

原子分子データ応用フォーラム会報 第2号 β

The forum for atomic and molecular data and their applications

目次

原子分子データ応用フォーラムについて
原子分子データ応用フォーラムのこれまでの活動

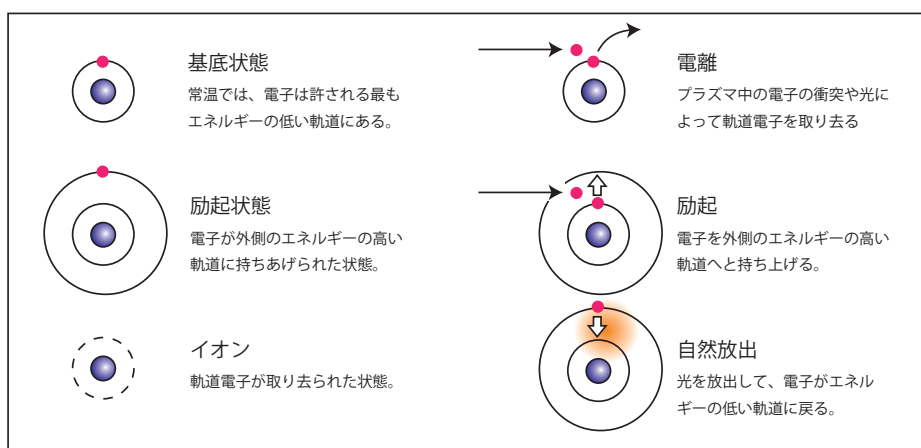
田辺監事のご逝去を悼んで
データ活動の変遷 (市川行和)



原子分子データ応用フォーラムは、科学技術を支える、原子分子データに関心をもつ、大学、研究機関、企業の研究者、技術者が集って設立した特定非営利活動法人 (NPO) です。宇宙物理や、核融合のような基礎研究から、プラズマプロセス、環境汚染物質処理、光源などの応用分野で、プラズマのモデリングに用いられる、精度、信頼性の高い原子分子データの生産、データベース化、利用普及を図るために、基礎・応用分野の研究者、技術者が、それぞれが持つ原子分子データのニーズとシーズのマッチングを行なう場として設立されました。現在、フォーラムでは、セミナーの開催、インターネットコミュニティの運営などの活動を行なっています。本会報では 2010 年の設立以来の活動についてご報告いたします。フォーラムの活動をより科学技術に役立つものにするため、ご意見をお寄せくださいましたら幸いに思います。

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のこれまでの活動

□ 原子分子データとは

私たちの身の回りにある物質は、原子や分子がもとになって作られていると言われています。私たちが通常手にする物質は、非常にたくさんの原子分子が集って作られています。詳しく見ると、原子核と電子から作られる原子、いくつかの原子が組み合わさった分子が、物質の性質を決めるもとになっています。原子分子データ応用フォーラムでは、このような原子分子の性質や働きに

興味を持つメンバーが集って活動しています。

自然界や人工的に作られた装置の中では、ある物質を別のものに作りかえて使うことが良く行なわれています。例えば石油を燃やすと、燃料と空気中の酸素とが反応して二酸化炭素と水になると同時に熱が発生し、自動車の動力として使われます。生物体の中ではもっとゆっくりと反応が進んでいて、植物は太陽光のエネルギーを使

って食料を生産し、動物はそれを活動のエネルギー源として利用しています。

これらの、物質があるものから別のものへ変わる反応の起こりやすさは、それぞれの物質により、また温度や光の強さなどの条件で決まっているので、反応の起こり方を理解し、人や社会に役に立つように利用するためには、もととなっている原子分子についての知識が必要です。そのなかに、対象となる原子や分子、条件によって決まる数値的な情報という意味で、「原子分子データ」があります。現在、原子分子の反応を活用するいろいろな装置を開発するときに、その性能を改良にするために、コンピューターシミュレーションが必要だと言われています。「原子分子データ」はそのために使われています。現在、原子分子過程のシミュレーション、つまり「原子分子データ」が、宇宙物理、核融合などの基礎研究から、プラズマプロセス（半導体素子の製造技術）、光源、環境汚染物質処理などのさまざまな分野で利用されています。

□ 原子分子データ応用フォーラムセミナー

原子分子データ応用フォーラムでは、その重要な事業として、毎年セミナーを開催しています。その年に重要そうなテーマを設定し、講師の先生を招き、お話頂き、今、どのような基礎、応用の研究分野で、どのような原子分子データが必要になっているか、そのデータを生産し、データベース化し、利用するにはどうしたら良いか、データの質を高めるにはどうしたら良いかなどについて議論しています。参加費は無料です。

設立初年度（2010年度）は、2011年2月2-4日に、自然科学研究機構・核融合科学研究所共同研究「原子分子光の素過程とプラズマ分光のフロンティア」研究会との共催でセミナーを開催し、2011年度のセミナーは、

原子分子、特に原子の関与する反応、原子過程の基本的なものに、図のような電離、励起、自然放出過程があります。常温（室温）で一番エネルギーの低い基底状態にあった原子に、電子や光が作用して、よりエネルギーの高い励起状態になったり、軌道電子が取り去られたイオンになったりします。励起状態の原子は光を放出して、もとの安定な状態に戻ります。

これらの過程は、炭素、窒素、酸素などの原子の種類によってそれぞれ異なり、各々が取りうる軌道電子の状態によって異なるたくさんの励起状態を持つので、実際は、原子分子データは膨大な量になります。

原子分子データ応用フォーラムでは、原子分子物理の専門家と、さまざまな利用分野の専門家が、互いにニーズとシーズの情報を交換することで、原子分子データの生産や、膨大なデータをデータベース化すること、そして、データをより使いやすいものにして科学技術に役立てることを目指しています。

12月13-14日に、後述のプラズマのモデリングに関する分科会活動の一環として、「O₂（酸素分子）を含む原子分子過程を考慮したプラズマ研究」というテーマで開催しました。それぞれのセミナーは、講師を引き受けて下さった先生方のご協力、会場の使用を認めて下さっている他、核融合学研究所の有形無形のご支援、同分光研究会の蓮尾先生（京大）を初めとする皆様のご協力を得て、盛会となり、活発な討論が行なわれ、有意義会になりました。2012年度は、12月11-13日に「高Zプラズマの原子過程と、酸素分子が関係する原子過程とその応用」のテーマで開催する予定です。

2010年度「原子分子光の素過程とプラズマ分光の研究フロンティア」との合同研究会プログラム（2011年2月2-4日）

2月2日（水）

13:30 開催の挨拶 佐々木、蓮尾
13:45 アナウンス後藤、村上
13:50 「超高層大気における原子・分子過程」藤原均（東北大理）
14:20 「大気微量分子組成の分光遠隔計測」長濱智生（名大STE）
休憩
15:10 「太陽風を起源とする軟 X 線観測への原子物理の寄与」田沼肇（首都大理工）
15:50 「EBIT を用いた多価 W イオン分光」大橋隼人（電通大レーザー）
16:10 「JT-60U トカマクプラズマでのタングステンの輸送」仲野友英（原子力機構）
16:30 「LHD および EBIT を用いた Fe 多価イオンの EUV 分光計測」坂上裕之（核融合研）
16:50 「EBIT での Fe XVII の EUV スペクトルモデリング」加藤太治（核融合研）

17:10 「プラズマ原子分子過程ハンドブック」について村上泉（核融合研）

2月3日（木）

9:00 「衝突輻射モデルをバルス発光解析に応用する際に必要な常微分方程式論的考察」赤塚洋（東工大原子炉）
9:20 「バルマー α 線プロファイルに基づく粒子輸送の研究」後藤基志（核融合研）
10:00 「LHD プラズマ中水素原子発光線プロファイルの高速分光計測」藤井恵介（京大工）
休憩
10:40 「軟X線レーザー・Xe クラスタ相互作用による強結合プラズマの発生」難波慎一（広大工）
11:20 「GAMMA10 における Thomson 散乱計測による電子温度計測」森本真人（筑波大数理物質）
昼食
12:40 「大気圧ストリーマ放電のラジカル反応計測」小野亮（東大新領域）

13:10 「大気圧低温プラズマジェットを用いた液体プロセス～大気イオンにより誘起される液中化学反応のバイオ応用～」北野勝久（阪大工）
 13:40 「高熱流大気圧プラズマが関与するプラズマ応用研究について」上杉喜彦（金沢大理工）
 休憩
 14:30 「反応性プラズマ中で観測される質量数の大きな気相分子と膜堆積との関係」古屋謙治（九大総合理工）
 15:00 「放射光を用いた高分解能電子衝突実験」北島昌史（東大理工）
 15:30 「JT-60U ダイバータでの炭素不純物の発生，輸送および放射」仲野友英（原子力機構）
 休憩
 16:20 「マイクロホローカソード放電ヘリウムプラズマの複数波長域高分解分光診断」蓮尾昌裕（京大工）
 16:40 「水素原子シュタルク拡がりを用いた大気圧マイクロ波プラズマにおける電子密度および電界強度の時分解計測」石島達夫（名大プラズマナノ）
 17:00 「最近接原子分布に基づく原子過程のモデル」西川亘（岡山大自然科学）
 懇親会
2月4日（金）
 9:00 「水素・ヘリウム混合プラズマの分光診断」澤田圭司（信州大工）
 9:20 「光吸収率決定のためのヘリウム発光線の実用的選択」梶田信（名大）

9:40 「水素原子バルマーアルファにおける飽和吸収分光法」佐々木浩一（北大工）
 10:00 「レーザー駆動黒体放射源を用いた光電離非平衡プラズマの分光計測」山本則正（阪大レーザー）
 休憩
 10:40 「電子と水素分子イオン同位体の衝突過程」高木秀一（北里大一般教育）
 11:00 「原子衝突による偏極緩和過程と原子間ポテンシャル」松隈啓（京大工）
 11:20 「フォーラム分科会活動案と参加勧誘」田辺正孝（流体研）
 昼食
 12:50 「反応性プラズマ診断の概要とそれに必要な原子分子データ」佐々木浩一（北大工）
 13:20 「 C_2H_2 中の電子輸送係数と電子衝突断面積」中村義春（東京電機大工）
 13:50 「プラズマプロセスの赤外分光解析」篠原正典（長崎大生産科学）
 休憩
 14:40 「プロセスプラズマにおける具体的課題（重粒子衝突）」小方誠司（アルバック）
 15:10 「半導体プロセスにおける原子，分子の反応」林俊雄（名大プラズマナノ）
 15:25 「原子衝突断面積データベース」今井誠（京大工）

2011 年度セミナー「 O_2 （酸素分子）を含む原子分子過程を考慮したプラズマ研究」プログラム（12月13-14日）

12月13日（火）
 13:45 NPO の紹介・分科会の趣旨説明 佐々木（原子力機構）・池田（アテナシス）
 14:15 酸素分子と電子の衝突に関する最近の研究 市川行和（宇宙研）
 15:00 酸素分子および酸素分子イオンが関係した衝突素過程 田沼肇（首都大）
 休憩
 16:10 不平等磁界下の電子輸送 菅原広剛（北大）
 懇親会
12月14日（水）
 9:00 Ar/O_2 誘導結合プラズマのシミュレーションとRRK理論に基づいたイオン-分子反応モデルの紹介 伝室一樹（東京エレクトロン）

9:45 大気圧プラズマのモデリング・酸素ガス添加に伴う容量結合型 RF 大気圧ヘリウムプラズマ特性への影響 小田昭紀（千葉工大）
 休憩
 10:45 大気圧酸素誘電体バリア放電のシミュレーション 明石治朗（防衛大）
 11:30 反応速度を考慮した熱プラズマのモデリング 田中康規（金沢大）
 昼食
 13:15 半導体レーザによる酸素分子の高速高感度吸収分光計測 片山光一（京大）
 13:40 核融合研の原子分子データベースについて 村上泉（核融合研）
 14:25 - 15:00 総合ディスカッション

□「プラズマシミュレーションに用いるレート係数の推算方法の調査」分科会の活動について

原子分子過程のコンピュータシミュレーションを行なうには、正確な原子分子データが必要です。ところが、必要な原子分子データに比べて、データベース化されているデータは絶対的に不足しており、適当なデータが手に入らないことがしばしばあります。

一方で、現実の要求から、欠けているデータを何らかの方法で推定して、シミュレーションを行なうことも良くあり、そのための方法を問題別に収集、整理し、利用できることもフォーラムの活動として重要ではないか、分科会を設けて検討するのが良いと考えられるように

なりました。

そこで、2011 年度から準備を始め、実際に環境技術などへの応用において、推算方法に対するニーズのある酸素分子の関係する原子分子過程から検討を始めました。そして、この年度のセミナーのテーマとし、この分野の専門家の先生方のお話を聞き、2012 年 6 月のフォーラムの定例総会にて、本年度の事業のひとつとして、アテナシス（株）池田を幹事として「プラズマシミュレーションに用いるレート係数の推算方法の調査」分科会を設置することになりました。

□ フォーラムのインターネット活動

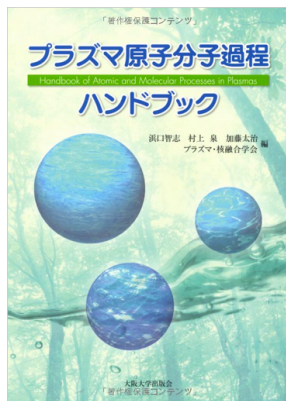
現在、さまざまな社会活動のためにインターネットの活用は重要とされています、原子分子データを接点とする、研究者、技術者のネットワーク作りを目標とする原子分子データ応用フォーラムにとっては、なおさら重要な課題ということが出来ます。

フォーラムでは、設立の準備段階から、google groupsを活用した、メーリングリストを運用してきましたが、2010年7月にwebサイト ([http:// www. am-data-forum.com](http://www.am-data-forum.com)) を開設しました。Web サイトには、定款、会員申し込み方法、セミナーなどのイベントの情報、総会などのフォーラムの運営上重要な会議の議事録など、フォーラムの情報を掲載しています。セミナーについては、発表者にご了解を頂くことができたものについて、スライドを、核融合研のwebサイトを通じて閲覧できるようにしています。Web サイト開設に当たっては、独自のドメイン (am-data-forum.com) も取得し、フォーラムドメインのアドレスから、メールの送受信ができるようにしています。現在では、電子メール、ホームページだけではなく、Facebook のようなさまざまな SNS

(Social Network Service) も利用できるようになってきましたので、活用方法や問題点を今後検討していく予定です。



□ 出版活動



原子分子データ応用フォーラムで対象と考える原子分子過程には、原子分子と電子、光の相互作用を含めさまざまなものがあります。現在、いろいろな分野の研究者や技術者が原子分子過程のシミュレーションに触れるようになっており、そのための知識のよりどころになる教科書、そし

て、原子分子データを利用するための情報が記載されたハンドブックが切望されていました。「プラズマ原子分子過程ハンドブック」(浜口智志、村上泉、加藤大治、プラズマ・核融合学会編、大阪大学出版会 2011 年) は、プラズマ核融合学会の 50 周年記念事業のひとつとして企画され、大阪大学の浜口先生のリーダーシップのもと、村上理事長を初め、フォーラムのメンバーの多くが著者として参加して出版されました。基礎編と応用編とからなり、前者では、原子分子物理についての詳しい解説が、後者ではさまざまな分野での応用の実例が示され、充実した内容になっています。

■ 田辺監事のご逝去を悼んで

フォーラムの監事であり、設立準備段階から重要な役割を果たして来られた田辺正孝様が、10月26日に逝去されたという情報を、ご子息の義明様の Facebook 書き込みで知りました。同 30、31 日に通夜、告別式が営まれ、フォーラムからお花をお供えさせて頂きました。

田辺様とは、同じくフォーラムの設立に多くのご尽力下さった故季村峯夫先生のご紹介で初めてお会いしました。スーパーコンピュータの活用、今で言うハイパフォーマンスコンピューティングつながりで、インターネットコミュニティの運営や、NPO 法人の経営の実務にも詳しく、ご本人の快活な性格も相まって、それまで大学、研究機関の中にとどまっていた活動を社会に向かって広げるきっかけを下さったと思います。心からご冥福をお祈りいたします (佐々木明)。



■ データ活動の変遷 (市川行和*)

最初に簡単な自己紹介をしよう。私は、原子衝突の理論的研究を専門としている。実は大学院ではプラズマ物理の理論を専攻していたのだが、その後原子分子物理に転向した。そこで今でもプラズマ中の原子衝突に強い関心がある。また、特にここ20年ぐらいは電子と分子の衝突にもっとも興味があり、そんなこんなで **Molecular Processes in Plasmas** (Springer, 2007) という本を書いた。この本では、電子と分子、およびイオンと分子の衝突過程を取り上げて解説している。一方、原子分子データにも興味があり、特に宇宙科学研究所(現JAXA)を退官後は、自宅でできるので原子衝突断面積データの **review** をすることをしばらく続けた。幸い外国の研究者でいっしょに仕事をしようという人がいて、英国と韓国にそれぞれ少し長く滞在してデータの **review** をすることができた。

私が原子分子データに興味を持ち始めたのはかなり昔である。大学院を出て5年ほどしたころ、アメリカにしばらく出かけた。そのときいろいろな研究室を訪ねたが、どこへ行っても基礎的な研究だけでなく応用についても強い関心をもっていることがわかった。これは主に研究費の獲得のためであるが、それだけではなく常に現実の世の中に目を向けている彼らの姿勢の表れであった。それ以後、私自身も原子衝突研究の応用面での重要性を意識するようになった。原子衝突断面積はきわめて広い分野に関係があり、あまりなじみのない雑誌に文献が出ていたりする。探しているデータがとんでもないところで見つかるという「宝探し」の楽しみもあり、また視野がひろがるなど普通の研究にはないメリットがデータ活動にはある。

私がデータ活動を始めた1970-80年代には、個人(あるいは一つの研究室)が活動の主体であった。ただ一部の分野では公費で設立・維持されたデータセンターが活動していた。中でも有名だったのが、アメリカはコロラド州ボルダーにあるJILA (Joint Institute for Laboratory Astrophysics) のデータセンターである。この研究所はコロラド大学とNIST (当時はNBS) が共同で設立したもので現在も存在する。しかしデータセンターはもうない。ここでは様々な原子分子データを集めてデータ集を作り出版していた。特に良かったのは、客員として研究者を招待し、データの **review** を書かせたことである。大変有用なしっかりした **review** がいくつも出版された。こほかにいくつかデータセンターがあったが、さまざまな理由からその活動を停止したり、規模を縮小したりしている。かわって現在盛んになってきたのは、ある特定の分野の研究者が協力して一つあるいは複数のデータベースを構築し維持していく活動である。特にITの発達で、大きな資金や人員をどこかに集中しなくてもデータ活動が維持できるようになってきている。そこでネットでつながることで研究者が協力し合

いしかりとしたデータベースを作り、利用する例が増えてきた。

少し調べてみると原子分子データだけでも多数のデータベースが世の中に存在することがわかる。(どこかのデータベースのサイトにアクセスするとほとんど必ず、関連する他のデータベースへのリンクがあるので、次々と見つけることができる。) ただし、それらは玉石混交で質の高いものもあれば、とにかくデータがあればよいというような、あまり質にこだわっていないように見えるものもある。またその多くは特定の応用を目的にしており、集められているデータの範囲が限られている。どこにどのようなデータベースがあるかを調べてその情報を利用者に提供したり、またできればデータベースの質をそろえたりする活動が必要である。そのような試みはすでに始まっており、ヨーロッパを中心に活動しているVAMD C (Virtual Atomic and Molecular Data Centre; M.L.Dubernet et al., J. Quant. Spec. Rad. Transf. **111**, 2151 (2010) 参照) などはその一つである。「原子分子データ応用フォーラム」もそのような役割を果たせるのではないだろうか。今後の活動に期待したい。

最後にこれからのデータ活動についていくつかコメントしてみよう。まずこれまでの経験から強調したいことは、活動の主体はデータを必要とする人、すなわちデータユーザーになるのが最適である。データベースは基本的に使う人のために存在する。利用者が自分たちが使いやすいように設計し運用するのがベストである。またデータを必要としている人がもっとも熱心になれる。もちろん原子分子の専門家の協力は不可欠であるが、彼らに任せると全く使いにくかったり、なかなか出来上がらなかったりする。次に、上で述べたように現在多数のデータベースがアクセス可能である。是非それらを使ってみることである。そして良いところがあれば真似をする。研究と違ってデータベースには必ずしも独創性はいらない。とにかく使い勝手が良いことが一番である。ただし質の良いものを作るべきである。すなわち収納されているデータの素性が良くわかっており、できればきちんと評価されている(すなわち、精度に関する情報が与えてある)ことが望ましい。また絶えず(数年に一度)見直しが行われて、データの更新がきちんとなされている必要がある。小規模でもよいから質の高いデータベースを作り、それを武器にして他のグループと積極的に交流することが良いのではないだろうか。

*) 宇宙航空科学研究所名誉教授