

Виртуальный центр атомных и молекулярных данных (VAMDC) *

А.З. Фазлиев и участники проекта VAMDC

Институт оптики атмосферы им. В.Е. Зуева СО РАН, Томск
faz@iao.ru

Аннотация

Виртуальный центр атомных и молекулярных данных (VAMDC, <http://www.vamdc.eu>) представляет сотрудничество групп по генерации, оценке, и использованию атомных и молекулярных данных. VAMDC ориентирован на построение безопасного, гибкого и интероперабельного интерфейса для существующих атомных и молекулярных данных. Доклад основан на материалах статьи [1]. В нем поставлены задачи решаемые центром, описаны базы данных являющиеся основой для функционирования виртуального центра и перечислены группы пользователей из разных прикладных областей науки.

1. Введение

Атомные и молекулярные данные (АМД) критически важны в целом ряде прикладных наук, таких как астрофизика, атмосферная физика, науки об окружающей среде, химии процессов горения и промышленных приложениях по плазме и световой иллюминации. В настоящее время эти ресурсы в значительной степени разобщены, и доступ к ним осуществляется через разнородные интерфейсы, что в значительной мере ограничивает научную значимость этих ресурсов. Это замечание касается широкого диапазона исследований в исследовании космоса, изучения атмосфер планет, количественных изменений климата, развитию программ по расщеплению энергии и пониманию радиационных повреждений биологических систем.

VAMDC [1] ориентирован на построение интерфейсов для работы с существующими АМД, с целью объединения производителей данных и создания инфраструктуры, удовлетворяющей потребностям пользователей в академических, государственных, промышленных и общественных сообществах.

VAMDC объединяет партнеров, представляемых авторами доклада, имеющих опыт в сборе и использовании АМД и их использовании в инфраструкту-

рах (Euro-VO [2], EGEE [3]). Центр организован на следующих принципах. Он взаимодействует с научным сообществом, гарантируя приоритет обоснованных атомных и молекулярных сервисов (выбираются данные из проверенных, признанных и широко используемых источников).

2. Предпосылки создания центра

В исследовательском сообществе достаточно много групп создающих АМД. Эти данные, расположены в слабо связанных между собой базах данных (БД) и информационных сервисах. Для некоторых прикладных задач производители данных уже создали транснациональные сети, такие как European Theoretical Spectroscopy Facility [4], и проект развитый в рамках Nanoquanta Network of Excellence [5]. Некоторые значимые научные сотрудничества планируют использовать такие сервисы для собственных целей и нужд. Примерами являются сообщество Europlanet [6], занимающееся планетарными науками, астрономическое сообщество вместе с Euro-VO, сообщество исследователей, занимающихся расщеплением в рамках ITER [7] и EURATOM [8] и сообщество из науки о радиации моделирующее радиотерапию и исследующее влияние малых доз на здоровье человека [9]. Во всей перечисленной деятельности практически отсутствует деятельность, направленная на гарантию интероперабельности АМД. Это означает, что при каждом обращении к одной и той же БД нового приложения, выходные данные, получаемые при запросе от БД, должны быть адаптированы.

Например, в сообществе астрономов планируется создать инструменты для визуализации вычисляемых спектров планет, звезд и межзвездных сред. Эти инструменты требуют автоматического доступа к разным АМБД (атомные и молекулярные БД), слияния и проверки качества данных. В настоящее время вне рамок VAMDC нет общедоступной инфраструктуры для решения таких задач.

В рамках VAMDC строится гибкая, безопасная и легко адаптируемая интероперабельная инфраструктура для работы с АМД, извлекаемыми из существующих БД. Особой задачей центра является гибкая подстройка под нужды и задачи научных, правительственных, промышленных кругов при решении этой задачи.

Труды XIV Всероссийской объединенной конференции «Интернет и современное общество» (IMS-2011), Санкт-Петербург, Россия, 2011.

VAMDC наряду с созданием инфраструктуры организует реестр для поиска ресурсов, строит слои доступа к БД для обеспечения унитарного вывода данных, занимается хранением огромного количества данных из виртуальной обсерватории и объединением инфраструктуры с Grid. Центральной задачей виртуального центра является задача преодоление существующей фрагментации АМБД. Для решения этой задачи VAMDC

- развивает наиболее значимую атомно-молекулярную инфраструктуру, разделяемую, поддерживаемую и расширяемую исследователями в области АМД;
- обеспечивает функциональность распределенной инфраструктуры, которая является достижимой, допускает формирование ссылок на нее

и эксплуатируется широким научным сообществом.

Для выполнения этих целей в проекте VAMDC организован ряд мероприятий по сетевой деятельности закладывающих основания для долговременной и самодостаточной инфраструктуры. Сетевые мероприятия нацелены на:

- объединение производителей данных;
- координацию деятельности между существующими провайдерами данных;
- выяснение и удовлетворение нужд разных сообществ пользователей;
- обеспечение средств обучения для овладения возможностями ресурсов VAMDC.

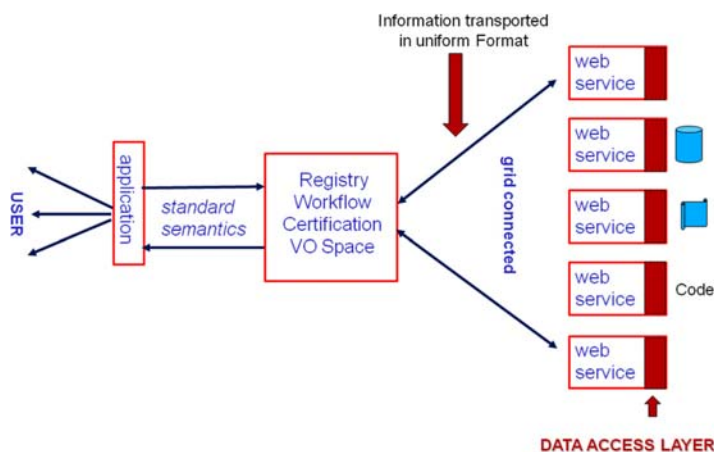


Рис. 1. Схема инфраструктуры VAMDC - система является распределенной

3. Базы данных участников проекта

Основу инфраструктуры VAMDC составляют базы данных. Они ниже описаны в привязки к группам исследователей поддерживающих их актуальность. Детали о физических свойствах аккумулированных в БД см. в Табл. 1, 2.

3.1. БД VALD [10]

База данных содержит около 5*10:7 атомных переходов имеет веб-интерфейс и зеркала. Она обеспечивает согласованный анализ излучения приходящего от астрофизических объектов.

3.2. CHIANTI [11]

БД атомных свойств для спектроскопической диагностики плазмы. Используется при описании спектроскопических и столкновительных процессов ионизированной плазмы.

3.3. EMol [12, 13]

БД содержит сечения взаимодействия электронов с молекулярными системами и поддерживается Open University.

3.4. БД CDMS [14] и каталог JP L [15]

БД обеспечивают рекомендуемые значения вакуумных частот, интенсивностей и погрешностей. Диапазон собранных частот лежит в области 0-10ТГц (0-320 см⁻¹).

3.5. BASECOL [16]

БД содержит коэффициенты скоростей колебательно-вращательного возбуждения молекул электронами, молекулярным водородом и гелием. БД доступна через веб-сервис.

3.6. GhoSST [17]

БД обеспечивает данные по молекулярным и атомным твердым телам в ближнем УФ и дальнем ИК диапазоне. Основной группой ресурсов являются спектральные полосы чуть более полусотни веществ.

3.7. БД UMIST для астрохимии [18]

БД содержит набор скоростей химических реакций и программное обеспечение для моделирования процессов в химической кинетике.

3.8. Кинетическая БД KIDA для астрохимии [19]

БД содержит все химические реакции, используемые при моделировании химических процессов в межзвездной среде и атмосферах планет.

3.9. БД по полициклическим ароматическим углеводородам [20]

В БД представлено более 60 веществ в четырех состояниях заряда: +1, 0, -1 и +2.

3.10. LASP [21]

БД обеспечивает ИК-спектры молекул в твердой фазе (10-100К), как для чистых веществ, так и для смесей до и после обработки ионами (30-200keV) и УФ фотонами (10.2 eV).

3.11. Stark-B [22]

БД вычисленных полуширин и сдвигов изолированных атомов и молекул, обусловленных столкновениями с электронами и ионами. Интервалы температур и плотностей покрываются таблицами в широком диапазоне их изменений и зависят от степени ионизации иона.

3.12. Spectr-W3 [23]

БД содержит около $4.5 \cdot 10^5$ записей об атомах. Вся информация обеспечена библиографическими ссылками.

3.13. БД института оптики атмосферы [24-26]

FTP содержит файлы с данными о CO_2 и H_2O . Информационная система (ИС) SMPO (<http://smpro.iao.ru>) и ИС SPECTRA (<http://spectra.iao.ru>) содержат версии массивов данных HITRAN, GEISA и HITEMP. ИС W@DIS (<http://wadis.saga.iao.ru>) представляет выверенные данные, извлеченные из всех публикаций по молекуле воды, собранные группой данных IUPAC, а также все опубликованные данные по молекулам CO_2 , NH_3 , CH_4 , CO и C_2H_2 и их изотопомерам. Все ИС ИОА СО РАН имеют веб-интерфейсы.

3.14. БД IVIC/CeCALCULA [27, 28]

База данных TIPTOP (<http://cdsweb.ustrasbg.fr/topbase/home.html>) содержит вычисленные атомные данные, полученные в проекте Opacity.

3.15. БД HITRAN [29, 30]

БД состоит из параметров линий 42 молекул в газовой фазе от микроволнового до ультрафиолетового диапазона. В нее входят данные о коэффициентах преломления некоторых веществ и сечения поглощения 32 молекул.

Таблица 1. Данные участников проекта, распределенные по разным предметным областям

БД	Атомы в газовой фазе	Молекулы в газовой фазе	Столкновения частиц	Химия	Коэфф. преломл.	Вещества в жидкой и твердой фазе
VALD	EL, SL, TP					
CHIANTI	SL		REP, RIR			
EMol			ECSM			
CDMS&JPLSC	SL	SL				
BASECOL			RCE			
GhoSST						SB
UMIST				RCR		
KIDA				RCR		
CESR		PAH				
LASP						OCM, BS
STARK-B			HWS			
Spectr-W3	EL, SL, TP, IP, OS		ECSA			
IAO		EL, SP		CS		
IVIC/CeCALCULA	gf, A		ICS, ECS	RCR		
HITRAN		EL, SP		CS	IoR	
NIST	EL, SL, TP, ELx, SLx, NLTE					

3.16. БД NIST [31-35]

БД содержит данные о 99 химических элементах от микроволнового до рентгеновского диапазона. Самая значительная по объему и полноте БД по публикациям в атомной спектроскопии.

Характеристики состояния для МВ, ИК и УФ - спектров (EL - уровни энергии, ELx - уровни энер-

гии для рентгеновских спектров), характеристики перехода (SL - параметры спектральных линий (вакуумные волновые числа, интенсивности, столкновительные параметры для МВ, ИК и УФ - спектров), TP - вероятность перехода, IP- потенциал ионизации, OS - сила осциллятора, gf-значения, A-значения), NLTE - БД по кинетики заселенностей в нелокальном термодинамическом равновесии, PAH - спектры ароматических углеводородов, REP -

скорости столкновений с электронами и протонами, RIR - скорости ионизации и рекомбинации, ECSM - сечения столкновений молекул с электронами, RCE - коэффициенты скорости возбуждения при столкновении с электронами, H₂ и He, HWS – сдвиги и уширения спектральных линий при столкновении с электронами и ионами, ICR – сечения ионизации,

ECS - сечения ионизации, RCR - скорости химических реакций, CS – сечения поглощения фотонов, SB – спектры в ИК и УФ диапазонах для твердых тел, OCM - оптические интенсивности молекул в твердой фазе, BS – спектральные полосы вещества в твердой фазе.

Таблица 2. Классификация ресурсов участников проекта по типам, приложениям и метаданным

БД	Тип ИС	Локальные приложения	Интернет доступные приложения	Тип метаданных
VALD	WDIS (Vienna, Uppsala, Москва)		М	В, AS
CHIANTI	WIS	М	М,С	
EMol		М		
CDMS&JPLSC	WIS		М	
BASECOL	WIS		М	
GhoSST	WIS		М	
UMIST	WIS		С	
KIDA	WIS		М	
CESR		М		
LASP	WIS		М	
STARK-B		М		
Spectr-W3	WIS	М	М	В, AS
IAO	WDIS (Томск, Reims, Cambridge, С.-Петербург, Н.Новгород)		М, С	В
IVIC/CeCalCULA	WIS		М, С	В, AS, SS, CI
HITRAN	WDIS (Cambridge, Томск)	М, С	М, С	В
NIST	WIS		М	В, AS

Здесь WIS – информационная система с доступом по сети Интернет, WDIS - информационная система с доступом по сети Интернет (распределенная или имеет зеркала), М – приложения для манипуляции данными, С- вычислительные приложения, относящиеся к предметной области, В – библиографический сервис, AS – атрибутный поиск ресурсов, SS – семантический поиск ресурсов, CI – система автоматической классификации информационных ресурсов, основанная на онтологиях.

4. Сообщества пользователей

4.1. Атмосферные науки

Понимание физики и химии атмосферы планет, а значит и изменений климата со всем его социальными и экономическими последствиями, требует создания сложных вычислительных моделей. Развитие таких моделей представляет собой итерационный процесс, управляемый полевыми наблюдениями. В таких наблюдениях используется спектроскопическая техника, и, следовательно, требуются достоверные БД о сечениях поглощений излучения. Эти данные используются для построения моделей, используемых для предсказания влияния поведения естественных или антропологических процессов в атмосфере. Подобные модели используют около сотни веществ, характеристики которых извлекаются из экспериментов и теории. Все такие характеристики должны быть извлечены, проверены, табулированы и взаимопроверены. В качестве приме-

ра можно привести водяной пар, играющий центральную роль в приземной атмосфере как основной поглотитель солнечного излучения и являющийся доминантным парниковым газом.

4.2. Астрохимия (и планетарная наука)

Все астрономические наблюдения и большинство планетных исследований основаны на дистанционных наблюдениях, требующих данных о спектрах и столкновениях. Из-за широкого интервала изменений физических условий и радиационного окружения, свойственного разным астрофизическим объектам, по-видимому, нет иного поля исследований, для которого так необходим доступ к достоверным АМД. Почти вся информация о Вселенной поступает к нам с фотонами и из процессов, в которых они участвуют, изменяются и детектируются. Большая часть этих процессов относится к атомной и молекулярной оптики. Например, сечения фотохимических процессов существенны для понимания химических процессов, происходящих в звездных системах, содержащих экзопланеты.

4.3. Плазменные технологии

Технологии, основанные на использовании плазмы, являются наиболее востребованными в коммерческой промышленности. Производство тонких пленок в изготовлении микрoeлектронных структур основаны на методах обработки поверхности материалов плазмой. Основанные на использовании плазмы процессы применяются на 40% этапов создания полупроводниковых схем. Для моде-

лирования поведения и свойств такой химически активной плазмы

4.4. Световая иллюминация

Товары для освещения составляют около четверти всех товаров электрической промышленности, и, следовательно, существует интерес в совершенствовании технологий освещения. Вопреки долгой истории существования сообщества исследователей по изучению средств освещения, в настоящее время, статус существующих БД является неудовлетворительным для инновационной деятельности, связанных с использованием новых веществ (например, флуоресцентных ламп на ртути, чистом ксеноне, флуоресцирующих и металлических сплавов, таких как InSb).

4.5. Исследования расщепления энергии

Атомно-молекулярные столкновения и спектроскопические процессы играют важную роль в устройствах магнитного расщепления, поскольку они влияют на баланс энергии в плазме, в переносе плазмы и ее радиационных свойствах и используются в качестве основы диагностических методов. Конструирование и использование некоторых систем устройств, основанных на расщеплении, таких как нагревание нейтральным пучком, контроль примесей и систем тепловой энергии, требуют большого количества АМ спектральных и столкновительных данных.

4.6. Науки о радиации

Влияние увеличивающейся экспозиции низких доз излучения в повседневной жизни может иметь долговременные последствия из-за поражения клеток ДНК. Аналогично, использование ионизирующего излучения в медицинской терапии влияет на понимание того, как управлять и инициировать повреждения ДНК в канцерогенных тканях. Обе проблемы возникли при развитии сложных моделей радиотерапии на наномасштабном уровне и они связаны с фундаментальными /АМД. Например, низко-энергетические столкновения электронов с компонентами ДНК и другими биомолекулами, такими как нуклеотиды и аминокислоты. Базы данных по спектроскопическим характеристикам и сечениям поглощения до сих пор не объединены в одну БД.

5. Усилия по созданию А&М стандартов

Некоторые прототипы сервисов и инструментов (<http://voparis-molecular.obspm.fr>) разработаны для автоматического доступа к БД BASECOL [48,49] and CDMS [50,51]. Эти разработки основаны на стандартах обмена АМД, возникшими при обмене данными из области атомной и молекулярной физики в рамках International Virtual Observatory Alliance (IVOA, <http://www.ivoa.net/>) для списков линий [54]. Деятельность VAMDC основывается на использо-

вании XML схемы XSAMS (XML Schema for Atomic & Molecular Spectroscopy) [55] развитой при участии IAEA с целью описания атомных, молекулярных данных и данных о взаимодействии частиц с поверхностью. VAMDC тестирует эти стандарты и предлагает дополнения и расширения по широкому диапазону данных, относящихся к разным смежным областям.

6. Заключение

Атомные и молекулярные данные играют ключевую роль во многих научных областях. Долгое время существовала тенденция для каждой предметной области создавать специализированные хранилища данных и протоколы для обращения к ним. Такой подход оказался неэффективным, приводил к дублированию и не способствовал объединению научных сообществ, занимающихся исследованием смежных проблем. Это приводило к ситуациям, когда устаревшие и неточные данные использовались в ряде предметных областей, тогда как в предметных областях производящих данные имелись в наличии выверенные данные, существенно уточняющие количественные значения. Использование неоднозначно интерпретируемых данных также приводит к трудностям в сравнении и стыковки разных моделей. Виртуальный центр атомных и молекулярных данных создает структуру, позволяющую связать БД и информацию о АМД по всему миру.

Литература

- [1] Dubernet, M.L. Virtual atomic and molecular data centre / M.L. Dubernet, V.Boudon, J.L.Culhane, et al. // J. Quant. Spectros. Rad. Transfer. 2010. Vol. 111. P. 2151–2159.
- [2] Euro-Virtual Observatory [Электронный ресурс]. — Режим доступа: <http://www.euro-vo.org>
- [3] Enabling Grids for E-science [Электронный ресурс]. — Режим доступа: <http://www.eu-egee.org/>.
- [4] European Teoretical Spectroscopy Facility (ETSF) [Электронный ресурс]. — Режим доступа: <http://www.etsf.eu>.
- [5] Nanoquanta Network of Excellence [Электронный ресурс]. — Режим доступа: <http://www.nanoquanta.eu>.
- [6] EU-Project Europlanet RI [Электронный ресурс]. — Режим доступа: <http://www.europlanet-ri.eu>
- [7] ITER Organization [Электронный ресурс]. — Режим доступа: <http://www.iter.org>.
- [8] EURATOM [Электронный ресурс]. — Режим доступа: <http://www.euratom.org>
- [9] Mason, N.J. Radiation induced damage in macromolecular systems; where do we go next? // Radiation damage in biomolecular systems. AIP Conf. Proc. 2008. Vol. 1080. P. 3–20.
- [10] Kupka, F. Stempels HC, Weiss WW. VALD-2: progress of the Vienna Atomic Line Data Base / Kupka F, Piskunov N, Ryabchikova T. // Astron. Astrophys. Sup Ser 1999. Vol. 138. P. 119–233.

- [11] Dere, K.P. CHIANTI—an atomic database for emission lines IX. Ionization rates, recombination rates, ionization equilibria for the elements hydrogen through zinc and updated atomic data / Dere K.P., Landi E., Young P.R., Del Zanna G., Landini M., Mason H.E. // *Astron. Astrophys.* 2009. Vol. 498. P. 915–929.
- [12] Itikawa, Y. Cross sections for electron collisions with water molecules / Itikawa Y., Mason N. // *J. Phys. Chem. Ref. Data.* 2005. Vol. 34. P. 1–22.
- [13] Mason, N.J. The status of the database for plasma processing // *J. Phys. D: Appl Phys.* 2009. Vol. 42. P. 194003.
- [14] Muller, H.S.P. The cologne database for molecular spectroscopy, CDMS: a useful tool for astronomers and spectroscopists / Muller H.S.P., Schloder F., Stutzki J., Winnewisser G. // *J. Mol. Struct.* 2005. Vol. 742. P. 215–227.
- [15] Pickett, H.M. Submillimeter, millimeter and microwave spectral line catalog / Pickett H.M., Poynter R.L., Cohen E.A., Delitsky M.L., Pearson J.C., Muller H.S.P. // *JQSRT.* 1998. Vol. 60. P. 883–890.
- [16] Dubernet, M.L. Ro-vibrational collisional excitation database BASECOL / Dubernet M.L., Grosjean A., Daniel F., Flower D., Roueff E., Daniel F., et al. // *J. Plasma Fusion Res. Ser.* 2006. Vol. 7. P. 356–257.
- [17] Schmitt, B.P. GhoSST: the Grenoble astrophysics and planetology solid spectroscopy and thermodynamics database service / Schmitt B.P., Volcke E., Quirico O., Brissaud N., Fray W., Grundy J.-M., et al. // *RELEVANT Database.* 2009 [Электронный ресурс]. — Режим доступа: <http://ghosst.obs.ujf-grenoble.fr/>.
- [18] Woodall, J. The UMIST database for astrochemistry / Woodall J., Agundez M., Markwick-Kemper A.J., Millar T.J. // *Astron. Astrophys.* 2007. Vol. 466. P. 1197–2003.
- [19] KIDA [Электронный ресурс]. — Режим доступа: <http://kida.obs.u-bordeaux1.fr>
- [20] Mallocci, G. On-line database of the spectral properties of polycyclic aromatic hydrocarbons / Mallocci G., Joblin C., Mulas G. // *Chem. Phys.* 2007. Vol. 332. P. 353–359.
- [21] LASP (Laboratorio di Astrofisica Sperimentale) [Электронный ресурс]. — Режим доступа: <http://web.ct.astro.it/weblab/dbindex.html#dbindex>
- [22] Jevremovic, D. The project of Serbian Virtual Observatory and data for stellar atmosphere modeling / Jevremovic D., Dimitrijevic M.S., L.C, Popovic, Dacic M., Protic Benisek V., Bon E., et al. // *New Astron. Rev.* 2009. Vol. 53. P. 222–226.
- [23] Faenov, A.Y. Spectr-W-3 online database on atomic properties of atoms and ions / Faenov A.Y., Magunov A.I., Pikuz T.A., Skobelev I.Y., Loboda P.A. Vakshayev N.N., et al. // *AIP Conf. Proc.* 2002. Vol. 636. P. 253–262.
- [24] Perevalov, V.I. CDSD-296 (Carbon Dioxide Spectroscopic Databank): updated and enlarged version for atmospheric applications / Perevalov V.I., Tashkun S.A. // 10-th HITRAN database conference. Cambridge, MA, USA, 2008.
- [25] Mikhailenko, S. S&MPO—a databank and information system for ozone spectroscopy on the WEB Mikhailenko S., Barbe A., Babikov Y., Tyuterev V.G. [Электронный ресурс]. — Режим доступа: <http://smpro.iao.ru/>.
- [26] Tennyson, J. IUPAC critical evaluation of the rotational-vibrational spectra of water vapor. Part I. Energy levels and transition wavenumbers for H₂¹⁷O, and H₂¹⁸O / Tennyson J., Bernath P.F., Brown L.R., Campargue A., Carleer M.R., Csaszar A.G., et al. // *JQSRT* 2009. Vol. 110. P. 573–596.
- [27] Cunto, W. TOPbase at the CDS / Cunto W, Mendoza C, Ochsenbein F, Zeippen C. // *Astron. Astrophys.* 1993. Vol. 275. L5–8.
- [28] Mendoza, C. OPserver: interactive online computations of opacities and radiative accelerations / Mendoza C., Seaton M.J., Buerger P., Bellorin A., Melendez M., Gonzalez J., et al. // *Mon. Not. R. Astr. Soc.* 2007. Vol. 378. P. 1031–1035.
- [29] Rothman, L.S. The HITRAN 2008 molecular spectroscopic database / Rothman L.S., Gordon I.E., Barbe A., Benner D.C., Bernath P.F., Birk M., et al. // *JQSRT* 2009. Vol. 110. P. 533–572.
- [30] Rothman, L.S. HITEMP, the high-temperature molecular spectroscopic database / Rothman L.S., Gordon I.E., Barber R.J., Dothe H., Gamache R.R., Goldman A., et al. // *JQSRT* 2010. Vol. 111. P. 2139–2150.
- [31] Bautista, M.A. The XSTAR atomic database / Bautista M.A., Kallman T.R. // *Astrophys. J. Suppl.* 2001. Vol. 134. P. 139–149.
- [32] Ralchenko, Yu. NIST ASDTeam. NIST Atomic Spectra Database (version 3.1.5) / Ralchenko Yu., Kramida, A.E., Reader J. National Institute of Standards and Technology, Gaithersburg, MD; 2008. [Электронный ресурс]. — Режим доступа: <http://physics.nist.gov/asd3S>.
- [33] Sansonetti, J.E. Handbook of Basic Atomic Spectroscopic Data (version 1.1.2) / Sansonetti J.E., Martin W.C., Young S.L. National Institute of Standards and Technology, Gaithersburg, MD; 2005. [Электронный ресурс]. — Режим доступа: (<http://physics.nist.gov/HandbookS>).
- [34] Podobedova, L.I. Spectral Data for the Chandra X-Ray Observatory, (version 1.1) / Podobedova L.I., Musgrove A., Kelleher D.E., Reader J., Wiese W.L., Coursey J.S., et al. National Institute of Standards and Technology, Gaithersburg, MD; 2003. [Электронный ресурс]. — Режим доступа: <http://physics.nist.gov/Chandra>.
- [35] Ralchenko, Yu. NISTSA Plasma Kinetics Database (version 1.0) / National Institute of Standards and Technology, Gaithersburg, MD; 2006. [Электронный ресурс]. — Режим доступа: <http://nlte.nist.gov/SAHA>.

Virtual Atomic and Molecular Data Centre (VAMDC)

A.Z. Fazliev and VAMDC Collaboration

The Virtual Atomic and Molecular Data Centre (VAMDC, <http://www.vamdc.eu>) is an European Union funded collaboration between groups involved in the generation, evaluation, and use of atomic and molecular data. VAMDC aims to build a secure, documented, flexible and interoperable e-science environment-based interface to existing atomic and molecular data. The

project will cover establishing the core consortium, the development and deployment of the infrastructure and the development of interfaces to the existing atomic and molecular databases. It will also provide a forum for training potential users and dissemination of expertise worldwide. This review describes the scope of the VAMDC project; it provides a survey of the atomic and molecular data sets that will be included plus a discussion of how they will be integrated. Some applications of these data are also discussed.

* Участники проекта VAMDC: M.L. Dubernet^{ab}, V.Boudon^c, J.L.Culhane^d, M.S.Dimitrijevic^e, C.Joblin^g, F. Kupka^h, G.Letoⁱ, P.LeSidaner^j, P.A.Loboda^k, H.E.Mason^l, N.J.Mason^m, C.Mendozaⁿ, G. Mulas^o, T.J.Millar^p, L.A.Nuñez^q, V.I.Perevalov^f, N.Piskunov^r, Y.Ralchenko^s, G.Rixon^{bb}, L.S. Rothman^t, E.Roueff^{ab}, T.A.Ryabchikova^u, A.Ryabtsev^v, S.Sahal-Bréchet^w, B.Schmitt^x, S. Schlemmer^y, J.Tennyson^z, V.G.Tyuterev^{aa}, N.A.Walton^{bb}, V.Wakelam^{cc}, C.J.Zeippen^w

^a Laboratoire de Physique Moléculaire pour l'Atmosphère et l'Astrophysique, UMR7092 CNRS/INP, Université Pierre et Marie Curie, Case76, 4 Place Jussieu, 75252 Paris Cedex 05, France, ^b Laboratoire Univers et Théories, UMR8102 CNRS/INSU, Observatoire de Paris, Section Meudon, 5 Place Janssen, 92195 Meudon Cedex, France, ^c Laboratoire Interdisciplinaire Carnot de Bourgogne, UMR5209 CNRS-Université de Bourgogne, 9 Avenue Alain Savary, BP47870, F-21078 DIJON Cedex, France, ^d Mullard Space Science Laboratory, University College London, Holmbury St.Mary, Dorking, Surrey RH56NT, UK, ^e Astronomical Observatory, Volgina 7, 11060 Belgrade, Serbia, ^f V.E. Zuev Institute of Atmospheric Optics, Siberian Branch, Russian Academy of Sciences, 1, Academician Zuev square, Tomsk 634021, Russian Federation, ^g Centre d'Etude Spatiale des Rayonnements, UMR5187 CNRS/INSU, Université Paul Sabatier, 9 Avenue du Colonel Roche, F-31028 Toulouse Cedex 9, France, ^h Faculty of Mathematics, University of Vienna, Nordbergstrasse 15, 1090 Wien, Austria, ⁱ Istituto Nazionale di Astrofisica — Osservatorio Astrofisico di Catania, Via Santa Sofia 78, I-95123 Catania, Italy, ^j Division Informatique de l'Observatoire, VO-Paris Data Centre, UMS2201 CNRS/INSU, Observatoire de Paris, 5 Place Janssen, 92195 Meudon Cedex, France, ^k Russian Federal Nuclear Centre – All Russian Institute of Technical Physics (RFNTC-VNIITF), 13 Vasilyeva St., Snezhinsk, Chelyabinsk Region 456770, Russia, ^l Department of Applied Mathematics and Theoretical Physics, Centre for Mathematical Sciences, Wilberforce Road, Cambridge CB30WA, UK, ^m Open University, Faculty of Science, Walton Hall, Milton Keynes MK76AA, UK, ⁿ Centro de Física, Instituto Venezolano de Investigaciones Científicas (IVIC), P.O. Box20632, Caracas 1020A, Venezuela, and Centro Nacional de Cálculo Científico Universidad de Los Andes (CeCalCULA), Corporación Parque Tecnológico de Mérida, Mérida 5101, Venezuela, ^o Istituto Nazionale di Astrofisica — Osservatorio Astronomico di Cagliari, strada 541 oc. Poggio dei Pini, Capoterra (CA) I-09012, Italy, ^p School of Mathematics and Physics, Queen's University Belfast, University Road, Belfast BT71NN, UK, ^q Centro Nacional de Cálculo Científico Universidad de Los Andes (CeCalCULA), Corporación Parque Tecnológico de Mérida, Mérida 5101, Venezuela, and Grupo de Investigación en Relatividad y Gravitación (GIRG) Esc. Física, Universidad Industrial de Santander, Bucaramanga, Colombia, ^r Uppsala University, Department of Physics and Astronomy, Lägerhyddsvägen 1, Uppsala 75120, Sweden, ^s National Institute of Standards and Technology, Atomic Physics Division, 100 Bureau Dr., Stop 8422, Gaithersburg, MD 20899-8422, USA, ^t Harvard-Smithsonian Center for Astrophysics, Atomic and Molecular Physics Division, MS 50, 60 Garden Street, Cambridge, MA02138-1516, USA, ^u Institute for Astronomy RAS, Pyatnitskaya 48, Moscow 119017, Russian Federation, ^v Institute for Spectroscopy RAS, Physical 5, Troitsk 142190, Russian Federation, ^w Laboratoire d'Etude du Rayonnement et de la Matière en Astrophysique, UMR8112 CNRS/INSU, Observatoire de Paris, 61, Avenue de l'Observatoire, 75014 Paris, France, ^x Laboratoire de Planétologie de Grenoble, UMR5109 CNRS/INSU, Université Joseph Fourier, BP53, 38041 Grenoble Cedex 9, France, ^y University of Cologne, I. Physikalisches Institut, Zùlpicher Strasse 77, Köln 50937, Germany, ^z Department of Physics and Astronomy, University College London, London WC1E6BT, UK, ^{aa} Groupe de Spectroscopie Moléculaire et Atmosphérique, UMR6089 CNRS/INP, Université de Reims, U.F.R. Sciences Exactes et Naturelles, Mouline de la Housse B.P. 1039, 51687 Reims Cedex 2, France, ^{bb} Institute of Astronomy, University of Cambridge, Madingley Road, Cambridge CB30HA, UK, ^{cc} Laboratoire d'Astrophysique de Bordeaux, UMR5804 CNRS/INSU, Université de Bordeaux, BP89, 33271 Floirac Cedex, France).

Работа выполнена в рамках проекта Virtual Atomic and molecular data centre (Infra-2008-1.2.2 Scientific Data Infrastructure).