

# NIFSにおける原子分子データ活動

加藤太治  
核融合科学研究所

# NIFSの原子分子データ活動

- NIFS一般共同研究, LHD計画共同研究
  - 原子分子データ収集作業会
  - 新しいデータベースシステムの開発(データベース活動支援ツール)
  - EBITを用いた多価イオン分光, 多価イオン-原子衝突実験(NICE共同研究), 電子-重元素イオン電子放出実験, 固体表面反射/スパッタリング等
- 原子分子過程を基盤とした核融合炉プラズマ/材料研究の新展開(国際共同研究拠点形成)
  - 水素/ヘリウム中性ビームの原子過程データ
  - LHDによる高Z元素多価イオンのEUV分光スペクトル解析
  - プラズマ壁相互作用の診断とモデリングの高精度化
- 他分野との連携
  - 太陽上層大気診断のための鉄イオン原子過程データ(国立天文台, 電気通信大学)
  - 放電基礎パラメータ(電気学会調査専門委員会)
  - 原子分子データベース協会(代表:JAEA 佐々木明)
- IAEA IFRC, DCN and CRP
  - “Atomic data for heavy element impurities” (2005-2009) T. Kato
  - “Data for surface composition dynamics relevant to erosion processes” (2007-2011) D. Kato

# 最近のDBアップデートから

核融合研 共同研究 平成18年度－平成20年度  
「LHDの周辺プラズマのための高Z原子及び分子の原子分子  
データベース作成」

(代表:北島昌史 東工大, 所内世話人:坂上裕之)

Ar, Fe, Ni, Kr, Mo, Xe, Wなどの電子衝突および重粒子  
衝突断面積. (活動報告をNIFS-DATAに投稿準備中)

# 原子分子データ収集作業会メンバー

北島昌史(代表、東工大)

日下部俊男(近畿大)

島倉紀之, 副島浩一(新潟大)

奥野和彦(首都大)

森林健悟(JAEA)

五十嵐明則(宮崎大)

Lukas Pichl(ICU)

石井邦和(奈良女子大)

今井 誠, 土田秀次(京大)

鈴木令子(一橋大)

数納広哉(JAMSTEC)

星野正光(上智大)

本橋健次(東京農工大)

森下 亨(電通大)

渡部亜矢子(お茶の水大)

村上 泉, 加藤太治, 坂上裕之(所内世話人), 後藤基志, 森田 繁, 佐藤国憲, 舟場久芳, 井戸 毅, Byron Peterson(NIFS)

**狭義の原子分子若手オールジャパン!**

**実際上の応用を示していくことが重要!  
プラズマ原子分子過程の専門家との協力が  
ますます重要になる!**

# Cross Section Data Compilation of Atomic Data for Electron and Atomic Collisions with High Z elements; Ar, Fe, Ni, Kr, Mo, Xe and W

A working group for updating atomic and molecular collision data in the NIFS database AMDIS (electron scattering) and CHART (ion scattering) has been organized. This group has searched and reviewed literatures for collecting relevant atomic data which are to be included into the database.

## 最近のDBアップデートから

M. Hoshino et al.

“Cross sections for electron-induced resonant vibrational excitations in polyatomic molecules”

NIFS-DATA-105, 2009

Energy loss spectra and differential cross sections measured at some fixed scattered angles. Incident electron energies between 1–30 eV.

### A. Fusion Plasma-related Gases

CH<sub>4</sub>, C<sub>2</sub>H<sub>6</sub>, C<sub>3</sub>H<sub>8</sub>, C<sub>3</sub>H<sub>6</sub>, cyclo-C<sub>3</sub>H<sub>6</sub>, isomers-C<sub>3</sub>H<sub>4</sub>

### B. Processing Plasma-related Gases

C<sub>2</sub>F<sub>4</sub>, C<sub>2</sub>F<sub>6</sub>, C<sub>3</sub>F<sub>8</sub>, cyclo-C<sub>4</sub>F<sub>8</sub>, C<sub>2</sub>F<sub>4</sub>, C<sub>6</sub>F<sub>6</sub>, C<sub>3</sub>F<sub>6</sub>

CH<sub>3</sub>F, CH<sub>2</sub>F<sub>2</sub>, CHF<sub>3</sub>, NF<sub>3</sub>, SiH<sub>4</sub>, Si<sub>2</sub>H<sub>6</sub>, GeH<sub>4</sub>, SiF<sub>4</sub>, F<sub>2</sub>CO

### C. Environmental Issues-related Gases

CF<sub>3</sub>Cl, CF<sub>3</sub>Br, CF<sub>3</sub>I, CO<sub>2</sub>, N<sub>2</sub>O, CO, OCS, CS<sub>2</sub>, H<sub>2</sub>O, H<sub>2</sub>CO, (CH<sub>3</sub>)<sub>2</sub>O, (CH<sub>3</sub>)<sub>2</sub>CO, C<sub>6</sub>H<sub>6</sub>, C<sub>6</sub>H<sub>5</sub>CH<sub>3</sub>, C<sub>6</sub>H<sub>5</sub>CF<sub>3</sub>, 1,1-C<sub>2</sub>H<sub>2</sub>F<sub>2</sub>

核融合研 共同研究 平成21年度申請中

「水素同位体および炭化水素の原子分子データベースの作成」

(代表:北島昌史 東工大, 所内世話人:坂上裕之)

重水素、三重水素や $H_3^+$ を含む水素および炭化水素を含む原子分子過程のデータセットの電子衝突および重粒子衝突断面積についてのデータベースのアップデートを行う。

核融合研 共同研究(研究会) 平成21年度申請中

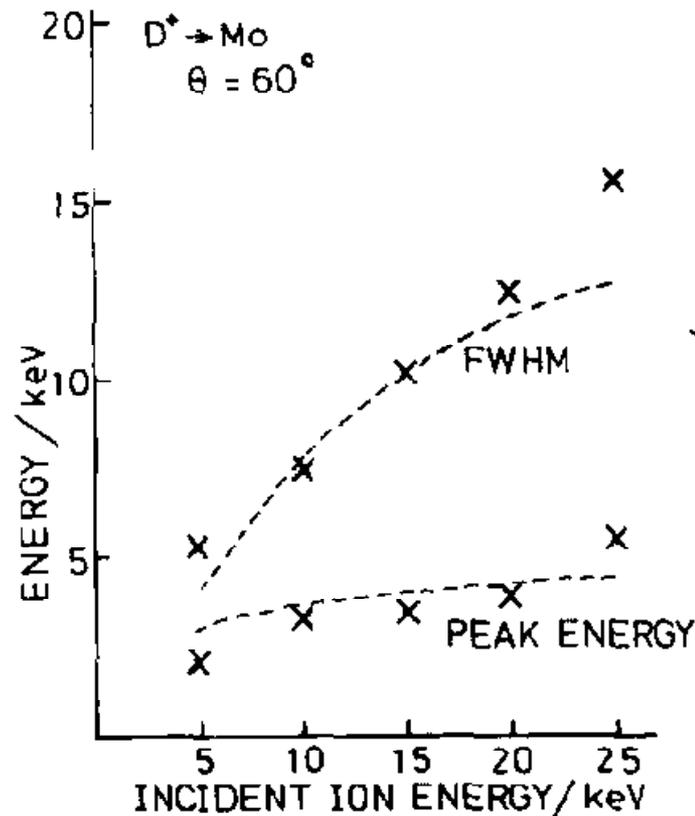
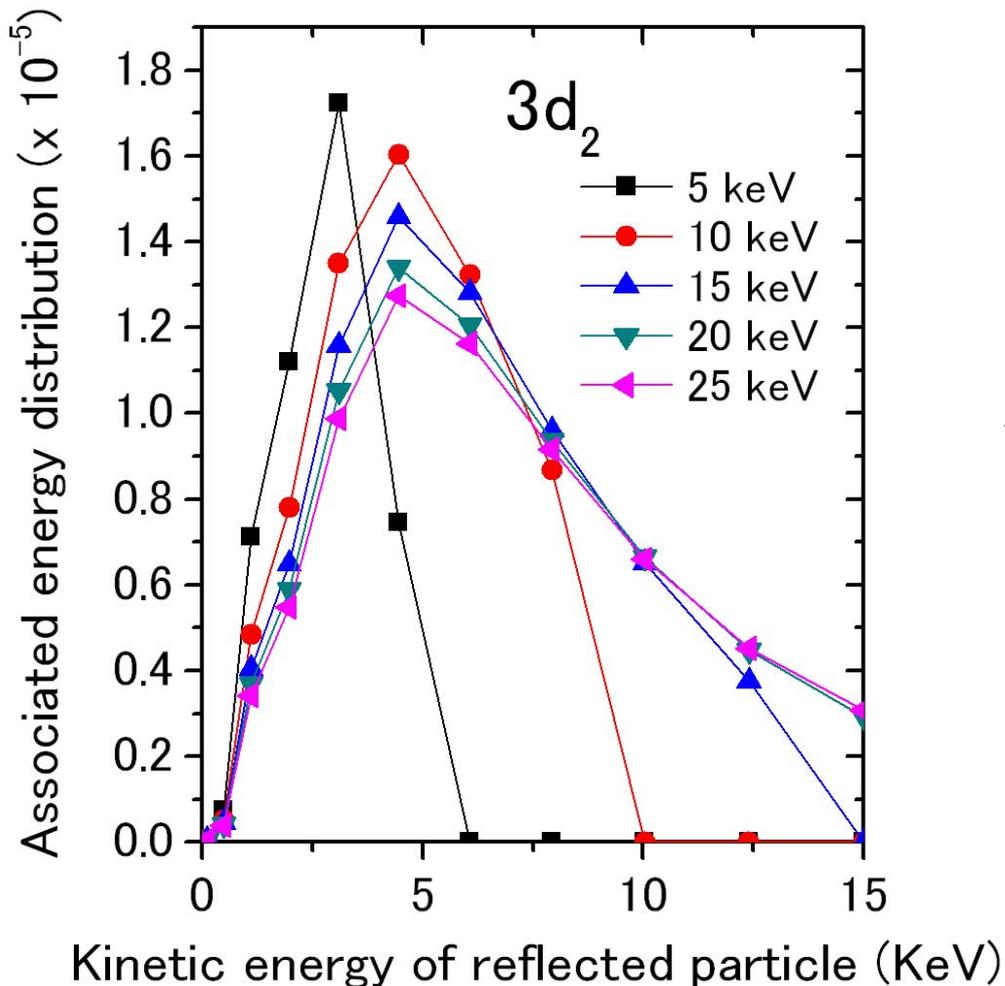
「プラズマ壁相互作用によるタングステン材料の水素同位体リテンション」

(代表:高木郁二 京大, 所内世話人:加藤太治)

リテンション量データの科学的な評価基準、例えばプラズマ照射フルエンス、材料温度、材料特性、及び同位体効果を考慮したリテンション量データ整理の進め方、及びそのための研究者ネットワーク形成について討論する。

# Associated energy distribution for $3d_2$ state and Doppler shift of $D_\alpha$ line

D atoms reflected specularly:  
**60 degree** to the surface normal.



T. Tanabe et al.; J. Nucl. Mater. 220-222 (1995) 841.

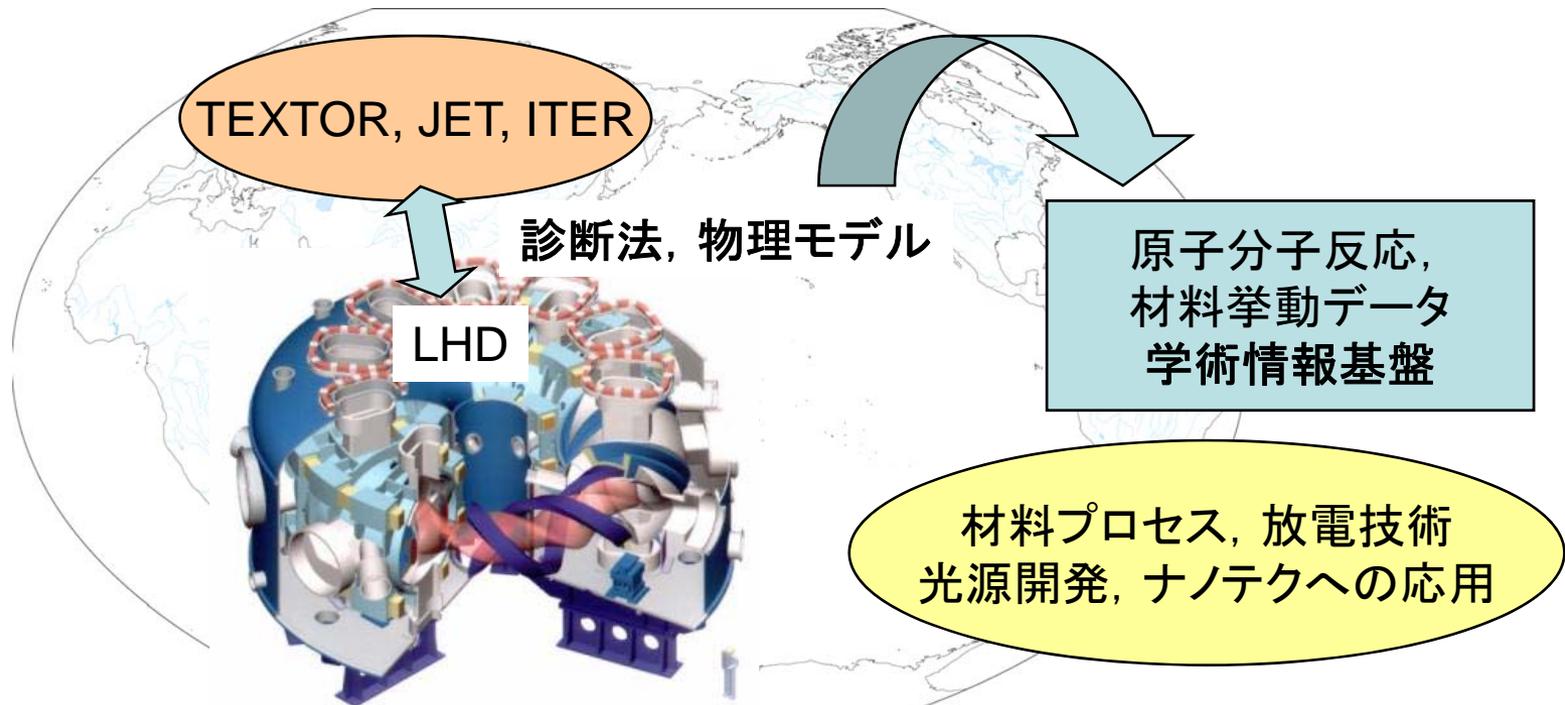
# 国際拠点形成 狙いと期待される成果

## 固有のもの

- 原子過程の特性をactiveに活用したプラズマ診断法の発展(LHD/TEXTOR/JET/ITER)
- 核融合炉プラズマ/材料研究のための原子分子反応、及び材料挙動データの整備と物理モデルの開発

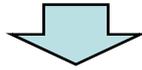
## 分野間連携の観点から

核融合炉プラズマ/材料研究(診断法や物理モデル開発など)で整備された原子分子反応と材料挙動データは、材料プロセス、放電技術、光源開発、ナノテクなど広範囲の分野で応用され、新しい科学技術・産業の発展につながる。

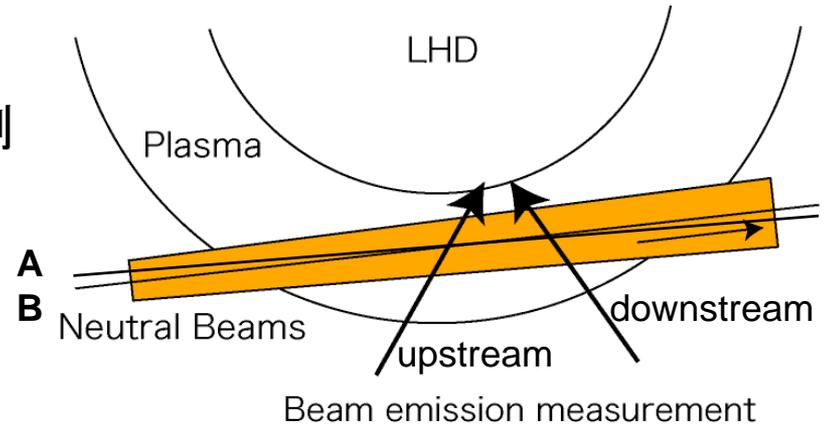


# LHDでの中性粒子ビームの減衰

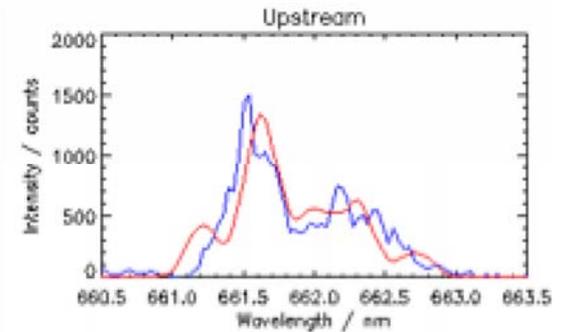
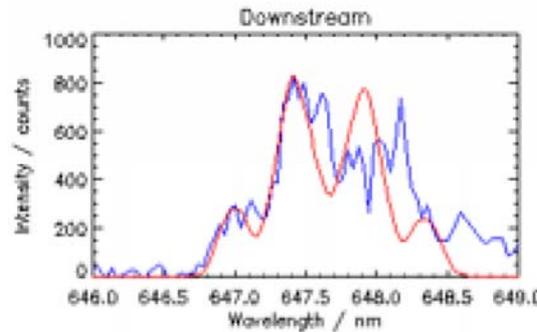
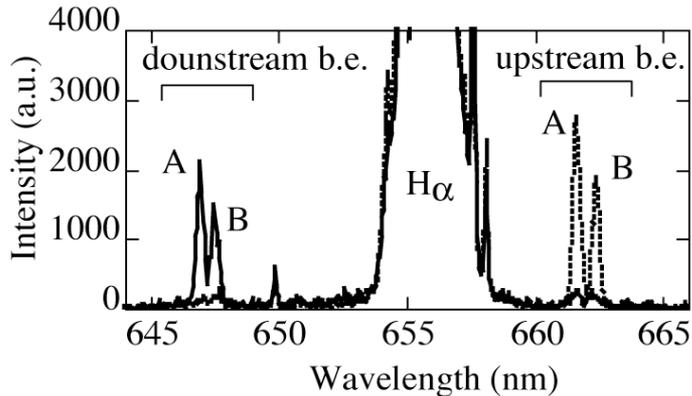
高エネルギー中性粒子ビームからの放射スペクトルをドップラーシフトを利用して観測



ビーム減衰とプラズマ加熱効果、プラズマ不純物の影響



様々なビーム減衰・放射過程(イオン衝突、電子衝突、荷電交換等)を含んだ計算モデルの構築にADASコードを適用し、さらにビームの幾何学構造、LHDの複雑な磁場構造と各分布データを適用した。

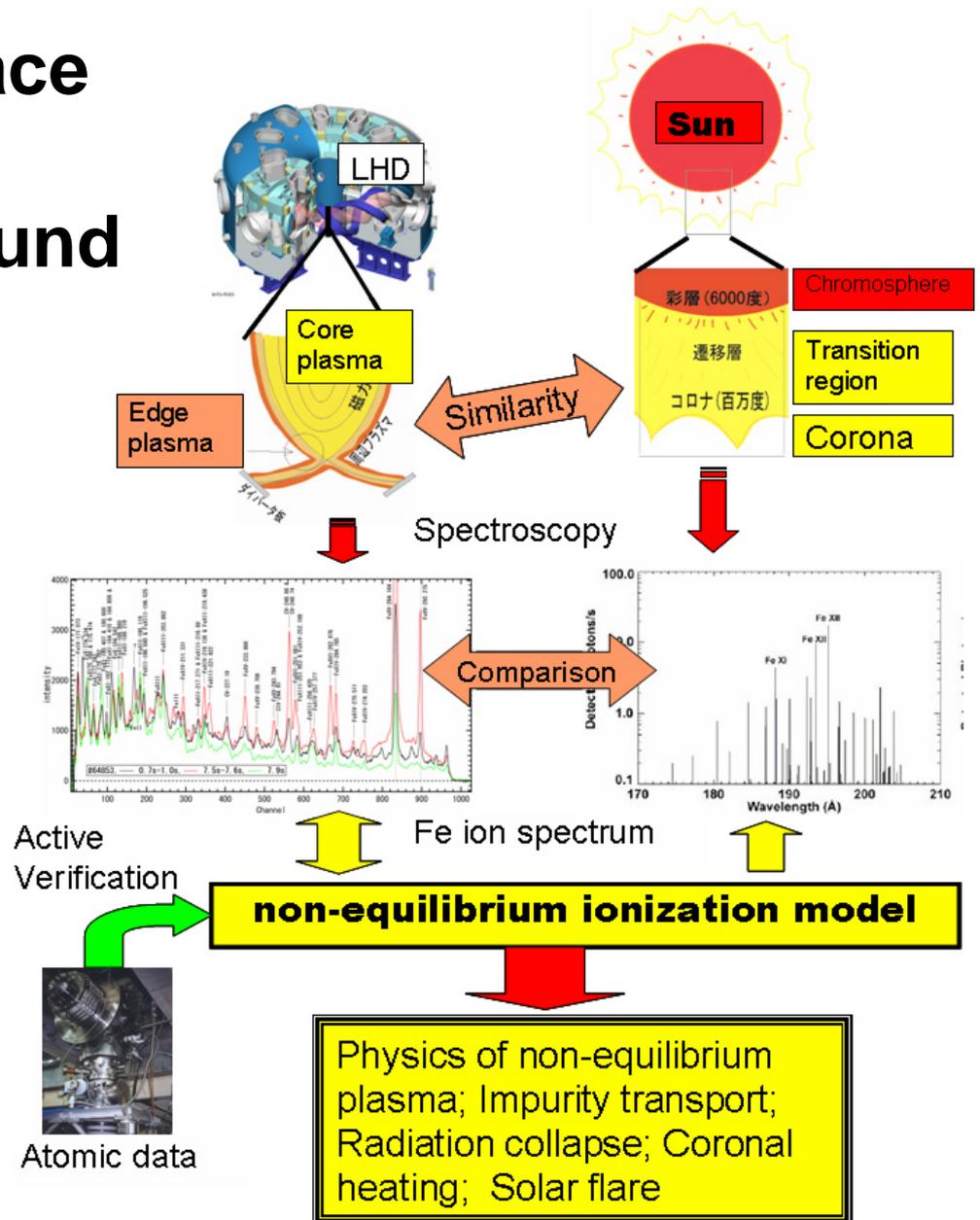


ADASコードによるビーム放射 $H_{\alpha}$ スペクトルのフィッティング結果  
青が実験値、赤が計算値

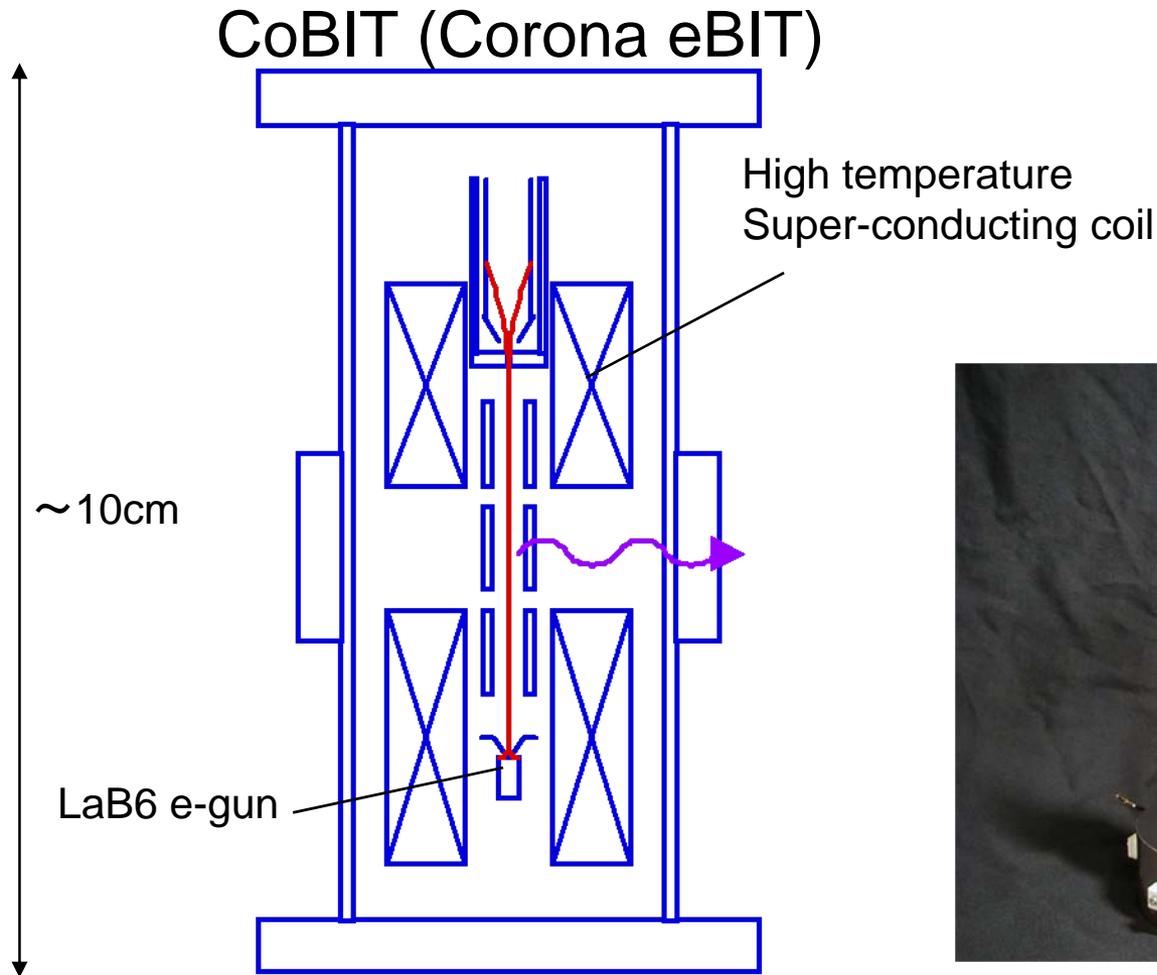
ビーム放射 $H_{\alpha}$ とプラズマ放射 $H_{\alpha}$ の分離

# Investigate the Space through the Sun on the Ground

1. Construct **Collisional Radiative Model** for Fe L and M shell ions
2. Produce and evaluate atomic data for Fe ions
3. Measure spectra from **LHD**, analyze them by **non-equilibrium ionization model** and verify our model.
4. Apply our model to **solar spectra** measured by the “Hinode” satellite to understand coronal heating mechanism.



# EUV spectroscopy of Fe ions by means of Low energy Electron-Beam-Ion-Trap



$E_e$ : 0.1-1 keV  
 $I_e$ : >10mA  
 $B \sim 0.1$ T  
LN2 cooling



中村信行(電通大)、坂上裕之(NIFS)

# 電気学会のデータベース活動との連携

核融合研 共同研究

「プロセスプラズマ関連の原子・分子データベースネットワーク構築」

平成16年度～平成18年度（代表：田中大 上智大）

プラズマプロセス、放電、大気化学  
「広い意味でのプラズマ科学への活用」

電気学会調査専門委員会で過去に収集されたデータを  
NIFS-DBサーバで公開

（故）林真先生の未発表データの整理と公開（NIFS-DBサーバ／NIFS-DATA） 中村義春 慶応大

電気学会 調査専門委員会

「荷電粒子、励起種、解離種ならびに光子と原子分子ダイナミクス」

平成18年～平成20年（代表：伊藤晴雄 千葉工大）

# 電気学会調査専門委員会で収集されたデータをNIFS-DBサーバで公開 (<http://dpsalvia.nifs.ac.jp/DB/IEEJ/>)

## Recommended data file of atoms and molecules

The recommended data set is available in the *The Institute of Electrical Engineers Report #853, Sep. 2001*. This data set is reproduced measurements of Boltzmann code.

### How to get data set

Click name of atom/molecule

#### Atom

[He](#), [Ne](#), [Ar](#), [Kr](#), [Xe](#), [Rb](#)

#### Diatomic molecule

[CO](#), [N<sub>2</sub>](#), [NO](#), [O<sub>2</sub>](#)

#### Triatomic molecule

[CO<sub>2</sub>](#)

#### Polyatomic molecules

[CF<sub>4</sub>](#), [CH<sub>4</sub>](#), [GeH<sub>4</sub>](#), [SiH<sub>4</sub>](#), [C<sub>2</sub>H<sub>6</sub>](#)

### Structure of data file

For example, data file of Ar

```
890621 39.948 8      dates, atomic
elastic momentum transfer
40 0 2.746470e-005  number of data
0.000 6.300      electron energy
0.010 4.500
0.014 3.880
0.017 3.560
.
```

```
900310 131.30000 16
elastic momentum transfer
80 .000000E+00 .829150E-05
.00000 131.00000
.00100 123.00000
.00250 113.00000
.00500 99.00000
.01000 84.30000
.02000 67.10000
.03000 55.70000
.04000 47.20000
.05000 40.80000
.06000 35.33000
.08000 27.84000
.10000 22.60000
.12000 18.10000
.14000 14.66000
.16000 11.97000
.18000 9.86000
.20000 8.18000
.22000 6.82000
.24000 5.73000
.26000 4.83000
.28000 4.10300
.30000 3.50400
.32000 3.01000
.34000 2.60000
.36000 2.26000
.38000 1.98000
.40000 1.74000
.42000 1.55000
.44000 1.38000
.46000 1.25000
.48000 1.14000
.50000 1.04200
.54000 0.90000
.58000 0.75000
```

- [1] Y. Nakamura and M. Kurachi, *J. Phys.D*, **21** (1988) 718 - 723
- [2] M. Hayashi and S. Ushiroda, *J. Chem. Phys.*, **78** (1983) 2621 - 2625
- [3] A. Chutjian and D. C. Cartwright, *Phys. Rev. A*, **23** (1981) 2178 - 2193
- [4] D. Rapp and P. Englander-Golden, *J. Chem. Phys.*, **43** (1965) 1464 - 1479

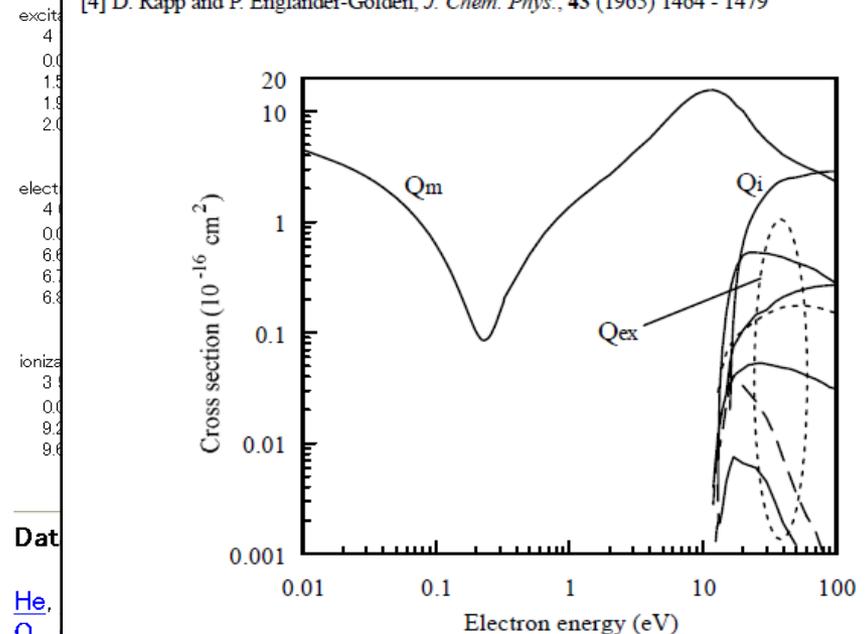


Fig.1 Recommended cross sections for Ar

### Acknowledgment

This database is opened under auspice of the technical society "dynamics of atoms and molecules interacting with charged particles, excited species, dissociated species, and photons" of The Institute of Electrical Engineers of Japan.

Copyright (c) 2008 National Institute for Fusion Science

## (故)林真先生の文献データベース公開について

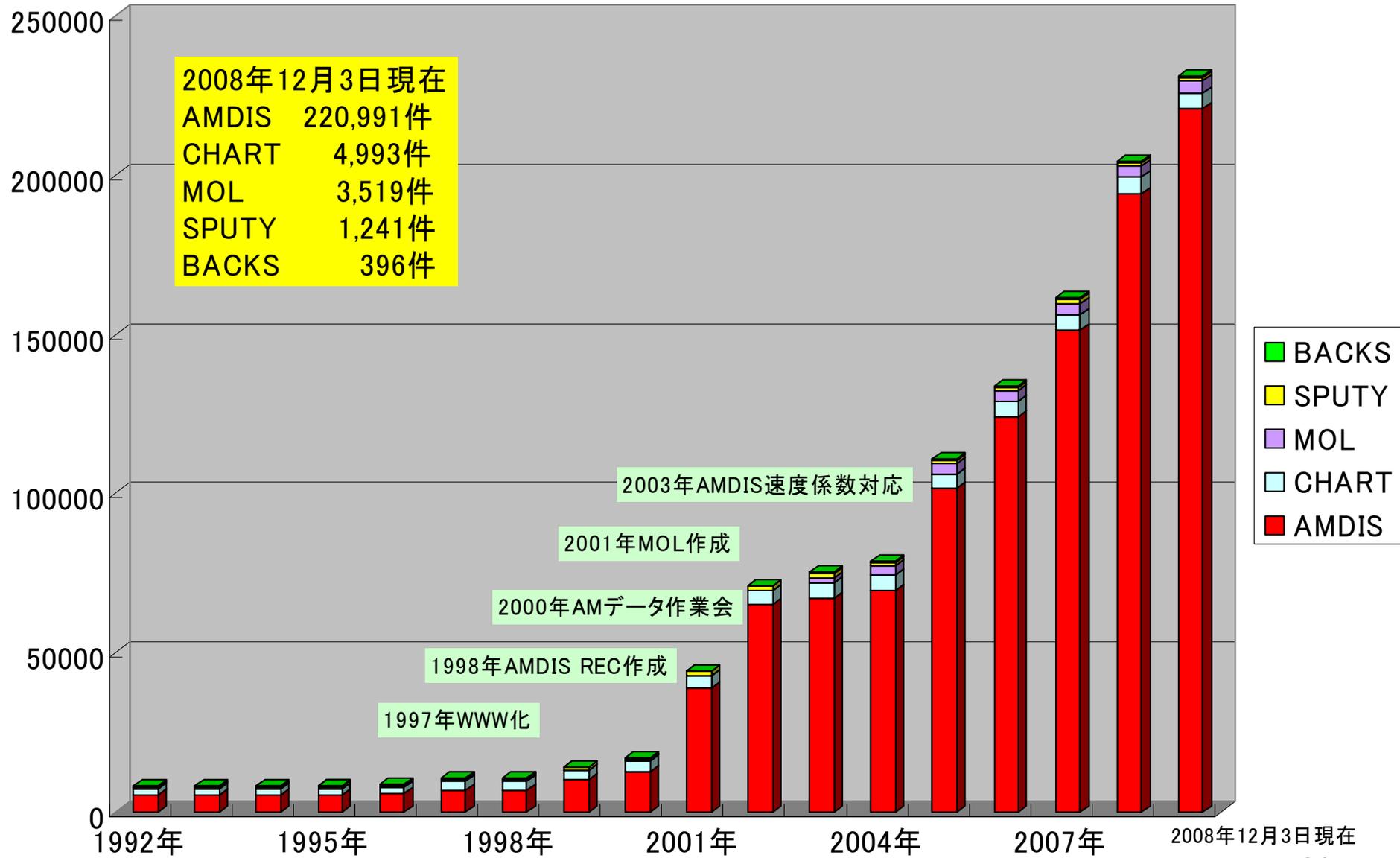
67種の原子分子について1900年から1999年(20世紀)の間に報告された文献を網羅.

そのうち、17の原子分子についてはすでにNIFS-DATA-72(Ar), -74(CO<sub>2</sub>), -76(SF<sub>6</sub>), -77(N<sub>2</sub>), -79(Xe), -80(F<sub>2</sub>, Cl<sub>2</sub>, Br<sub>2</sub>, I<sub>2</sub>), -82(H<sub>2</sub>), -83(HF, HCl, HBr, HI), -87(NH<sub>3</sub>, PH<sub>3</sub>), -90(CH<sub>4</sub>)として発行.

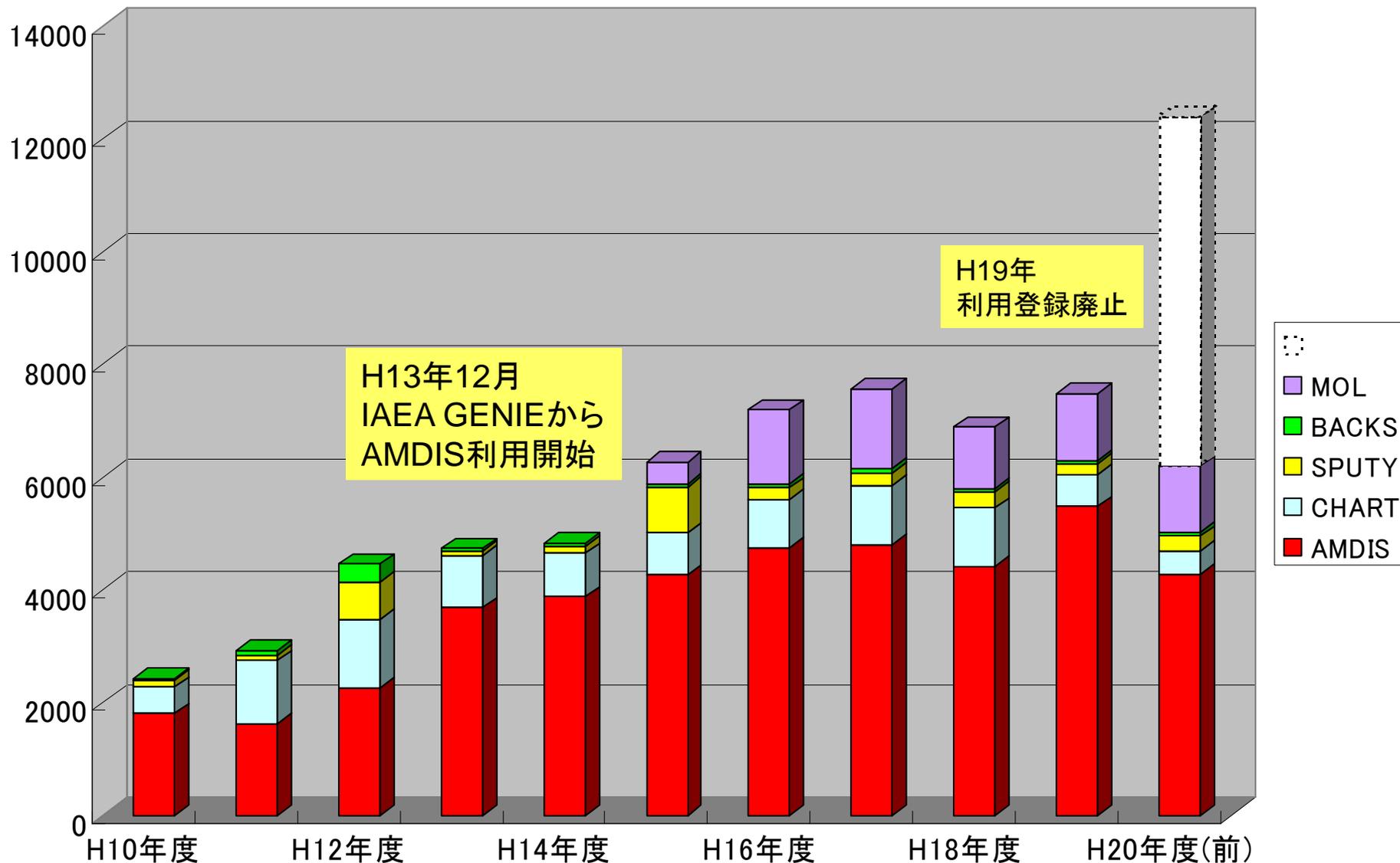
未発表データはNIFS-DBサーバ上で公開(準備中).

# 登録データ件数推移

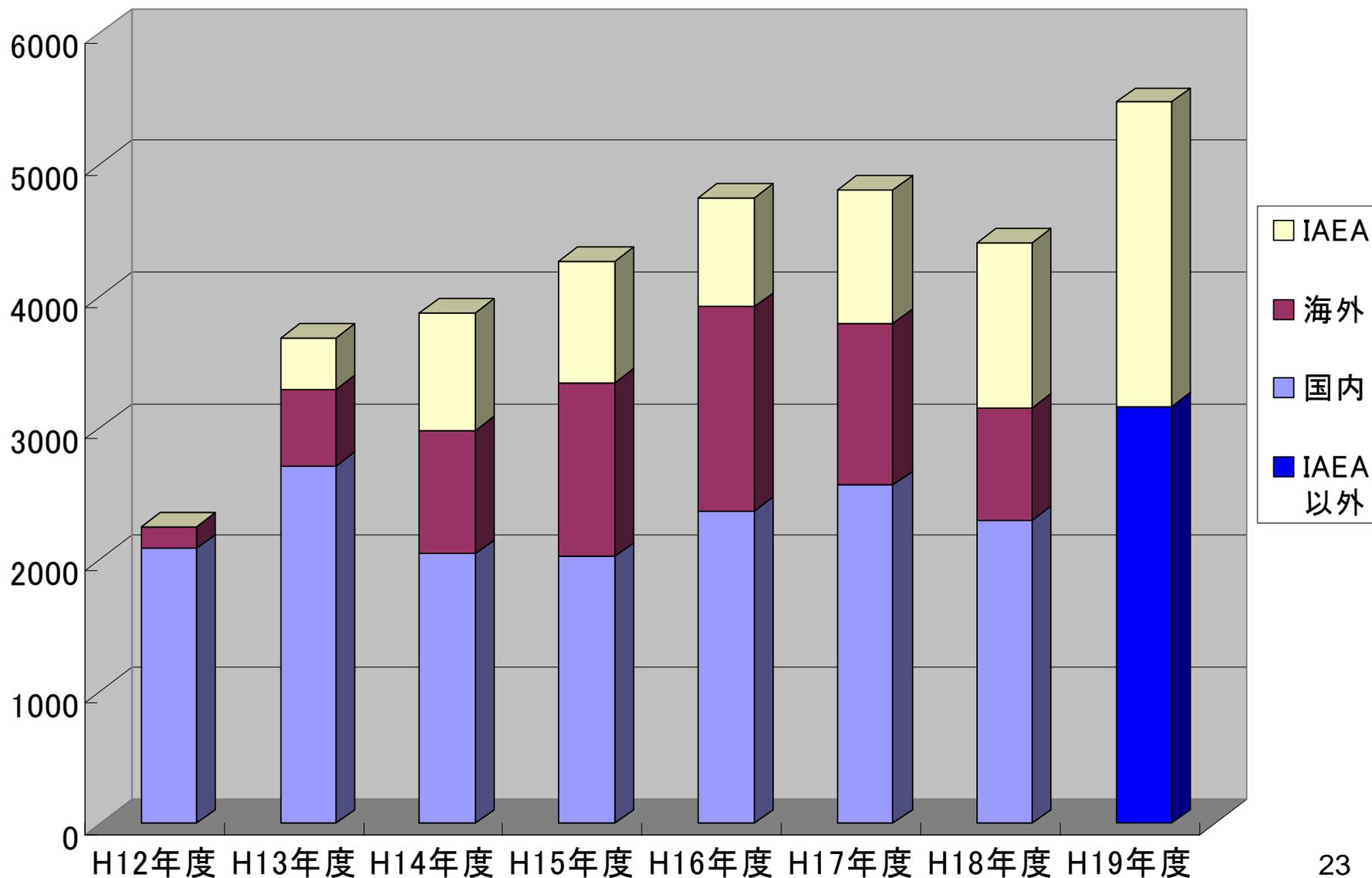
2008年12月3日現在  
AMDIS 220,991件  
CHART 4,993件  
MOL 3,519件  
SPUTY 1,241件  
BACKS 396件



# 年度別検索回数



# AMDIS(ION, EXC)検索回数 IAEA GENIE経由数



# Standardization of atomic and molecular data for fusion research

Yu. Ralchenko (Univ. of Maryland College Park, USA),

I. Murakami, D. Kato (NIFS)

- Related to recent movement on new atomic and molecular database network with **Atomic and Molecular Data Markup Language (AMDML)**.
- Current Atomic Data Search Engine (GENIE) by IAEA is just merging outputs from each database and unified format is required.
- To develop an **XML schema allowing for a complete description of atomic, molecular, and particle-surface (solid) interactions and properties, and other tools (Web services)** for data exchange.
- Development approved by the IAEA Data Center Network
- Currently active: **NIST, IAEA, ORNL, Paris Observatory, NFRC(Korea) will join**
- Presently finalizing the XML Schema
- Other related projects are under discussion
- **New search engine system** will communicate with each database through a gate with AMDML of unified XML schema and each database system is not needed to change its database system. “A new gate” system is just required.
- NIFS will be able to contribute to checking the XML schema and joining the new network.