

ФИЗИКО-ТЕХНИЧЕСКИЕ ОСНОВЫ МИКРО- И ОПТОЭЛЕКТРОНИКИ

УДК 539.184

КВАНТОГРАММЫ КАК НОВАЯ ТЕХНИКА ВИЗУАЛИЗАЦИИ ЭЛЕКТРОННОЙ СТРУКТУРЫ АТОМНЫХ СИСТЕМ

© О. И. Мешков^{1,2}, В. В. Казаков¹, В. Г. Казаков¹, А. А. Потехина¹,
Е. А. Темникова¹, А. В. Тихонова¹

¹Новосибирский государственный университет,
630090, г. Новосибирск, ул. Пирогова, 1

²Институт ядерной физики им. Г. И. Буджера СО РАН,
630090, г. Новосибирск, просп. Академика Лаврентьева, 11
E-mail: O.I.Meshkov@inp.nsk.su

Для аналитической работы с электронной структурой атомных систем и целей подготовки специалистов в области спектроскопии существенное значение имеет научная визуализация уровней и переходов в атомной системе, обычно реализуемая в виде диаграмм Гротриана. В настоящее время такие диаграммы могут генерироваться программно по спектроскопическим базам данных. В отличие от печатных графических изображений графика, обрабатываемая и представляемая машинным образом, может иметь свойства интерактивности и динамики, что существенно влияет на эффективность работы специалиста. Можно предположить, что возможности машинной визуализации в состоянии вызвать к жизни новые типы графических представлений электронной структуры, ранее не используемые из-за их трудоёмкости или других причин. Предложен новый тип диаграмм электронной структуры атомных систем, называемых авторами квантограммами, ориентированный на компьютерную генерацию в сочетании с интерактивным динамическим представлением результатов. Описывается идея новой диаграммной техники и её основные особенности, приводится опыт программной реализации и работы с квантограммами, автоматически генерируемыми по базе спектральных данных.

Ключевые слова: атомная спектроскопия, электронная структура, научная графика, диаграмма Гротриана, квантограмма.

DOI: 10.15372/AUT20210208

Введение. Специалистами в области атомной спектроскопии активно используется диаграммная техника для наглядного представления электронной структуры атомной системы.

В настоящее время классической считается нотация, предложенная немецким физиком В. Гротрианом в 1928 г. [1] и используемая до сих пор в некоторых вариациях как диаграммы Гротриана.

Основа построения диаграмм Гротриана следующая (рис. 1, а). В общем виде это прямоугольник с заданными размерами, внутри которого с помощью линий, букв и чисел представлена электронная структура атомной системы: положение уровней энергий, основные радиационные переходы, квантовые числа. Каждому известному электронному состоянию на схеме отвечает своя короткая горизонтальная линия, имеющая ординату, соответствующую его энергии, и ряд квантовых чисел, которые дают значения важных физических параметров.

Состояния с одинаковым орбитальным моментом l возбуждённого электрона сгруппированы в колонки: s , p , d , f . Они образуют последовательность, сходящуюся к границе

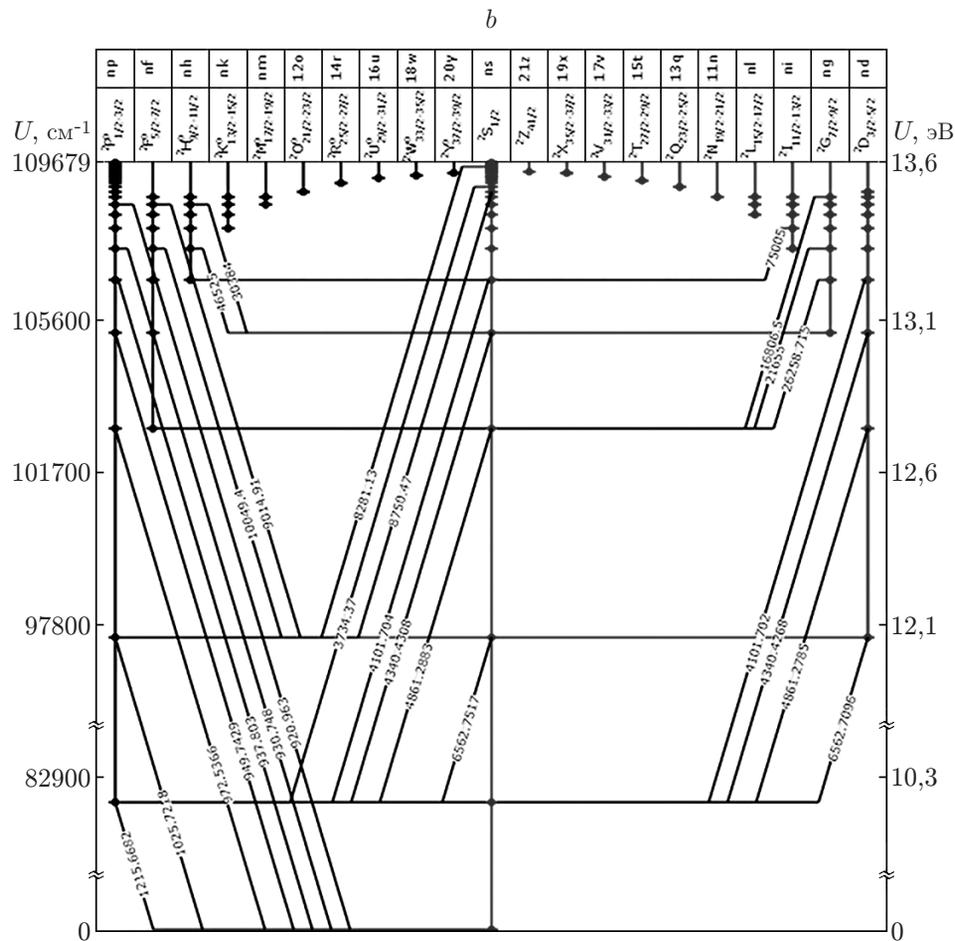
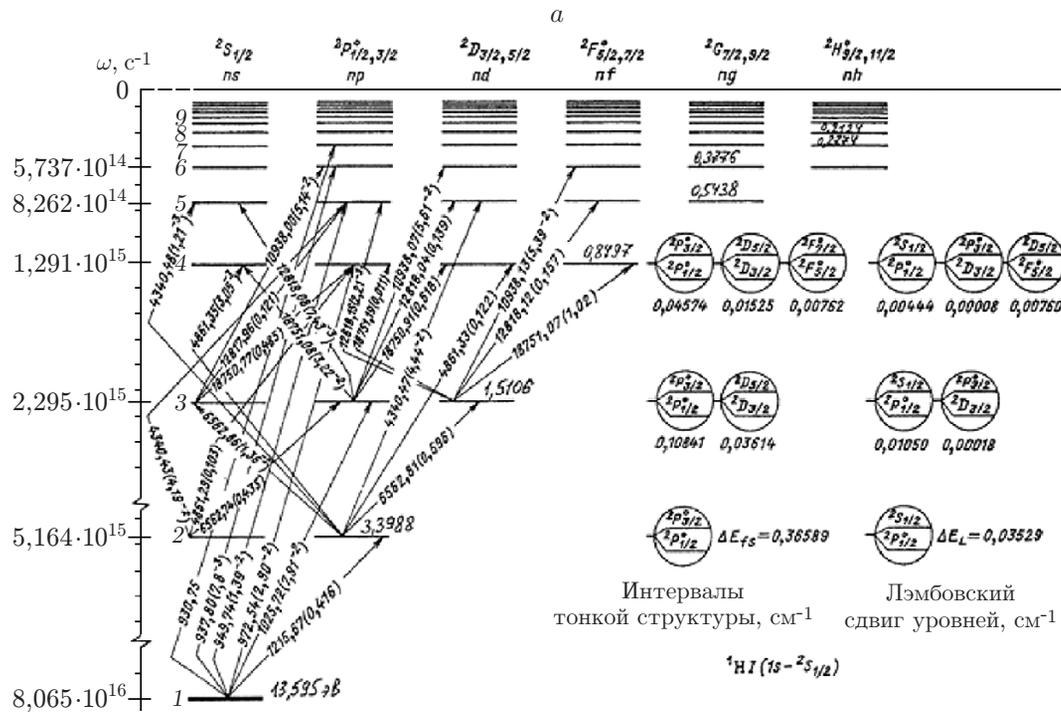


Рис. 1. Диаграммы Гроттриана для атома водорода: а — классический вид (построена вручную); б — одна из современных нотаций (сгенерирована автоматически в информационной системе «Электронная структура атомов»)

ионизации. Такое размещение уровней автоматически разделяет чётные и нечётные состояния. Наклонными линиями показаны радиационные переходы с соответствующими значениями длин волн в ангстремах, которые возникают в результате переходов между уровнями двух соседних колонок, подчиняясь правилам отбора квантовых чисел $\Delta l = \pm 1$, $\Delta j = 0, \pm 1$.

Диаграммы Гротриана позволяют исследователю охватить взглядом всё многообразие уровней энергии и переходов между ними в конкретной атомной системе. С момента появления диаграммы Гротриана стали весьма популярны среди специалистов в области спектроскопии и во множестве опубликованы в специализированных изданиях [2, 3].

Построение диаграмм Гротриана в связи с необходимостью репрезентативного отбора размещаемых радиационных переходов является сложной интеллектуальной задачей, решение которой до недавнего времени было под силу только высококвалифицированным специалистам, и осуществлялось «вручную» [4, 5]. Сегодня современные информационные системы по атомной спектроскопии предоставляют всё более качественные автоматизированные средства построения диаграмм Гротриана (см. рис. 1) [6–9]. Диаграммы Гротриана в компьютерном исполнении могут обладать свойствами интерактивности и динамики (перерисовки диаграммы в реальном времени в соответствии с настройками, заданными пользователем). Такая возможность в сочетании с широким выбором параметров построения кардинально меняет эффективность работы исследователя с диаграммой. Изменение пользовательских свойств диаграмм при переходе к их компьютерному исполнению позволяет применить новые, ранее не использовавшиеся техники построения диаграмм с возможностью когнитивной визуализации электронной структуры атомов, интерактивностью и динамикой.

В [10] предложен один из вариантов такой диаграммной техники, называемый квантограммами. Опыт работы с ним, включая формулирование правил построения, создание средств их автоматической генерации и первоначальный опыт использования в исследовательской и образовательной деятельности, является предметом данного исследования.

Квантограмма как диаграмма нового типа. Разработка нового типа диаграмм — квантограмм — обусловлена желанием повысить информационные возможности диаграмм Гротриана. Основной проблемой таковых является их слабая читаемость, связанная с трудностями отображения на них сколько-нибудь значительного количества переходов. Отрезки линий, изображающие на диаграмме радиационные переходы через соединение их верхних и нижних энергетических уровней, создают запутанную паутину даже при достаточно ограниченном их числе на диаграмме. Как выход для изображения на диаграммах Гротриана обычно используется отбор только небольшого числа переходов, наиболее характерных для данной электронной структуры. Отбор переходов осуществляется специалистом или при автоматической генерации программно. Однако любой отбор линий снижает информативность диаграммы. Кроме того, диаграммы Гротриана при всей наглядности по определению однослойны и зачастую требуют обращения к табличному представлению спектральных данных, например для поиска интенсивности выбранной линии. Нахождение квантовых чисел заинтересовавшего перехода также требует определённых усилий пользователя из-за загруженности диаграммы графической информацией. Очевидно, что интерактивное графическое компьютерное представление электронной структуры атомной системы даёт гораздо больше возможностей для получения информации о ней в отличие от статичного рисунка.

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 (рис. 2, a , b).

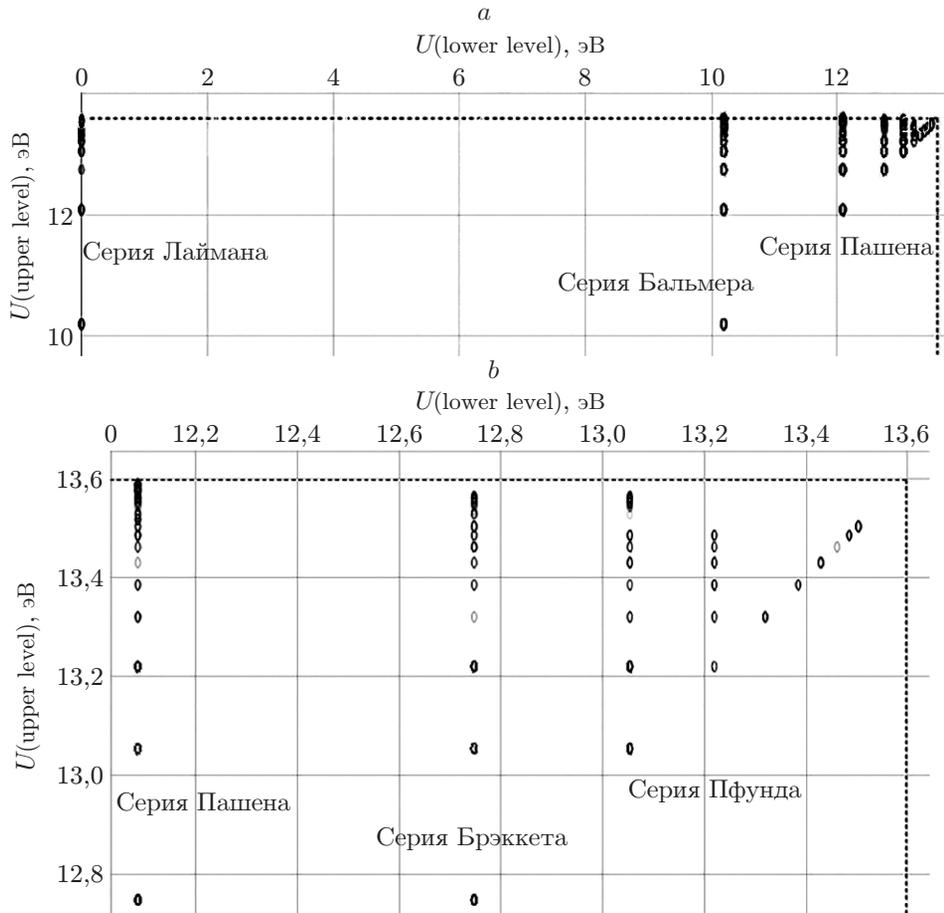


Рис. 2. Один из способов представления квантограммы для атома водорода: a — квантограмма построена в координатах: ось X — энергия нижнего уровня, ось Y — энергия верхнего уровня; переходы обозначены пиктограммами, центры которых соответствуют энергиям верхнего и нижнего уровней; хорошо видны серии, представленные вертикально расположенными группами переходов; b — серии Пашена, Брэккета, Пфунда и другие серии, увеличенные с помощью масштабирования квантограммы

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).

Радиационный переход на квантограмме, представленный точкой, открывает широкие возможности для связывания с ним пиктограмм, привязывания к ним надписей, цветовых значений и подобных приёмов усиления информативности.

Программное обеспечение для генерации квантограмм. Изначально предполагалось, что построение квантограмм должно проводиться с помощью программ для ЭВМ. Для генерации квантограмм и изучения их возможностей был спроектирован и реализован программный модуль для представления электронной структуры атомов. Программный модуль обеспечивает автоматическую генерацию квантограмм по данным электронной структуры атомной системы, а также динамическую интерактивную работу пользователя с её параметрами и настройками. Модуль представляет собой насыщенное интернет-приложение (RIA), выполненное на базе протокола HTTP с программным кодом HTML5 + JavaScript, и может работать в любом современном веб-браузере. Приложение получает данные электронной структуры атомной системы через URL в виде текстового файла с разметкой JSON.

Визуальное представление квантограммы является интерактивным и динамическим. Пользователь управляет параметрами и настройками квантограммы с помощью панели инструментов, позволяющей осуществлять масштабирование, выбор варианта координатного пространства квантограммы и ряд других операций. Инструменты квантограммы представлены различными элементами управления HTML-страницы, а также через выбор самих объектов диаграммы. Каждое изменение настроек инструментов или выбор объектов диаграммы генерирует соответствующее событие DHTML, обработчик которого инициирует изменение сцены и последующую перерисовку диаграммы.

Таким образом, реализованное приложение может работать как автономно, так и в составе информационных систем по атомной спектроскопии, интернет-ресурсов, других программных комплексов. Файл, содержащий данные об электронной структуре атомной системы, может быть как статичным, так и создаваться «на лету».

Для получения квантограмм широкого перечня атомных систем в целях исследования их полезности и когнитивных возможностей разработанное приложение было интегрировано в информационную систему по спектральным свойствам атомов и ионов «Электронная структура атомов» и находится в свободном доступе [7]. Приложение строит квантограммы для всех атомных систем, параметры электронной структуры которых занесены в базу данных системы, в том числе всех нейтральных атомов и их однократных и двукратных ионов, а также многократных ионов кратности до 7 для большинства элементов периодической системы. Тестовые построения квантограмм для различных атомных систем показали, что их автоматическая генерация осуществляется корректно.

Квантограммы в информационной системе «Электронная структура атомов». Пользовательский интерфейс квантограммы приведён на рис. 3.

Для отображения каждого перехода на квантограмме используются иконки (рис. 4).

Форма иконки соответствует мультиплетности перехода, цвет границы иконки — длине волны перехода, воспринимаемой глазом человека. Для этого цвета вычисляются

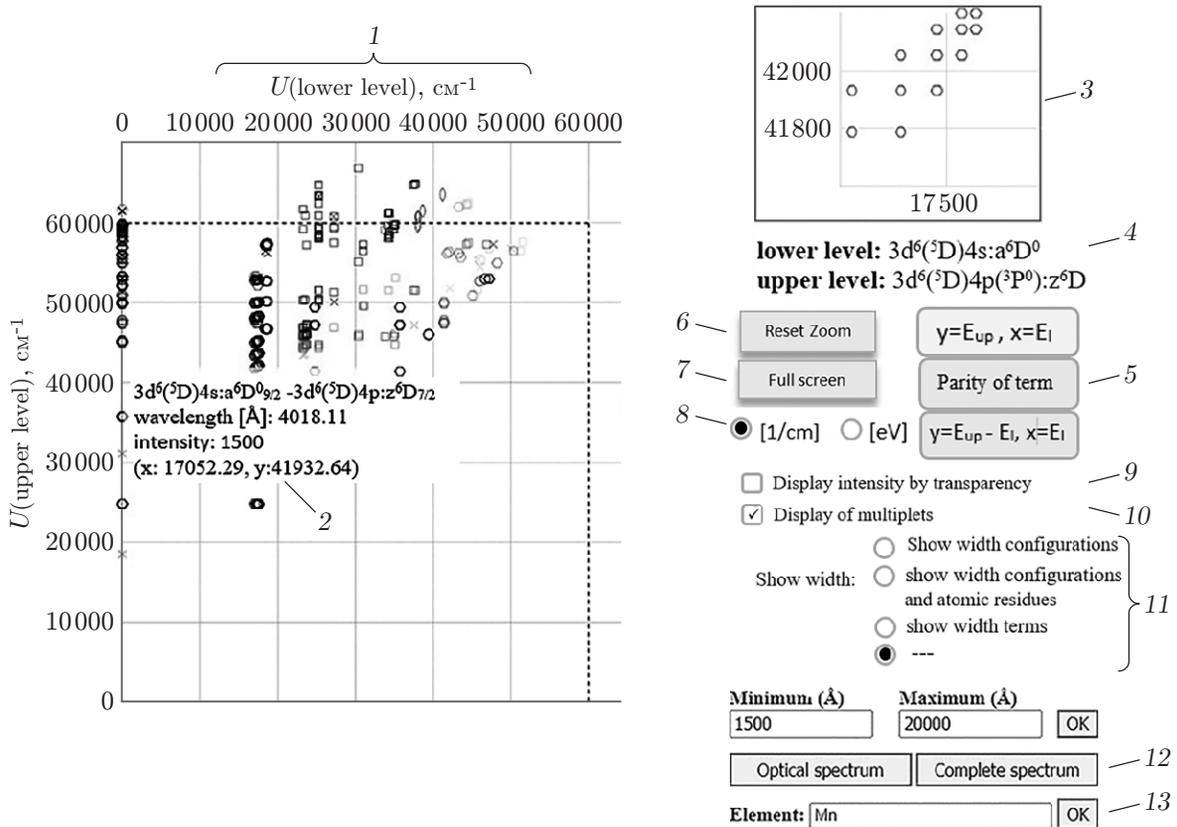


Рис. 3. Пользовательский интерфейс модуля генерации квантограмм. Представлен скриншот интерфейса модуля построения квантограмм, встроенного в ИС ЭСА, для случая Mn I. Обозначения элементов интерфейса: 1 — основное поле диаграммы с координатной сеткой и переходами (для переходов применены пиктограммы с формой, соответствующей кратности мультиплета, цветом, соответствующим длине волны видимого диапазона, прозрачностью, задаваемой интенсивностью); 2 — информация о параметрах перехода, появляющаяся при наведении на связанную с ним пиктограмму (конфигурация верхнего и конфигурация нижнего уровней, длина волны, интенсивность, координаты перехода); 3, 4 — дополнительные окна для отображения выбранного мультиплета с автоматическим масштабированием по окну и отображением конфигураций верхнего и нижнего уровней; 5 — выбор варианта координатного пространства диаграммы; 6, 7 — масштабирование экрана; 8 — выбор единиц энергии; 9 — включение/выключение отображения интенсивности перехода прозрачностью; 10 — включение/выключение отображения мультиплетов; 11 — управление режимом отображения ширины конфигураций; 12 — выбор ширины отображаемого спектра; 13 — поле для ввода названия атома и кнопка подтверждения

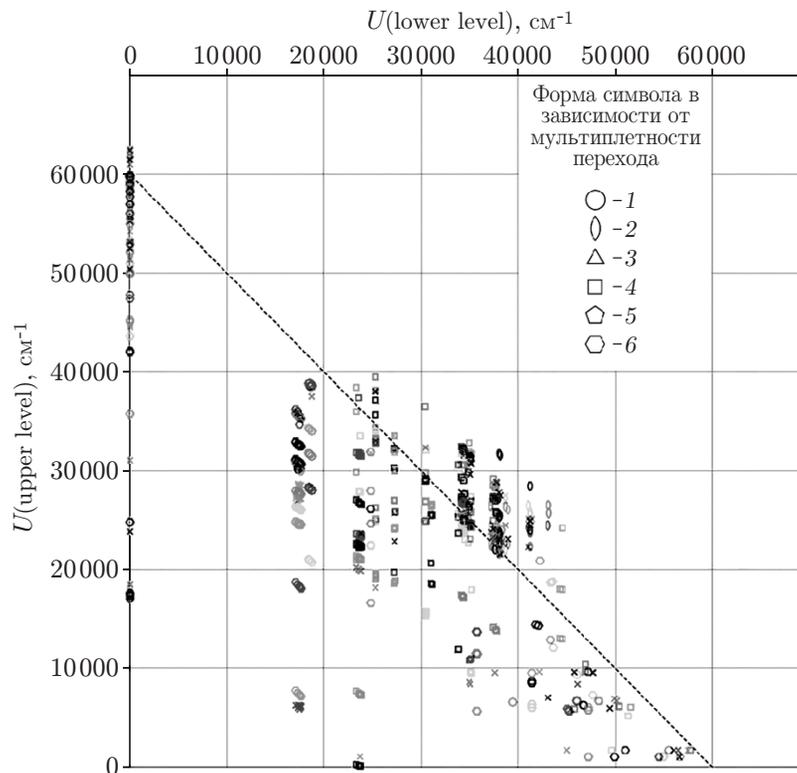


Рис. 4. Квантограмма Mn I, построенная в координатах: ось X — энергия нижнего уровня, ось Y — разность энергий верхнего и нижнего уровней перехода. Пунктирная линия — граница ионизации. Выше границы ионизации расположены автоионизационные переходы

методом линейной интерполяции семи опорных цветов. Переходы, имеющие длину волны за пределами видимого диапазона, отображаются чёрным цветом.

Квантограммы ИС ЭСА являются интерактивными. Для них реализованы различные способы отображения и фильтрации данных. Так, имеются три способа конфигурации шкал диаграммы. Первый способ: горизонтальная ось отображает энергию нижнего уровня, вертикальная — энергию верхнего уровня (рис. 5).

Второй способ: горизонтальная ось — энергия нижнего уровня, вертикальная — разность энергий верхнего и нижнего уровней перехода (рис. 6). Третий способ: для чётных состояний верхнего уровня: ось X — энергия верхнего уровня, ось Y — энергия нижнего уровня перехода, а для нечётных — наоборот (см. рис. 5).

Для каждого способа представления данных пунктирной линией отображается энергия ионизации атома. Также имеется возможность фильтрации данных по длине волны, выбора единиц измерения энергии и отображения интенсивности перехода. Так, интенсивность может показываться одинаково для всех переходов или отображаться прозрачностью иконки в логарифмическом масштабе для возможности одновременного просмотра переходов, интенсивности которых отличаются на порядки.

При наведении на любой переход возникает подсказка с отображением термов и конфигураций 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 мультиплетта используется отдельное окно. При наведе-

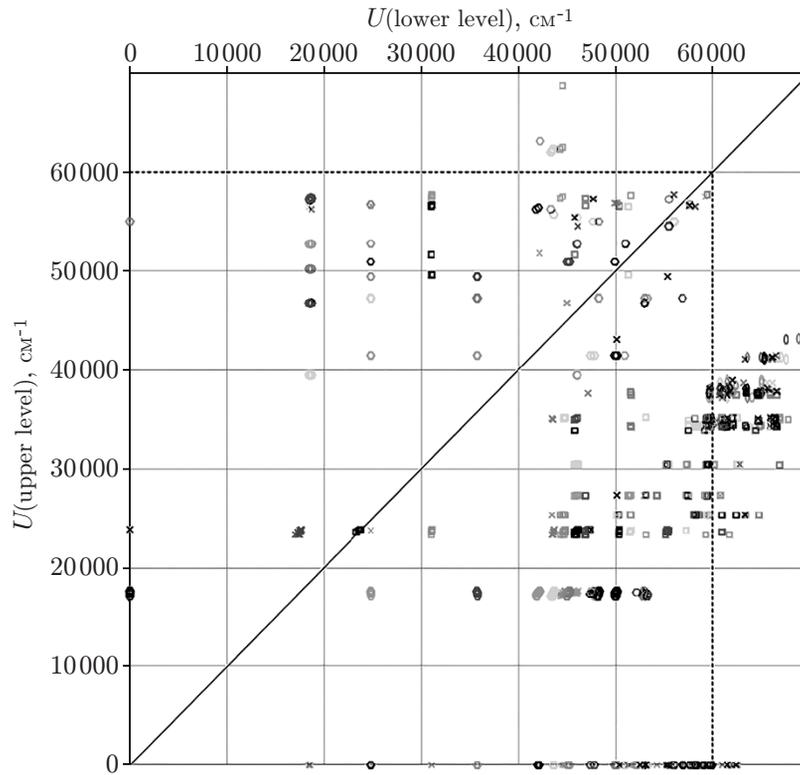


Рис. 5. Квантограмма Mn I. Для чётных состояний верхнего уровня: ось X — энергия верхнего уровня, ось Y — энергия нижнего уровня перехода, а для нечётных — наоборот

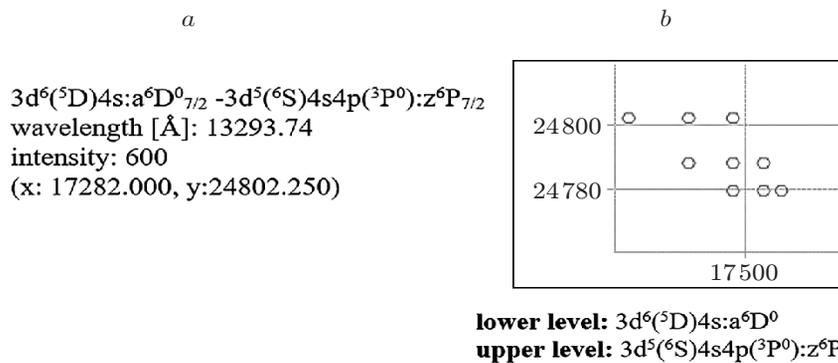


Рис. 6. Отображение мультиплетов на квантограмме: *a* — линия в спектре Mn I, выбранная на квантограмме наведением курсора, и подсказка, всплывающая при этом; *b* — мультиплетная структура выбранной линии, выводимая в отдельном окне; энергетический масштаб указан в cm^{-1}

нии курсора на выбранный переход происходит выделение всех переходов, которые принадлежат данному мультиплету (см. рис. 6).

Заключение. Предложен новый тип диаграммы для отображения с помощью компьютера электронной структуры атомной системы, называемой авторами квантограммами. Образец программы, генерирующей квантограммы, реализован и встроены в информационную систему ИС ЭСА. Программа способна генерировать квантограммы для всех нейтральных атомов, а также ионов кратности 1–7, содержащихся в базе данных системы. Всё программное обеспечение размещено в сети 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.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. **Grottrian W.** Graphische Darstellung der Spektren von Atomen und Ionen mit ein, zwei und drei Valenzelektronen. Berlin: J. Springer, 1928. Bd 2.
2. **Раутиан С. Г., Яценко А. С.** Диаграммы Гротриана // УФН. 1999. **169**, № 2. С. 217–220.
3. **Казаков В. В., Казаков В. Г., Мешков О. И. и др.** Вопросы систематизации, хранения и отображения информации о спектрах атомных систем: Учеб. пособие. Новосибирск: РИЦ НГУ, 2018. 122 с.
4. **Moore Ch., Merrill P.** Partial Grotrian Diagrams of Astrophysical Interest. US, NBS, NSRD-NBS 23. Washington, 1968. 80 p.
5. **Яценко А. С.** Диаграммы Гротриана нейтральных атомов. Новосибирск: Наука, 1993. 136 с.
6. **NIST Atomic Spectra Database Lines Form.** URL: http://physics.nist.gov/PhysRefData/ASD/lines_form.html (дата обращения: 20.11.2019).
7. **Информационная система “Электронная структура атомов”.** URL: <http://grotrian.nsu.ru> (дата обращения: 20.11.2019).
8. **Казаков В. Г., Раутиан С. Г., Яценко А. С.** Компьютерное представление электронных оболочек атомов // Оптика и спектроскопия. 2008. **106**, № 1. С. 53–58.
9. **Казаков В. Г., Казаков В. В., Жакупов М. Б., Яценко А. С.** Задача автоматического построения диаграмм атомных спектров и опыт её решения в ИС ЭСА // Вестн. НГУ. Сер. Информационные технологии. 2010. **8**, № 3. С. 66–78.
10. **Тихонова А. А.** Разработка техники квантограмм как оригинальных диаграмм электронной структуры атомных систем и создание программы их генерации // Информационные технологии: Матер. 57-й Междунар. науч. студ. конф. 14–19 апреля 2019 г. Новосибирск: ИПЦ НГУ, 2019. С. 92.

Поступила в редакцию 26.10.2020

После доработки 19.01.2021

Принята к публикации 27.01.2021