

原子分子データ応用フォーラム会報 第1号

The forum for atomic and molecular data and their applications

目次

フォーラム発足にあたって
フォーラム発足の経緯
データベース談義
原子分子データ応用フォーラム Web サイト
のご紹介
核融合科学研究所原子分子数値データベース



原子分子データは、核融合や、プラズマプロセスの研究開発の知的基盤と考えられ、高精度なデータの生産とデータベース化の努力が続けられてきました。最近ではX線天文学、光源開発、環境技術など、新たな基礎研究、応用分野においてもその重要性が高まっていまっていることから、原子分子データを接点とする、研究者、技術者のコミュニティ、NPO 法人「原子分子データ応用フォーラム」を設立いたしました。今後活動を進めるに当たり、広い分野の原子分子データの生産者とユーザーの皆様に設立の趣旨、経緯をお知らせしたく会報を発刊することになりました。皆様の研究開発に役立つフォーラムのあり方についてご意見を賜りますとともに、今後のフォーラムの運営にご理解、ご協力をお願いする所存です。

NPO 法人原子分子データ応用フォーラム 所在地 岐阜県土岐市下石町 322 番地 6

理事長 村上泉、副理事長 佐々木明 問い合わせ先 staff@am-data-forum.com

■ 原子分子データ応用フォーラム発足の経緯

「原子分子データ応用フォーラム」は、原子分子データを接点とする、原子分子データの生産者、データベースの専門家、基礎科学・産業分野におけるユーザーの間のコミュニティの構築、すなわち、高精度な原子分子データの応用した先進的な研究開発環境の実現を目指して、設立の準備を進めてまいりました。

原子分子データ活動は、これまで 30 年あまりに渡って、核融合コミュニティの中で行われてきました。日本では核融合科学研究所、日本原子力研究開発機構が、国際エネルギー機関 (IAEA) のデータセンターネットワークのメンバーとなり、大学、研究機関の研究者が互いに協力して、データベースの研究開発を行なってきました。

しかし、近年では、X線天文学のような基礎科学から、プラズマプロセッシング、大気環境、光源などの応用分野でも、精度の高い原子分子データのニーズが多くなってきました。また、核融合分野でも、これら他分野での原子物理、原子過程研究の成果を活用することが重要と考えられるようになってきました。そこで、これまでの研

究分野の枠にとらわれず、原子分子データの生産、収集、利用・普及を進めるための、新しい学協会組織の設立を目指すことになりました。

われわれは、2004 年に開かれた、「原子分子データとその応用国際会議 (International Conference on Atomic and Molecular Data And Their Applications: ICAMDATA 2004)」や、外国の研究者との共同研究事業などの機会を通じて、分野横断的に原子分子データ活動を継続して行なえる環境を構築する必要性を認識し、「原子分子データ応用フォーラム」設立に向けた検討を行なってきました。2005 年より、各分野の専門家の先生方や、原子分子データ分野で重要な役割を果たしている研究機関の先生方にお集まり頂き、「原子分子データ応用フォーラム」設立の意義や課題について議論を続けてきました。

この間、2006 年 8 月には「核融合プラズマからプラズマプロセスまで-プラズマ中の原子過程-」、2008 年 12 月には「原子分子データのニーズとシーズのマッチングを目指して」と題するセミナーを、多くの方のご参加を賜って開催し、基礎および応用分野の皆様「原子分子デ

ータ応用フォーラム」に対するお考えを伺うことができました。

その結果、原子分子データベースそのものの構築、運営に先行して、原子分子データの生産者と、応用分野のユーザーの間で、ニーズとシーズのマッチング、研究者・技術者の間のコミュニティを構築することが重要という考え方に至りました。

原子分子データが非常に多岐に渡ることを考えると、原子分子データを応用する研究開発を開始する際に、対象のデータを予めデータベース化して、すぐに利用出来る状態にすることは困難と考えられます。一方で、原子分子物理や原子過程のコミュニティの中には、応用に必要な原子分子データの理論計算、実験的な測定、原子過程のシミュレーション解析に詳しい専門家の方がおられるので、これらデータの生産者と応用分野のユーザーが、互いにニーズとシーズを理解して協力すれば、応用研究において最も早く成果が得られると考えられます。そのような活動を通じて得られたデータをデータベース化すれば、後に続く研究開発の効率化につながると考えられます。

このような研究者のネットワーク作りについては、これまで各研究機関や、物理学会、プラズマ・核融合学会、原子衝突協会などの学会の活動を通じて行なわれてきましたが、さまざまな分野を横断して、原子分子データの活用を進めるためには、独立した学協会組織を設立した方が良いと考えられるようになりました。

学協会活動には、学理の追求と、成果の利用普及のような社会貢献活動の2つの面があると考えられ、両者を統合した学会の再構築の可能性が一部では議論されていますが、現時点では、主に前者の役割を持つ物理学会や原子衝突協会の活動を補うために、協会の設立は意義のあるものと考えられるようになりました。

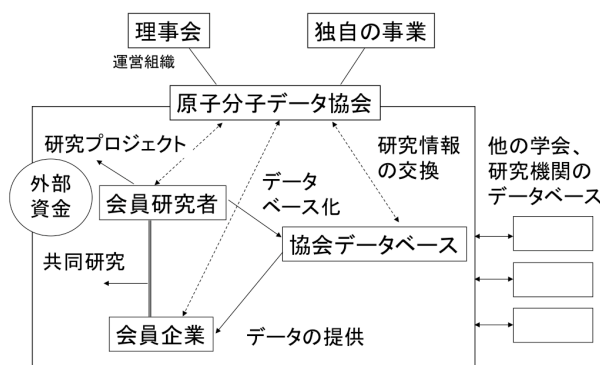
そして、現在の社会の考え方のもとで、協会独自の活動を行って、原子分子データのような知的資産を蓄積してゆくためには、NPO（非営利特定法人）として設立するのが良いと考えられるようになり、2009年11月25日に活動の中心となるメンバーが集まって設立総会を開催し、NPO法人の定款、事業内容などの方針を決定、認証手続きを経て、2010年4月21日にNPO法人「原子分子データ応用フォーラム」が設立されました。

設立に当たっては、多くの皆様から、精神的、物質的な面においても積極的なご支援を頂きました。今後、セミナーの開催、会報の刊行、Webサイト、メーリングリストの運営などの事業から始め、将来は独自のデータベースの公開を目指したいと考えています。

セミナーについては、すでに2006年、2008年、2009年に延べ100名以上の参加者を得て開催し、多彩な分野における原子分子データの生産と利用についての情報交換が行なえたことが好評で、2010年度以降も継続して開催する予定です。一方で、セミナーの短い時間の間に議

論出来る内容は限られており、インターネット上での活動が重要になると考えています。すでにGoogle groupsの技術によるホームページとメーリングリストの機能を統合し、原子分子データの生産者とユーザーが、自ら研究リソース、共同研究のパートナーを見つけられる環境の構築を進めています。

2010年2月のセミナーでは、水中プラズマ、プロセスプラズマ、核融合用タングステンプラズマなどの最近のトピックが議論され、今後これらの基礎、応用分野において、原子分子データが有効に活用されるプロジェクト事例を実現することが課題になると考えています（佐々木明）。



(図 1.1) 原子分子データ応用フォーラムの概念図

NPO 法人としての原子分子データ応用フォーラムの設立について

NPO(Non Profit Organization)法人とは、1998年に制定された「特定非営利活動促進法」によって制度化された、不特定かつ多数のものの利益の増進に寄与することを目的とした団体を言います。

1995年の阪神大震災は、NPOの活動が注目されるようになったひとつのきっかけであったと言われています。震災の復興支援のために集まった多数のボランティアによる支援活動を効率的に行なうために、別の言い方をすると、多くの人の協力の意思を生かすために、法人として組織化することが重要と考えられるようになりました。その後、NPOは行政の機能を補完するという考え方にに基づき、それに市民がより積極的に参加できるようにするために、国や地方自治体から支援が行なわれるようになっていきました。

原子分子データの生産、データベース化、利用を進めるために、それぞれの専門家が持っているリソースを互いに提供し、広く活用するという考え方の実現のためには、NPOの形態が相応しいと考えました。

■ データベース談義

旧プラズマ研究所の研究・企画情報センターで当時早川センター長のもとで、センターの特徴を出すためにデータベース作りが考えられた。最初は何もないので、INSPEC 文献データベースを購入し使えるようにしようということになった。原子分子データベースについては高柳、鈴木、金子、大谷先生などを中心としたワーキンググループにより多価イオンのデータ収集が行われており、数値データをデータベース化し、グラフで出力しデータを比較できるようにした。その頃プラズマからの不純物による放射損失が重大であると世界的に大問題となった頃で原子データに対する必要性は認識され始めていた。企画情報センターには核融合システムについての部門もあり、核融合関係などのファクトデータベース作成も考えられた。しかしこれらのデータベースは成功しないで終わった。例えば入れ物のデザインはされたのであるが、入れるデータが集まらないで、立ち消えになったものもある。アップデートしていくことがいかに難しいかを表している。結局生き残ったのは原子分子数値データベースのみであった。この成功にはデータベースをデザインされた金田さんやデータ入力システムを改良して下った小笠原さん、鈴木さんなど数多くの情報関係研究者の協力のお陰があった。またワーキンググループによってデータ収集がしてあり、入力するデータが存在していた事も幸運であった。しかしその後関連の原子分子の先生方も忙しくなりデータ収集はセンターの職員がやらざるを得なくなり、段々仕事が重くなってきた。データベースはアップデートしないと意味がなくなる。新しい論文を見つけ論文から入力すべきデータを取り出し入力する。その頃入力するのはアルバイト学生さんにやって貰っていたが遷移の入れ方や、単位の問題などがあり、入力システムが結構複雑で、学生アルバイトさんが間違えることもある。データベースの品質はデータの信頼性にあり、間違ったデータ入力はデータベースの品質を損ねる。入力ミスは避けられず、データのチェックは真剣に行った。

核融合研になってからの事であるが、プラズマ研究者にデータベースの作業の説明をしたら、そんなつまらないことをやっているのかと思われた。論文からデータを持ってきてデータベースに入力するだけなのでつまらない事と言えばそうである。研究者はそんな事をしているよりは、研究をしていた方がよほど楽しい。しかし質の良い研究をするためには質の良い原子分子データが必要である。良いデータベースがあれば、その国の研究の質が向上することになる。プラズマ研究者の9割以上は実際に原子データを自分の研究に使った事がないので、その重要性や便利さが解らないのだと思う。現在の核融合研の原子分子データベースは、村上泉さんや加藤雅敏さんの努力によりインターネットで使えるようになり、世

界的にもトップクラスのデータベースに成長し、日本の財産ともいえる。しかしアップデートしていかないと財産でなくなってしまうジレンマがある。故季村先生は、日本の原子分子若手研究者を総動員して核融合研の作業会により、アップデートのためのデータ収集を始めて下さった。季村先生が急逝されたことは本当に残念で大きな損失であった。現在は加藤太治さんをはじめとする若手が引き継ぎ、データ収集が毎年なされているのは心強いことである。故井口先生は核融合研に滞在された折りに、7つも講義や講演をしてくださった。その時データベースは辞書のようなものであると同時にノーベル賞級の仕事にもなると、重要性を説明された。多くの方が理解して下さったのではと思っている。(井口先生は大変お元気でしたので、訃報を受け驚いています。データベース活動を熱心に支援して下さいました。感謝の気持ちを込めて心よりご冥福をお祈り致します。)

韓国や中国では出発は遅れたが原子分子データベース活動に大変熱心である。中国は人が多いので人海戦術で行える強みがある。韓国ではサムソンなどの産業界との結びつきが強い。韓国で原子分子データベースの会合に招かれた時にサムソンから日本の研究者に助成金が出ていることを知り驚いた。ヨーロッパでは ITER を始めとする大きいプロジェクトの予算により最近データベースへかなり予算が出ている。フランスでもデータベース関係に大きな予算がついたと聞いた。日本は先端の研究という言葉に目を取られ、基礎的な力となる地味なデータベースには予算がつきにくい。面白くないと受け取られているからだと思う。一方計算機の発達により原子データを簡便に計算できる計算機コードの発展にめざましいものがある。これらの計算機コードの結果のベンチマークとしても評価済みデータベースは重要である。

これからのデータベースは応用と結びついたものに行く必要があるのではと思う。そうすればどういう役に立つかが目に見えるので外部から評価されやすい。その場合信頼できる基礎的な評価済みデータベースが必要である。そのような基礎的なデータベースはやはり公の機関が支援していく必要があると思う。例えば地震のデータ、生物の遺伝子のデータなどは公の機関でデータベース化されている。韓国のチェジュ島で行われた日韓セミナーで、季村先生や真壁先生と話をしていた折りに、真壁先生からデータベース協会のようなものを作ったらどうだろうかという話がでた。原子分子データの利用者が多分野に渡っている現在、この考えは良いかも知れないと考えようになり、核融合研の共同研究で立ち上げの組織作りを行った。現在は佐々木さんが共同研究の代表者で、村上さん、加藤太治さんと共に、若手で立ち上げを考えておられ、世代交代が出来嬉しく思っている(加藤隆子)。

■ 原子分子データ応用フォーラム Web サイトのご紹介

原子分子データ応用フォーラム Web サイトの URL は、<http://groups.google.co.jp/group/pre-data-forum> です。URL を入力すると右のトップページが表示されます。現在の Web サイトには、トップページの他に、いくつかの情報ページ、あるいはそれへのリンクが掲載されています。正式な NPO 法人の定款や事業計画なども掲載する予定です。

トップページには、ホーム、ディスカッション、メンバーのような項目があります。フォーラムが作成したコンテンツは、ホームの項目から参照できるようになっています。原子分子データ応用フォーラムの趣旨、2006 年および 2008 年に行なったセミナーのプログラムとプレゼンテーションを含むイベント情報、参考資料を、ここから見ることができます。

ディスカッションやメンバーは、Google groups の Web サイトに特徴的な項目です。ディスカッションは、メンバーの間の議論の内容が掲載される、Google groups の機能の一番重要な部分です。

原子分子データ応用フォーラムのメンバーになることは、実はこの Google groups のメンバーになることを意味します。メンバーになると、メンバーシップに投稿できるようになり、他のメンバーからの投稿がメールとして送られて来るようになります。その点では、Google groups は従来のメンバーシップと同じですが、メールの配信と同時に、投稿がトピックごとにスレッド化されて Web サイトに保存され、新しいメンバーの人が過去の投稿の内容と、議論の流れを参照することができます。

さらに、メンバーの人は、Google groups にログインすることによって、さらに情報の発信や収集ができます。図にあるメンバーの項目は、ログインすることによって初めて表示されます。ログインするには、メンバーシップに登録しているアドレスで、google account を作成し、Google のログインページ、<https://www.google.com/accounts/> でアカウント、パスワードを入力します。Google account の作成も、説明に従って操作することによって簡単に行なうことができます。

メンバーの項目からは、原子分子データ応用フォーラムのメンバーの情報を参照することができます。数行の研究紹介の他、顔写真や、より詳しい情報を参照できるように各自のホームページへのリンクを設定することができますが、これらの情報は、各メンバーが自身のページから自ら入力したものです。このように、Google groups とは、各メンバーが自らの判断で情報を提供することによって、Web サイトの情報が充実し、それが最終的に各メンバーのメリットにつながるという考え方に立



(図 3.1) 原子分子データ応用フォーラム Web サイトのトップページ



(図 3.2) Google のログイン画面

っています。より多くの共同研究の機会を得たいと考えられる方には、メンバーとして参加して頂いた上で、詳細な情報を掲載して下さることをお勧めします。ReaD (<http://read.jst.go.jp/>) に情報を掲載しリンクを配置して頂ければ、今回作成したデータを他の活動に活用することもできるでしょう。一方、Google groups では匿名に近い形で参加することも可能です。このようなシステムを活用するには技術も必要ですが、原子分子データ応用フォーラムは、これらの考え方を踏襲したいと考えています。メンバーシップに参加を希望される方は、staff@am-data-forum.com までメールでお知らせ下さいますようお願いいたします (佐々木明)。

■ 核融合科学研究所原子分子数値データベース

核融合科学研究所 (NIFS) では、前身の名古屋大学プラズマ研究所時代の 1980 年代からプラズマ研究のための原子分子衝突過程の数値データを検索・表示の出来るデータベースとして作成し研究者へ公開してきました。1997 年よりインターネットによる公開へシステムを変更し、産業界を含め世界中の様々な分野の研究者から広く利用されるようになりました。2007 年には利用者登録を廃止して利用しやすくなり、好評を得ています。

この原子分子数値データベースは、アドレス <https://dbshino.nifs.ac.jp> からアクセスでき、(表 4.1)に示すメインのデータベース群とサテライトとよぶ検索機能等のない小さなデータベース群からなっています。サテライトはデータベースのトップページにリストが表示されていますが、例えば水素分子の解離性付着速度係数などがあります。また、トップページには、そのほかに世界で公開されているデータベースリストページへのリンクなどもあります。

メインのそれぞれのデータベースは元素名などで検索が行え、数値データの表や図での表示に加え、データの原著論文の書誌情報、データ内容の情報などが表示できます。例として(図 4.1)に AMOL (分子の電子衝突過程のデータベース) の検索画面、(図 4.2)に検索結果の断面積の図を示します。数値データには、理論(T)や実験(E)のデータと推奨データ(V)があり、原著論文のままデータベースに格納されています。そのため、一つの衝突過程に対していくつもの原著論文によるデータが表示され、その中からもっともらしいデータを選択して利用することになります。データ収集は、国内の原子分子物理学研究者の協力を得て行っています。また、データベースのデータをご自身の研究論文などに使用する際は、Acknowledge していただけるよう御願ひしています。

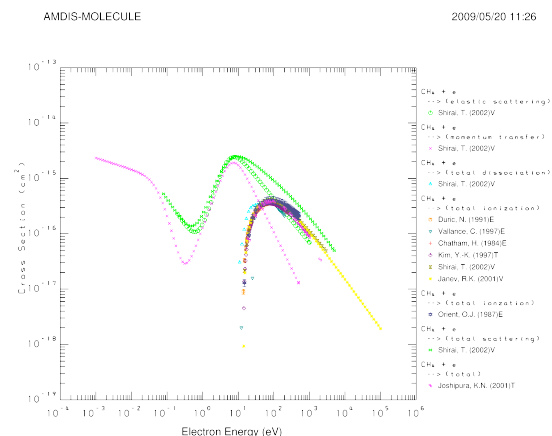
メインのデータベースの中にはもう一つ、原子分子衝突過程に関する文献データベース ORNL もあり、衝突過程を指定して検索が可能で、論文検索に役立てることが出来ます。

データベースに関するご質問やデータリクエストなどは dbadmin@dbshino.nifs.ac.jp で随時受け付けています。

(表 4.1)NIFS 原子分子数値データベース

名称	データ内容
AMDIS	電子衝突による原子・イオンの電離、励起、再結合断面積又は速度係数
CHART	イオン・原子衝突による電離、荷電交換断面積
AMOL (AMDIS MOL)	電子衝突による分子の各種衝突過程断面積又は速度係数
CMOL (CHART MOL)	イオン衝突による分子の各種衝突過程断面積又は速度係数
SPUTY	固体表面のスputtering収率
BACKS	固体表面の後方散乱係数

(図 4.1)AMOL 検索画面



(図 4.2) AMOL 検索結果例 (CH4 の電子衝突過程の断面積)