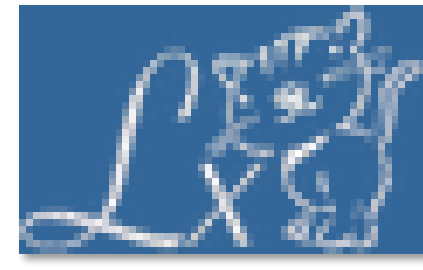


Constat post 1^{ères} rencontres Plasmas froids et Laser 25-27 novembre 2019, Toulouse

- Demande d'accès à des bases de données plus larges que celles actuellement disponibles
- Interrogations sur le devenir de la base LXCat



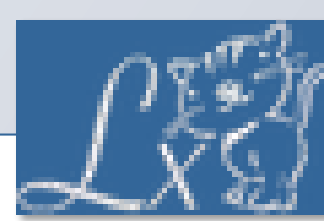
- Demande d'accès à des sections efficaces ou des taux basés sur des lois d'échelle pour les molécules polyatomiques
- Demande de travail plus étroit entre spécialistes des processus élémentaires (« collisionnistes ») et cinétiens-physiciens des plasmas (« plasmiciens »)

Objectifs du stand Données de Base pour la Physico-chimie des Plasmas Froids

- Donner les toutes dernières informations à propos de LXCat
- Faire un bilan sur les ressources disponibles
- Discuter de la place d'outils clef en main (de type Quantemol) par rapport à des bases de données plus traditionnelles
- Discuter de la hiérarchie d'outils « pour les initiés » (piloté par un spécialiste « collisionniste ») et « pour les plasmiciens »
- Discuter de la hiérarchie entre processus collisionnels et radiatifs

- Quel rôle la spectroscopie doit-elle jouer ?
- Avoir un retour des collègues sur le potentiel intérêt à développer ou maintenir des bases de données en France
- Proposer des actions permettant un rapprochement accru entre spécialistes des processus élémentaires et cinétiens-physiciens des plasmas (projet ANR, colloques dédiés, série d'articles dans des journaux pertinents... ?)
- Donner des informations sur les méthodes utilisées pour la détermination de sections efficaces (calculs et expériences) selon leur type et leurs limitations

Evolutions de la base de données LXCat <http://www.lxcat.net/>



- En évolution permanente
- Hébergée sur des serveurs situés aux USA (Drake University) et à Eindhoven
- Toujours accessible car ne dépend pas directement d'une institution
- Liste des contributeurs en perpétuel élargissement
- Volonté d'élargir la base vers les collisions par impact de lourd (ion ou neutre)

Outils de type QUANTEMOL <http://www.quantemol.com/>



- Accès libre ou payant
- Structure, surfaces d'énergie potentielle, sections efficaces, taux, schémas cinétiques, couplages avec modules plasmas de type industriel
- Atomes, molécules, ions (atomiques et moléculaires), molécules polyatomiques
- Hiérarchie entre utilisateur « standard » et utilisateur « averti » ?
- Retours d'expériences sur ce genre d'outil ?

Bilan sur l'essentiel des ressources disponibles en ligne...

- Bases de données spécifiques

Nom base de données	Base collisionnelle	Base radiative	Lien internet
ADAS Atomic Data and Analysis Structure	<input checked="" type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	https://open.adas.ac.uk/
ALADDIN IAEA Atomic and Molecular Database	<input checked="" type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	https://www-amdis.iaea.org/ALADDIN/collision.html
ALL Atomic Line List	<input type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	https://www.pa.uky.edu/~peter/newpage/
AMDB Atomic and Molecular Database	<input checked="" type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	http://www.camdb.ac.cn/e/
CDMS Molecular Spectroscopy Cologne	<input type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	https://cdms.astro.uni-koeln.de/classic/
GAPHYOR Gas Physics Orsay	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	http://gaphyor.lpgp.u-psud.fr/
KIDA Kinetic Database for Astrochemistry	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	http://kida.astrophy.u-bordeaux.fr/
KURUCZ Atomic Line List	<input type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	https://lweb.cfa.harvard.edu/amp/ampdata/kurucz23/sekur.html
LXCat Plasma Data Exchange Project Database	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	http://www.lxcat.net/
NIST Atomic Spectra Database	<input type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	https://www.nist.gov/pml/atomic-spectra-database
NIST Chemistry WebBook	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	https://webbook.nist.gov/chemistry/
PHYS4ENTRY Physics for Entry	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	http://phys4entrydb.ba.imip.cnr.it/Phys4EntryDB/
QUANTEMOL-DB Database	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	https://quantemoldb.com/
STARK-H Stark Broadening Database for H	<input type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	https://stark-h.obspm.fr/
STARK-B Stark Broadening Database	<input type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	http://stark-b.obspm.fr/
UMIST Rate Database	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	http://udfa.ajmarkwick.net/index.php

- Moteurs de recherche transversaux et sites d'accès transversal

Nom moteur de recherche ou site transversal	Base collisionnelle	Base radiative	Lien internet
GENIE A General Internet Search Engine for Atomic Data	<input checked="" type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	https://www-amdis.iaea.org/GENIE/
MOLAT Molecular and Atomic Data	<input checked="" type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	https://molat.obspm.fr/index.php?page=pages/menuOtherDB.php
OBSERVATOIRE de PARIS Base de données scientifiques	<input checked="" type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	https://www.observatoiredeparis.psl.eu/-bases-de-donnees-scientifiques-.html
VAMDC Portal	<input checked="" type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	https://portal.vamdc.eu/vamdc_portal/nodes.seam
WEISMANN Institute of Science	<input checked="" type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	https://plasma-gate.weizmann.ac.il/directories/databases/

Méthodes et outils développés par la communauté « collisionniste »

- MQDT, méthode du paquet d'onde, calculs de type R-matrix, MOLSCAT-HIBRIDON collisions inélastiques indépendantes du temps, etc.
- Cf. posters complémentaires à celui-ci commentés pendant ce stand...
- Qu'est-il possible de faire avec les méthodes développées actuellement ?
- Quels sont les verrous actuels empêchant les calculs pour certaines collisions ?
- Quelle place pour les expériences de collision par rapport aux capacités de calcul ?

Des actions communes entre « plasmiciens » et « collisionnistes » ?

- Comment opérer un rapprochement efficace ?
- Identifier une feuille de route sur les processus particulièrement intéressants pour les « plasmiciens » aurait-il du sens ?
- Devrait-on impliquer des « collisionnistes » dans le fonctionnement du GDR ?
- Un projet ANR porté par le GDR aurait-il du sens ?

Références bibliographiques discutant des bases de données

- Data needs for modeling low-temperature non-equilibrium plasmas: the LXCat project, history, perspectives and a tutorial, E. Carbone et al., Atoms 2021, 9, 16 <https://doi.org/10.3390/atoms9010016>
- Networked mining of atomic and molecular data from electronic journal databases on the Internet, L. Pichl et al., S. Bhalla (Ed.): DNIS 2005, LNCS 3433, 159-170, 2005 © Springer-Verlag Berlin Heidelberg

- Atomic and molecular databases in Japan and Asia, I. Murakami and T. Kato, AIP Conference Proceedings 543 (2000) 287 <https://doi.org/10.1063/1.1336285>
- The Belgian repository of fundamental atomic data and stellar spectra (BRASS) I. Cross-matching atomic databases of astrophysical interest, M. Laverick et al., A&A 612 (2018) A60 <https://doi.org/10.1051/0004-6361/201731933>
- The spectroscopic atomic and molecular databases at the Paris observatory, E. Roueff et al., Atoms 8 (2020) 36 <https://doi.org/10.3390/atoms8030036>