2011年12月13－14日
原子分子データ応用フォーラムセミナー

核融合研の原子分子データベースと世界の原子分子データベースについて

核融合科学研究所
村上　泉

原子分子データベースの発展

1981 AMDIS

1985 CHART SPUTY BACKS

ALADDIN

1997 WWW

1998 AMDIS Rec.

2001 AMOL CMOL

2001 GENIE

1990代～　サテライトデータベース

1977－1989
IPPJ-AM　(64 reports)

1990－
NIFS-DATA　(111 reports)

1978－1989
名古屋大学プラズマ研究所

1989－2004
核融合研　研究・企画情報センター

2004－2009
核融合研
連携研究センター原子分子データ研究室

2010-
核融合研
核融合システム研究系
原子分子過程研究部門

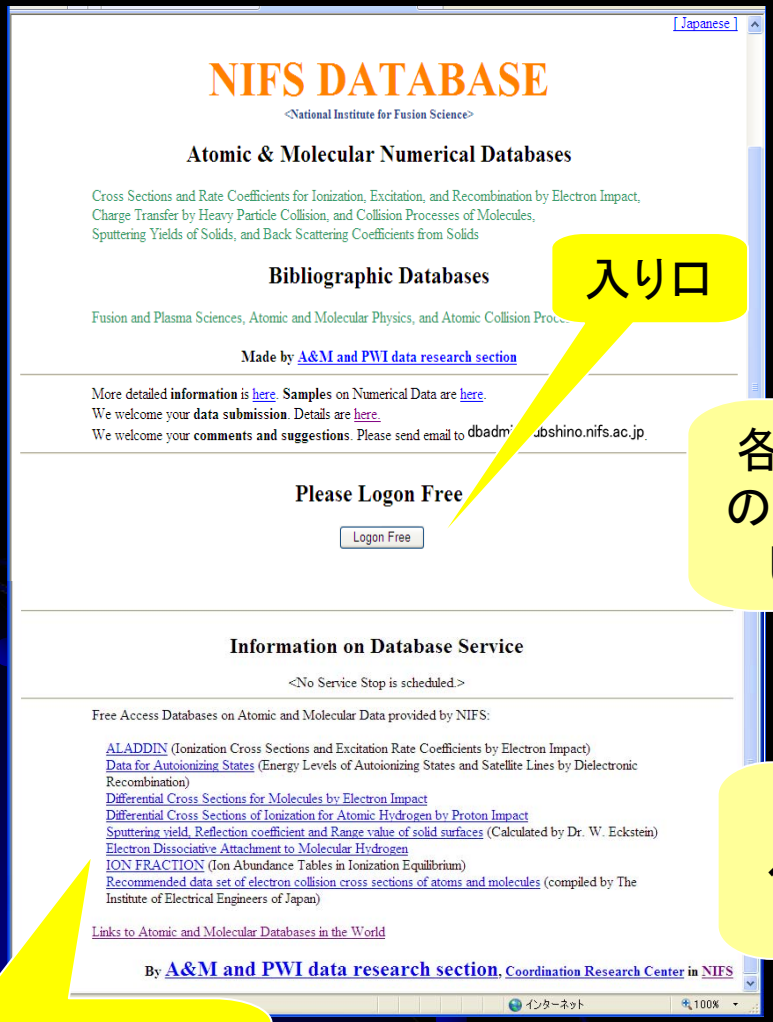
1977－
IAEA 核融合のための原子データ諮問委員会、データセンターネットワーク

1973－1977
名古屋大学プラズマ研
原子過程作業グループ
データ収集
IPPJ-DT-48 ('75), 50('76)

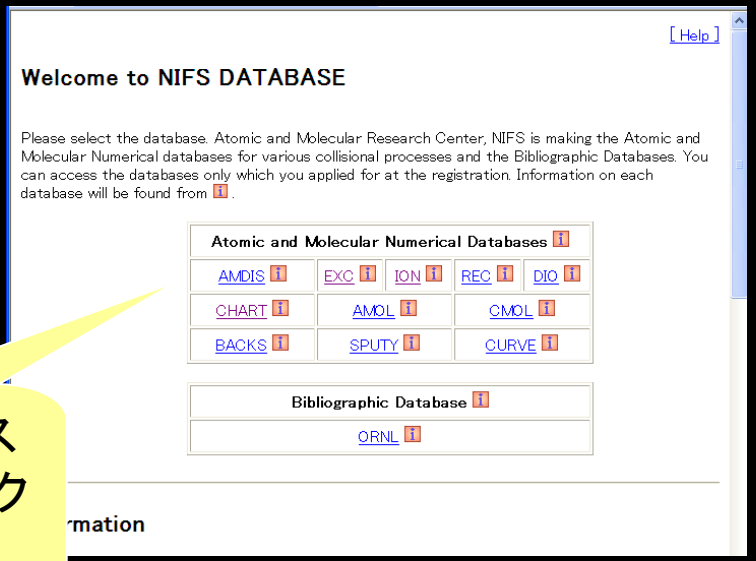
30年以上に及ぶデータ収集と蓄積
（Data Bank）
核融合プラズマ→より広いプラズマ分野へ

1. NIFS 原子分子数値データベース

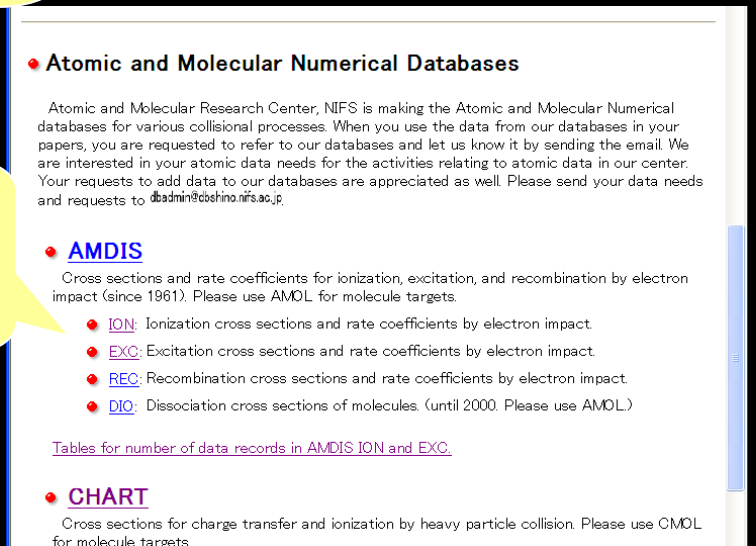
http://dbshino.nifs.ac.jp/



入り口



各データベースの略称をクリックしてアクセス



各データベースの簡単な紹介

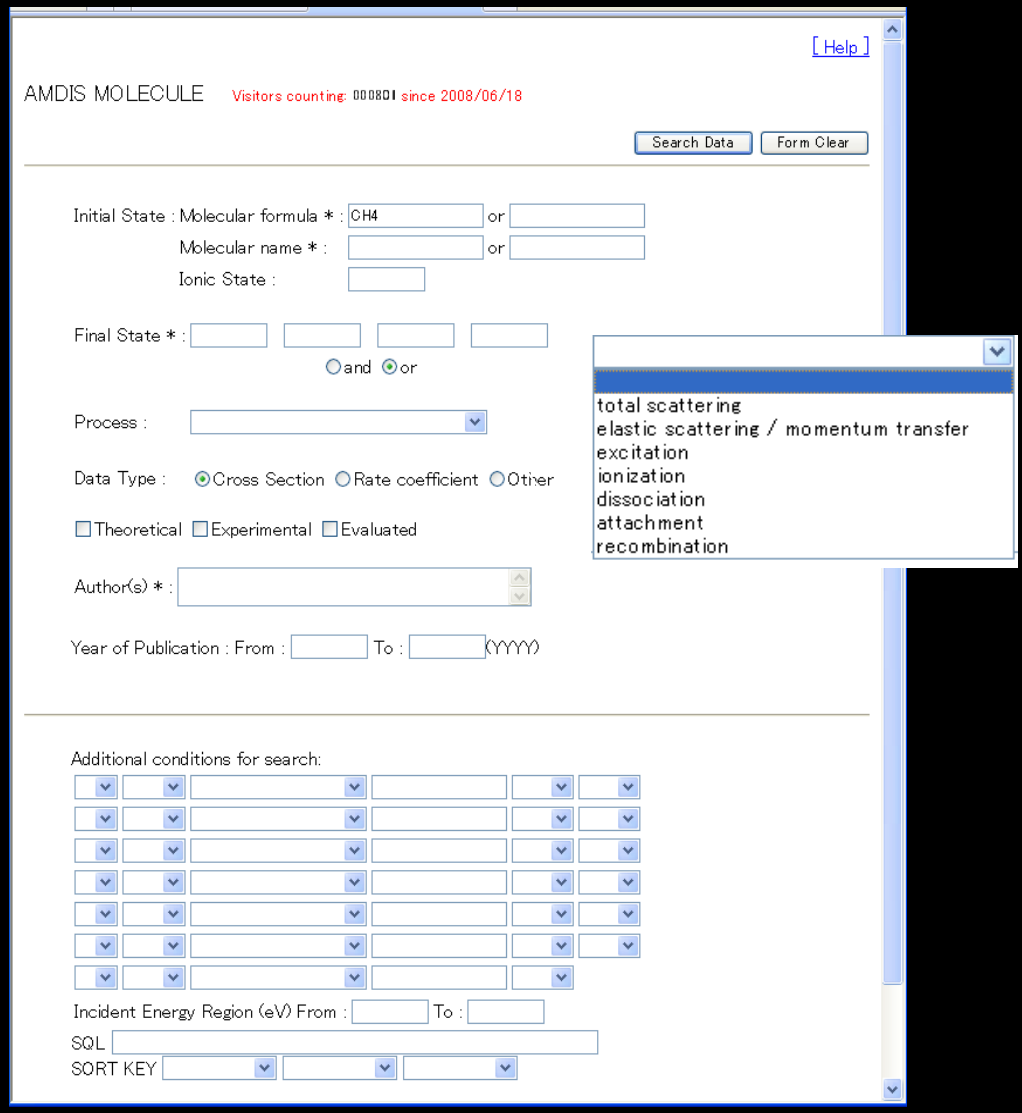
サテライトデータベース

AM and PWI 数値Database (http://dbshino.nifs.ac.jp)

データベース名		内容	Period	データ件数 (2011年8月)
AMDIS	EXC	原子・イオンの電子衝突励起過程	1961–2011	463,592 (408,164 (Aug. 2009))
	ION	原子・イオンの電子衝突電離過程		
	DIO	分子の電子衝突解離過程		
	REC	原子・イオンの再結合過程		
CHART		原子ーイオン衝突の荷電交換・電離過程	1957–2010	7,054 (5,305)
AMDIS MOL (AMOL)		分子の電子との各種衝突過程	1956–2008	3,765
CHART MOL (CMOL)		分子の原子との各種衝突過程		
SPUTY		固体のスパッタリングイールド	1931–2000	1,241
BACKS		固体表面での後方散乱係数	1976–2002	396
(AM Bibliographic database)				
ORNL		ORNL(USA)で作成した原子衝突過程に関する文献データベース	1959–2008	77,714

AMOL 分子の電子衝突過程

- 分子の電子衝突による各種反応過程の断面積、速度係数
- 分子名（化学式、英語名）や反応過程などで検索できる。
- CMOL（分子の原始衝突による各種反応過程）も同様



AMOL： 例 O_2

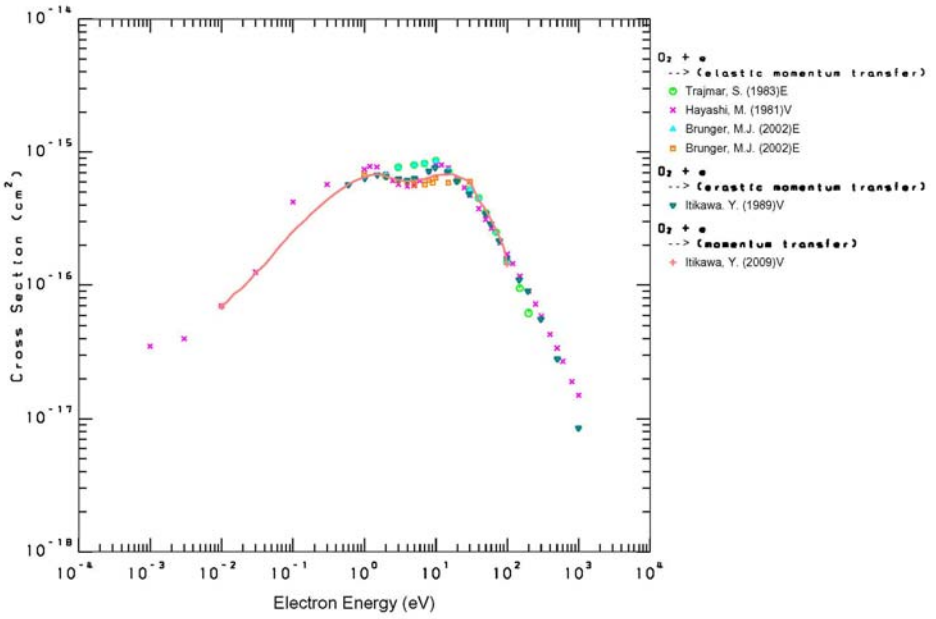
衝突過程ごとに分類したリスト。

Momentum transfer
断面積。
市川の評価データ
(2009)を実線で表示

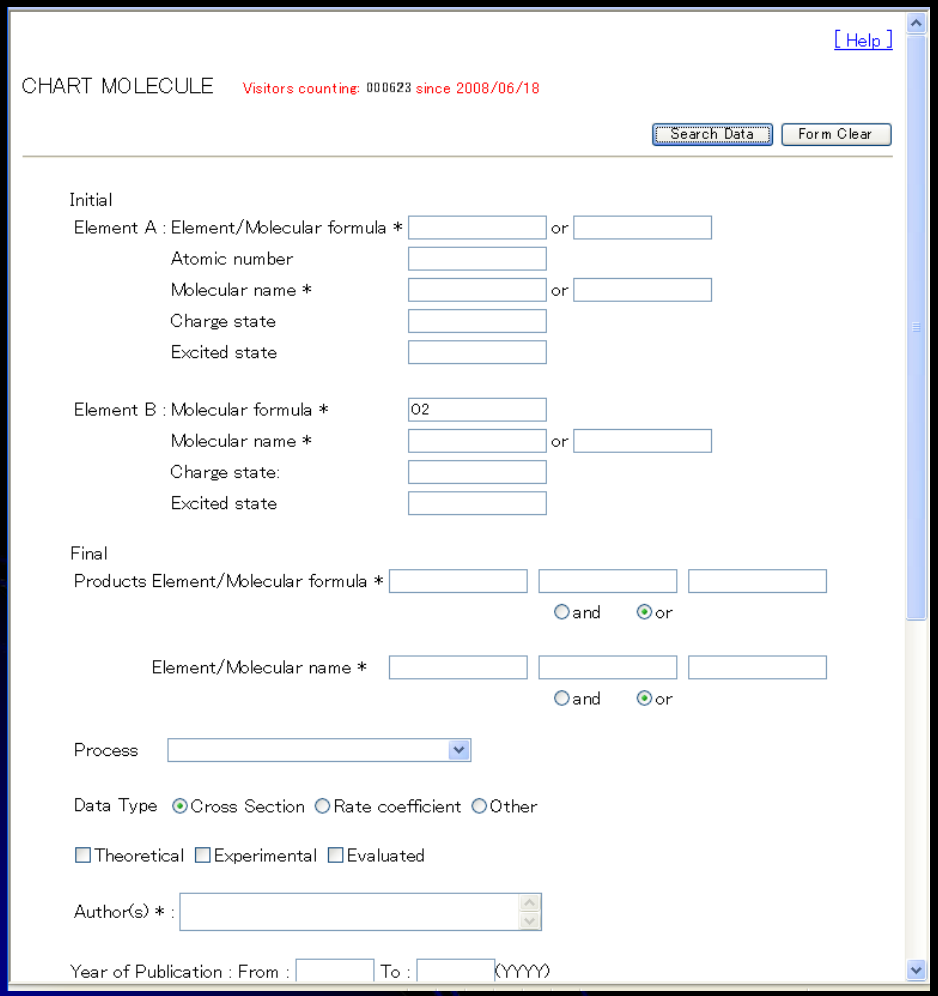
Found Result in AMDIS MOLECULE

Found 130 Title(s)

☑ All Data List	130 records found
☐ O_2 + e --> (SR continuum)	2 records found
☐ O_2 + e --> (W=9.7-12.1eV)	1 records found
☐ O_2 + e --> (dissociative electron attachment)	1 records found
☐ O_2 + e --> (elastic momentum transfer)	4 records found
☐ O_2 + e --> (elastic scattering)	9 records found
☐ O_2 + e --> (elastic)	1 records found
☐ O_2 + e --> (erastic momentum transfer)	1 records found
☐ O_2 + e --> (erastic scattering)	1 records found
☐ O_2 + e --> (ionization)	1 records found
☐ O_2 + e --> (longest band)	1 records found
☐ O_2 + e --> (momentum transfer)	1 records found
☐ O_2 + e --> (second band)	1 records found
☐ O_2 + e --> (the longest band)	1 records found
☐ O_2 + e --> (the second band)	1 records found
☐ O_2 + e --> (total dissociation)	1 records found
☐ O_2 + e --> (total double ionization)	1 records found
☐ O_2 + e --> (total ionization)	1 records found
☐ O_2 + e --> (total scattering)	12 records found
☐ O_2 + e --> (total single ionization)	1 records found
☐ O_2 + e --> $A\,^3\Sigma + c\,^3\Delta + c\,^1\Sigma$	1 records found



CMOL： 分子の重粒子衝突過程



- 入射イオン、標的分子を指定して検索
- H_2（D_2），N_2，炭化水素、CO，CO_2等が中心。
- データ数はまだあまり多くない。
- 標的O_2は44セット。

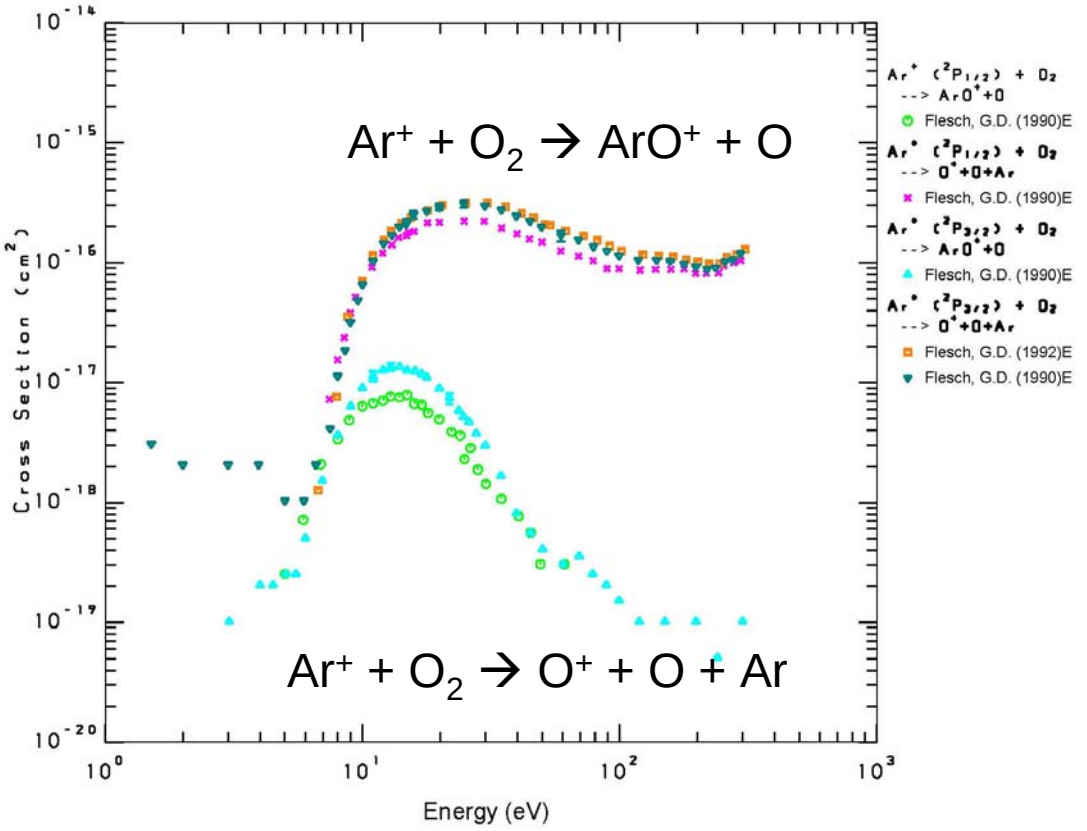
CMOL: 例 O_2

[Help]

Found Result in CHART MOLECULE

Found 44 Title(s)

☑ All Data List	44 records found
☐ $Ar^+ (^2P_{1/2}) + O_2$ --> $ArO^+ + O$	1 records found
☐ $Ar^+ (^2P_{1/2}) + O_2$ --> $O^+ + O + Ar$	1 records found
☐ $Ar^+ (^2P_{3/2}) + O_2$ --> $ArO^+ + O$	1 records found
☐ $Ar^+ (^2P_{3/2}) + O_2$ --> $O^+ + O + Ar$	2 records found
☐ $C^+ (^2P) + O_2$ --> C	1 records found
☐ $C^+ + O_2$ --> $C + O_2^+$	1 records found
☐ $H + O_2$ --> H^+	1 records found
☐ $H^+ + O_2$ (1s) --> $H(n=1) + O_2^+$	1 records found
☐ $H^+ + O_2$ --> H	1 records found
☐ $H^+ + O_2$ --> $H + O_2^+$	2 records found
☐ $He + O_2$ --> He^+	1 records found
☐ $He + O_2$ --> He^+ (CS)	1 records found
☐ $He + O_2$ --> He^{2+}	2 records found
☐ $He + O_2$ --> He^{2+} (CS)	3 records found
☐ $He^+ + O_2$ (1s) --> $He(n=1) + O_2^+$	1 records found
☐ $He^+ + O_2$ --> He	2 records found
☐ $He^+ + O_2$ --> He (CS)	1 records found
☐ $He^+ + O_2$ --> $He + O_2^+$	1 records found
☐ $He^+ + O_2$ --> He^{2+}	2 records found
☐ $He^+ + O_2$ --> He^{2+} (CS)	1 records found



データ入力・アップデート

- 原子分子過程部門の少人数スタッフ、および、核融合研の共同研究として、原子物理学研究者のボランティアによるデータ収集活動によりデータ入力、アップデートを行っているのが現状。なかなか網羅できない。

2. サテライトデータベース
dbshino の表紙にリンク

検索機能のないデータベース。テキストファイル等でデータを公開。
共同研究などの成果の公開

- ALADDIN (電子衝突による電離断面積と励起速度係数) (英語)
- 二重励起状態のデータベース (二重励起状態のエネルギーレベルと二電子性再結合によるサテライト線) (英語)
- 電子衝突による分子の微分断面積データベース (英語)
- 陽子衝突による水素原子の電離微分断面積(英語)
- 水素分子への電子の解離付着係数 (英語)
- 電離平衡時のイオン比表 (英語)
- 固体表面のスパッタリング収率、反射係数、飛程値のデータベース (Eckstein博士の計算による) (英語)
- PWI計算コードライブラリー
- 原子・分子の電子衝突断面積の推奨データセット（電気学会提供）
- 光吸収 (英語)

故　林先生の原子分子文献・数値データベース

- 林先生（故人）によって、67の原子分子の文献及び断面積データの収集が行なわれたが、文献データベースはほとんどが未発表
- 以下の18の原子・分子の文献データ（20世紀に出版された文献情報）が、NIFS-DATAとして2003-2004年に出版されているが、のこりはまだ。その中に、O_2も含まれる。

NIFS-DATA-72 (Ar),
NIFS-DATA-74 (CO_2),
NIFS-DATA-76 (SF_6),
NIFS-DATA-77 (N_2),
NIFS-DATA-79 (Xe),
NIFS-DATA-80 (F_2, Cl_2, Br_2, I_2),
NIFS-DATA-81 (水蒸気),
NIFS-DATA-82 (H_2),
NIFS-DATA-83 (HF, HCl, HBr, HI),
NIFS-DATA-87 (NH_3, PH_3),
NIFS-DATA-90 (CH_4)

CH4

Table QT-1. Summary of the experimental study of grand total cross section Q_T for CH_4.

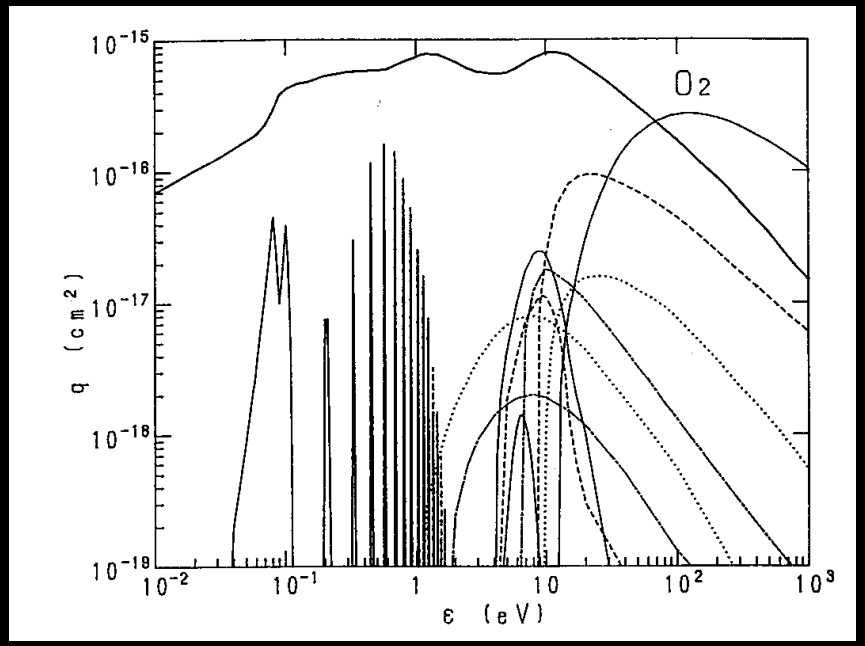
	Author	year	ε (eV)	error (%)
	Brode	1925	1.5 - 320	
	Bruche	1927	1 - 44	
	Bruche	1929	1 - 50	
	Ramsauer	1929	0.2 - 1.3	
	Ramsauer	1931		
	Barbarito	1979	0.1 - 16	
	Hasted	1979	(0.3 - 5)	
	Bonham	1980	(0.5 - 100)	
	Griffith	1982	5 - 400	
*	Ferch	1985	0.085 - 12	1 - 4
	Floeder	1985	5 - 400	
*	Jones	1985	1.3 - 50	3 - 8
*	Lohmann	1986	0.1 - 20	3 - 5
*	Sueoka	1986	1 - 400	4 - 5
*	Dababneh	1988	4.5 - 500	
*	Nishimura	1991	5 - 500	13
*	Zecca	1991	0.9 - 4000	6.5 - 8
*	Kanik	1992	4 - 300	
*	Garcia	1998	400 - 5000	3

( ) The data are not available.
* These data are shown in the tables.

(from NIFS-DATA-90)

故　林先生のデータベースとしての整備・出版

- 林先生が評価された断面積データは、36の原子分子が、「プラズマ材料科学ハンドブック」(1992)に図として掲載されている。
- 未発表のデータを電気学会の放電委員会の協力のもとで、整備。
- 未発表の4原子分子（Cd, NO, CCl_2F_2, CCl_4）の断面積をデータベースとして整備中。
- 文献データもデータベースとして整備中。



「プラズマ材料科学ハンドブック」に掲載されているO_2の電子衝突断面積

3 世界にある原子分子データベース

- インターネットでアクセスできる原子分子データベースは「プラズマ原子分子過程ハンドブック」17章で紹介。
- リンクリスト（上記の一部は未掲載）
  http://dpc.nifs.ac.jp/dblinks1.html
- 応用分野ごとのコミュニティでデータベースが作られて公開されている
- 分子の衝突過程データベースはあまり多くない

韓国NFRIの原子分子データベース

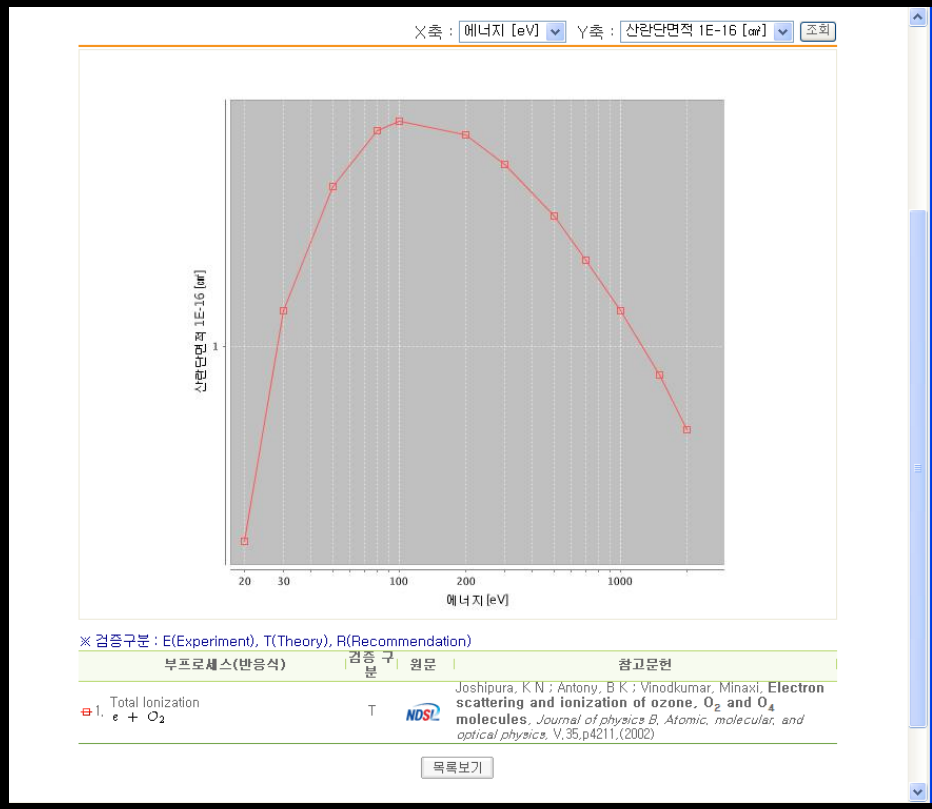
- 韓国のNFRIが、独自にプラズマ応用のための原子分子データベースを作成。原著論文の調査および独自のデータ評価を行っている。表示は韓国語。
  シミュレーションコードも別途開発
- 分子：
  http://plasma.kisti.re.kr/webs/property/property_molecule.jsp

http://plasma.kisti.re.kr/

NFRI（韓国）のデータベース

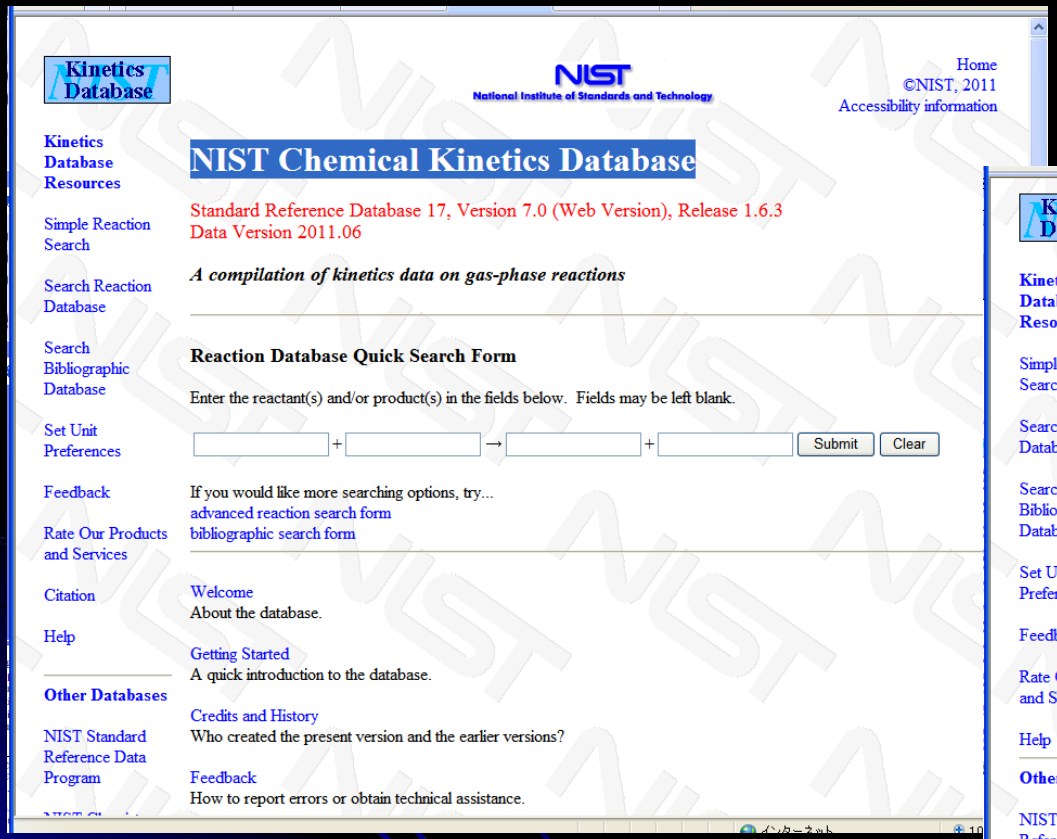
- 分子種を選んだあと、衝突過程を指定して検索

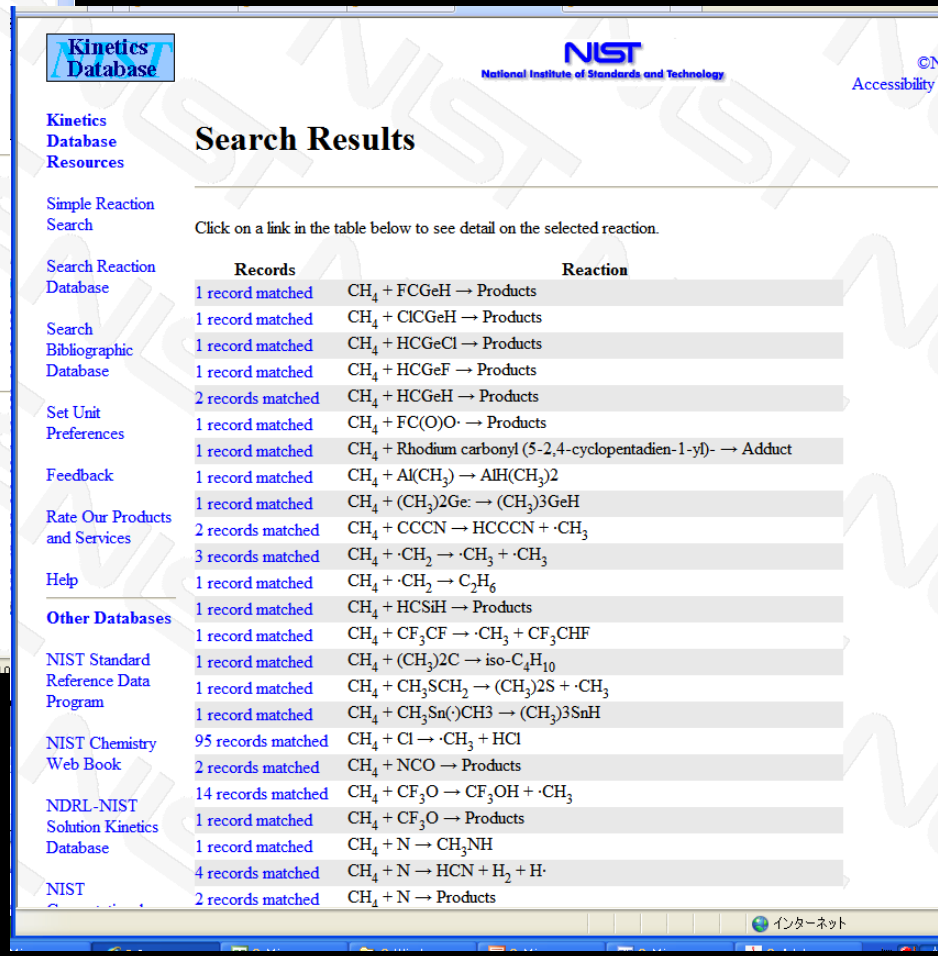
NFRIのデータベース



- 原著論文ごとに結果が表示。断面積データはグラフ表示できる。

NIST Chemical Kinetics Database
http://kinetics.nist.gov/kinetics/





- 化学反応式に分子記号等を入れて、データを検索

NIST Chemical Kinetics Database

Kinetics Database

NIST National Institute of Standards and Technology

Home
©NIST, 2000
Accessibility information

Kinetics Database Resources

Simple Reaction Search

Search Reaction Database

Search Bibliographic Database

Set Unit Preferences

Feedback

Rate Our Products and Services

Help

Other Databases

NIST Standard Reference Data Program

NIST Chemistry Web Book

NDRL-NIST Solution Kinetics Database

Search Results

$$CH_4 + O_2 \rightarrow \cdot CH_3 + HO_2$$

Rate expression: $k(T) = A\,(T/298\ K)^n\ e^{-Ea/RT}$
Rate expression units:
First order: s^{-1}
Second order: cm^3/molecule s
Third order: cm^6/molecule^2 s
R = 8.314472E-03 kJ / mole K

Energy Units	kJ	Molecular Units	Molecule
Pressure Units	Pa	Temperature Units	K
Base Volume Unit	cm	Reference Temperature	298.0
Evaluation Temperature	298.0		

Use the Plot checkboxes to select data for plotting. Plot selected data using the "Create Plot" button. Click the squib to see extra information about a particular rate constant. Additional help is available.

Create Plot | Check all... | 2nd order | Uncheck All

Plot	Squib	Temp [K]	A	n	Ea [kJ]	k(298.00 K)	Order
Review							
☐	1992BAU/COB411-429	500 - 2000	6.59E-11		238		2
☐	1986TSA/HAM1087	300 - 2500	6.71E-11		238		2
Experiment							
☐	1961FAL/KNO782-791	830	<0.36				2
	Reference reaction: $C_2H_6 + O_2 \rightarrow \cdot C_2H_5 + HO_2$						2

Theory

ページが表示されました | インターネット | 100%

Kinetics Database Resources

Simple Reaction Search

Search Reaction Database

Search Bibliographic Database

Set Unit Preferences

Feedback

Rate Our Products and Services

Citation

Help

Other Databases

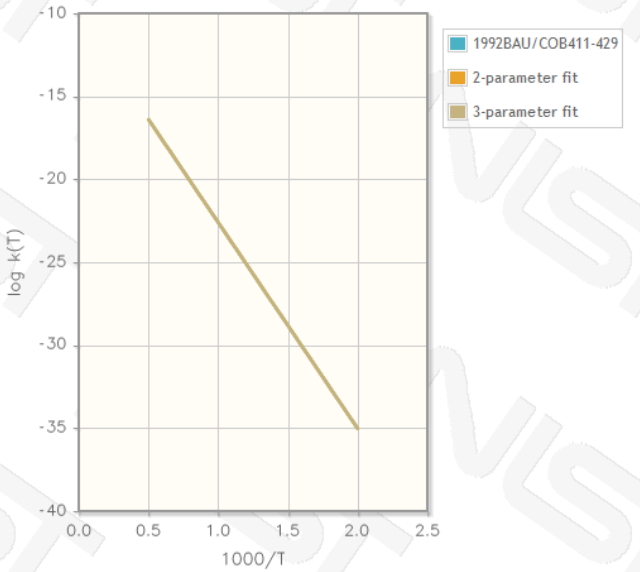
NIST Standard Reference Data Program

NIST Chemistry Web Book

NDRL-NIST Solution Kinetics Database

NIST Computational

Rate Constant Plot



Fit of Arrhenius parameters to set:
Temperature range: 500 - 2000 K

Two-parameter fit:

$k(T) = Aexp(-E_a/RT)$

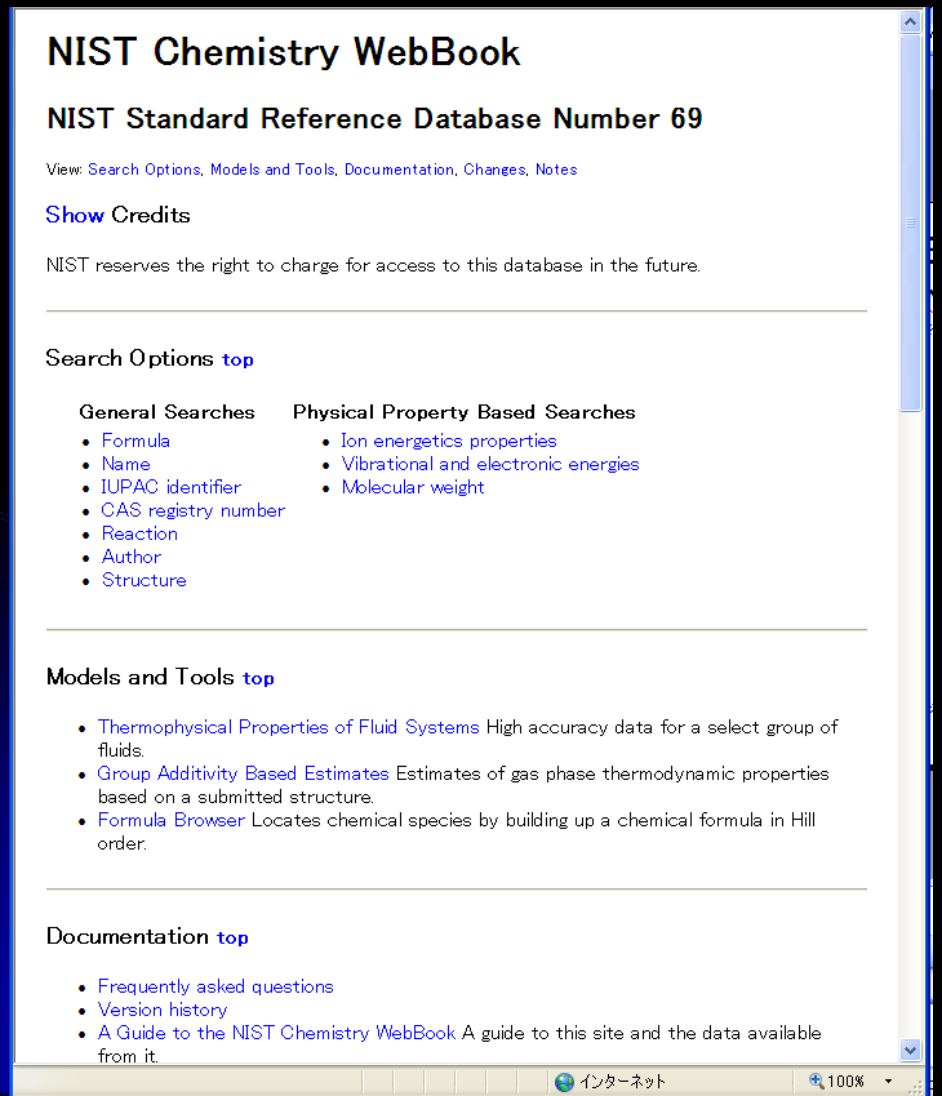
A = 6.59x10^{-11} [cm^3/molecule s]
E_a = 238 [kJ]
RMSD = 0.0

Three-parameter fit:

$k(T) = A(T/T_{ref})^n exp(-E_a/RT)$

A = 6.59x10^{-11} [cm^3/molecule s]
n = 0.0
T_{ref} = 298 [K]
E_a = 238 [kJ]
RMSD = 0.0

NIST Chemistry Webbook
http://webbook.nist.gov/chemistry



- 原子分子の化学的性質を網羅したハンドブック
- 分子構造や、気相反応などのエンタルピー、エントロピー、自由エネルギーなど、電離ポテンシャル、解離イオン種のappearance energyなどのデータとそのリファレンスなどが調べられる。

NIST Chemistry Webbook

Oxygen

- **Formula:** O_2
- **Molecular weight:** 31.9988
- **IUPAC Standard InChI:**
  - InChI=1S/O2/c1-2
  - Download the identifier in a file.
- **IUPAC Standard InChIKey:** MYMOFIZGZYHOMD-UHFFFAOYSA-N
- **CAS Registry Number:** 7782-44-7
- **Chemical structure:** O═O

  This structure is also available as a 2d Mol file .
- **Other names:** Molecular oxygen; Oxygen molecule; Pure oxygen; O2; Liquid-oxygen-; UN 1072; UN 1073; Dioxygen
- **Permanent link** for this species. Use this link for bookmarking this species for future reference.
- **Information on this page:**
  - Gas phase thermochemistry data
  - Reaction thermochemistry data (reactions 1 to 50)
  - Gas phase ion energetics data
  - Ion clustering data
  - References
  - Notes / Error Report
- **Other data available:**
  - Phase change data
  - Reaction thermochemistry data: reactions 51 to 68
  - Henry's Law data
  - Mass spectrum (electron ionization)
  - Constants of diatomic molecules
  - Fluid Properties
- **Data at other public NIST sites:**
  - Microwave spectra (on physics lab web site)
  - Electron-Impact Ionization Cross Sections (on physics web site)
  - Computational Chemistry Comparison and Benchmark Database
  - Gas Phase Kinetics Database
- **Options:**
  - Switch to calorie-based units

Data at NIST subscription sites:

ページが表示されました　インターネット　100

Reaction thermochemistry data

Go To: Top, Gas phase thermochemistry data, Gas phase ion energetics data, Ion clustering data, References, Notes / Error Report

Data compiled as indicated in comments:
B - J.E. Bartmess
M - M. M. Meot-Ner (Mautner) and S. G. Lias
ALS - H.Y. Afeefy, J.F. Liebman, and S.E. Stein

Note: Please consider using the reaction search for this species. This page allows searching of all reactions involving this species. A general reaction search form is also available. Future versions of this site may rely on reaction search pages in place of the enumerated reaction displays seen below.

Reactions 1 to 50

$O_2^- +$ ◦═◦ $= (O_2^- \bullet$ ◦═◦ $)$

By formula: $O_2^- + O_2 = (O_2^- \bullet O_2)$

Enthalpy

Entropy

Free energy

Quantity	Value	Units	Method	Reference	Comment
$\Delta_f H°$	48. ± 20.	kJ/mol	AVG	N/A	Average of 5 out of 7 values; Individual data points
Quantity	**Value**	**Units**	**Method**	**Reference**	**Comment**
$\Delta_r S°$	102.	J/mol*K	PHPMS	Hiraoka, 1988	gas phase; *M*
$\Delta_r S°$	130.	J/mol*K	PHPMS	Conway and Nesbit, 1968	gas phase; *M*
Quantity	**Value**	**Units**	**Method**	**Reference**	**Comment**
$\Delta_f G°$	13. ± 4.6	kJ/mol	TDAs	Hiraoka, 1888	gas phase; see also Sherwood, Hanold, et al., 1996. Aquino, Taylor, et al., 2001 calns indicate rectangular anion; *B*
$\Delta_r G°$	16. ± 4.2	kJ/mol	TDAs	Conway and Nesbit, 1968	gas phase; *B*
$\Delta_r G°$	23. ± 4.2	kJ/mol	IMRE	Payzant J.D. and Kebarle, 1972	gas phase; *B*
$\Delta_r G°$	13. ± 4.2	kJ/mol	IMRE	Pack and Phelps, 1971	gas phase; *B*

インターネット　100%

UMIST database for Astrochemistry
http://www.udfa.net/

- Astron. &Astrophys., 466, 1197–1204 (2007)
- 2体衝突　速度係数のフィッティング関数
  $k = \alpha\ (T/300)^{\beta}\ \exp(-\gamma/T)\ \mathrm{cm^3\ s^{-1}}$

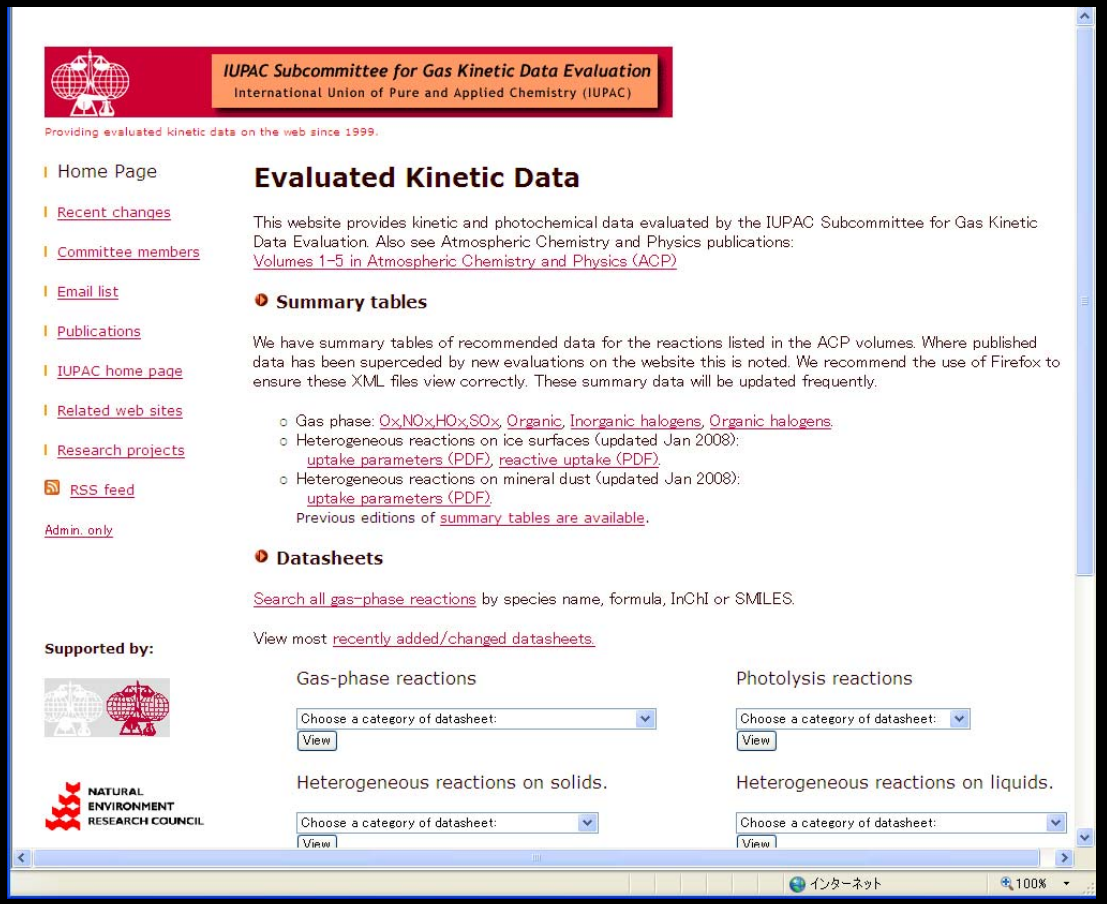
udfa'06 C2H4 Search or Select a species... or Download UDfA...

Found 122 'C2H4' reactions, showing 1 - 50 next 50

	Reaction	α	β	γ	T_l - T_u (K)	Accuracy	Source
1	$C + C_2H_4 \rightarrow C_3H_3 + H$	3.00E-10	-0.11	0.0	15 - 300	within 25%	Measurement
2	$C^+ + C_2H_4 \rightarrow C_3H_2^+ + H_2$	3.40E-10	0.00	0.0	10 - 41000	within 25%	Measurement
3	$C^+ + C_2H_4 \rightarrow C_3H^+ + H_2 + H$	8.50E-11	0.00	0.0	10 - 41000	within 25%	Measurement
4	$C^+ + C_2H_4 \rightarrow C_2H_4^+ + C$	1.70E-11	0.00	0.0	10 - 41000	within 25%	Measurement
5	$C^+ + C_2H_4 \rightarrow C_2H_3^+ + CH$	8.50E-11	0.00	0.0	10 - 41000	within 25%	Measurement
6	$C^+ + C_2H_4 \rightarrow H_2C_3H^+ + H$	1.02E-09	0.00	0.0	10 - 41000	within 25%	Measurement
7	$C_2 + C_2H_4 \rightarrow C_4H_3 + H$	3.50E-10	0.00	0.0	24 - 300	within 50%	Measurement
8	$C_2H_2^+ + C_2H_4 \rightarrow C_4H_5^+ + H$	3.17E-10	0.00	0.0	10 - 41000	within 25%	Lit. Search
9	$C_2H_2^+ + C_2H_4 \rightarrow C_2H_4^+ + C_2H_2$	4.14E-10	0.00	0.0	10 - 41000	within 25%	Lit. Search
10	$C_2H_2^+ + C_2H_4 \rightarrow H_2C_3H^+ + CH_3$	6.62E-10	0.00	0.0	10 - 41000	within 25%	Lit. Search
11	$C_2H_2^+ + CH_3CH_3 \rightarrow C_2H_4^+ + C_2H_4$	2.48E-10	0.00	0.0	10 - 41000	within 25%	Measurement
12	$C_2H_2^+ + SiH_4 \rightarrow Si^+ + C_2H_4 + H_2$	6.60E-11	0.00	0.0	10 - 41000	within 50%	Measurement
13	$C_2H_2^+ + SiH_4 \rightarrow SiH_2^+ + C_2H_4$	1.65E-10	0.00	0.0	10 - 41000	within 50%	Measurement
14	$C_2H_3 + C_2H_4^+ \rightarrow C_2H_4 + C_2H_3^+$	5.00E-10	0.00 / -0.50	0.0	10 - 41000	factor 2	Lit. Search
15	$C_2H_3^+ + C_2H_4 \rightarrow C_2H_5^+ + C_2H_2$	8.90E-10	0.00	0.0	10 - 41000	within 25%	Measurement
16	$C_2H_3^+ + CH_3CH_3 \rightarrow C_2H_5^+ + C_2H_4$	2.91E-10	0.00	0.0	10 - 41000	within 25%	Measurement

IUPAC Evaluated Kinetic Data
http://www.iupac-kinetic.ch.cam.ac.uk/

- 大気化学のための、原子分子反応、原子分子と固体や液体との評価済み反応速度係数等のデータ表。



IUPAC Evaluated Kinetic Data

IUPAC Subcommittee for Gas Kinetic Data Evaluation
International Union of Pure and Applied Chemistry (IUPAC)

Providing evaluated kinetic data on the web since 1999.

- Home Page
- Recent changes
- Committee members
- Email list
- Publications
- IUPAC home page
- Related web sites
- MCM-IUPAC project
- RSS feed

Use Firefox for best results when viewing XHTML files.

Data sheets for gas phase reactions of Ox species

To cite material from the datasheets below we suggest "R. Atkinson, D. L. Baulch, R. A. Cox, J. N. Crowley, R. F. Hampson, R. G. Hynes, M E. Jenkin, M J. Rossi, and J. Troe, Atmos. Chem. Phys., 4, 1461–1738 (2004); IUPAC Subcommittee for Gas Kinetic Data Evaluation, http://www.iupac-kinetic.ch.cam.ac.uk." Vol 1

A zip file containing all of the PDF format datasheets for this category is available : iupac_ox_gasphase.zip. Please do not redistribute these datasheets or zipfile. They are for personal use only.

Our ID ACP ID	Reactants		Products	Formats	Last change in preferred values	Last evaluated
Ox1	$O + O_2 + M$	→		PDF Word XML XHTML	2002-03-09	2002-03-09
Ox2	$O + O_3$	→		PDF Word XML XHTML	2001-10-02	2001-10-02
Ox3	$O(^1D) + O_2$	→		PDF Word XML XHTML	2001-10-02	2001-10-02
Ox4	$O(^1D) + O_3$	→		PDF Word XML XHTML	2001-10-02	2001-10-02
Ox5	$O_2^* + O_3$	→		PDF Word XML XHTML	2001-10-02	2001-10-02
Ox6	$O_2(^3\Sigma_g^-,v) + M$	→		PDF Word XML XHTML	2001-10-02	2001-10-02
Ox7	$O_2(^1\Delta_g) + M$	→		PDF Word XML XHTML	2001-10-02	2001-10-02
Ox8	$O_2(^1\Delta_g) + O_3$	→		PDF Word XML XHTML	2001-10-02	2001-10-02
Ox9	$O_2(^1\Sigma_g^+) + M$	→		PDF Word XML XHTML	2001-10-02	2001-10-02
Ox10	$O_2(^1\Sigma_g^+) + O_3$	→		PDF Word XML XHTML	2001-10-02	2001-10-02

Providing evaluated kinetic data on the web since 1999.

IUPAC Subcommittee on Gas Kinetic Data Evaluation

Website: http://www.iupac-kinetic.ch.cam.ac.uk/ See website for latest evaluated data. Datasheets can be downloaded for personal use only and must not be retransmitted or disseminated either electronically or in hardcopy without explicit written permission.

This datasheet last evaluated: 2001-10-02 ; last change in preferred values: 2001-10-02 ; last peer-reviewed publication: 2004-03-09

$$O_2(^1Delta_g) + M \rightarrow O_2(^3Sigma_g^-) + M \quad (1) \qquad \Delta H^o = -94.3 \text{ kJ mol}^{-1}$$

Rate Coefficient Data

Absolute Rate Coefficients

Rate Coefficient (k) / $cm^3molecule^{-1}s^{-1}$	Third Body	Unknown / UNKNOWN	Reference	Techniques and Comments
$(1.51 \pm 0.05) \times 10^{-18}$	O2	298	Borrell et al., 1977	DF-CL (a)
$(1.47 \pm 0.05) \times 10^{-18}$	O2	298	Leiss et al., 1978	(b)
$(1.65 \pm 0.07) \times 10^{-18}$	O2	298	Raja et al., 1986	DF-CL (a)
$3.15 \times 10^{-18} \exp(-205/T)$	O2	100–450	Billington and Borrell, 1986	DF-CL (a)
1.57×10^{-18}		298		
1.4×10^{-19}	N2	300	Collins et al., 1973	FP-VUVA (c)
5.6×10^{-18}	H2O	298	Findlay and Snelling, 1971	(d)
$< 1.5 \times 10^{-20}$	CO2	298		
$(4 \pm 1) \times 10^{-18}$	H2O	298	Becker et al., 1971	(e)

Comments

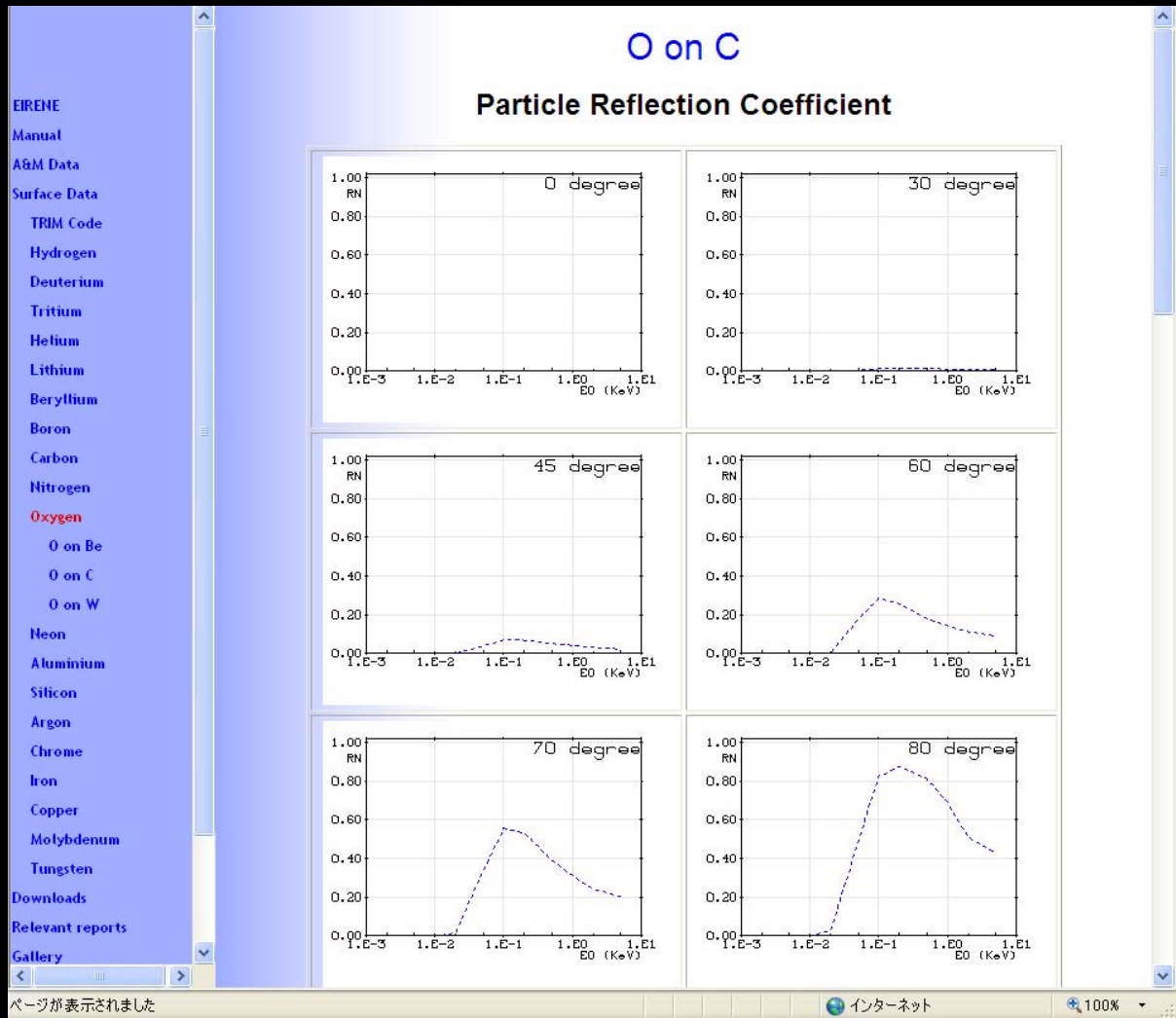
(a) Discharge flow system. O_2 ($^1\Delta$) was monitored by dimol emission at 634 nm or from O_2 ($^1\Sigma$) emission at 762 nm.

(b) Large static reactor. O_2 ($^1\Delta$) was monitored by emission at 1.27 μm.

(c)O_2 ($^1\Delta$) was detected by time-resolved absorption at 144 nm.

Surface Interaction Database / TRIM code

- TRIMコードでの計算結果（粒子反射係数、エネルギー反射係数、運動量反射係数の角度依存性）の図を表示。
- Online database?
- E<100eVは精度が悪い



Online calculation sites & open atomic codes

- ハンドブックに記載した、オンライン計算サイト、及び公開している原子コードは、基本的に原子、原子イオンの原子データに関するものばかり。
- 分子の電子衝突電離断面積：NIST　BEB法による経験式
  http://physics.nist/gov/PhysRefData/Ionization/Xsection.html
  経験式の中で用いる係数は、原子・分子コードでの計算が必要。

燃焼化学関係のデータベース

- プラズマ支援燃焼：例： I. N. Kosarev et al., Combustion and Flame 154 (2008) 569.
- 点火過程のkinetics=RAMEC:
  E.L. Petersen, D.F. Davidson, R.K. Hanson, Combust. Flame 117 (1999) 272–290.
- GMI-Mech 1.2 (35種の分子・原子,190反応過程)
  M. Frenklach, H. Wang, M. Goldenberg, G.P. Smith, D.M. Golden, C.T. Bowman, R.K. Hanson, W.C. Gardiner,V. Lissianski, in: GRI, Topical Report No. GRI-95/0058, 1995.
  http://www.me.berkeley.edu/gri-mech/

GRI-Mech
http://www.me.berkeley.edu/gri-mech/

- 例：炭化水素とOHの反応データ

Number	Reaction	Rate Coefficient A T^n exp(-E/RT)			Served as Optimization Variable in GRI-Mech Releases
		A (mol,cm3,s)	n (T in K)	E (cal/mol)	
11	**O + CH4 -> OH + CH3**	1.02E+09	1.5	8600	1.2; 2.1; 3.0
52	H + CH3 (+M) -> CH4 (+M)	pressure dependent			3.0
53	**H + CH4 -> CH3 + H2**	6.60E+08	1.6	10840	1.1; 1.2; 2.1; 3.0
98	**OH + CH4 -> CH3 + H2O**	1.00E+08	1.6	3120	1.1; 1.2; 2.1; 3.0
118	**HO2 + CH3 -> O2 + CH4**	1.00E+12			1.1; 1.2; 2.1; 3.0
130	CH + CH4 -> H + C2H4	6.00E+13			
139	**CH2 + CH4 -> CH3 + CH3**	2.46E+06	2.0	8270	3.0
150	**CH2(S) + CH4 -> CH3 + CH3**	1.60E+13		-570	3.0
157	CH3 + H2O2 -> HO2 + CH4	2.45E+04	2.5	5180	
160	CH3 + HCO -> CH4 + CO	2.65E+13			1.1; 1.2; 2.1
161	CH3 + CH2O -> HCO + CH4	3.32E+03	2.8	5860	
162	CH3 + CH3OH -> CH2OH + CH4	3.00E+07	1.5	9940	
163	CH3 + CH3OH -> CH3O + CH4	1.00E+07	1.5	9940	
164	CH3 + C2H4 -> C2H3 + CH4	2.27E+05	2.0	9200	
165	**CH3 + C2H6 -> C2H5 + CH4**	6.14E+06	1.7	10450	3.0
211	NNH + CH3 -> CH4 + N2	2.50E+13			
303	CH3 + CH3CHO -> CH3 + CH4 + CO	2.72E+06	1.8	5920	
317	CH3 + C3H8 -> C3H7 + CH4	9.03E-01	3.6	7154	

CH4 | only | Find Reactions | Instructions

ページが表示されました

O + CH4 -> OH + CH3

k = 1.02E+09 T^1.5 exp(-8600 cal/mol /RT) cm3/mol s

SOURCE:
Tsang, W., and Hampson, R.F. (1986) *J. Phys. Chem. Ref. Data* **15**, 1087.

COMMENTS:
Served as an optimization variable in GRI-Mech 1.2, 2.1 and 3.0 releases. The rate coefficient was not changed.

Temp (K)	delta-S (cal/mol K)	delta-H (kcal/mol)	kf (mol,cm3,s)	kr	Keq
300	7.3	2.8	2.88E+06	8.08E+06	3.56E-01
500	8.4	3.2	1.98E+09	7.50E+08	2.65E+00
1000	8.6	3.3	4.26E+11	2.97E+10	1.43E+01
1500	7.8	2.3	3.31E+12	1.42E+11	2.33E+01
2000	7.0	.9	1.05E+13	3.89E+11	2.70E+01
2500	6.3	-.8	2.26E+13	8.30E+11	2.72E+01
3000	5.6	-2.7	3.96E+13	1.54E+12	2.57E+01

[Rate coefficient format | Chemkin file | Thermo data | Main menu]

最近のデータベース情勢

- ヨーロッパにおけるVAMDC（Virtual Atomic and Molecular Data Center) プロジェクト

さいごに

- 原子分子データベースの維持、アップデートは、専門家の強力とともに、ユーザーのサポートも大切