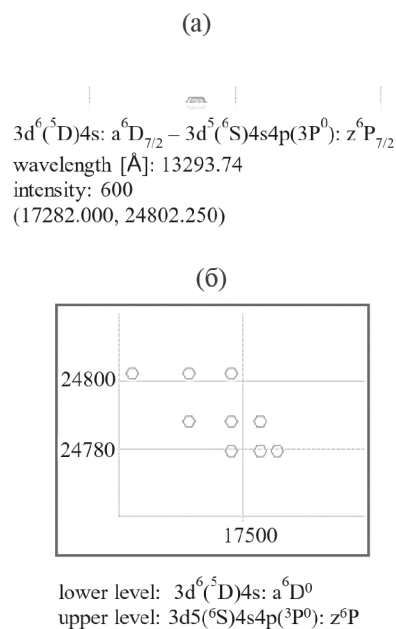


Рис. 7. Отображение мультиплетов на квантограмме. а – Линия в спектре Mn I, выбранная на квантограмме наведением курсора и подсказка, всплывающая при этом. б – Мультиплетная структура выбранной линии, выводимая в отдельном окне. Энергия указана в см^{-1} .