

SPECTCOL : Nouvelles fonctionnalités (hyperfine)

Yaye Awa BA, Marie-Lise Dubernet

ASOV 09-11 Mars 2020

SPECTCOL

- Outil graphique de manipulation de données spectroscopiques et collisionnelles issues des bases de données VAMDC (CDMS, JPL, BASECOL, HITRAN, ...)
 - VAMDC-TAP : création des requêtes
 - XSAMS : Xml Schema for Atoms, Molecules and Solids – format de stockage des résultats
- Visualisation et conversion de données XSAMS vers d'autres formats (CSV, RADEX, LTE, BIBTEX)

SPECTCOL

- Combinaison de données collisionnelles et spectroscopiques
- Interopérabilité avec des outils VO (Topcat) via SAMP
- Connection avec le Query store pour la citation des données

<http://www.vamdc.org/activities/research/software/spectcol/>

SPECTCOL : fenêtre principale

Importation fichier

Recherche

The screenshot displays the Spectcol FX software interface. At the top, there is a window titled 'Import data from file' with a 'Browse...' button and a 'File path:' field. Below this is a 'Search VAMDC database' section with a 'Databases to search:' dropdown set to 'VAMDC Nodes'. The 'Species' tab is active, showing a 'Form' section with fields for 'Nuclear spin' (set to '_any_'), 'Molecular species InChiKey', 'Molecular stoichiometric formula' (set to 'CO'), 'Ion charge', 'Atomic symbol', and 'Particle name'. A 'Submit query' button is present. To the right, a 'Selected databases' list shows 'BASECOL2015: VAMDC-TAP ir' and 'CDMS'. Below the search section is a 'Transitions' table with columns: Comment, Source, Structural formula, Stoichiometric formula, Spin, and InChI key. The table contains 7 rows of data. To the right of the table are buttons for 'Clear', 'Sources', 'Energy table', 'Einstein coef.', 'Partition function', 'Export', 'Group by species', 'Group by hand', and 'Cite'. Below the transitions table is another table with columns: Comment, Source, Target struct..., Target stoic..., Target spin, Target InChi..., Collider stru..., Collider stoic..., Collider spin, and Collider InCh.... This table also contains 7 rows of data. To the right of this table are buttons for 'Clear', 'Sources', 'Energy table', 'Rate coef.', 'Scale rate coef.', 'Export', and 'Cite'.

Résultat données spectro

Bases de données sélectionnées

Résultat données collisionnelles

Boutons de manip des données

SPECTCOL : Les nouveautés

- Extraction et visualisation des données hyperfines issues des bases spectroscopiques :
 - Tables d'énergies
 - Table d'Einstein
- Possibilité de combiner des données collisionnelles et spectroscopiques de type hyperfin (en supposant que le couplage est identique sur les nombres quantiques hyperfins)

SPECTCOL : Les nouveautés

Démo

SPECTCOL : Environnement

- Java 8 → migration en cours Java 13
- JavaFx pour l'interface

Contacts

- Contacter : yaye-awa.ba[at]obspm.fr or marie-lise.dubernet[at]obspm.fr
- VAMDC Consortium site web : <http://www.vamdc.org/>