

# ***DIPLOMAMUNKA***

**Szenes Péter**  
Vernika Tamás

Debrecen  
2010

**Debreceni Egyetem**  
**Informatika Kar**

**Egy kémiai adatbázis relációs  
adatbázisra való leképezése**

Témavezető:

**Dr. Végh János**  
egyetemi tanár

Készítette:

**Szenes Péter**  
Programtervező matematikus  
**Vernika Tamás**  
Programtervező matematikus

Debrecen

2010

# Tartalomjegyzék

<b>Tartalomjegyzék .....</b>	<b>3</b>
<b>Bevezető .....</b>	<b>5</b>
<b>1. Elektronspektroszkópia .....</b>	<b>6</b>
<b>2. NIST Rendszerek .....</b>	<b>9</b>
2.1. NIST XPS 2.0.....	9
2.1.1. Az adatbázis adatai.....	9
2.1.2. Az adatbázis .....	9
2.1.3. GUI .....	9
2.1.4. Funkciók, keresési lehetőségek.....	10
2.1.4.1. Ismeretlen spektrális vonalak azonosítása .....	10
2.1.4.2. Mérések keresése energiatípusonként .....	10
2.1.4.3. Mérések lekérdezése vegyületek illetve vegyületek csoportosítása szerint.....	10
2.1.4.4. Összetett keresés .....	11
2.1.5. Megjegyzések .....	11
2.2. NIST XPS 3.5.....	11
2.2.1. Az adatok .....	12
2.2.2. Az adatbázis tervezés .....	12
2.2.3. Lekérdezési lehetőségek .....	13
2.2.3.1. Spektrális vonalak azonosítása.....	13
2.2.3.2. Egy adott elemre vonatkozó mérések lekérdezése.....	15
2.2.3.3. Több elemre vonatkozó mérések együttes lekérdezése.....	16
2.2.3.4. Vegyületekre vonatkozó mérési eredmények keresése a vegyületekben levő elemek alapján.....	17
2.2.3.5. Keresés publikáció alapján.....	17
2.3. NIST XPS 4.0.....	18
<b>3. A saját fejlesztés .....</b>	<b>19</b>
3.1. Adatbázis .....	19
3.2. Technológiai háttér .....	20
3.3. A rendszerünk felépítése .....	21

3.4. A rendszerünk bemutatása.....	25
3.5. Keresés az adatbázisban.....	25
3.5.1. Spektrális vonalak azonosítása.....	25
3.5.2. Publikáció keresése.....	26
3.5.3. Egy adott elemre vonatkozó mérések lekérdezése.....	27
3.5.4. Több elemre vonatkozó mérések lekérdezése.....	28
3.5.5. Egy elemre vonatkozó mérésekben szereplő vegyértékhéjak lekérdezése.....	29
3.5.6. Keresések eredményének megjelenítése.....	29
3.5.7. Egy mérés részleteinek megjelenítése.....	30
3.5.8. Új adat felvétele az adatbázisba.....	30
3.6. C API.....	32
3.6.1. Példa az xps.h használatára:.....	34
3.6.2. Lekérdezés MySQL C API-val.....	34
3.6.3. Lekérdezés a lekérdezésben.....	36
3.6.4. Megjegyzés.....	36
<b>4. Rendszerünk jövője.....</b>	<b>37</b>
<b>Összefoglalás.....</b>	<b>40</b>
<b>Köszönetnyilvánítás.....</b>	<b>41</b>
<b>Irodalomjegyzék.....</b>	<b>42</b>
<b>Ábrajegyzék.....</b>	<b>43</b>

## **Bevezető**

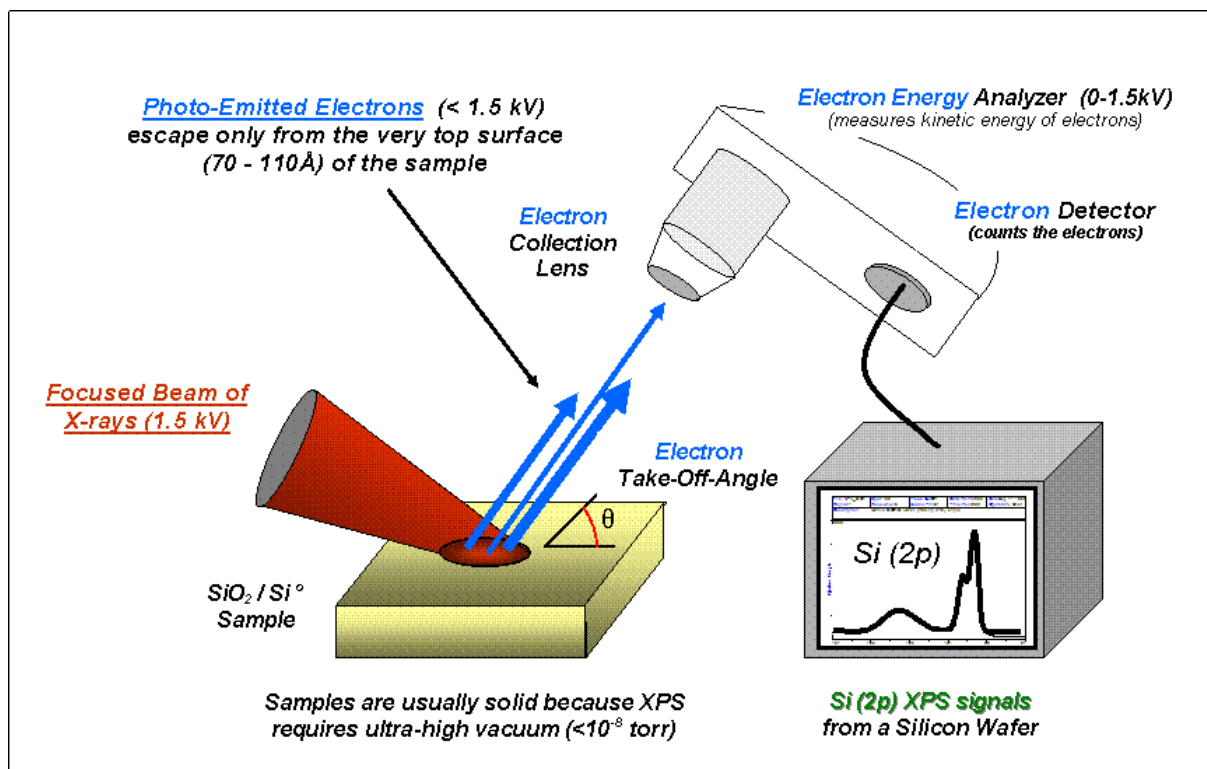
Diplomamunkánkat Vernika Tamással csoportmunkában készítettük, melynek során végig együtt dolgoztunk, ezért az elkészített munkát nem tudjuk szétválasztani, dolgozataink megegyeznek.

Diplomamunkánk készítése során szerettünk volna olyan témával foglalkozni, amelyben valós igény van valamilyen program létrehozására. Ezért választottuk az "Egy kémiai adatbázis relációs adatbázisra alakítása" című kiírást, melynek során megismerkedtünk az elektronspektroszkópiával, a NIST X-ray Photoelectron Spectroscopy Database rendszerrel és a felhasználók igényeivel.

Mi egy olyan nyílt forráskódú, továbbfejleszhető rendszer fejlesztését tűztük ki célul, amelyet bárki ingyenesen használhat, funkcionalitásában tudja azt, amit a NIST ingyenesen elérhető webes verziója, és plusz funkciókat biztosít, amik fizikusok igényein alapulnak. Ilyen igények például az adatbázis megfelelő bővíthetősége és C-s függvénykönyvtár elkészítése, amely által külső programok is lekérdezéseket hajthatnak végre az adatbázison.

# 1. Elektronspektroszkópia

Ebben a fejezetben az elektronspektroszkópiáról (X-ray Photoelectron Spectroscopy, a továbbiakban XPS) szeretnénk egy áttekintő képet adni, a teljesség igénye nélkül. Célunk nem a fizikai, kémiai folyamatok részletesen ismertetése, hanem az, hogy aki még nem hallott az XPS-ről, megtudja mi az, milyen elveken alapszik, és hogy miért hasznos.



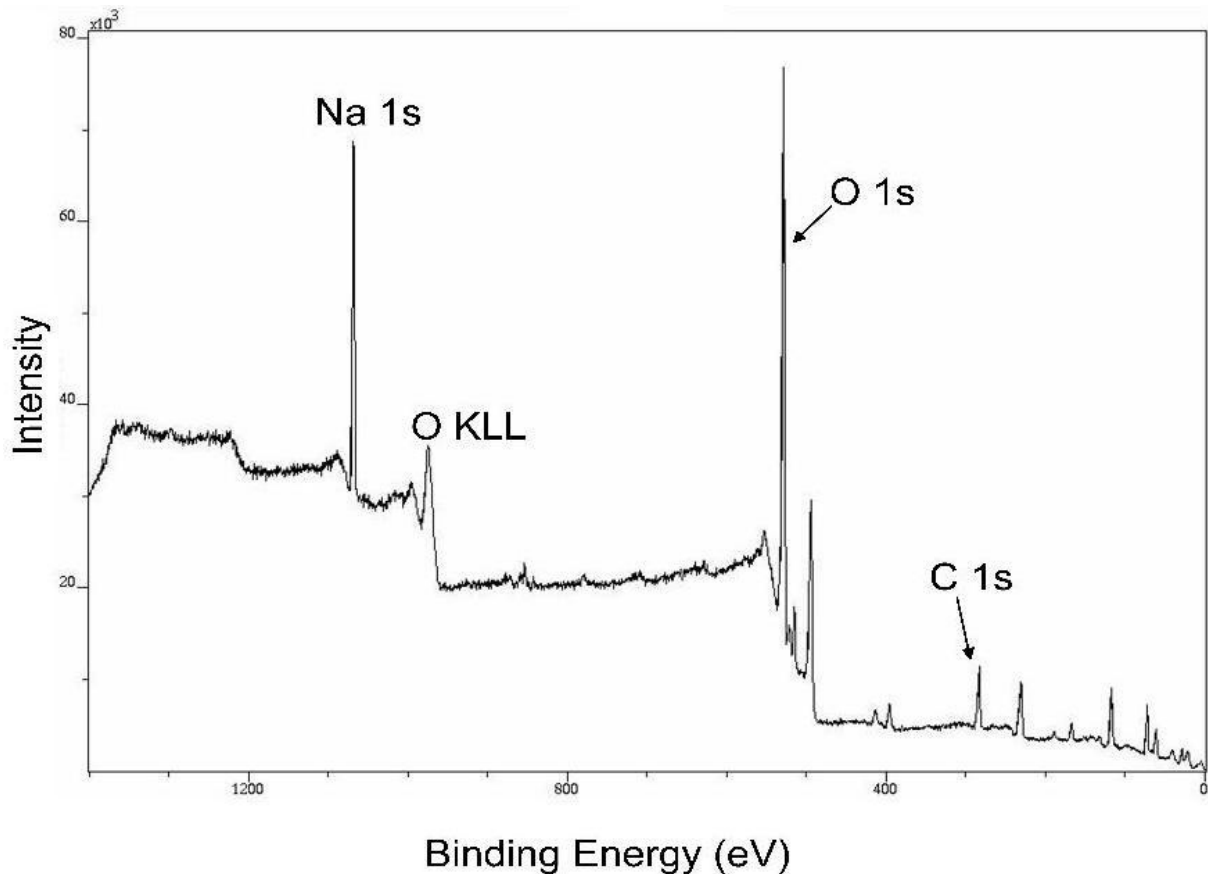
1. ábra Az elektronspektroszkópia működési elve

Az XPS meghatározza egy szilárd minta elemösszetételét kvalitatív és kvantitatív módon, és információt szolgáltat a mintában levő elemek kémiai állapotáról.

Az 1. ábra mutatja a teljes XPS rendszert. A módszer lényege, hogy a vizsgálandó szilárd mintánkat állandó energiájú röntgen sugárzásnak tesszük ki egy adott ideig. A mintából a röntgensugárzás hatására elektronok válnak ki, és ezeknek az elektronoknak az energiáját és a darabszámát mérjük. Az elektronoknak ekkor a mozgási energiájukat tudjuk megmérni. Mivel tudjuk a röntgensugárzás energiáját is, kiszámítható hogy az elektron milyen kötési energiával rendelkezett mielőtt kilépett a mintából. Az eljárás kimenete egy spektrum lesz (2. ábra), aminek a vízszintes tengelye a kötési energia, a függőleges tengelye pedig az intenzitás, azaz hogy hány db adott energiájú elektront számoltunk meg. Egy elemet

egyértelműen meghatároz az, hogy milyen energiájú elektronokat emittál adott röntgensugárzás hatására. Ez a karakterisztikus jellemző úgynevezett foto csúcsok formájában jelenik meg a spektrumon.

Az egyes elemeket meghatározó jellemzők tárolására különböző adatbázisok léteznek.



2. ábra Egy XPS spektrum

A kapott spektrum elemzése során egy ilyen adatbázist felhasználva beazonosíthatók a mintában lévő egyes elemek milyensége, mennyisége és kémiai állapota. Az informatikai feladat a rendszerben az, hogy beazonosítsuk a spektrumon a csúcsokat, és azt, hogy azok milyen elemekhez tartoznak. Diplomamunkánk készítése alatt mi egy olyan programot készítettünk el, ami az utóbbi feladatot látja el, vagyis mérési eredményekből elemeket tud azonosítani.

Az XPS elnevezés helyett használatos az ESCA (Electron Spectroscopy for Chemical Analysis, magyarul elektron spektroszkópia kémiai analízisre) is. Az ESCA azonban, tágabb értelemben azt a módszercsaládot is jelenti, amely az elektronok analízisén alapszik, és a szilárd minta elemösszetételét és az összetevők kémiai állapotát kutatja. <sup>[1]</sup>

Az ESCA napjainkban a felületek kémiai analízisében az egyik legszélesebb körben alkalmazott módszer.<sup>[2]</sup> Széles körben elterjedt, mind ipari, mind alapkutatási célokra rutinszerűen használatos analitikai technika. Tipikusan XPS-sel vizsgált problémák például a felületi tisztaság ellenőrzése, felületi szennyezők meghatározása, vékonyrétegek növekedése, felületi réteg összetételének és vastagságának meghatározása, a felületi összetétel módosulásának monitorozása ötvözetekben, valamint diffúziós, felületi szegregációs, oxidációs, korróziós és katalitikus folyamatok megfigyelése.<sup>[1]</sup>

Más technikákkal összehasonlítva, az XPS kiemelkedik a kvantitatív elemösszetétel és kémiai állapot meghatározásának pontosságában és gyorsaságában. A töltött részekkel való gerjesztéseken alapuló módszerekkel szembeni nagy előnye, hogy kevésbé roncsolja a mintát. Hátrányai között meg kell említeni, hogy a módszer nem képes hidrogén detektálására.<sup>[1]</sup>

Diplomamunkánkban a továbbiakban már nem foglalkozunk az elektronspektroszkópia elméletével, helyette informatikai problémákra térünk át.

## **2. NIST Rendszerek**

### **2.1. NIST XPS 2.0**

A mi célunk egy olyan program fejlesztése volt, aminek a segítségével egy XPS spektrum adataiból, beazonosíthatók az egyes elemek. Ezért, hogy a feladatunkat jobban megismerjük, tanulmányoztunk egy ilyen XPS programot, melyet a National Institute of Standard (a továbbiakban NIST) készített. Ebben és a következő fejezetben a NIST két termékét mutatjuk be kronologikus sorrendben.

A NIST-es program neve NIST X-ray Photoelectron Spectroscopy Database. Megismerkedtünk a program 2.0-ás verziójával, amit a 90-es évek második felében adtak ki. Ez a program egy floppy lemezről telepíthető, és DOS-os rendszer alatt fut.

A program segítségével a felhasználók könnyen beazonosíthatják azokat a spektrumban szereplő csúcsokat, amelyek az adatbázisban már szerepelnek.

#### **2.1.1. Az adatbázis adatai**

Az 1.0-ás verzió 13000 adatrekordot tartalmazott. Ezek az adatok 1985-ig megjelent publikációkból származnak. A 2.0-ás verzióban az adatbázis 3000 újabb adatrekorddal bővült. Az új mérések forrásai az 1992-ben megjelent *High Resolution XPS of Organic Polymers: the Scienta ESCA300 Database* című könyv, és a következő folyóiratok: *Surface and Interface Analysis*, *Journal of Electron Spectroscopy and Related Phenomena*, *Physical Review B*.

#### **2.1.2. Az adatbázis**

Az adatbázist dBase adatbázis kezelő rendszerrel hozták létre. Az adatbázis tábláit a DBF Viewer 2000 nevű programmal nyitottuk meg. Az adatbázis mintegy 16 táblát tartalmaz, melyek erősen redundánsak. Bizonyos keresési funkciók támogatására indexelést is alkalmaztak.

#### **2.1.3. GUI**

A program karakteres menü szerkezetű DOS-os program, egérre nincs is szükség. Minden képernyőkép esetén ki van írva mely billentyűkkel éppen mit lehet csinálni.

## **2.1.4. Funkciók, keresési lehetőségek**

A főmenüben négy keresési mód közül választhatunk:

- Ismeretlen spektrális vonalak azonosítása
- Mérések keresése energiatípusonként
- Mérések lekérdezése vegyületek illetve vegyületek csoportosítása szerint
- Összetett keresés

### **2.1.4.1. Ismeretlen spektrális vonalak azonosítása**

Első lépésként ki kell választanunk az energiatípust. Ezután meg kell adnunk a mért energia értékét eV-ban két tizedes jegy pontosságig. A következő lépésben meg kell adnunk egy toleranciatartományt. A bevitt energiaérték és tolerancia által meghatározható az az energiatartomány, amelyben a keresést végre kell hajtani. Az előző lépéseket maximum négyszer lehet megismételni a keresés végrehajtása előtt. A keresés eredménye egy összefoglaló táblázat, melynek sorai a talált méréseket jelentik. A táblázat bármely eleméről egy újabb képernyőn részletes információkat kaphatunk. Ez a részletező képernyő tartalmazza az adott mérésről tudható összes információt.

### **2.1.4.2. Mérések keresése energiatípusonként**

Első lépésként itt is egy energiatípust kell választanunk, majd meg kell adnunk egy kémiai elemet. Az adott elem elektronhéjai közül ki kell választanunk a számunkra érdekeset. Az előző két lépést négyszer ismételhetjük meg, a keresés végrehajtása előtt. A keresés eredménye az előző funkcióban ismertetett összefoglaló táblázat.

### **2.1.4.3. Mérések lekérdezése vegyületek illetve vegyületek csoportosítása szerint**

Ez a menü két almenüre bomlik. Az elsőben vegyületekről kereshetünk méréseket. Vegyületek keresése estén maximum kilenc, a vegyületben lévő elemet adhatunk meg. Ezután meg kell határozni, hogy a megadott elemeken kívül más elemek is lehetnek-e a vegyületben. Eredményül a szokásos összefoglaló táblázatot kapjuk.

Az adatbázisban a vegyületek osztályozva vannak. Lehetőségünk van az adott osztályba tartozó vegyületek méréseit lekérdezni. Egyszerre több osztályt is kijelölhetünk

keresésre. Minden kijelölt osztály esetén megjelennek a hozzájuk tartozó vegyületek, melyek közül választanunk kell. A keresés eredménye a szokásos összefoglaló táblázat.

#### **2.1.4.4. Összetett keresés**

Ebben a funkcióban maximum öt tulajdonság értékét adhatjuk meg, összesen maximum négyszer. Az öt opcionális, nem kötelező tulajdonság, amit megadhatunk a fizikai állapot, kémiai osztály, az energiatípus, annak értéke és egy tolerancia, valamint a mérés minősége. Eredményül a szokásos összefoglaló táblázatot kapjuk.

#### **2.1.5. Megjegyzések**

Az összetett keresési funkció kínálja a legnagyobb rugalmasságot a kereséskor, azonban az adatbázis összes rekordját meg kell vizsgálni a keresés végrehajtásakor, így ez a keresési mód (a felhasználói kézikönyv bevallása szerint) relatíve lassú.

Megadhatunk olyan keresési feltételeket (bármelyik funkcióban), amelyek esetén akár több mint 1750 találat van. Ekkor a felhasználó csak az első 1750 találatot tekintheti meg, a többit nincs lehetőség megnézni. Ennek elkerülésére csak a feltételek pontosításával van lehetőség.

## **2.2. NIST XPS 3.5**

A NIST XPS harmadik verziója egy korszerűbb, webes változat. Erről a verzióról a NIST 2002-ben megjelentetett DEVELOPMENT OF THE WEB-BASED NIST X-RAY PHOTOELECTRON SPECTROSCOPY (XPS) DATABASE címmel egy cikket a Data Science Journal-ben.<sup>[3]</sup> Ennek a fejezetnek ez a cikk szolgál alapjául.

A NIST XPS rendszer 3 fő rétegre bontható. Az első réteg felelős az adatok megfelelő megjelenítéséért, és ebbe a rétegbe tartozik a böngésző és a webszerver. A második réteget a cikk alkalmazási rétegnek nevezi, és ide sorolja a futtató környezetet (ASP) és a program tényleges kódját. A harmadik réteg az "adatréteg", ami a feldolgozandó adatokat szolgáltatja a második rétegnek, és a cikk ide sorolja az adatbázisszervert és magát az adatbázist is.

A rendszer Window NT 4.0 operációs rendszeren és IIS 4.0 webszerveren fut, az adatok tárolására pedig egy SQL Server 7.0 adatbázis kezelő rendszer szolgál.

A cikk a NIST X-ray Photoelectron Spectroscopy Database (XPSDB) 3.0-ás verziójához készült, azonban az interneten a jelenleg ingyenesen elérhető rendszert a 3.5-ös verziószámot viseli, melyek funkcionalitásukban megegyeznek. Mi ez utóbbit fogjuk bemutatni.

### 2.2.1. Az adatok

A rendszer adatait 1968 és 1992 között megjelent tudományos cikkekből gyűjtötték ki. Első lépésként folyóiratokat, publikációkat gyűjtöttek bizonyos kulcsszavak alapján, ilyen kulcsszavak például az “X-ray photoelectron spectroscopy” és az “XPS”, majd megvizsgálták, hogy az így nyert adatok megfelelően részletezettek-e, és azt, hogy nem inkonzisztensek-e. Végül megfelelően beleillesztették az adatbázisukba az így nyert adatokat.

A NIST XPS ezen verziója mintegy 19000 adatrekordot tartalmaz, vagyis körülbelül 3000 új adatrekorddal többet, mint a 2.0-ás DOS-os verzió. Az újonnan felvett adatok több, részletesebb információkat tartalmaznak a vizsgált mintákról, a mérési körülményekről és módszerekről.

### 2.2.2. Az adatbázis tervezés

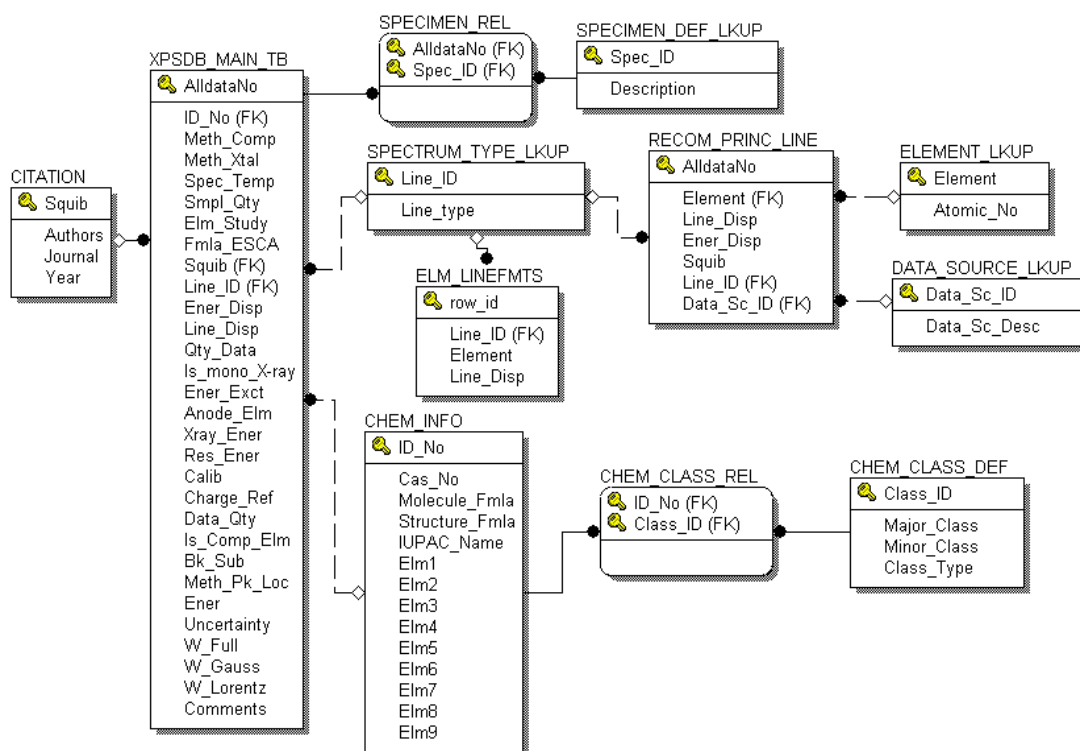
Az adatbázisséma teljesen újra lett tervezve a DOS-os verzióhoz képest, harmadik normál formára lett hozva.

Az *XPSDB\_MAIN\_TB* nevű tábla tartalmazza az egyes mérési eredményeket, különböző energiákat és a mintára vonatkozó egyéb információkat, ezeknek a részletezésére nem térünk ki. Ehhez a táblához kapcsolódnak a következő táblák:

- *CITATION*: tartalmazza a mintára vonatkozó publikáció fellelhetőségét és kiadásának idejét
- *SPECTRUM\_TYPE\_LKUP*: Egy XPS folyamat során különböző típusú méréseket lehet elvégezni. Ez a tábla ezeket a mérési típusokat azonosítja.
- a *SPECIMEN\_DEF\_LKUP* tábla a *SPECIMEN\_REL* kapcsolótáblán keresztül kapcsolódik az *XPSDB\_MAIN\_TB* táblához, és a mintára vonatkozó többlet információkat tartalmazza.
- *CHEM\_INFO*: az egyes elemekre, vegyületekre vonatkozó általános formulákat

tartalmazza, hozzá kapcsolódik a *CHEM\_CLASS\_REL* kapcsolótáblán keresztül a *CHEM\_CLASS\_DEF* tábla, mely a kémiai osztályokat tartalmazza.

A *RECOM\_PRINC\_LINE* tábla az egyes elemekre vonatkozó ajánlott energiaértékeket tartalmazza, ehhez kapcsolódik az *ELEMENT\_LKUP* tábla, mely a kémiai elemeket tartalmazza, és a *DATA\_SOURCE\_LKUP* tábla, mely az ajánlás forrásának leírását tartalmazza.



3. ábra A NIST XPS 3.0 adatbázissémája

### 2.2.3. Lekérdezési lehetőségek

Különböző lekérdezések végrehajtására ad a lehetőséget a rendszer. A következőkben ilyen keresési lehetőségeket ismertetünk.

#### 2.2.3.1. Spektrális vonalak azonosítása

Ezen keresési lehetőség esetén a felhasználónak meg kell adni az energia típusát, szintjét és az energiaszinttől való eltérést. Ilyen keresésből egyszerre 4-et tudunk megadni. Minden energiatípus esetén a megadott energiaszintnek meghatározott intervallumba kell esnie, ezért a rendszer a lekérdezések végrehajtása előtt validálja a bevitt adatokat.

Match a set of unknown spectral lines. Up to 4 spectral lines may be requested:

Select energy type:	Binding Energy	<b>For Information Only</b> Valid energy ranges (eV): Binding energy: 7.2 - 3939.9. Auger kinetic energy: 20.2 - 4002. Auger Parameter: 36.5 - 5206. Doublet separation energy: 0.105 - 126.6. If an uncertainty associated with input energy is not entered, the default value of 1.0 will be used.
Input an energy:	50 ± 1.0	
Select energy type:	Auger Kinetic Energy	
Input an energy:	30 ± 5.0	
Select energy type:	Choose Energy Type	
Input an energy:	± 1.0	
Select energy type:	Choose Energy Type	
Input an energy:	± 1.0	

**Search** **Reset**

XPS Home > Identify Unknown Spectral Lines

#### 4. ábra Ismeretlen spektrális vonalak meghatározása (NIST 3.5)

A négy lekérdezés eredményének az unióját egy új lapon látjuk egy tömör táblázatban összefoglalva. A táblázat sorai rendezhetők az oszlopok szerint. A további keresések eredménye szintén ugyanígy jelenik meg.

Matches from element and spectral line search

Element = Be Cl Cl  
Spectral Line = 1s 3s 2p

Page 1 of 17. => Jump directly to a page: Page 1

Element	Spectral Line	Formula	Energy (eV)	Details ?
Be	1s	Be	111.30	<a href="#">Click</a>
Be	1s	Be	111.60	<a href="#">Click</a>
Be	1s	Be	111.80	<a href="#">Click</a>
Be	1s	BeF2	115.30	<a href="#">Click</a>
Be	1s	BeF2	116.10	<a href="#">Click</a>
Be	1s	BeMoO4	113.70	<a href="#">Click</a>
Be	1s	BeO	113.70	<a href="#">Click</a>
Be	1s	BeO	113.70	<a href="#">Click</a>
Be	1s	BeO	113.70	<a href="#">Click</a>
Be	1s	BeO	114.00	<a href="#">Click</a>
Be	1s	BeRh2O4	113.80	<a href="#">Click</a>
Be	1s	Na2BeF4	114.70	<a href="#">Click</a>
Be	1s	NaBeF3	115.30	<a href="#">Click</a>
Cl	2p	((-CSeC(CH3)C(CH3)Se-)2)2ClO4	207.39	<a href="#">Click</a>
Cl	2p	(C34H20N4O(ClO4)3.4.8.4H2O)n	207.60	<a href="#">Click</a>
Cl	2n	(C8H12)RhCl2Rh(C8H12)	198.80	<a href="#">Click</a>

#### 5. ábra Összefoglaló táblázat egy keresés eredményeiről (NIST 3.5)

A táblázat minden egyes sora csak az adott mérés a legfontosabb információit tartalmazza, valamint egy linket, ami a mérés részletes leírását tartalmazó oldalra mutat. Ezen

az oldalon az adott mérésre vonatkozó összes olyan információt láthatjuk, amely az adatbázisban le van tárolva.

<b>General:</b>	
Element:	Ga
Formula:	GaAs
XPS Formula:	
Name:	gallium arsenide
CAS Registry No:	1303-00-0
Classes:	arsenide, III-V semiconductor
<b>Citation:</b>	
Author Name(s):	Esser N., Zahn D.R.T., Muller C., Richter W., Stephens C., Whittle R., et al.
Journal:	Appl. Surf. Sci. 56, 169 (1992)
<b>Data Processing:</b>	
Data Type:	Surface Core-level Shift
Line Designation:	SS-3d
Quality of Data:	Good
Core-Level Shift (eV)	0.27
Energy Uncertainty:	
Background Subtraction Method:	other
Peak Location Method:	mixed Gaussian/Lorentzian
Full Width at Half-maximum	
Intensity (eV):	
Gaussian Width (eV):	0.23-0.35
Lorentzian Width (eV):	0.19

6. ábra Egy keresési találat részletes leírása (részlet, NIST 3.5)

### 2.2.3.2. Egy adott elemre vonatkozó mérések lekérdezése

Ezen keresési lehetőség esetén első lépésben meg kell határoznunk milyen típusú mérésekre vagyunk kíváncsiak. Második lépésben egy periódusos rendszerből ki kell választani a számunkra érdekes elemet. Minden egyes elem különböző elektronhéjaihoz különböző spektrális vonalak tartoznak. Utolsó lépésként ki kell választanunk mely héjra vonatkozó spektrális vonalakra vagyunk kíváncsiak. Eredményül a már említett összesítő táblázatot kapjuk.

- Retrieve data for a selected element.

Step 1. Choose type of data:

- Binding Energy
- Auger Kinetic Energy
- Auger Parameter
- Doublet Separation
- Surface/Interface Core-Level Shift
- Chemical Shift:

**Go to Step 2**

Step 2. Select an element for binding energy:

IA	IIA	IIIB	IVB	VB	VIB	VIIA	VIII	IB	IIB	IIIA	IVA	VA	VIA	VIIA	VIIIA		
<sup>1</sup> H															<sup>2</sup> He		
<sup>3</sup> Li	<sup>4</sup> Be									<sup>5</sup> B	<sup>6</sup> C	<sup>7</sup> N	<sup>8</sup> O	<sup>9</sup> F	<sup>10</sup> Ne		
<sup>11</sup> Na	<sup>12</sup> Mg									<sup>13</sup> Al	<sup>14</sup> Si	<sup>15</sup> P	<sup>16</sup> S	<sup>17</sup> Cl	<sup>18</sup> Ar		
<sup>19</sup> K	<sup>20</sup> Ca	<sup>21</sup> Sc	<sup>22</sup> Ti	<sup>23</sup> V	<sup>24</sup> Cr	<sup>25</sup> Mn	<sup>26</sup> Fe	<sup>27</sup> Co	<sup>28</sup> Ni	<sup>29</sup> Cu	<sup>30</sup> Zn	<sup>31</sup> Ga	<sup>32</sup> Ge	<sup>33</sup> As	<sup>34</sup> Se	<sup>35</sup> Br	<sup>36</sup> Kr
<sup>37</sup> Rb	<sup>38</sup> Sr	<sup>39</sup> Y	<sup>40</sup> Zr	<sup>41</sup> Nb	<sup>42</sup> Mo	<sup>43</sup> Tc	<sup>44</sup> Ru	<sup>45</sup> Rh	<sup>46</sup> Pd	<sup>47</sup> Ag	<sup>48</sup> Cd	<sup>49</sup> In	<sup>50</sup> Sn	<sup>51</sup> Sb	<sup>52</sup> Te	<sup>53</sup> I	<sup>54</sup> Xe
<sup>55</sup> Cs	<sup>56</sup> Ba	<sup>57</sup> La	<sup>72</sup> Hf	<sup>73</sup> Ta	<sup>74</sup> W	<sup>75</sup> Re	<sup>76</sup> Os	<sup>77</sup> Ir	<sup>78</sup> Pt	<sup>79</sup> Au	<sup>80</sup> Hg	<sup>81</sup> Tl	<sup>82</sup> Pb	<sup>83</sup> Bi	<sup>84</sup> Po	<sup>85</sup> At	<sup>86</sup> Rn
<sup>87</sup> Fr	<sup>88</sup> Ra	<sup>89</sup> Ac	<sup>104</sup> Rf	<sup>105</sup> Db	<sup>106</sup> Sg	<sup>107</sup> Bh	<sup>108</sup> Hs	<sup>109</sup> Mt									
lanthanides			<sup>58</sup> Ce	<sup>59</sup> Pr	<sup>60</sup> Nd	<sup>61</sup> Pm	<sup>62</sup> Sm	<sup>63</sup> Eu	<sup>64</sup> Gd	<sup>65</sup> Tb	<sup>66</sup> Dy	<sup>67</sup> Ho	<sup>68</sup> Er	<sup>69</sup> Tm	<sup>70</sup> Yb	<sup>71</sup> Lu	
actinides			<sup>90</sup> Th	<sup>91</sup> Pa	<sup>92</sup> U	<sup>93</sup> Np	<sup>94</sup> Pu	<sup>95</sup> Am	<sup>96</sup> Cm	<sup>97</sup> Bk	<sup>98</sup> Cf	<sup>99</sup> Es	<sup>100</sup> Fm	<sup>101</sup> Md	<sup>102</sup> No	<sup>103</sup> Lr	

7. ábra Adott elemhez tartozó mérések lekérdezése (NIST 3.5)

### 2.2.3.3. Több elemre vonatkozó mérések együttes lekérdezése.

Első lépésben itt is meg kell határoznunk milyen típusú mérésekre vagyunk kíváncsiak. Ezután megadhatunk maximum négy elemnév-elektronháj párt. Eredményül az ezekhez tartozó méréseket kapjuk az összesítő táblázatban.

8. ábra Energiaértékek lekérdezése elem-vegyértékháj párok függvényében (NIST 3.5)

### 2.2.3.4. Vegyületekre vonatkozó mérési eredmények keresése a vegyületekben levő elemek alapján

Ezen keresési lehetőség esetén, sorban megadhatjuk a vegyületet alkotó elemeket, majd kiválaszthatjuk, hogy a keresés során a kiválasztott elemeken kívül más elem is szerepelhet-e a vegyületben vagy sem.

The screenshot shows a web interface for searching by element composition. On the left is a navigation menu with links: XPS Home, Introduction, Search Menu, Data Field, Definitions, Version History, Disclaimer, Acknowledgments, Contact, Information, and FAQs. The main content area is titled "Search by element composition:" and contains two sections: "a. Enter element list (Up to 9):" with four dropdown menus (Ba, C, He, Element) and "b. Select the option for search:" with two radio buttons: "Search for specified elements only (faster option)" (selected) and "Search for specified elements plus any other". A "Search" button is below. At the bottom, it says "XPS Home > Retrieve Data for Selected Compounds > Selected Groups of Elements" and "Last updated: May 1, 2007 (Created: May 1, 2007)".

9. ábra Vegyületekre vonatkozó keresés (NIST 3.5)

### 2.2.3.5. Keresés publikáció alapján

Lehetőségünk van szerzők, folyóirat, illetve kiadás éve szerint keresni az adatbázisban, ekkor eredményül a feltételeknek megfelelő publikációk kerülnek kilistázásra, így megtekinthetjük az egyes publikációkban szereplő méréseket.

The screenshot shows a web interface for searching by scientific citation. On the left is the same navigation menu as in the previous screenshot. The main content area is titled "Scientific Citation Search:" and contains a form with "Author:" and "Year:" fields (Year is set to 1986), and a "Journal:" field (Solid State Commun.). A "Search" button is below. Below the form, it says "Scientific citation from substring search of: 1986+Solid State Commun." and displays a table of results:

Publication Year	Author's Name	Reference
1986	Humbert P.	<a href="#">Humb86</a>
1986	Peto G., Zsoldos E.	<a href="#">PeZs86</a>

Below the table, it says "XPS Home > Retrieve Data by Scientific Citation" and "Instructions:" with a list of instructions: "Enter author name if desired.", "Select publication year if desired.", "Select scientific journal if desired.", and "If nothing is selected or entered, all the scientific citations will be returned." At the bottom, it says "Last updated: May 1, 2007 (Created: May 1, 2007)".

10. ábra Mérések keresése publikáció alapján (NIST 3.5)

### **2.3. NIST XPS 4.0**

A NIST rendszerének legújabb verziója már több mint 29000 adatrekordot tartalmaz, amelyek szintén tudományos cikkekből lettek összegyűjtve és már a legfrissebb mérési eredményeket is tartalmazza. Ez a rendszer azonban nem ingyenes, az adatok eléréséhez éves előfizetés szükséges.

### 3. A saját fejlesztés

A mi célunk egy olyan ingyenesen elérhető, nyílt forráskódú program elkészítése volt, ami segítségével egy XPS folyamat végén kapott spektrum adataiból könnyebben meg tudjuk határozni, hogy milyen elemeket tartalmaz a minta. Beszámolunk az általunk létrehozott adatbázisról, a fejlesztett web-alkalmazásról, valamint egy C nyelven létrehozott függvénykönyvtárról, amivel bárki a saját programjából hajthat végre lekérdezéseket az adatbázison.

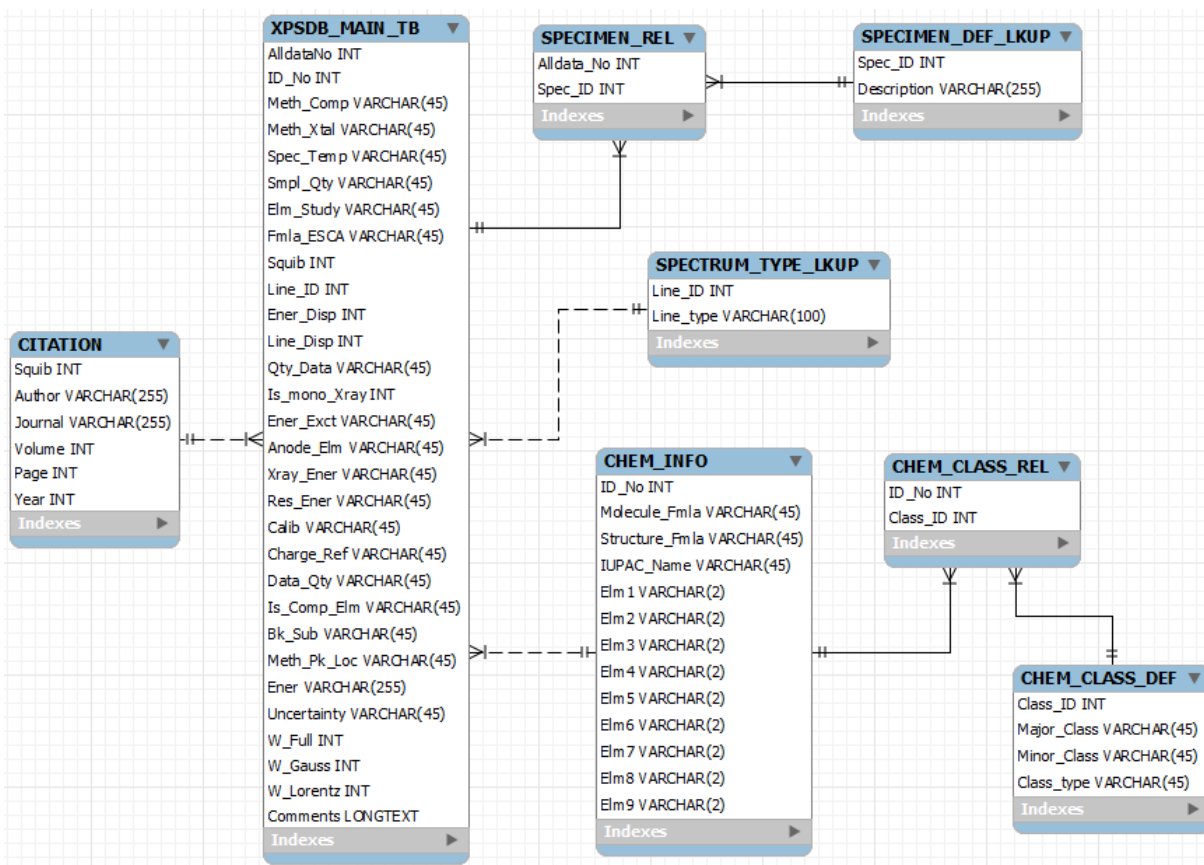
Rendszerünk készítése során a XAMPP 1.6.7 verziószámú programcsomagot használtuk, mely tartalmazza az Apache webservert, valamint egy MySQL adatbázisszervert.

#### 3.1. Adatbázis

Az adatbázis létrehozásakor a fentebb már ismertetett, DEVELOPMENT OF THE WEB-BASED NIST X-RAY PHOTOELECTRON SPECTROSCOPY (XPS) DATABASE cikkben szereplő adatbázissémát vettük alapul, azonban egy kisebb változtatást hajtottunk végre rajta, valamint az adatbázis egy részét nem használtuk ki. Az említett változtatás hogy a CITATION táblában a *Journal* mező értékét 3 részre bontottuk:

- *Journal*,
- *Page*,
- *Volume*.

Az adatbázis *RECOM\_PRINC\_LINE*, *ELEMENT\_LKUP*, *DATA\_SOURCE\_LKUP* valamint az *ELM\_LINEFMTS* nevű táblái nem kerültek felhasználásra. Az általunk használt adatbázis sémája tehát a következő:



11. ábra Az általunk létrehozott adatbázisséma

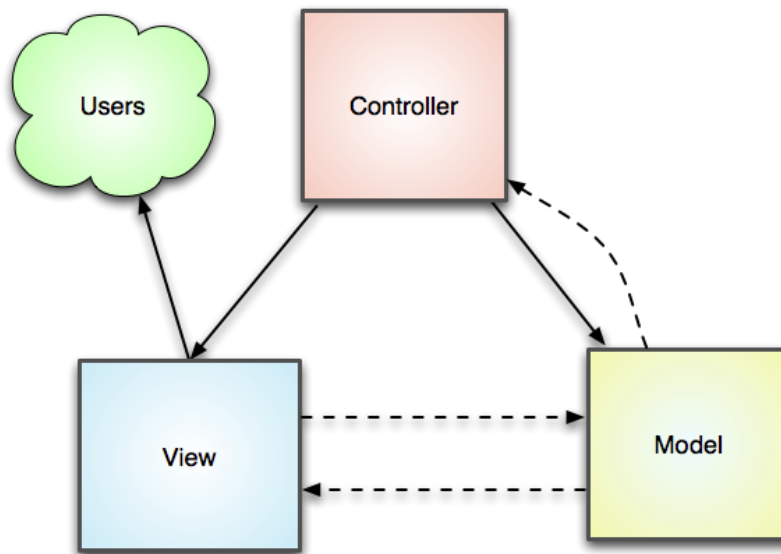
Meg kell jegyezni, hogy az egyes adatmezők méretét a NIST ingyenes adatbázisában szereplő néhány adat ismeretében állítottuk be.

Az adatbázis tervezése során a MySQL Workbench nevű programot használtuk, az adatbázist pedig egy MySQL szerverre telepítettük.

### 3.2. Technológiai háttér

Saját rendszerünk fejlesztése során a Zend Framework nevű keretrendszert használtuk, ami egy nyílt forráskódú, objektum orientált keretrendszer a PHP 5 nyelvhez. A Zend nem csupán egy lazán kapcsolt komponens gyűjtemény, több annál. Ugyan rengeteg függvényt illetve eljárást tartalmaz, amik többé-kevésbé egymástól függetlenül használhatók, azonban megvalósít egy fejlett Model-View-Controller (MVC) tervezési mintát is, ami egy modern web-alkalmazás felépítésénél egy alapvető irányelv. Az MVC alkalmas arra, hogy egy web-alkalmazás készítése során szétválasszuk a felhasználói felületet, az üzleti logikát, és az adatokat. Így maga a rendszer átláthatóbbá válik, a fejlesztés során a munka több kisebb

részre oszlik, egy későbbi frissítés, változtatás során az adatok egyszerűen átszervezhetők a felhasználói felület változtatása nélkül.<sup>[4]</sup>



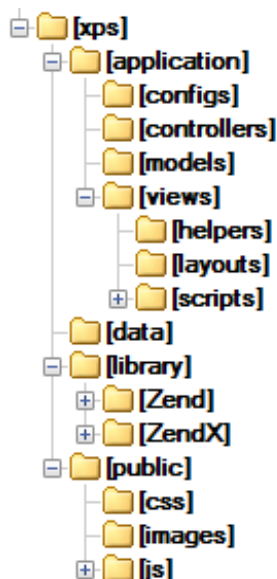
**12. ábra** Az MVC rétegek rétegek kapcsolata

- Model: az alkalmazás által kezelt adatok, információk absztrakt ábrázolása. Ez a réteg jelentéssel ruházza fel a puszta adatot.
- View: a model adatainak megjelenítésére szolgál, valamint arra, hogy adatokat gyűjtsön a felhasználótól. Segítségével különböző platformokhoz készíthetünk felhasználói felületeket (például mobiltelefon, PDA).
- Controller: a model és a view összekapcsolását biztosítja, a felhasználó által bevitt adatokat ellenőrzi, feldolgozza, továbbítja a model-nek, esetleg más controller-nek adja át a vezérlést.

Fontos megjegyezni, hogy az MVC csak egy ajánlás, betartása nem kötelező, egy Zend-es alkalmazás készítése során a programozó maga dönti el, hogy mennyire használja ki az MVC lehetőségeit. Rendszerünk készítése során mi igyekeztünk ezeket kihasználni.

### 3.3. A rendszerünk felépítése

Rendszerünket a Zend Framework által javasolt könyvtárstruktúrának megfelelően hoztuk létre, ami a következőképpen néz ki:



**13. ábra Könyvtárstruktúra**

Az alkalmazás gyökere az *xps* könyvtár. Ebben található az *application*, a *library* valamint a *public* mappa.

Az *application* mappa tartalmazza az alkalmazás kódjait. Ide kerül a *Bootstrap.php* nevű fájl, mely a *Zend\_Application\_Bootstrap\_Bootstrap* osztályból származtatott *Bootstrap* osztályt tartalmazza. Ezen osztály inicializálja a használni kívánt erőforrásokat és komponenseket. A *configs* mappában található az *application.ini* fájl, mely az alkalmazás globális paramétereit állítja be. Ilyen beállítások például, hogy az egyes hibák megjelenjenek-e, az adatbázis-kapcsolat paramétereit, és a rendszer egyes komponensinek a helye.

A következő három mappa nevéből adódóan is látszik az MVC megvalósítása. A *models* mappa az adatbázis egyes tábláihoz tartozó tábla-, illetve sorosztályokat tartalmazza, például az *XPSDB\_MAIN\_TB* tábla esetén egy *XpsdbMainTbs.php* és egy *XpsdbMainTb.php* fájl. A táblaosztály a *Zend\_Db\_Table\_Abstract* osztály leszármazottja. Tartalmazza az adatbázistábla nevét, elsődleges kulcsainak neveit, a hozzá tartozó sorosztály nevét, valamint azt, hogy mely táblaosztályok vannak vele szülő illetve gyermek viszonyban. Ezek az információkon kívül itt definiálunk még különböző függvényeket is, melyek az adatbázis adatainak a kezelésére szolgálnak, például új rekordokat vesznek fel az adatbázisba, valamilyen keresési funkciót látnak el, vagy az adatbázisban levő rekordok tartalmát összegzik és azok alapján valamilyen új információt szolgáltatnak. A sorosztály a *Zend\_Db\_Table\_Row\_Abstract* osztály leszármaztatásával jön létre, tartalmát tekintve olyan

függvényeket tartalmaz, melyek az adatbázistábla egy rekordján operálnak, megváltoztatják, lekérdezik egyes mezőinek az értékét, esetleg ezek alapján valamilyen egyéb, új információt állítanak elő. Az *XPSDB\_MAIN\_TB* tábla esetén a hozzá tartozó táblaosztály és sorosztály például a következőképpen néz ki:

*XpsdbMainTbs.php*:

```
<?php
class XpsdbMainTbs extends Zend_Db_Table_Abstract
{
    protected $_name = 'xpsdb_main_tb';
    protected $_primary = 'AlldataNo';
    protected $_rowClass = 'XpsdbMainTb';
    protected $_dependentTables = array('SpecimenRels');
    protected $_referenceMap = array(
        'citation' => array(
            'columns' => array('Squib'),
            'refTableClass' => 'Citations',
            'refColumns' => array('Squib')
        ),
        'spectrum_type_lkup' => array(
            'columns' => array('Line_ID'),
            'refTableClass' => 'SpectrumTypeLkups',
            'refColumns' => array('Line_ID')
        ),
        'chem_info' => array(
            'columns' => array('ID_No'),
            'refTableClass' => 'ChemInfos',
            'refColumns' => array('ID_No')
        )
    );
    // a teljes tábla kezelésére szolgáló függvények
}
```

*XpsdbMainTbs.php*:

```
<?php
class XpsdbMainTb extends Zend_Db_Table_Row_Abstract {
    // az egy sor kezelésére használtfüggvények helye
}
```

Lehetőség van még a felsorolt két osztálytípus mellett úgynevezett rowset típusú osztályok definiálására is, melyeket a `Zend_Db_Table_Rowset_Abstract` osztályból származtatunk, azonban ezek létrehozása az esetek többségében felesleges. A mi rendszerünk esetén ilyen osztályok nem kerültek létrehozásra.

A *controllers* mappa által tartalmazott fájlok nevei mindig a Controller szóra végződnek és php kiterjesztésűek. Minden ilyen fájl egyetlen osztályt tartalmaz, mely a `Zend_Controller_Action` osztály leszármazottja. Egy Controller osztály különböző metódusokat tartalmazhat, melyek nevei az Action szóra végződnek, a böngészőnkkel mindig egy ilyen action-re hívathozunk. Alapértelmezés szerint a Zend-es URL címek a `/controller/action` sémát követik, ahol a controller az adott Controller osztály neve mínusz a Controller szó, az action pedig a Controller osztály egy metódusának a neve mínusz az Action szó. Minden Zend-es alkalmazás esetén szükség van egy `IndexController` osztályra, ami a rendszer kezdőlapjához tartozó Controller, és egy `ErrorController`-re, ami a fellépő hibákat kezeli, mint például, ha egy controller vagy egy action nem található, vagy valamilyen futtatási hiba következik be.

A *views* mappa tartalmát tekintve további három mappára bomlik. A *helpers* mappa a saját view-helperek definiálásának helye, a *layouts* mappában pedig általános layout-ok definiálására van lehetőségünk. Azonban ezen két mappa tartalmával most nem foglalkozunk bővebben, ugyanis diplomamunkánk során nem használtuk ki ezen lehetőségeket. A harmadik, *scripts* mappa tartalmai újabb mappák, melyek nevei megegyeznek az egyes Controller-ek neveivel (mínusz a Controller szó), ezen almappákban levő fájlok pedig a megfelelő Controller egyes Action-jeinek a párjai, nevük a megegyezik a megfelelő Action nevével(mínusz az Action szó), kiterjesztésük `phtml`. Például az `IndexController` `indexAction()` metódusához tartozó view-script fájl a `../../views/scripts/index/index.phtml` fájl. Ezek a fájlok valójában hagyományos php scripteket tartalmazó HTML fájloknak tekinthetők.

Visszatérve a gyöker mappába találjuk a *library* mappát. Ez nem más, mint a Zend Framework osztályait tartalmazó könyvtár, az ezen belüli könyvtárszerkezet megfelel a Zend osztályhierarchiájának.

A *public* mappába kerülnek a css állományok, képek, javascript fájlok, valamint erre a mappára érdemes állítani a szerverünk document root-ját. Ebben az esetben a szerver ebben a mappában fogja keresni az *index.php* vagy az *index.html* állományt, ami esetünkben a Zend Framework-ös rendszerünk inicializálását hajtja végre.

### **3.4. A rendszerünk bemutatása**

Web-alkalmazásunk tervezésénél az elsődleges szempont a NIST által készített rendszer funkcionalitásának reprodukálása, kibővítése volt. Összesen négy Controller osztályt használtunk munkánk során. Az IndexController egyetlen indexAction-t tartalmaz, mely lényegében egy linkgyűjtemény az általunk létrehozott funkciók elérésére. Az ErrorController valamint a hozzá tartozó errorAction() teljesen megegyezik a Zend Framework által alapértelmezésben generált ErrorController-el. Ezekon kívül még két Controller osztályt hoztunk létre, az első a SearchController, ami működését tekintve a NIST-es rendszer funkcionalitását valósítja meg, a második pedig a ChangeController, ami az adatbázis bővítésére szolgáló action-t tartalmazza. Ezen utóbbi két Controller action-jeit fogjuk a következőkben részletezni.

### **3.5. Keresés az adatbázisban**

#### **3.5.1. Spektrális vonalak azonosítása**

Ezen funkcionalitás megvalósítására szolgál az `energytypevalAction()` metódus. A NIST web-alkalmazásához hasonlóan itt is négy adattípust, energiaszintet és bizonytalanságszintet lehet megadni keresési feltételként. Maga a metódus nem tartalmaz kódot, a hozzá tartozó viewscript is pusztán csak HTML elemekből épül fel.

Select energy type:	Choose Energy Type	<b>For Information Only</b> Valid energy ranges (eV): Binding energy: 7.2 - 3939.9. Auger kinetic energy: 20.2 - 4002. Auger Parameter: 36.5 - 5206. Doublet separation energy: 0.105 - 126.6.  If an uncertainty associated with input energy is not entered, the default value of 1.0 will be used.
Input an energy:	<input type="text"/> +- 1.0	
Select energy type:	Choose Energy Type	
Input an energy:	<input type="text"/> +- 1.0	
Select energy type:	Choose Energy Type	
Input an energy:	<input type="text"/> +- 1.0	
Select energy type:	Choose Energy Type	
Input an energy:	<input type="text"/> +- 1.0	

14. ábra Spektrális vonalak beazonosítása mért energiaértékek alapján

### 3.5.2. Publikáció keresése

A `citationAction()` lehetővé teszi, hogy publikáció alapján keressünk az adatbázisban. Keresési paraméterként megadhatjuk a szerző nevét, akinek a publikációira kíváncsiak vagyunk, a kiadás évét, valamint a folyóirat nevét, melyben a tudományos publikációt keressük. Az évszám, valamint a folyóirat bevitelére szolgáló beviteli mező lehetséges értékei az adatbázis alapján kerülnek meghatározásra.

Scientific Citation Search:

Author:  Year: 1990

Journal: Surf. Interface Anal.

Show 10 entries

Search:

Publication Year	Author's Name	Reference
1990	Turner N.H., Single A.M.	<a href="#">Click</a>
1990	Seah M.P., Smith G.C., Anthony M.T.	<a href="#">Click</a>

Showing 1 to 2 of 2 entries

15. ábra Mérések keresése publikáció alapján

A keresés gombra kattintva megjelenik a keresés eredményét tartalmazó táblázat, évszám és szerző szerinti csoportosításban. A táblázatot a felsorolt tulajdonságok szerint rendezhetjük, kereshetünk benne, illetve beállíthatjuk hány sort jelenítsen meg egyszerre, kiválaszthatjuk, hogy hányadik oldalát szeretnénk megtekinteni. A táblázat harmadik

oszlopában pedig egy linket találunk, ami az adott publikációban szereplő méréseket összegző oldalra mutat. Amennyiben nem található a keresési paramétereknek megfelelő publikáció az adatbázisban, üres táblázat jelenik meg.

### 3.5.3. Egy adott elemre vonatkozó mérések lekérdezése

Egyetlen elemre vonatkozó összes mérési eredményt kérdezhetjük le az `elementselectAction()` segítségével. Első lépésként ki kell választanunk, hogy milyen típusú adatokat szeretnénk lekérdezni, majd a Select gombra kattintva a lap alján található periódusos rendszerben linkre változnak azok az elemek, melyekre létezik az adatbázisban megfelelő típusú mérési eredmény. Ezután a kívánt elemre kattintva, az összes erre az elemre vonatkozó mérési eredményt kilistázza a rendszer egy új lapon.

Choose type of data:

- Binding Energy
- Auger Kinetic Energy
- Auger Parameter
- Doublet Separation
- Surface/Interface Core-Level Shift
- Chemical Shift:

Select

IA	IIA	IIIB	IVB	VB	VIB	VIIIB	VIII	IB	IIB	IIIA	IVA	VA	VIA	VIIA	VIIIA		
<sup>1</sup> H															<sup>2</sup> He		
<sup>3</sup> Li	<sup>4</sup> Be					Metals Transition metals				<sup>5</sup> B	<sup>6</sup> C	<sup>7</sup> N	<sup>8</sup> O	<sup>9</sup> F	<sup>10</sup> Ne		
<sup>11</sup> Na	<sup>12</sup> Mg					Metalloids Nonmetals				<sup>13</sup> Al	<sup>14</sup> Si	<sup>15</sup> P	<sup>16</sup> S	<sup>17</sup> Cl	<sup>18</sup> Ar		
<sup>19</sup> K	<sup>20</sup> Ca	<sup>21</sup> Sc	<sup>22</sup> Ti	<sup>23</sup> V	<sup>24</sup> Cr	<sup>25</sup> Mn	<sup>26</sup> Fe	<sup>27</sup> Co	<sup>28</sup> Ni	<sup>29</sup> Cu	<sup>30</sup> Zn	<sup>31</sup> Ga	<sup>32</sup> Ge	<sup>33</sup> As	<sup>34</sup> Se	<sup>35</sup> Br	<sup>36</sup> Kr
<sup>37</sup> Rb	<sup>38</sup> Sr	<sup>39</sup> Y	<sup>40</sup> Zr	<sup>41</sup> Nb	<sup>42</sup> Mo	<sup>43</sup> Tc	<sup>44</sup> Ru	<sup>45</sup> Rh	<sup>46</sup> Pd	<sup>47</sup> Ag	<sup>48</sup> Cd	<sup>49</sup> In	<sup>50</sup> Sn	<sup>51</sup> Sb	<sup>52</sup> Te	<sup>53</sup> I	<sup>54</sup> Xe
<sup>55</sup> Cs	<sup>56</sup> Ba	<sup>57</sup> La	<sup>72</sup> Hf	<sup>73</sup> Ta	<sup>74</sup> W	<sup>75</sup> Re	<sup>76</sup> Os	<sup>77</sup> Ir	<sup>78</sup> Pt	<sup>79</sup> Au	<sup>80</sup> Hg	<sup>81</sup> Tl	<sup>82</sup> Pb	<sup>83</sup> Bi	<sup>84</sup> Po	<sup>85</sup> At	<sup>86</sup> Rn
<sup>87</sup> Fr	<sup>88</sup> Ra	<sup>89</sup> Ac	<sup>104</sup> Rf	<sup>105</sup> Db	<sup>106</sup> Sg	<sup>107</sup> Bh	<sup>108</sup> Hs	<sup>109</sup> Mt									
lanthanides			<sup>58</sup> Ce	<sup>59</sup> Pr	<sup>60</sup> Nd	<sup>61</sup> Pm	<sup>62</sup> Sm	<sup>63</sup> Eu	<sup>64</sup> Gd	<sup>65</sup> Tb	<sup>66</sup> Dy	<sup>67</sup> Ho	<sup>68</sup> Er	<sup>69</sup> Tm	<sup>70</sup> Yb	<sup>71</sup> Lu	
actinides			<sup>90</sup> Th	<sup>91</sup> Pa	<sup>92</sup> U	<sup>93</sup> Np	<sup>94</sup> Pu	<sup>95</sup> Am	<sup>96</sup> Cm	<sup>97</sup> Bk	<sup>98</sup> Cf	<sup>99</sup> Es	<sup>100</sup> Fm	<sup>101</sup> Md	<sup>102</sup> No	<sup>103</sup> Lr	

16. ábra Adott elemhez tartozó mérések lekérdezése

### 3.5.4. Több elemre vonatkozó mérések lekérdezése

A `moreelementsselectstep1Action()` és a `moreelementsselectstep2Action()` annak a funkciónak a két egymást követő lépése, amikor több elemre vonatkozóan vagyunk kíváncsiak az adatbázis tartalmára. Első lépésben ki kell választanunk a mérési adatok típusát:

Choose Data Type:

- Binding Energy
- Auger Kinetic Energy
- Auger Parameter
- Doublet Separation
- Surface/Interface Core-Level Shift
- Chemical Shift

17. ábra Energiatípus kiválasztása, az elem-vegyértékhéj párok megadása előtt

Ezután a második lépésben választhatjuk ki azt a maximum négy elem-vegyértékhéj párt, amire kíváncsiak vagyunk. Először egy legördülő listából ki kell választani a keresni kívánt elemet. Ennek lehetséges értékei az adatbázisban szereplő mérések alapján állítódnak be. Ezután megjelenik egy multiselect lista, melyet egy AJAX-os kéréssel töltünk fel olyan elektronhéjakkal, melyek a kiválasztott elemmel egy rekordban szerepelnek az adatbázisban. Ebből a listából kiválaszthatjuk, hogy a kiválasztott elem mely vegyértékhéjaira vonatkozó mérésekre vagyunk kíváncsiak. A Select gombra kattintva rögzítődnek a keresési feltételek a jobb oldali mezőkben. Ezen mezők értékei csak az ismertetett módon állíthatók be, egyéb módon nem. Az eddig említett funkciók mind javascript-el lettek megvalósítva, ezért nem igénylik a böngészőben a lap frissítését. A Search gombra kattintva a böngésző egy új lapra irányít, ahol megtekinthetők a keresési eredmények.

Select an element:

or

or

or

18. ábra Energiaértékek lekérdezése elem-vegyértékháj párok függvényében

### 3.5.5. Egy elemre vonatkozó mérésekben szereplő vegyértékhéjak lekérdezése

Az előző action-ben ismertetett AJAX-os kérés során a `findlinedesignationsAction()` szolgáltatja a megfelelő vegyértékhéjakat eredményül a hívó számára. Ehhez az action-höz nem tartozik view-script, két paramétert kap, az adat típusát és az elem nevét, eredményét pedig HTML formában adja vissza egy echo függvény segítségével.

### 3.5.6. Keresések eredményének megjelenítése

Az eddig ismertetett keresések mindegyike egy új lapra irányítja a böngészőt, ami a keresés eredményét listázza ki. Ezen eredmények keresését, kiírását a `resultAction()` metódus valósítja meg. Az eredmények listájának megjelenítése minden keresési típus esetén teljesen azonos, tehát egyetlen táblázat elegendő a megjelenítésükre. A táblázat öt oszlopot tartalmaz, melyek rendre a következők: az elem neve, a spektrális vonal jelölése, a vegyület molekuláris formulája, a mérésben szereplő energia érték, valamint egy link, melynek segítségével a kiválasztott mérés részletes adatait, körülményeit tekinthetjük meg. A táblázat, ami egyébként egy jQuery-s táblázat, természetesen rendezhető bármely oszlopa szerint, lehet benne keresni, beállítható az egyszerre megjelenítendő sorok száma, és lapozhatunk az egyes oldalak között.

Show  entries Search:

Element ▲	Spectral Line ◆	Formula ◆	Energy(eV) ◆	Details ◆
Be	1s	Be	111.3	<a href="#">Click</a>
Be	1s	Be	111.6	<a href="#">Click</a>
Be	1s	Be	111.8	<a href="#">Click</a>
Be	1s	BeF2	116.1	<a href="#">Click</a>
Be	1s	BeF2	115.3	<a href="#">Click</a>
Element	Spectral Line	Formula	Energy(eV)	Details

Showing 1 to 5 of 5 entries

### 19. ábra Összefoglaló táblázat egy keresés eredményeiről

A kereséseket tekintve azonban már korántsem ilyen egyszerű a helyzet, ugyanis minden keresés más és más módszert igényel az adatok adatbázisból való kinyerésére. Éppen ezért minden egyes keresési típus esetén más-más paramétereket kap az action. Ezen paraméterek vizsgálatával egyértelműsíteni kell, hogy milyen lekérdezést kell végrehajtani, ezért a `resultAction()` metódus első lépésben kiválasztja a megfelelő keresési módszert, majd ennek megfelelően hajtja végre a lekérdezéseket az adatbázison. Amennyiben nincs az adatbázisban a keresésnek megfelelő rekord, üres táblázat jelenik meg.

### 3.5.7. Egy mérés részleteinek megjelenítése

Az egyes mérések részletes adatainak megjelenítésére a `detailsAction()` metódus szolgál. Paraméterül kapja a megjeleníteni kívánt mérés azonosítóját, ez alapján végrehajtja az adatbázis-lekérdezést, és a felhasználó számára a lekérdezést eredményét táblázatos formában jeleníti meg. Ez a táblázat minden információt tartalmaz az adott méréssel kapcsolatban, a mintára vonatkozó különböző kémiai információkat, a publikáció részleteit, a mérés eredményét, körülményeit, a minta hőmérsékletére, halmazállapotára vonatkozó információkat valamint a méréshez írt egyéb megjegyzéseket.

### 3.5.8. Új adat felvétele az adatbázisba

Az adatbázis bővíthetősége egy olyan funkció, amit a NIST-es rendszer létrehozásakor nem valósítottak meg olyan módon, hogy azt bárki megtehesse. További probléma, hogy az újabb, friss mérési adatok nem érhetőek el ingyenesen. Ezért felmerült az igény az adatbázis bővíthetőségére. Erre a problémára hoztuk létre mintegy megoldásként a ChangeController

`editAction()` metódusát, ami úgy készült el, hogy nem csak új adat bevitelére alkalmas, hanem egy korábban bevitt esetleg pontatlan vagy hiányos mérés is javítható a segítségével.

Az `action` egy táblázatos formában kéri be a felhasználótól a mérési adatokat, melynek az egyes részei megegyeznek a részletek megjelenítésénél ismerttetett információkkal. A rendszer a bekért információkat a `Save` gomb megnyomása után feltölti az adatbázis megfelelő tábláiba.

Amennyiben az `action` paraméterként megkapja egy mérés azonosítóját, annak adataival előre kitölti a beviteli mezőket. Ebben az esetben továbbra is bármely mező módosítható, a `Save` gomb megnyomásával a módosítások menthetők az adatbázisba.

## 3.6. C API

Ebben a fejezetben az általunk írt C nyelvű függvénykönyvtárról szeretnénk beszámolni. Ismertetjük a megoldandó feladatot és röviden a megoldásunkat, azt, hogy milyen problémák merültek fel a fejlesztés során, és azt, hogy pontosan hogyan használhatók az elérhető funkciók.

Az adatbázisunk elérhető, lekérdezhető böngésző segítségével, de igény volt arra is, hogy emberi interakció nélkül, külső programok is lekérdezéseket hajthassanak végre az adatbázison. Az is igény volt, hogy C nyelven biztosítsuk ezt a lehetőséget. Az adatbáziskezelő rendszerünk MYSQL. A MYSQL rendelkezik egy C API-val (`mysql.h`). Ezt kellett tanulmányoznunk és felhasználni ahhoz, hogy egy függvénykönyvtárból (`xps.h`) ugyanúgy elérhető legyen az interneten lévő adatbázis, mint a böngészőből.

Az függvénykönyvtárat linux Operációs rendszer alatt fejlesztettük, és a következő módon fordítottuk le:

```
gcc -o output-file $(mysql_config --cflags)
mysql-c-api.c $(mysql_config --libs)
```

[5]

A következőkben általunk létrehozott eljárásokat, függvényeket mutatunk be, amelyek az általunk létrehozott `xps.h` függvénykönyvtárban vannak implementálva, és amelyeket a felhasználó programoknak közvetlenül használni kell az XPS adatbázis használata során.

```
void connect_to_xps_database(
    char *server, char *user,
    char *password, char *database
)
```

Először csatlakozni kell az XPS adatbázishoz. Ezt a `connect_to_xps_database` eljárással tehetjük meg. Paraméterül meg kell adni a MySQL szerveret futtató gép nevét vagy IP címét, egy kapcsolatot létesítő MySQL felhasználó azonosítóját, a felhasználó jelszavát, és az adatbázis nevét, amihez csatlakozni akarunk.

Ha hiba történik a csatlakozáskor, akkor hibaüzenetet ír ki a program.

Ha több paramétert akarunk megadni a csatlakodáskor, például port számot, akkor a

mysql\_real\_connect függvényt kell meghívunk (a függvény a mysql.h-ban található).

```
void close_connection()
```

Lezárja az adatbáziskapcsolatot a close\_connection eljárás hívásával.

```
LIST_ELEMENT *select_element_by_linetype_and_elmstudy(  
    char *linetype, char *elmstudy  
)
```

Ezzel a függvénnyel lehet lekérdezni adott elemhez tartozó méréseket energiatípusonként. A függvény két paramétere az energiatípus, és a kémiai elem formulájával megadva.

A függvény visszatérési értéke egy LIST\_ELEMENT\* típusú mutató, amelyet később részletezünk. Ha nincs a lekérdezésnek megfelelő találat az adatbázisban, akkor a függvény NULL értékkel tér vissza.

Most bemutatjuk az XPS\_RECORD, és a LIST\_ELEMENT struktúrákat.

```
typedef struct xps_record  
{  
    char Elm_Study[65], Structure_Fmla[65],  
    Fmla_ESCA[65], IUPAC_Name[65], Cas_No[65],  
    ..., ID_No[65], AlldataNo[65];  
} XPS_RECORD;
```

Az összes lekérdezésben (beleértve a webes felületet is), amikor méréseket kérdezünk le, az eredményül kapott rekordok mindig ugyanazokból a mezőkből állnak (kb. 30 darab mező). Egy ilyen eredményül kapott rekordot realizál az XPS\_RECORD típusú struktúra. A struktúra tagjai (a struktúrában felsorolt változók) tartalmazzák az egyes adatbázisbeli mezőkhöz tartozó értékeket.

```

typedef struct listelement
{
    XPS_RECORD data;
    struct listelement *next;
} LIST_ELEMENT;

```

A lekérdezések eredményeül nyert rekordokat egy listában fűzzük fel. Ezt a lista adatszerkezetet a LIST\_ELEMENT struktúra realizálja, mely egy XPS\_RECORD típusú adattal és egy, a következő listaelemre mutató mutatóval rendelkezik.

### 3.6.1. Példa az xps.h használatára:

```

#include "xps2.h"
int main(int argc, char **argv)
{
    LIST_ELEMENT *proba;
    connect_to_xps_database("192.168.56.1", "admin",
"passw", "xps");
    proba=select_element_by_linetype_and_elmstudy(1,
"Be");
    kiir_list(proba);
    close_connection();
    return 0;
}

```

A kiir\_list(proba) utasítás megjeleníti a lekérdezés eredményeül kapott rekordokat.

A továbbiakban említést teszünk néhány problémáról és azok megoldásáról, amelyekkel fejlesztés során talákoztunk.

### 3.6.2. Lekérdezés MySql C API-val

```

int mysql_query(connection, "SQL lekérdezés")

```

A fenti függvénnyel tudunk lekérdezést végrehajtani. A connection paraméter egy aktív MySQL kapcsolat mutatója. A második paraméterben kell megadnunk SQL nyelven magát a lekérdezést. A függvény nullától eltérő számmal tér vissza hiba esetén.

```
MYSQL_RES * mysql_store_result(connection)
```

Ha a `mysql_query` függvény visszatérési értéke 0, akkor az eredmények a `mysql_store_result` függvénnyel érhetőek el. A függvénynek paraméterül kell adni a `mysql_query`-ben használt, még aktív MySQL kapcsolat mutatóját. A `MYSQL_RES` típus lényegében nem jelent mást, mint null-karakterrel lezárt karaktersorozatok tömbjét. A függvény `NULL` értékkel tér vissza ha nem létezik a keresésnek megfelelő sor vagy ha hiba történt annak elérésekor.

```
MYSQL_ROW mysql_fetch_row(MYSQL_RES *result)
```

Ezzel a függvénnyel tudunk elérni egy rekordot az eredményhalmazból. Visszatérési értéke karaktersorozatok tömbje.

A következő példán keresztül megmutatjuk hogyan hajtunk végre egy lekérdezést, és érhetjük el annak eredményét.

```
...
int state;
MYSQL_RES res;
MYSQL_ROW row;
...
state = mysql_query(conn, "SELECT * FROM TEST");
res = mysql_store_result(conn);
while ( row = mysql_fetch_row(res) )
{
    fprintf(stdout, "%s\n", row[0]);
}
mysql_free_result(res);
...
```

Magyarázat: `row[i]` jelenti az *i*-edik mező értékét a rekordban. Az eredmények feldolgozása után felszabadítható a memória, ezt az utolsó sorban látjuk.

### 3.6.3. Lekérdezés a lekérdezésben

Munkánk során többször kerültünk olyan helyzetbe, amikor egy lekérdezésben egy lekérdezett mező függvényében újabb rekordokat kellett lekérdeznünk. Kézenfekvőnek tűnik az a megoldás, hogy amikor `mysql_fetch_row`-val bejárjuk az eredményhalmazt, akkor a számunkra érdekes mező értékét reprezentáló `row[i]` függvényében egy újabb megfelelő lekérdezést hajtunk végre a `mysql_query` függvénnyel. Ekkor viszont, ha a `mysql_query`-t ugyanazzal az aktív MySQL kapcsolattal felparaméterezve hívjuk meg, a program hibásan fog működni. Ennek a megoldására létre kellett hoznunk egy újabb aktív kapcsolatot a MySQL szerverrel, ugyanazokkal a paraméterekkel, mint ahogy az eredeti kapcsolatot létrehoztuk. A "belső" lekérdezést már ezzel a kapcsolattal kell végrehajtani, és a megfelelő eredményhalmaz feldolgozása után le kell zárnunk a kapcsolatot. Ennek a második kapcsolatnak az elindítása és lezárása a "külső" lekérdezés minden egyes sorának feldolgozásakor megtörténik.

### 3.6.4. Megjegyzés

Diplomamunkánk ideje alatt a függvénykönyvtárba a webes felület "Retrieve data for a selected element" funkcióját implementáltuk. A függvénykönyvtár teljes funkcionalitásának eléréséhez a többi funkció implementálása szükséges.

## 4. Rendszerünk jövője

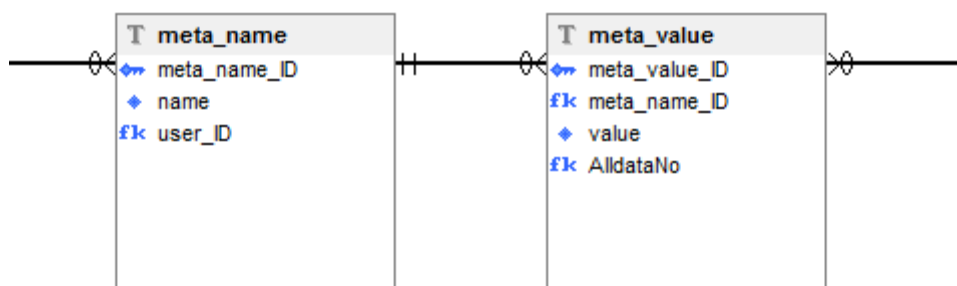
Az alkalmazás amit elkezdünk fejleszteni diplomamunkánk készítése alatt, valójában egy nagyon komplex rendszerré válhat, amelynek teljes megvalósítása nem fér bele egy diplomamunka keretei közé. Ezt a kezdetektől fogva tudtuk. Elkezdtük a rendszer felépítését, és odáig jutottunk, hogy "tudja" azt, amit a kereskedelmi forgalomban kapható változata (NIST XPS) és új funkciókkal is bővítettük. Ebben a részben arról szeretnénk írni, hogy mivé is válhatna alkalmazásunk, milyen igényekkel talákoztunk a felhasználó fizikusok, kémikusok részéről, és milyen elképzeléseink vannak nekünk. A program az ismertetésre kerülő lehetőségeken kívül számos módon továbbfejleszhető.

A következő lehetőségek (kivéve az utolsót) szükségességét, jelentőségét az indokolja, hogy bár rendszerünk használható, helyesen működik, az adatbázis gyakorlatilag üres, csak mintaadatokkal van feltöltve. Bár webes felületen keresztül bővíthető új adatokkal az adatbázis, azonban ez több száz rekord felvitelére nem jó megoldás.

A program felhasználhatóságát jelentősen növelné, ha sikerülne megoldani a NIST 2.0-ás verziójú adatbázisának a migrálását. Így 16000 új rekord kerülne az adatbázisba (egy mai aktuális adatbázis ennek legalább a kétszerese lehet), ami azt jelentené, hogy szinte minden keresésre lenne találat, amelyek ha nem is a legpontosabbak, a kutatók hasznos információkat nyerhetnének ki belőle. Ennek a problémának a megoldásával elkezdtünk foglalkozni, de a rendelkezésre álló idő alatt sajnos nem sikerült befejezni.

Saját ötletünk a felhasználó kezelés. Ez rengeteg lehetőséget hordoz magában. Úgy képzeljük, hogy a rendszert bárki használhatja az interneten keresztül, de a regisztrált felhasználók plusz funkciókat vehetnének igénybe. Ilyen plusz funkció például különböző új adatmezők felvétele az egyes mérési adatokhoz, vagy az adatbázis új rekordokkal történő bővítése olyan módon, hogy ezeket a változtatásokat csak az adott felhasználó láthatja.

Új adatmezőre előfordulhat, hogy valakinek szüksége lesz munkája során, és ezzel a számára szükséges jellemzővel könnyen, egy űrlap segítségével bármikor bővítheti az adatbázist. Ennek az új adatmezőnek a tárolására két külön adatbázistábla szolgálna. Az első csak az adatmezők neveit és a létrehozó személy azonosítóját tartalmazná. Az adatmező értékét valamint azt, hogy melyik mérési eredményhez tartozik a másik tábla tartalmazná.



20. ábra Új adatmezők kezelése a sémában

Az hogy a felhasználó az általa végrehajtott változtatásokat csak ő maga láthassa két okból hasznos. Egyrészt kialakíthat magának egy olyan felületet, amin a saját, munkája során állandóan használt adatokkal dolgozhat, vagyis saját adatokat vihet fel és kiválaszthatja a közös adatokból, hogy melyek azok, amelyek számára fontosak, informatívak. Másrészt azért jó, hogy globálisan nem láthatók a változtatások, vagy láthatóak, de megfelelő figyelmeztetés mellett, mert ekkor még semmi nem garantálja a felvitt adatok helyességét. A helyességet egy validáló modul ellenőrizné, amely két részből állna. Léteznek kémiai algoritmusok, amelyekkel eldönthető adatokról, hogy azok biztosan rosszak-e. Ezeket az algoritmusokat kellene implementálni. Vannak olyan esetek amikor matematikailag nem formalizálható, vagy valószínűleg nem formalizálható az ellenőrzés módja, azonban szakértő megtudja állapítani, hogy a mérés lehet-e helyes vagy sem. Ezért lenne szükség egy olyan protokollra, melynek során az új adatok egy szakértői csoporthoz kerülnének validálásra. Ezt a folyamatot teljesen automatizálhatónak képzeljük. Ha valaki a saját adatait globálisan elérhetővé akarná tenni, akkor a megfelelő felületen kiválaszthatná a megosztani kívánt adatokat és elküldhetné azokat elemzésre. Ezután minden adatra lefutnának az implementált kémiai algoritmusok, és a jóváhagyott adatok automatikusan a validáló csoporthoz kerülnének. Ha ők is jóváhagyják az adatokat, akkor rendszer átállítaná a megfelelő adatok láthatóságát globálisra.

A következő lehetőség, hogy az egész rendszert le lehessen tölteni, és mindenki a saját számítógépén használhassa internet nélkül. Így állandóan rendelkezésre áll minden adat internet eléréstől függetlenül. Akkor is jó lenne ez a funkció, ha valaki csak a saját adatainak kezelésére használná a programot. Ekkor biztosítani kellene a lokális és az interneten elérhető globális adatbázis szinkronizálását.

Mint, ahogy azt az Elektronspektroszkópia című részben említettük a teljes XPS folyamat végeredménye egy spektrum. Az Elektronspektroszkópia című rész 2. ábráján egy kielemezett, értékelt spektrumot látunk. Ez úgy készült el, hogy a vizsgálat eredményül kapott spektrumot egy spektrum elemező program megkapta. Ez a program arra alkalmas, hogy segítségével felismerhetővé váljanak a valós, felhasználható csúcsok és azok jellemzői (félérték szélesség, stb.) a spektrumon. Az így megszerzett információkkal le kell kérdezni egy adatbázist, hogy beazonosítsák az elemeket (ezt a lépést teszi lehetővé a mi programunk). Majd a kész spektrumba még vissza kell "rajzolni" az adatbázisból kinyert, és újra kielemezett adatokat. Így készül el a végleges spektrum. Mint látható, ehhez a teljes folyamathoz három egymástól független programot kell felhasználni. Nem tudunk olyan ingyenes (fizetősről sem) rendszerről, ami ezt a három szoftverkomponenst integrálná egybe, pedig a felhasználók munkáját ez jelentősen megkönnyítené. Ennek a feladatnak a megvalósítása lenne az egész program fejlesztés egyik legnagyobb kihívása, amely a rendszert igazán teljessé tenné.

Programunkat és forráskódját ingyenesen elérhetővé tesszük, bárki használhatja és továbbfejleszheti. Diplomamunkánk leadásával a mi tevékenységünk lezárult, azonban szívesen folytatnánk ha lenne rá lehetőségünk.

## Összefoglalás

Diplomamunkánk elkészítése során megismerkedtünk a National Institute of Standards and Technology (NIST) által létrehozott X-ray Photoelectron Spectroscopy (XPS) Database rendszerével, összegyűjtöttük az ilyen rendszerrel szemben támasztott igényeket és a NIST rendszeréhez hasonló, de kibővített funkcionalitású alkalmazást hoztunk létre.

Az elektronspektroszkópiai mérési eredmények kezelésére a NIST egy adatbázist és egy kezelőprogramot hozott létre. Megismerkedtünk a program két verziójával. A korábbi verzió (2.0) a 90-es évek első felében készítették, még DOS-os környezetre. Ehhez egy olyan adatbázis kapcsolódott amely 16000 mérési eredmény tartalmazott (amelyek ma már elavult, pontatlan méréseknek számítanak), és az adatbázis szerkezete redundáns volt. A program másik verziója egy ingyenesen elérhető webes alkalmazás, amely egy új normalizált relációs adatbázist használ, azonban a régi mérési eredményeket tartalmazza. A NIST által fejlesztett rendszer legújabb verziója már friss mérési eredményeket tartalmaz, de eléréséhez előfizetés szükséges.

Diplomamunkánk leadásának határidejéig létrehoztunk egy nyílt forráskódú, továbbfejleszthető web-alkalmazást, amelyben implementáltuk a NIST webes rendszerének funkcionalitását és biztosítottunk a felhasználók számára új mérési eredmények bevitelének lehetőségét. Ezen kívül készítettük egy C nyelvű függvénykönyvtárat, melynek segítségével bárki a saját programjából elérheti a rendszer szolgáltatásait. A rendszer számos helyen továbbfejleszthető, és továbbfejlesztendő melynek lehetőségeiről és ötleteinkről egy külön fejezetben számoltunk be.

## **Köszönetnyilvánítás**

Szeretnénk megköszönni Dr. Végh Jánosnak, hogy vállalta diplomamunkánk témavezetői szerepkörét, szakmai tudásával, építőjelleget tanácsaival, ötleteivel és hasznos észrevételeivel támogatta, felügyelte diplomamunkánk elkészítését, valamint szeretnénk megköszönni az Atommagkutató Intézetből Dr. Kövér Lászlónak és Dr. Cserny Istvánnak az elektronspektroszkópia elméleti háttérének ismertetését, folyamatának bemutatását és a rendszer kialakításához adott tanácsaikat, ötleteiket.

## Irodalomjegyzék

- [1] *Nagyenergiájú Auger elektronok keltését kísérő gerjesztési és elektrontranszport folyamatok szilárd anyagokban*, 2004, Fejezet: *Az elektronspektroszkópia kísérleti módszerei*, Berényi Zoltán; [http://w3.atomki.hu/PhD/these/Ber%e9nyi%20Zolt%e1n/files/2\\_1\\_2.pdf](http://w3.atomki.hu/PhD/these/Ber%e9nyi%20Zolt%e1n/files/2_1_2.pdf) letöltés dátuma: 2010.04.20.
- [2] *A felülettudománytól a nanotechnológiáig: reakciók tanulmányozása atomi léptékben*, Berkó András; Magyar Tudomány, 2002/12; <http://www.matud.iif.hu/02dec/berko.html> letöltés dátuma: 2010.04.20.
- [3] *Development of the web-based NIST X-ray Photoelectron Spectroscopy (XPS) Database*, Angela Y. Lee, Dorothy M. Blakeslee, Cedric J. Powell, és John R. Rumble Jr.; Data Science Journal, 2002; [http://www.jstage.jst.go.jp/article/dsj/1/0/1/\\_pdf](http://www.jstage.jst.go.jp/article/dsj/1/0/1/_pdf) letöltés dátuma: 2010.04.30.
- [4] Zend Framework: <http://framework.zend.com/> letöltés dátuma: 2010.04.30.
- [5] *A MySQL kezelése és használata*, George Reese, Randy Jay Yarger, Tim King, Kossuth kiadó 2003

## Ábrajegyzék

1. ábra Az elektronspektroszkópia működési elve.....	6
2. ábra Egy XPS spektrum .....	8
3. ábra A NIST XPS 3.0 adatbázissémája.....	14
4. ábra Ismeretlen spektrális vonalak meghatározása (NIST 3.5) .....	15
5. ábra Összefoglaló táblázat egy keresés eredményeiről (NIST 3.5) .....	16
6. ábra Egy keresési találat részletes leírása (részlet, NIST 3.5) .....	16
7. ábra Adott elemhez tartozó mérések lekérdezése (NIST 3.5).....	17
8. ábra Energiaértékek lekérdezése elem-vegyértékhéj párok függvényében (NIST 3.5)	18
9. ábra Vegyületekre vonatkozó keresés (NIST 3.5) .....	18
10. ábra Mérések keresése publikáció alapján (NIST 3.5).....	19
11. ábra Az általunk létrehozott adatbázisséma .....	21
12. ábra Az MVC rétegek rétegek kapcsolata.....	22
13. ábra Könyvtárstruktúra .....	23
14. ábra Spektrális vonalak beazonosítása mért energiaértékek alapján .....	27
15. ábra Mérések keresése publikáció alapján .....	28
16. ábra Adott elemhez tartozó mérések lekérdezése .....	29
17. ábra Energiatípus kiválasztása, az elem-vegyértékhéj párok megadása előtt.....	30
18. ábra Energiaértékek lekérdezése elem-vegyértékhéj párok függvényében .....	30
19. ábra Összefoglaló táblázat egy keresés eredményeiről .....	31
20. ábra Új adatmezők kezelése a sémában .....	39