



## 講座 原子分子データベースの構築と利用

### 5. おわりに

村上 泉

核融合科学研究所

(原稿受付：2012年1月27日)

第1章では、核融合プラズマ研究のための原子分子データベースの半世紀にわたる歴史を紹介したが、原子分子データを必要としている応用研究者のために長い歴史の中でデータ収集が行なわれてデータベースが構築され、検索システムなどが開発され、提供されてきた。アメリカの法律で「標準データの提供」としてその活動が規定されているNISTを別として、そのほかは、応用分野ごとに、その指導的大学や研究所が、あるいは学会が主体となって、それぞれが必要とする観点から、それぞれのポリシーに従ってデータ収集とデータベース化が進められてきた。そのため、原子分子過程といった点から見れば、同じようなデータを収集したデータベースが実はいろいろ存在している。

原子分子物理を専門としない利用者からしてみれば、複数のデータベースを渡り歩いてデータを探すのではなく、一度に探せて、しかも、「お薦めデータ」であると助かるわけで、そのような使い方をめざした活動が近年進められつつある。本講座1.1節でも紹介したが、インターネット上の複数のデータベースを同時にアクセスできる「仮想データセンター」VAMDCプロジェクト[1]や出力フォーマットをXMLで統一化するXSAMS[2]がそれである。現在IAEAが提供している検索エンジンGENIE[3]は、複数のデータベースから一度に波長や電離断面積といった原子データを探し出せる。しかしながら、出力はそれぞれのデータベースの出力形式のままである。この取り組みを更に発展させようとしたのがVAMDCとXSAMSで、個々のデータベースの出力が、同じルールブックXSAMSに則って出てくれば、それを読み取るのも利用するのも容易になる。そうすると、その出力を、例えばプラズマシミュレーションコードに利用することも簡単にできるようになるだろう。

さらに、「お薦め原子分子データ」のデータベースを作るために、データ評価を国際的に組織だてて進めようという動きがIAEAの原子分子データユニットを中心に今年から始まる。3.4節で紹介したデータ評価は、重要であると誰もが認識しているのにもかかわらず、サポートやバックアップがなければなかなか進められない。核反応データは、IAEAの核データ部が中心に策定したデータフォーマットEXFORを使って、評価済みデータライブラリーが

日本（日本原子力研究開発機構のJENDL）[4]、アメリカ、ヨーロッパ、中国、ロシアでそれぞれ作成され、IAEAのホームページから同時に検索ができるようになっている[5]。このような取り組みを、核融合プラズマ研究のための原子分子データに対しても行おうというものである。これを進めるためには、原子分子物理学研究者の協力はもちろん、プラズマを研究しているデータ利用者からの理解とサポートと協力が欠かせない。

さて、原子分子データやデータベースについて更に勉強をしたい方に、いくつか関連する教科書を和書を中心に紹介する。既にこれまでに参考文献として挙げられているものを含む。

原子・分子物理学の基礎に関しては、「プラズマ原子分子過程ハンドブック」[6]の基礎編に加え、教科書として「原子分子物理学」[7]、「電子・原子・分子の衝突」[8]、「化学のための原子衝突入門」[9]、「原子衝突」[10]がある。プラズマ中の原子分子過程という観点から書かれているのが、「電離気体の原子・分子過程」[11]で、原子分子データの表もたくさん掲載されている。プロセスプラズマへの応用という観点から原子分子過程を記述しているのが文献[12]の第3章と第8章、プラズマ材料科学のためにまとめられた文献[13]には、プロセスプラズマなどに良く用いられている主だった分子の評価済み電子衝突過程断面積の図も付録として掲載されている。天体物理への応用が主眼になっているが、原子分子過程についてもよく記述されているのが、文献[14]と[15]、プラズマ分光の教科書で、原子過程についても記述があるのが文献[16]と[17]である。国内の原子衝突や関連分野の研究者によって構成されている原子衝突研究協会[18]が発行している会誌「しょうとつ」にも解説記事や講座記事が掲載されており、もっと原子分子過程などの勉強や研究をしたい方に参考になるだろう。

様々な分野での原子分子データの応用例として、国際会議ICAMDATAの会議集録も参考になる。これまでに7回開催されており、招待講演として発表された最先端での研究成果が掲載されている[19-25]。

最後に、原子分子データベースは、半世紀にわたる歴史の中で多くの先達たちの絶え間ない労力の結晶であり、改めて、これまでに原子分子データベースに携わってこれ

た多くの研究者の皆さんに感謝したい。プラズマ研究で原子分子データを利用する研究者と、原子分子物理学の研究者の方々の御理解とサポートに感謝するとともに、今後もデータベース活動を支えてくださるよう改めてお願い申し上げる。様々な技術の進歩を取り入れながら、原子分子データベースの維持と発展に努め、次世代へとつなげていきたいと思う。

### 参考文献

- [1] Virtual Atomic and Molecular Data Centre, <http://www.vamdc.eu/>
- [2] XSAMS (XML Schema for Atoms, Molecules, and Solids), <http://www-amdis.iaea.org/xml/>
- [3] A General Internet Search Engine for Atomic Data "GENIE", <http://www-amdis.iaea.org/GENIE/>
- [4] Japanese Evaluated Nuclear Data Library (JENDL), [http://www.ndc.jaea.go.jp/jendl/Jendl\\_J.html](http://www.ndc.jaea.go.jp/jendl/Jendl_J.html)
- [5] Evaluated Nuclear Data File (ENDF), <http://www.nds.iaea.org/exfor/endf.htm>
- [6] 浜口智志他編：プラズマ原子分子過程ハンドブック（大阪大学出版会，2011）。
- [7] 高柳和夫：原子分子物理学（朝倉書店，2000）。
- [8] 高柳和夫：電子・原子・分子の衝突 [改訂版]（培風館，1996）。
- [9] 金子洋三郎：化学のための原子衝突（培風館，1999）。
- [10] 高柳和夫：原子衝突（朝倉書店，2007）。
- [11] J.S. Chang, R.M. Hobson, 市川幸美, 金田輝夫 共著：電離気体の原子・分子過程（東京電機大学出版局，1982）。
- [12] M.A. Liberman, A.K. Lichtenberg 著，堀勝監修，佐藤久明訳：プラズマ／プロセスの原理 第2版（丸善，2010）。
- [13] 日本学術振興会プラズマ材料科学第153委員会編：プラズマ材料科学ハンドブック（オーム社，1992）。
- [14] G.B. Rybicki and A.P. Lightman, *Radiative Processes in Astrophysics* (John Wiley & Sons, 1979)。
- [15] L. Spitzer, Jr. 著，高窪啓弥訳：星間物理学 星間物質における物理的諸過程（共立出版，1980）。
- [16] T. Fujimoto, *Plasma Spectroscopy* (Oxford University Press, 2004)
- [17] H.R. Griem, *Principles of Plasma Spectroscopy* (Cambridge University Press, 1997)。
- [18] 原子衝突研究協会：<http://www.atomiccollision.jp/>
- [19] P.J. Mohr and W.L. Wiese eds., Atomic and Molecular Data and Their Applications: ICAMDATA - First International Conference, AIP Conference Proceedings 434, American Institute of Physics, 1998.
- [20] K.A. Berrington and K.L. Bell eds., Atomic and Molecular Data and Their Applications: ICAMDATA - Second International Conference, AIP Conference Proceedings 543, American Institute of Physics, 2000.
- [21] D.R. Schultz, P.S. Krstic and F. Ownby eds., Atomic and Molecular Data and Their Applications: ICAMDATA - Third International Conference, AIP Conference Proceedings 636, American Institute of Physics, 2002.
- [22] T. Kato, H. Funaba and D. Kato eds., Atomic and Molecular Data and Their Applications: Joint Meeting of 14th International Toki Conference on Plasma Physics and Controlled Nuclear Fusion (ITC14) and 4th International Conference on Atomic and Molecular Data and Their Applications (ICAMDATA2004), AIP Conference Proceedings 771, American Institute of Physics, 2005.
- [23] E. Roueff ed., Atomic and Molecular Data and Their Applications: 5th International Conference on Atomic and Molecular Data and Their Applications (ICAMDATA), AIP Conference Proceedings 901, American Institute of Physics, 2007.
- [24] S. Zhu and J. Yan eds., ICAMDATA-2008: 6th International Conference on Atomic and Molecular Data and Their Applications, AIP Conference Proceedings 1125, American Institute of Physics, 2009.
- [25] A. Bernotas, R. Karazija and Z. Rudzikas eds., 7th International Conference on Atomic and Molecular Data and Their Applications - ICAMDATA-2010, AIP Conference Proceedings 1344, American Institute of Physics, 2011.



むら かみ いずみ  
村上 泉

核融合科学研究所核融合システム研究系，教授。特定非営利活動法人原子分子データ応用フォーラム理事長。主な研究分野はプラズマ中の原子分子過程。IAEA 主導で核融合プラズマのための評価済み原子分子データのデータベースを作成するための会議を先日行い，データ評価の難しさを再確認。まずは基準作りと研究者ネットワーク作りから始めよう。