

Les données de Physique Atomique et Moléculaire dans les VO

Observatoire de Paris

M.L. Dubernet

M. Bruston, F. Combes, M. Cornille, J. Dubau

D. Egret, S. Sahal-Bréchet, C. Stehle, L. Tchang-Brillet, C. Zeippen

Motivation

1. Favoriser et organiser l'accès aux données de physique atomique et moléculaire pour les applications astrophysiques :
 - préparation et exploitation scientifique d'instrument d'observation
 - thématique
2. Permettra pour un grand nombre d'utilisateurs :
 - une unification, validation des données
 - assurance que les données de physique utilisées dans les modèles de spectres ou dans les modèles des milieux astrophysiques sont identiques.
 - Stellaire, Solaire, Planétologie, Milieu interstellaire
3. Accès à ces données par le biais des Observatoires Virtuels permettra l'interopérabilité entre ces données et des applications WEB de création de spectres synthétiques, d'analyse de spectres ou de modélisation.

Comment procéder ?

1. Identification des besoins
2. Répertoire des données disponibles : NIST, VALD, CHIANTI, GEISA, HITRAN, MOLAT, BASECOL, etc ...
3. Validation des données pour les besoins
4. Mise à disposition de ces données dans le format scientifique intéressant et utilisable rapidement dans les applications astrophysiques
5. Mise à disposition dans un format informatique cohérent
6. **ONTOLOGIE**

Identification données

1. Mots clés des journaux ? différent suivant les éditeurs
2. PACS ? trop général, mais une 1ere approche
3. autres exemples ?

- 34.50.Bw Energy loss and stopping power (atoms and molecules)
- 34.50.Dy Interactions of atoms and molecules with surfaces ; photon and electron emission ; neutralization of ions
- 34.50.Ez Rotational and vibrational energy transfer (atoms and molecules)
- 34.50.Fa Electronic excitation and ionization of atoms including beam-foil excitation and ionization
- 34.50.Gb Electronic excitation and ionization of molecules ; intermediate molecular states including lifetimes, state mixing, etc
- 34.50.Lf Chemical reactions, energy disposal, and angular distribution, as studied by atomic and molecular beams
- 34.50.Pi State-to-state scattering analyses (atoms and molecules)

Quels types de données ? I

1. Espèces :

- Type : Atome, Molécule, Electron, Photon
- Nom : H, He, H₂
- Degré d'ionisation
- ?

2. Processus allant des réactants aux produits :

- Etats finaux/initiaux réactants/produits
- Spectroscopie
- collisions inélastiques (excitation rotationnelle, vibrationnelle, électronique), réactives
- ionization par photons, par collision
- ?

Quels types de données ? II

Processus dans 1 gamme de :

- fréquence
- température
- énergie
- ?

Quantités numériques recherchées :

- niveaux énergie, fréquences, opacités, fce oscillateurs, etc..
- sections efficaces de collision
- constantes de vitesse de réaction, excitation, ionization, etc..
- ?

Quels types de données ? III

1. Données théoriques et expérimentales :

- identifier méthodes utilisées

** dispositif expérimental

* théorie : interaction et dynamique

- précision
- années
- références

BASECOL (<http://basecol.obs-besancon.fr>)

BASECOL data base : publications query - Konqueror

Location Edit View Go Bookmarks Tools Settings Window Help

Publications query options :

Help : [Notation](#) - [Content](#)

Possible systems

- A-D
- A-LP
- AP
- D-D
- Id D-D
- D-LP
- D-P
- LP-LP
- Id LP-LP
- LP-P
- P - P
- Id P-P
- Ion - Neutral Molecule
- Electron - Neutral Molecule
- Electron - Ion

Transitions

- ROTATION
- VIBRATION
- RO-VIBRATION
- FINE
- HYPERFINE

Type of Data

- CROSS SECTIONS
- RATES
- POTENTIAL ENERGY SURFACES
- PRESSURE BROADENING
- PROBABILITIES

Possible Methods

RO-VIBRATIONAL COLLISIONAL EXCITATION DATABASE

Bibliographic references

You have chosen the following selection criteria :

- system :
 - D-D
- transitions :
 - ROTATION
- data :
 - RATES

Number of bibliographic references selected : 12

- D. R. Flower. [A quantum mechanical study of the rotational excitation of HD by H₂](#). *J. Phys. B*, 32:1755-1767, 1999.
- A. R. Offer and E. F. van Dishoeck. [Rotational excitation of interstellar OH by para- and ortho-H₂](#). *M. N. R. A. S.*, 257:377-390, 1992.
- D. P. Dewangan, D. R. Flower, and M. H. Alexander. [Rotational excitation of OH by para-H₂: rate coefficients calculated in an intermediate coupling representation](#). *M. N. R. A. S.*, 226:505-512, 1987.
- D. R. Flower and J. M. Launay. [Rate coefficients for the rotational excitation of CO by ortho- and para-H₂](#). *M. N. R. A. S.*, 214:271-277, 1985.
- D. P. Dewangan and D. R. Flower. [Collisional excitation of OH by H₂ in the interstellar medium](#). *M. N. R. A. S.*, 199:457-463, 1982.
- Lise Lotte Poulsen and Gert D. Billing. [Vibrational deactivation of CO\(v = 1\) by p-H₂ and o-H₂](#). *Chem. Phys.*, 73:313-322, 1982.
- D. R. Flower. [Rotational excitation of OH by H₂ at interstellar temperatures](#). *Astron. Astrophys.*, 83:33-37, 1980.
- S. C. Mehrotra. [Collisional excitation of interstellar molecules due to H₂ - Linear molecules CO, OCS, SiO, HCN and HC₃N in ¹Sigma state](#). *Ap. S. S.*, 71:507-514, 1980.
- Lise Lotte Poulsen and Gert D. Billing. [Calculation of vibrational deactivation of HF\(1 leq n leq 7\) by DF\(0\) and of DF\(1 leq n leq 7\) by HF\(0\)](#). *Chem. Phys.*, 36:271-281, 1979.
- S. Green and S. Chapman. [Collisional excitation of interstellar molecules - Linear molecules CO, CS, OCS, and HC₃N](#). *Ap. J. S.*, 37:169-194, 1978.
- R. Goldflam, D. J. Kouri, and S. Green. [On the factorization and fitting of molecular scattering information](#). *J. Chem. Phys.*, 67:5661-5675, 1977.
- S. Green and P. Thaddeus. [Rotational excitation of CO by collisions with He, H, and H₂ under conditions in interstellar](#)

Exemple d'une entrée dans la base

```
@Article{mha00e,  
author = "M. H. Alexander and X. Yang and P. J. Dagidigian and  
A. Berning and H.-J. Werner",  
title = "Potential energy surfaces for the CN( $X^2\Sigma^+$ ,  $A^2\Pi$ )-Ar system  
and inelastic scattering within the A state",  
keyword = "AD, MQ, CN, Ar, FIN, PES, XS, RA, EXP, RO",  
journal = jcp,  
volume = "112",  
pages = "781–791",  
year = "2000",  
}
```

– **Exemple de fichier : H₂O + H₂**

* ortho-water/para-h2 effective rate coeff. in cm³ s⁻¹ for temperature between 5K and 20K*

Dubernet, M.L., Grosjean, A. 2002, A. A., 390, 793

BUT the levels are sorted by **INCREASING ENERGY**

5 initial levels and 9 final levels, labelled as initial : j_i k_{i-1} k_{i1}– final : j_f k_{f-1} k_{f1}

initial rotational energy level given

notation : 101 means j=1 , k₋₁ = 0, k₁ = 1, which gives $\tau = k_{-1} - k_1 = -1$

101 110 23.7943039

5.000 0.392039E-13

6.000 0.112461E-12

7.000 0.242504E-12

8.000 0.434379E-12

9.000 0.685297E-12

10.000 0.987622E-12

Démarche ?

- essayer de définir des catégories - Ex : processus, espèces, etc ...
- des domaines - Ex : température, etc ...
- dans les catégories : liste la + exhaustive possible des composants, voir comment les regrouper en sous-catégories
- NE pas s'arrêter uniquement aux besoins actuels en Astro. car peuvent évoluer
- collaboration actuelle pour démarrer : nous aider à définir la démarche, nous apportons expertise en Phys. Atomique et Moléculaire.
- contacter les grandes bases NIST, VALD, etc..., les intéresser + groupe de travail