

小特集

IAEA における原子分子データ Coordinated Research Projects (CRP)

Coordinated Research Projects of the IAEA (CRP)

1. はじめに

BRAAMS Bastiaan J.¹⁾, 今井 誠²⁾, 加藤 太治³⁾

¹⁾国際原子力機関, ²⁾京都大学, ³⁾核融合科学研究所

(原稿受付: 2013年 8月22日)

The plasma in a magnetic confinement fusion experiment, such as a tokamak or stellarator, is affected by a large variety of atomic, molecular and plasma-material interaction (A+M+PMI) processes. For impurities in the hot core plasma the processes include ionization, recombination and radiative energy loss. Heating of fusion plasma relies in part upon injection of energetic neutral beams, which react with the main plasma species and with impurities in the plasma. In the low-temperature plasma near the boundary, molecules and molecular ions may be present and their collisions with electrons, with hydrogenic species and with other ions and molecules are important in determining the conditions in the edge plasma. In some scenarios impurities are introduced into the plasma on purpose in order to cool the plasma edge through atomic line radiation. Plasma interaction with the walls is another source of impurities; it causes erosion and introduces atomic and molecular impurities into the plasma. Plasma interaction with the walls changes the composition and other properties of the wall and it may cause plasma constituents to become trapped in the wall material. In the case of tritium this makes it unavailable for fusion and this poses a problem. In any reactor there will be strict limits on the amount of tritium that may become trapped in the walls.

For the purpose of plasma modelling, for interpretation of plasma measurements and for the design of future fusion experiments, it is important to have access to fundamental data about all such atomic, molecular and plasma-material interaction processes.

The International Atomic Energy Agency (IAEA) is a science-based United Nations organization for world-wide cooperation in the field of nuclear energy and other peaceful applications of nuclear technology. The IAEA has been

deeply engaged with fusion energy research since the declassification of that work in the late 1950s. The 1955 United Nations Conference on the Peaceful Uses of Atomic Energy (the "First Geneva Conference") led to the establishment of the IAEA in 1957 and the Second Geneva Conference, in 1958, is the milestone meeting that established free international exchange of information about nuclear fusion research. The first instance of the IAEA International Conference on Plasma Physics and Controlled Nuclear Fusion was held in 1961 and this biennial meeting remains the most important international conference on fusion energy research. In the years 1978-1988, the IAEA was host to the four-party (Europe, Japan, USA, USSR) INTOR (International Tokamak Reactor) design study and also the Conceptual and the Engineering Design Activities (CDA and EDA) for ITER were carried out under the auspices of IAEA. The *Nuclear Fusion* journal, a leading journal in the field, was founded by IAEA and editorial management remains with the IAEA.

In 1977 the IAEA created an Atomic and Molecular (A+M) Data Unit [1] with the purpose to coordinate a network of national data centres and to organize the collection and dissemination of bibliographical and numerical databases for atomic, molecular and plasma surface interaction (A+M+PSI) processes in fusion energy research. The original Japanese members of the Data Centre Network (DCN) were groups at the Japan Atomic Energy Research Institute (JAERI) (now Japan Atomic Energy Agency (JAEA)) Naka Fusion Institute and at the Institute of Plasma Physics, Nagoya University (mainly from which developed the present National Institute for Fusion Science (NIFS)). Almost immediately the A+M Data Unit devoted itself also to the development of new data using the mechanism of the IAEA Coordi-

nated Research Project (CRP). A CRP of the A+M Data Unit brings together a small number of research groups from around the world for coordinated work that is aimed at developing new data in a well-defined area of atomic, molecular or plasma material interaction science. (The work is done in the home institutes, but participants in a CRP are brought together several times in order to exchange information and coordinate their work.)

Recent and ongoing CRPs of the A+M Data Unit include the following: [2]

- Plasma-Wall Interaction for Irradiated Tungsten and Tungsten Alloys in Fusion Devices
- Data for Erosion and Tritium Retention in Beryllium Plasma-Facing Materials
- Atomic and Molecular Data for State-Resolved Modeling of Hydrogen and Helium and Their Isotopes in Fusion Plasma
- Spectroscopic and Collisional Data for Tungsten from 1 eV to 20 keV
- Light Element Atom, Molecule and Radical Behaviour in the Divertor and Edge Plasma Regions
- Characterization of Size, Composition and Origins of Dust in Fusion Devices
- Data for Surface Composition Dynamics Relevant to Erosion Processes

The CRPs are oriented towards development of new data, but the A+M Data Unit also has the task to evaluate existing data and make recommendations. The principal ingredient of a data evaluation are uncertainty estimates, but calculated (theoretical) data are often published without uncertainty estimates. There is a real need for better procedures to obtain uncertainty estimates for calculated cross sections. At present the Unit seeks very actively to engage atomic and molecular physicists in data evaluation and uncertainty estimation, either directly through IAEA projects or through IAEA cooperation in other meetings and projects. A recent joint IAEA-NFRI meeting (Daejeon, Korea, 4-7 September 2012) was devoted to data evaluation for atomic, molecular and plasma-material interaction processes in fusion. Other related meetings and projects are being planned.

The present special topic articles of the (Japanese) Journal of Plasma and Fusion Research contain contributions from (mainly) Japanese researchers in the field of fusion science or related atomic, molecular and plasma-material interaction processes. In many cases the work reflects the interests of one of the recent CRPs of the IAEA A+M Data Unit, or it reflects other work on A+M data and databases for fusion that is of interest to the IAEA. The editors are sincerely grateful to all authors for their work and for their contribution to this special topic articles. **(B.J. Braams)**

トカマクヤステラレータといった磁場閉じ込め核融合実

験装置内のプラズマは、多種多様な原子・分子ならびにプラズマ-材料相互作用 (A+M+PMI) 過程の影響を受ける。例えば高温の炉心プラズマに含まれる不純物に関しては電離・再結合と放射性冷却の各過程が、プラズマ加熱においては高速中性ビーム入射が挙げられ、高速中性ビームはプラズマ主構成粒子やプラズマ中の不純物粒子と反応を起こし、プラズマ加熱の一部を担う。プラズマ境界付近の低温プラズマ領域には (中性) 分子や分子イオンが存在すると考えられ、これらの分子・分子イオンと電子、水素とその同位体、あるいはその他のイオンや分子との衝突過程は、周辺プラズマの状態を決定する鍵となる。プラズマ中にわざと不純物を混入し、放射冷却を利用してプラズマ周縁の冷却を行うシナリオも検討されている。プラズマ-壁相互作用により壁材が浸食され、(中性) 原子・分子状態の不純物がプラズマ中に入ることも不純物混入の一因となる。プラズマ粒子との相互作用で壁材の構成や物性が変化し、プラズマ構成粒子が壁材にトラップされる可能性もある。どのような形式の核融合炉でも、壁中の三重水素 (トリチウム) の総量は厳しく制限されることになるため、プラズマ中のトリチウムのトラップにより、ある材料が核融合材料として不適切とされるという問題も起こり得る。

プラズマモデリングやプラズマ計測結果の解釈、さらに将来の核融合実験の立案のためには、このように多種多様な原子・分子ならびにプラズマ-材料相互作用過程全般に関する基礎データが入手可能であることが重要となる。

国際原子力機関 (IAEA) は、原子力エネルギーと原子力技術の全世界における平和利用と協力に貢献するため設立された国際連合傘下の (科学準拠) 機関である。IAEA は 1950 年代後期 (訳注; 1958 年) の核融合エネルギー研究の軍事機密指定解除以降、核融合研究に深く関わっている。原子力の平和利用に関する国連会議 (第 1 回ジュネーブ会議 1955 年) での議論が 1957 年の IAEA 設立へとつながり、1958 年の第 2 回ジュネーブ会議は核融合研究情報の国際的交換・共有を確立する記念碑的の会合となった。1961 年には第 1 回プラズマ物理と制御核融合に関する IAEA 国際会議 (IAEA International Conference on Plasma Physics and Controlled Nuclear Fusion) が開催され、以来この隔年開催会議は核融合エネルギー研究分野における主要な国際会議となっている。1978 年から 1988 年の間、IAEA は 4 極 (EC, 日, 米, ソ連) 国際トカマク炉 INTOR 計画 (設計研究) を主導し、その後の ITER の概念設計活動 (CDA) と工学設計活動 (EDA) も支援した。この研究分野における主要学術誌 Nuclear Fusion は IAEA により創刊され、現在でも IAEA が編集を担っている。

IAEA は、参加各国が運営するデータセンターのネットワークを組織し、協力して核融合研究に関連する原子・分子ならびにプラズマ-表面相互作用 (A+M+PSI) 過程に関する書誌ならびに数値データの収集とデータベース化を実施し、その普及を促すため、1977 年に原子分子 (A+M) データユニット [1] を設立した。設立当初のデータセンターネットワーク (DCN) への日本からの参加機関は日本原子力研究所 (当時: 現在の日本原子力研究開発機構) 那

珂研究所および名古屋大学プラズマ研究所（当時、後の核融合科学研究所設立の主要母体）であった。データ収集のみならず、原子分子データユニットは、その設立とほぼ同時に IAEA Coordinated Research Project (CRP) という枠組みを利用して原子分子データの生産（実験測定と理論計算）にも着手した。CRP によるデータ生産は、原子・分子ならびにプラズマ材料相互作用分野の知見にもとづき生産可能な新データを得ることを目的として共同研究課題を採択し、これを実行する複数の研究グループを国際的に招請するという方法で遂行される（CRP 参加者は各々の所属機関で研究を行い、情報交換と研究内容調整のため研究期間中に数回会合する）。

現在遂行中あるいは最近完了した原子分子データユニットの CRP は以下の通りである。[2]

- ・核融合装置における被照射タンゲステンおよびタンゲステン合金のプラズマ壁相互作用
- ・プラズマ対向ベリリウムの浸食とトリチウムリテンションデータ（本小特集2.7節）
- ・核融合プラズマ中の水素・ヘリウムと同位体の励起モデリングのための原子分子データ（2.4節）
- ・1 eV～20 keV タングステンの分光および衝突データ（2.2節，2.3節）
- ・ダイバータおよび周辺領域における軽元素原子分子とラジカル挙動（2.1節）
- ・核融合デバイスにおけるダストのサイズ・構成と起源（2.6節）
- ・材料表面浸食ダイナミクスに関するデータ（2.5節）

CRP では新たなデータの生産を指向しているが、これに加えて原子分子データユニットでは、（ばらつきが存在することが多い）既存データの評価を行い、推奨データを作成する活動も行っている。データ評価の主な内容は誤差の評価であるが、論文発表された計算値（理論値）では執筆者による誤差評価が行われていないことが多く、計算値の誤差の適切な評価手法を確立することが必要とされている。現在、原子分子データユニットでは、IAEA のプロジェクトにより直接、また他機関の会議やプロジェクトとの共催を通じて、原子分子物理研究者にデータ評価と誤差見積りの重要性を積極的に訴え、本活動への参加を促している。昨年、核融合に関連する原子・分子ならびにプラズマ材料相互作用過程におけるデータ評価を主題とする IAEA-NFRI 合同会議（2012 年 9 月 4－7 日、韓国大田広域市）が開催されており、目下、同様の関連会議やプロジェクトを計画中である。

本小特集では、IAEA 原子分子データユニットの CRP 活動ならびにデータ評価活動に参加している（主に）日本の核融合科学とこれに関連する原子・分子ならびにプラズマ材料相互作用分野の研究者の方に寄稿いただき、さらに IAEA のデータセンターネットワークに設立当初から参加している日本原子力研究開発機構と核融合科学研究所の DCN 関連活動についても寄稿いただくこととした。第 2 章に収めたものは IAEA 原子分子データユニットにおいて進行中あるいは最近完結した CRP 活動の一部として、他章の

ものは IAEA が関与する核融合関連原子・分子データやデータベースに関する活動の一環として実施されたものである。著者の方々の IAEA 原子分子データ活動への貢献ならびに本小特集への寄稿に、心より感謝申し上げる。

(B.J. Braams, 翻訳 今井 誠)

原子分子データベースが整備される以前、これらデータを利用してプラズマモデリングなど行う「利用者」は、自ら文献を調査して求めるデータ（実験値、理論値）を入手するか、データがない場合、衝突エネルギー、入射イオン価数などのパラメータをもとに実験値を再現するよう導き出された経験式や、定性的理論に基づき実験値を再現するようフィッティングパラメータを調整した半経験式などからデータを推定するか、それも叶わない場合、あてずっぽうの値を用いることを強いられていた。原子分子データベースは、世界各国のデータセンターにより作成・整備されてきたが、原子構造データに加えて、光衝突、電子衝突、重粒子衝突など非常に広い範囲におよぶ断面積データベースを単一の機関で監修することは不可能である。1977 年、国際機関である IAEA の物理化学部原子核データ部門（Nuclear Data Section / Division of Physical and Chemical Science）に原子分子データユニットが設立され、加盟各国のデータセンターをネットワーク化してデータセンターネットワーク（DCN）を形成した。同ユニット自らも、核融合研究に関連した原子・分子およびプラズマ材料相互作用（AM/PMI）データベースと材料物性データベースを供給する方針のもと、AM/PMI 数値データを提供する ALADDIN データベース[3]と原子分子データ文献情報を提供する AMBDAS データベース[4]を運用する他、DCN 参加の各データセンターが相補的役割を担うよう国際的な協力と調整のもと活動が行われており、利用者の利便性が大きく向上している[5]。

また IAEA 原子分子データユニットでは、論文発表データのデータベース化とは別に、核融合実現のために特に重要かつ喫緊性を有する具体的な原子分子過程ならびにプラズマ材料相互作用に関する Coordinated Research Project (CRP) を採択し、特定のトピックに関する実験測定や理論計算（データ生産）に関連研究者（「生産者」）に促すという、より主体的、積極的なデータ活動も行っており、CRP により生産されたデータも関連データベースに収録している。ひとつの CRP は通常 4～5 年の期間採択・継続され、8～15 の参加機関あるいはグループが協働して研究を行う。これらの CRP は、核融合分野研究者と原子分子、材料、表面各科学の研究者との共同研究という他にみられない機会を提供しており、小規模な集会で知り合った研究者同士で、CRP 期間終了後にも共同研究が継続される例もある。CRP 参加者は、自らの所属機関で研究を行い、CRP 採択期間中に 3 回程度研究会議を開いて、進捗状況の報告と調整を行うが、IAEA は発展途上国からの参加者向けの少額支出を除き直接的研究予算は支出しないため、CRP 参加者は必然的に関連分野で積極的に研究を行っている者となる。原子分子データユニットでは常時 3～4 つの CRP

を並行して遂行しており、過去および現在のCRPならびに研究会議報告書と発表資料とは、原子分子データユニットのウェブページで公開されている[2]。現在遂行中あるいは最近完了したCRPのリストは、本章冒頭の原子分子データユニット長 Braams 氏の序文にもあるが、本小特集第2章では、これらのうち6つのCRPに日本の研究機関から参加した7グループの方々に寄稿いただいた。

原子衝突理論・計算機科学双方の発展は、衝突理論研究者が生産したデータを自ら論文発表するのみであった従来の事態に変化をもたらし、利用者がウェブインターフェース上でパラメータを入力するとサーバ計算機上で理論計算を実行し、結果を即座に表示するオンライン計算コードの提供を可能とした。IAEA は2005年、DCN に続いてコードセンターネットワーク (CCN) を立ち上げ[6]、オンラインコードを提供可能な生産者の国際協力を通じて、原子分子構造や衝突断面積・レート係数などの原子分子データに加え、これらデータを核融合分野へ応用する際不可欠となる衝突輻射モデルやスペクトル線計算などのオンラインコードとドキュメントを提供してきた[7]。が、こうして原子分子データが比較的簡単かつ大量に生産されるようになると、その精度や適用範囲の利用者側での吟味がおざなりになる傾向は否めない。もとより、生産者が論文発表する原子分子データは、理論値にしる実験値にしる、それを得るまでの手法や処理に細心の注意を払った上、得られた値に対しても既存の同種衝突系データや類似衝突系データとの綿密な比較検討を行って論文化され、さらに同業者によるピアレビューを経て出版されたものである。にもかかわらず、ある衝突過程に対する複数の断面積値をデータベース上で比較すると、それぞれの誤差以上の乖離がしばしばみられる。データの蓄積が比較的十分である衝突過程に対しては、オンラインコード登場以前から、収集した断面積の評価を行い、推奨断面積値を提供する評価済み衝突断面積データベース作成の動きがあったのだが、オンラインコードの登場は、提供データの精度保証という問題点をあらためてデータ生産者側に突きつけることとなった。そこで、2011年に開催されたDCN 委員会において、データ評価と推奨値の問題が議論され、原子分子データ評価に関する新たな国際協力が必要であるとの結論とともに、以下の原則が示された。[8]

- ・データセットを収集し、評価に付さねばならない
- ・データ評価活動は、コミュニティの協力の下、組織されなければならない
- ・データ評価ガイドラインを確立する必要がある
- ・データ評価の結果として、推奨データセットを作成・提供する

IAEA 原子分子データユニットは、これらの議論をもとにデータ評価に関する3つの会議を2012年に開催した。まず2月に核融合のための原子・分子およびプラズマ壁相互作用 (AM/PMI) データ評価手法に関する専門委員会を核融合科学研究所で開催し、データ評価方法やデータ評価ネットワークにつき議論した[9]。次いで6月に核融合のためのAM/PMI データ評価と標準ライブラリー構築に関

する専門委員会をIAEA 本部で開催し、理論データの誤差評価法と標準データセット構築への道程が議論された[10]。これらの会議をうけ、9月に韓国国立核融合研究所 (NFRRI) において、10カ国から27名の参加者を集めて、核融合におけるAM/PMI 過程のデータ評価に関する技術委員会が開催され、評価済みデータベースの現状、データ評価方法 (市川)、誤差伝播と感度分析、理論データの誤差評価 (高木)、実験データ評価と半経験式 (中村義春、今井)、データセンターにおけるデータ評価活動 (村上) の6つのトピックにつき議論が行われた[11]。9月の委員会には日本から上記の5名が出席し、各トピック討議に参加した。このうち村上泉氏に第4章、残る4名の方に第3章で、同技術委員会における発表と討議についてまとめた。またCCN活動の一環として2年毎に開催されている非局所熱平衡コード比較ワークショップに参加した佐々木明氏にも原子分子データの評価と同ワークショップにつき第3章に寄稿いただいた。

日本はもとより、世界各国のDCN 参加データセンターが作成・公開しているデータベースについて、これまで本誌[12]や関連書籍[13]でも紹介されている。膨大な種類・分量の原子分子データのデータベース化を、国際的な協力体制のもと網羅的かつ効率的に実施するための協調活動について、また収集した原子分子データとその誤差の評価が次の課題となっており、これに対して現在進行中の国際的取り組みについて、そしてIAEA 原子分子データユニットが、CRP 活動によりデータ生産にも携わっていることを知っていただくことができれば、これに勝る慶びはない。

(今井 誠, 加藤太治)

参考文献

- [1] <http://www-amdis.iaea.org/>
- [2] <http://www-amdis.iaea.org/CRP/>
- [3] <http://www-amdis.iaea.org/infoaladdin.php>
- [4] <http://www-amdis.iaea.org/AMBDAS/>
- [5] <http://www-amdis.iaea.org/DCN/>
- [6] <http://www-nds.iaea.org/publications/indc/indc-nds-0485/>
- [7] <http://www-amdis.iaea.org/CCN/>
- [8] <http://www-nds.iaea.org/publications/indc/indc-nds-0600/>
- [9] <http://www-nds.iaea.org/publications/indc/indc-nds-0617/>
- [10] <http://www-nds.iaea.org/publications/indc/indc-nds-0622/>
- [11] <http://www-nds.iaea.org/publications/indc/indc-nds-0627/>
- [12] 村上 泉 他：講座「原子分子データベースの構築と利用」プラズマ・核融合学会誌 88, 35 (2012)；同プラズマ・核融合学会誌 88, 107 (2012)；同プラズマ・核融合学会誌 88, 180 (2012)。
- [13] 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)。