

# 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 input 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. A second table below it shows collisional data with columns: Comment, Source, Target struct..., Target stoic..., Target spin, Target InChi..., Collider stru..., Collider stoic..., Collider spin, and Collider InCh....

	Comment	Source	Structural formula	Stoichiometric formula	Spin	InChI key
1	29501- v2*:C-13-O; \$v=...	CDMS 2018-06-26 00:0...	C-13-O	CO		UGFAIRIUMAVXCW-OUBT...
2	30503- v 1:C-13-O-17; ...	CDMS 2018-06-26 00:0...	C-13-O-17	CO		UGFAIRIUMAVXCW-ZDOI...
3	29503- v 1:CO-17; \$v=0\$	CDMS 2018-06-26 00:0...	CO-17	CO		UGFAIRIUMAVXCW-VQEH...
4	28503- v 1:CO; \$v=0\$	CDMS 2018-06-26 00:0...	CO	CO		UGFAIRIUMAVXCW-UHFF...
5	28512- v1*:CO; \$v=1,2...	CDMS 2018-06-26 00:0...	CO	CO		UGFAIRIUMAVXCW-UHFF...
6	30502- v 1:CO-18; \$v=0\$	CDMS 2018-06-26 00:0...	CO-18	CO		UGFAIRIUMAVXCW-HQM...
7	31502- v 1:C-13-O-18; ...	CDMS 2018-06-26 00:0...	C-13-O-18	CO		UGFAIRIUMAVXCW-RGIGP...

	Comment	Source	Target struct...	Target stoic...	Target spin	Target InChi ...	Collider stru...	Collider stoic...	Collider spin	Collider InCh.
1	Rotational de-...	BASECOL2015...	CO	CO		UGFAIRIUMAV...	H	H		YZCKVEUIGO...
2	Vibrational de-...	BASECOL2015...	CO	CO		UGFAIRIUMAV...	H	H		YZCKVEUIGO...
3	Rotational de-...	BASECOL2015...	CO	CO		UGFAIRIUMAV...	HE	HE		SWQJXJQGLNC...
4	Rotational de-...	BASECOL2015...	CO	CO		UGFAIRIUMAV...	H\$ 2\$	H2	ORTHO	UFHFLCQGNY...
5	Vibrational de-...	BASECOL2015...	CO	CO		UGFAIRIUMAV...	HE	HE		SWQJXJQGLNC...
6	Rotational de-...	BASECOL2015...	CO	CO		UGFAIRIUMAV...	H\$ 2\$	H2	PARA	UFHFLCQGNY...
7	Rotational exc...	BASECOL2015...	CO	CO		UGFAIRIUMAV...	H\$ 2\$	H2	ORTHO	UFHFLCQGNY...

Résultat données spectro

Résultat données collisionnelles

Bases de données sélectionnées

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/>