

講座 原子分子データベースの構築と利用

4. 主なデータベースの利用方法例

村上 泉

核融合科学研究所

(原稿受付: 2012年1月27日)

原子分子データベースの具体的な利用方法例として、NISTの原子スペクトルデータベースと分子の化学反応データベース、核融合科学研究所の衝突過程の断面積等データベース、ADAS、そして化学反応データベースとしてGRI-Mechの使い方を紹介する。

Keywords:

atomic and molecular database, wavelengths, transition probabilities, collision cross sections, chemical reaction rate constants

本章では、原子分子データベースの具体的な利用方法をいくつか紹介する。検索方法は、データベースごとに異なっており、ちょっとしたコツがあったり、いろいろなオプションがあったりする。是非自分でもいろいろ試して使ってみてほしい。どのデータベースでも、ユーザーからのフィードバックは重要なので、使い勝手や、データ内容などの要望は、どんどん出すと良い。インターネットでアクセスできるデータベースのほとんどを文献[1]第17章で紹介しているのでそちらも参照していただきたい。

原子の波長・遷移確率と、電子衝突電離、励起、再結合断面積・速度係数については、インターネット上のデータベースを一度に検索できる検索エンジンGENIE[2]がIAEAによって提供されており、これらは、原子(イオン)を指定するだけで検索が実行され、それぞれのデータベースからの検索結果がそのまま表示されるようになっている。これらのデータを調べたい場合は、このサイトを利用するのが手取り早い。

4.1 NIST

米国標準技術研究所(NIST)では、その名のとおり標準データ Standard Reference Dataの整備に関する研究を広く行っており、多くのデータベースを提供している。それは、1968年にアメリカで制定した標準データを提供する法律に基づいている。その総合的な入り口としてNIST Data Gateway[3]がある。このページの左側の分野リストから「Atomic and Molecular Physics」を選ぶと、原子分子関係のデータベースのリストが出てくる。あるいは、右側のQuick Listから原子スペクトルデータベース「Atomic Spectra Database ASD」[4]へ行くこともできる。「Physical Reference Data」を選ぶと物理系のデータベースリスト[5]へ行く。ここには周期律表もある。その中に原子分光

データと分子分光データなどがある。原子分光データは、ASDのほか、基礎原子スペクトルデータハンドブック(中性原子と1価イオンのスペクトル線の波長と強度のデータ集で、データはASDに含まれている)、水素と重水素のエネルギーレベル(理論によるオンライン計算)、中性原子の基底状態と電離エネルギー表、X線遷移エネルギー($Z=10-100$ の $K\alpha$ 線等)、原子スペクトルの文献データベースなどがある。分子分光データは、2原子分子、3原子分子、炭化水素の回転遷移のマイクロ波スペクトルデータ(同位体を含む)、赤外分光器較正用波数表、星間分子のマイクロ波遷移周波数などがある。「Atomic and Molecular Physics」では、オンライン以外のデータベースもリストアップされている。オンラインのもので、NIST Chemistry Web Book[6]では分子の様々な基礎データが集められている。SRD107として、分子の電子衝突電離・励起断面積のスケーリング理論(BEBモデル)によるオンライン計算が実行できる[7]。そのほか、中性原子・分子の気相化学反応の速度係数のデータベース[8]、液相中の分子の化学反応の速度係数のデータベース[9]が提供され、化学反応式によって検索ができる。

ここでは、最もよく利用されている原子スペクトルデータベースASD[4]について、簡単に使い方を紹介する。2つのデータベース「Lines」と「Levels」があり、Linesのほうはスペクトル線の波長と遷移確率、遷移の上準位、下準位の情報、データの出典が見られる。調べたいイオン、例えば、 C^{3+} イオンの場合は、分光記号でC IVと指定し、波長範囲を指定して検索する(図1)。複数のイオンを指定することも可能である。検索のときのオプションとして、表示方法をテキスト形式にしたり、レベルエネルギーの単位を変更したり出来る。検索条件に、エネルギー準位の範囲の指定や、遷移強度の範囲の指定、データ精度の指定を

4. Examples How to Use Atomic and Molecular Databases

MURAKAMI Izumi

author's e-mail: murakami.izumi@nifs.ac.jp

図1 NISTのASD[4]のLineの検索画面。一番上部でイオン及び波長範囲を指定すると検索ができる。検索条件等の変更や、オプションで図の作成などもできる。「Dynamic Plots」では、熱平衡を仮定したスペクトルの図も表示できる(図2参照)。「Grotrian Diagram」では、エネルギー準位と遷移の関係を図にしたグロトリアン図が作成できる(図3参照)。

したり、表示される波長を真空のみにしたり、といった変更もできる。デフォルトでの表示は、波長(計測値, Å), Ritzの波長(Å), 相対強度, 遷移確率 $A_{ki}(s^{-1})$, 遷移確率の精度(AAA(0.3%以下)~E(50%以上)), 上準位および下準位のエネルギー(cm^{-1}), 遷移の電子配置(Configuration), LS多重項(Term), 全角運動量子数 J , 統計重率 g , 遷移のタイプ(何もない場合は電子双極子遷移), 出典が表示される。波長は, 2000 Å以下および20000 Å以上は真空の波長, その間は空気中の波長である。また, Ritzの波長は, 遷移の上準位と下準位のエネルギーの差の逆数が真空の波長であるとしたRitzの原理[10]に基づき, 実験によって得られた準位のエネルギーを使って出している。

基本的に実験値を元に評価されたデータであるが, エネルギーレベルについては, 実験値からの外挿や理論値の場合があり括弧で表示される。オプションで, 波長の位置の図("Line Identification Plot")や, サハの熱平衡の場合のスペクトル線強度の計算を電子温度と電子密度を指定して作

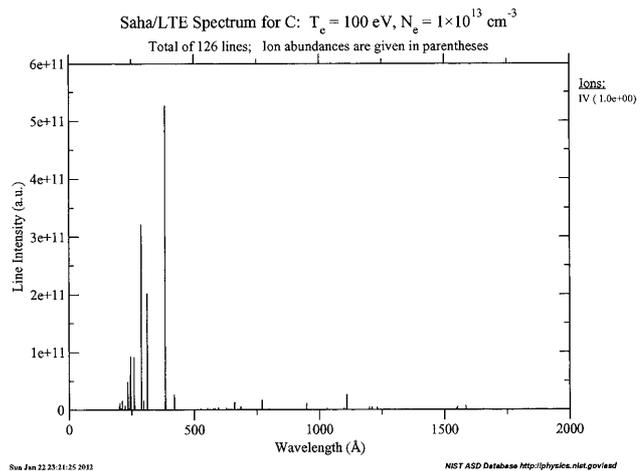


図2 NISTのASD[4]のLineの中で, Dynamic Plots オプションのSaha-LTE Spectrumを選択した場合に作成される, 熱平衡時のスペクトルで, C IVの例(1-2000 Å)を示す。電子温度100 eV, 電子密度 $10^{13} cm^{-3}$ を指定した。スペクトル線強度は相対値になる。

成することもできる("Saha-LTE Spectrum")。図2にCIVのスペクトルの例を示す。これらオプションで作成した図は, 検索結果の画面の一番下にリンクが出てきて, PDF等での表示・ダウンロードや, 図のデータのテキスト表示ができる。

また, グロトリアン図(Grotrian Diagram)と呼ばれる, エネルギー準位と準位間の光学的許容遷移の関係を表す図を作成することも可能である。図3にCIVの場合を示す。この図はJavaScriptを使ってダイナミックに表示される。遷移を示す線をクリックすると, 上準位や下準位の情報や, 波長, 遷移確率も表示できるため, スペクトル線の遷移の理解の助けになる。

次に, ASDのトップページに戻り「Levels」を選択すると, イオンの原子構造を調べることができる。イオンを分光記号で指定すると, 励起状態の電子配置, LS多重項, 全角運動量子数 J , レベルエネルギー(cm^{-1})が表示される。検索のときに, エネルギーの表示をeVに変更することも可能である。元素番号が大きな多価イオンの場合は, 配置間相互作用による混合があるため, その表示されている配置の占める割合(%)も表示される。例として, 図4にW LXX(W^{69+})で検索したときの結果を示す。レベルエネルギーの値が, 斜字体になっているのは, 実験による評価がない理論値で, +xと書かれているものは, 不定性があることを示している。電離閾エネルギーも表示される。

詳しい使い方, 説明は, ヘルプページ(ホームページ上部にリンク)に記述されている。

NISTが公開しているデータベースの中から, もうひとつ, 分子の化学反応のデータベースNIST Chemical Kinetics Database[8]を紹介する。様々な分子の気相化学反応の速度係数¹を, 化学反応式等を指定して検索できる。例えば, 初期状態として CH_4 と入力して CH_4 だけを指定して検索すると, 反応式ごとに分類した908レコードがヒットした。その中から, 7レコードヒットした $CH_4+O_2 \rightarrow CH_3+$

1 反応速度係数(Rate coefficients), 反応定数, 速度定数(Rate constant)などともいう。

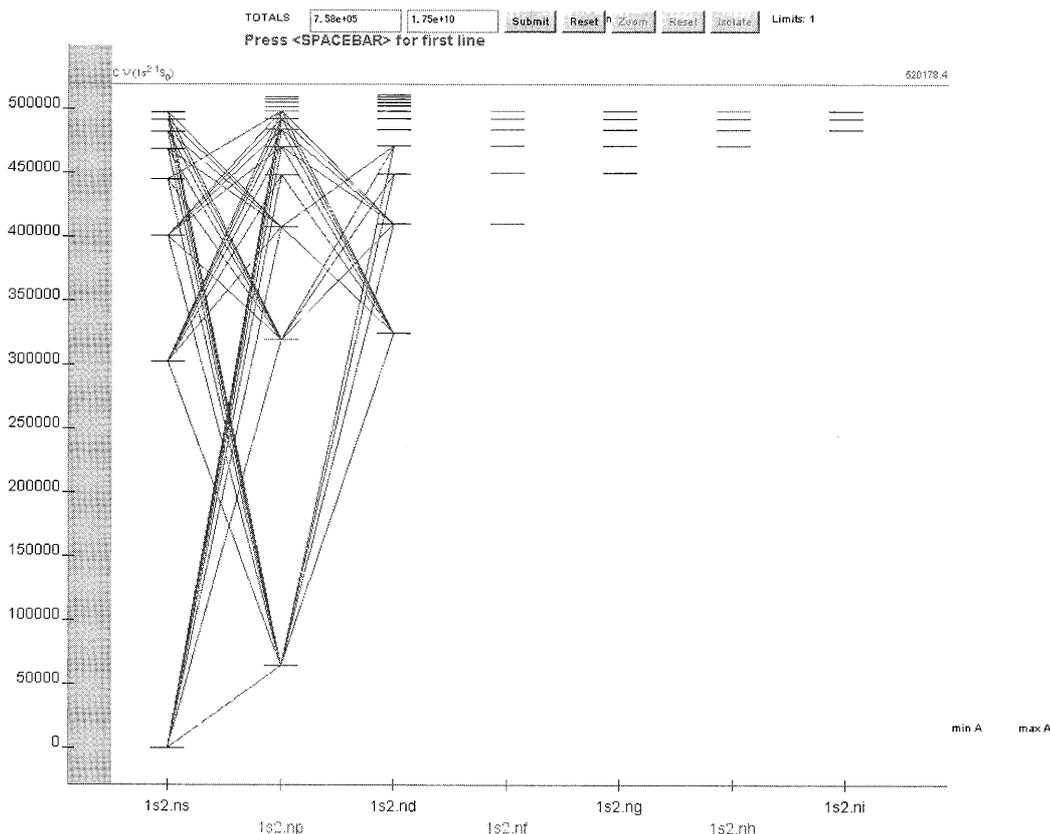


図3 NISTのASD[4]のLineのなかで作成したグロトリアン図の例として、CIVを示す。縦軸はエネルギーで、励起状態のエネルギー準位が横棒で示されている。それらの電子配置は、横軸に1s² nsのように記され、これは、1s² nsの意味で、主量子数 n=2~9 (np, ndはもう少し上まで) が描かれている。その横棒の間に引かれている斜めの線が、光学的許容遷移(電気双極子遷移, E1)である。電気双極子遷移の選択則として方位量子数 Δl=±1 に当てはまるものが描かれている。その遷移の線をクリックすると、上準位、下準位の情報や波長、遷移確率が表示される。データベースの中に入っているデータを元に図が描かれているため、この場合、lが3以上の励起状態間の遷移のデータが含まれていないこともわかる。

DATA
LINES LEVELS

INFORMATION
List of Spectra Ground States & Ionization Energies Bibliography Help

National Institute of Standards and Technology
Physical Measurement Laboratory

NIST Atomic Spectra Database Levels Data
W LXX 7 Levels Found

Example of how to reference these results:
Ralchenko, Yu., Kramida, A.E., Reader, J., and NIST ASD Team (2011). *NIST Atomic Spectra Database* (ver. 4.1.0). [Online]. Available: <http://physics.nist.gov/asd> [2012, January 23]. National Institute of Standards and Technology, Gaithersburg, MD.

Data on Lande factors are not available for this ion in ASD

Primary data source		Query NIST Bibliographic Database for W LXX (new window)	
Kramida 2011	(The energy of the 2s2p ² (³ P ₂) (172.0) ... level was calculated by Sazonova and Sazonova 2010. The additive quantity "+x" reflects the uncertainty of this calculation: ±5000 cm ⁻¹)	Literature on W LXX Energy Levels	
Configuration	Term J	Level (cm ⁻¹)	Leading percentages
2s ² 2p	³ P ^o 1/2	0	100
	3/2	11 802 000+x	99
2s2p ² (³ P ₂)	(1/2,0) 1/2	(2 184 000) +x	58 or 48 ⁴ P
	(1/2,1) 3/2	13 340 000	88 or 89 ⁴ P
2s2p ² (³ P ₁)	1/2	14 249 000	100 or 68 ² P
	3/2	14 266 000	61 or 61 ² D
W LXXI (2s ² S ₁) Limit	---	(152 213 000)	

図4 NISTのASD[4]のLevelsで、W LXX (W⁶⁹⁺)を検索した結果。基底状態、励起状態の電子配置(Configuration)、LS多重項(Term)、全角運動量子数J、エネルギーレベル(cm⁻¹; +xは計算値に不定性があることを示す)、混合の割合(%)で、他の項が混ざっているときは、2番目に大きいものも表示。

HO₂を見てみると、図5のように、速度係数に関するアレニウスの式と、そのパラメータA(頻度因子)とn, 活性化エネルギーEa, 適用温度範囲がデータの出典ごとのリストとして表示される。化学反応が、1体反応(1次)か、2体反応(2次)か、3体反応(3次)かによって、orderが分類され、速度係数の単位が、1次の場合がs⁻¹, 2次がcm³ molecule⁻¹ s⁻¹, 3次がcm⁶ molecules⁻² s⁻¹となっている。

出典のところをクリックすると、論文の情報が得られる。さらに、上部に表示された化学反応式の分子をクリックすると、Chemistry webbook[6]へ飛んで、その分子の情報が見られるようになっている。

出典の前にあるチェックボックスをチェックして、"Create Plot"をクリックすると、図(アレニウスプロット)が描かれて、データの比較ができる。図6に例を示す。アレニウスプロットは、横軸が温度の逆数、縦軸が反応係数の対数であるため、傾きから活性化エネルギーが求められる。チェックされたデータを使い、アレニウスの式で指数部の

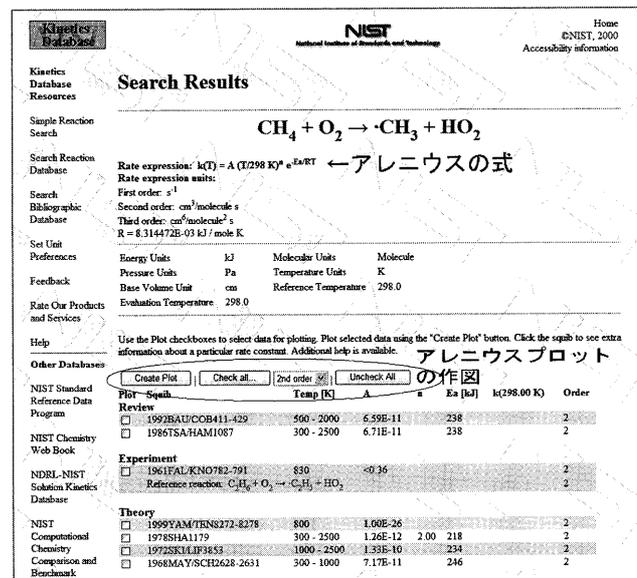


図5 NISTのChemical Kinetics Database[8]で検索し、CH₄+O₂→CH₃+HO₂の化学反応を選択して得られた検索結果。データの出典ごとに、適用温度範囲、速度係数を表すアレニウスの式のなかのパラメータA, n, Eaに対する値が表示される。Orderは速度係数の単位を示す(本文参照)。

前に温度Tのn乗の項を仮定しない場合と仮定した場合のフィットも自動で実行して、結果が表示される。

4.2 NIFS

核融合科学研究所(NIFS)では、原子・分子の衝突過程の断面積・速度係数等の数値データベース[11]を作成、公開しており、表1に示すように、9つのデータベースから構成されている。AMDIS, AMOLが電子衝突過程, CHART, CMOLが重粒子衝突過程のデータベースで、SPUTY, BACKSはプラズマ固体相互作用のデータベースである。データベース作成の歴史的経緯からDIOがあるが、近年は分子の電子衝突解離過程のデータはAMOLに格納している。データベースは1978年から順次作成され、現在のインターネットによる公開は、1997年から行っている。これらのデータベースに格納しているデータは、基本的には出版されている原著論文から収集したもので、一つの衝突過程に対して、複数の理論や実験などによるデータが表示されることが多い。原子データは、実験方法や理論

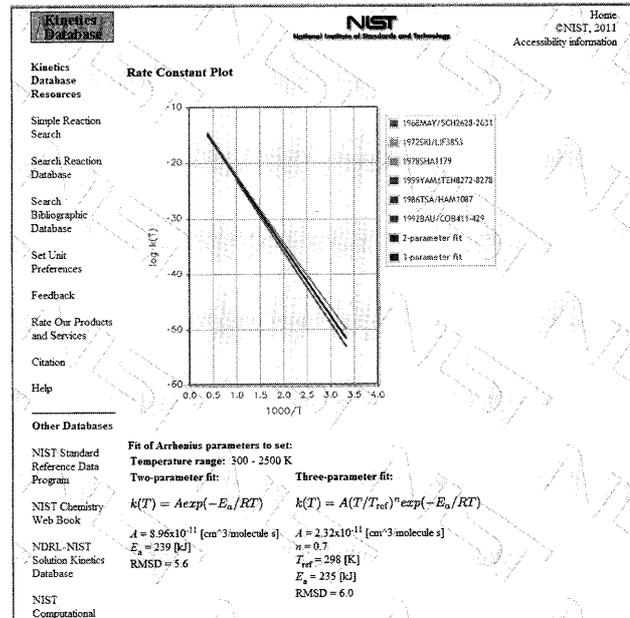


図6 NISTのChemical Kinetics Database[8]で検索し、図5で示した反応のすべてのデータをチェックしてアレニウスプロットを描いた結果。1968と1978の理論データを除き、どの文献からのデータもほぼ一致している。

表1 NIFS 原子分子数値データベース[11]の構成。

データベース名	内容	備考	
AMDIS	ION	原子の電子衝突電離断面積, 速度係数	
	EXC	原子の電子衝突励起断面積, 速度係数	
	DIO	分子の電子衝突解離断面積	H ₂ など.
	REC	原子の再結合断面積, 速度係数	
CHART	原子の重粒子衝突荷電交換断面積, 電離断面積	分子標的の古いデータも含む	
AMDIS Molecule (AMOL)	分子の電子衝突過程断面積, 速度係数(全断面積, 弾性散乱, 励起, 電離, 解離, 再結合, 電子付着)		
CHART Molecule (CMOL)	分子の原子衝突過程断面積, 速度係数(弾性散乱, 励起, 電離, 解離, 電荷移行, 組替)		
SPUTY	イオンの固体表面でのスパッタリング収率		
BACKS	固体表面での後方散乱係数		

計算手法などの違いなどにより、著者によって異なった値が出されていることが多々あり、どのデータを信頼して利用すべきか、気をつける必要がある。本講座3.4節でデータ評価について述べたが、核融合研のデータベースでは、そのような様々なデータを比較して、データ評価を行うことができるようになってきている。すでに論文として評価が行われたデータも収集してあり、そのようなデータは、実験(E)でも理論(T)でもなく、評価済み推奨データ[V]が表示されるようになってきている。研究の進歩により新たなデータが出されることもあるため、データベースのアップデートも重要である。アップデートは国内の原子分子物理学研究者の協力を得て行なっている。

表1で示したこれらのデータベースは検索システムを持ち、原子名などでの検索ができ、数値データは、数表の表示に加え、グラフ表示ができる。また、AMDIS ION, CHART, SPUTY, BACKSは、経験則による断面積も同時にグラフに書くことができる。IONの電離断面積については、Lotzの経験則(原子番号 ≤ 30) [12], CHARTは、H, H₂, He 標的に対する電荷移行断面積の経験則 [13], SPUTYは単原子固体に対するスパッタリング収率の経験則 [14], BACKSは軽元素入射に対する後方散乱係数の経験則 [15] を用いている。Lotzの式は、文献 [1] 第13章の(13.1.5)式にも記述してある。電荷移行断面積は、文献 [1] 第7章に様々な経験則が記述されているので、参考になる。データベースの中のCURVEへ行くと、経験則で断面積を作図することもできる。

図7に、例として電子衝突断面積, AMDIS IONの検索

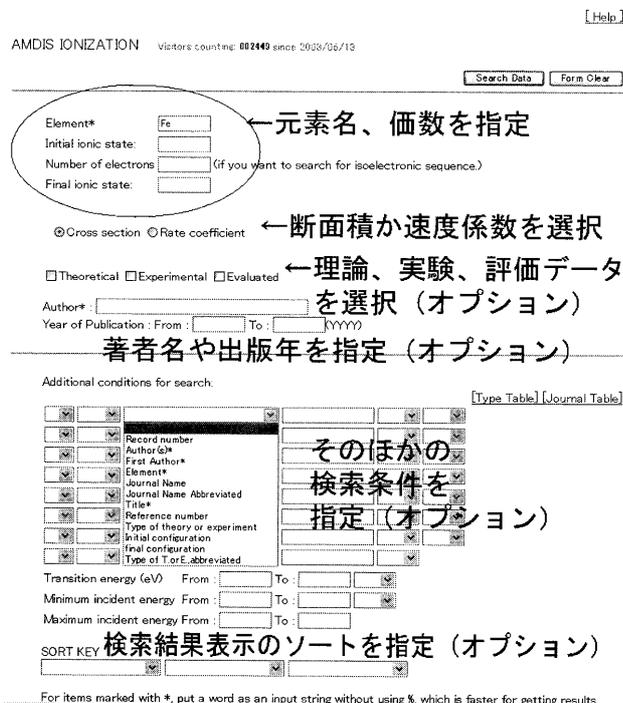


図7 NIFSのAMDIS IONデータベースの検索画面。元素名、価数などを指定して検索できる。検索データは断面積(デフォルト)、もしくは速度係数を指定する。データの種類として、理論、実験、評価データの指定や、著者、出版年、そのほかの項目も検索条件として指定できる。

画面を示す。元素名や価数などを指定して検索できる。検索する際は、断面積か速度係数を指定する必要がある(デフォルトは断面積)。オプションとして、理論、実験、評価データを選んだり、著者や出版年などの指定や、検索結果を例えば出版年でソートするように指定することもできる。検索の結果は、衝突過程ごとに分類されて表示される。ヒットするデータが300件を超えると検索が打ち切られてしまうので、ある程度狭くなるように条件を指定したほうが良い。このデータ数の検索上限は、AMDIS EXCとRECにはなく、EXCとRECの場合は、検索結果を一度、初期状態ごとに分類したリストが表示されて、そのなかから知りたい過程をさらに選択した後、個々の衝突過程のリストが表示されるようになってきている。

図7にあるようにIONで「Fe」のみ指定して検索すると、156件のデータがヒットした。例えばその中から中性鉄原子の電離断面積(1電子~4電子電離)をチェックボックスで選択して(その際、デフォルトのAll Data Listのチェックをはずす必要がある)、「Numerical Data Tables or Graphs」を選択して「Display」をクリックすると、図8

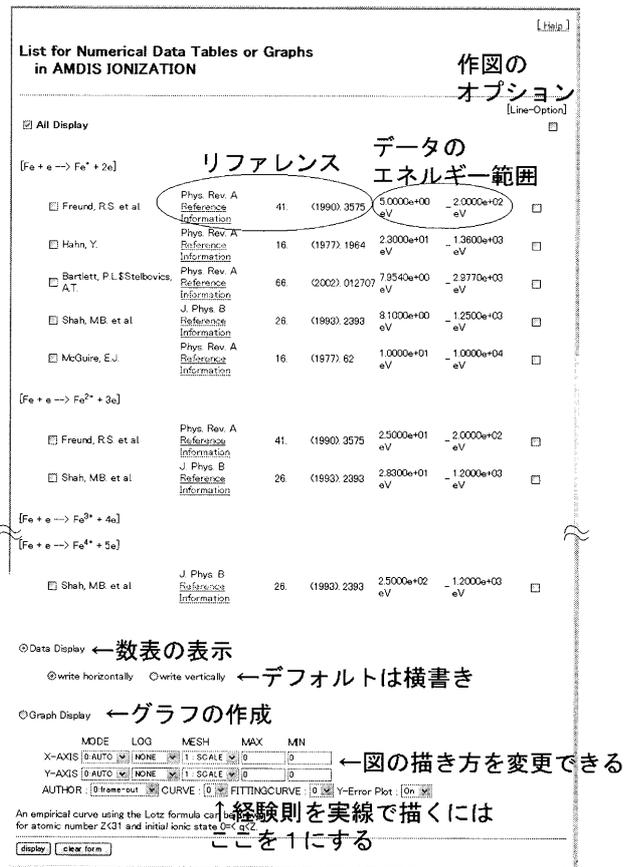


図8 NIFSのAMDIS IONデータベースで鉄を選択後、得られた結果の中から、鉄原子の1電子~4電子の電離過程を選択したあとに表示される画面。各衝突過程ごとに、データのリファレンスと衝突エネルギーの範囲が表示される。ここで、数表や図で表示するデータを選択することができる(デフォルトは全部)。数表表示は、デフォルトは横書きなので、縦書きを選択すると、あとで利用しやすい。グラフの描き方もオプションで変更できる。経験則を同時に書く場合は、CURVEを1に変更する。凡例の表示場所はAUTHORの次のプルダウンメニューで指定する。

のようなページが表示される。衝突過程ごとに、データの出典論文の情報と、衝突エネルギーの範囲が表示される。個々のデータのリストのリファレンスの著者名の次に、Reference というリンクと、Information というリンクがあるが、Reference は、文献データベース ORNL への横断検索、Information は、データに付随する情報(詳しい書誌情報、データが取得された方法、データに対するコメントなど)を見ることができる。これらの情報は、この前のページで「Numerical Data Tables and Graphs」を選ぶ前に、「Standard」もしくは「Custom」の選択によっても見ることができる。

ここで「Graph Display」を選択してグラフを描くと、図9のようになる。図を描く際に、オプション「Curve」を「1」にすると、経験則を実線で同時に描くことができる。また、個々のリファレンスごとに、データをシンボルでプロットするのではなく、線で結んで書くことも可能で、その場合は右側にある「Line-Option」のチェックボックスにチェックを入れる。図はPDFファイル等でダウンロードできる。図の描き方も変更でき、MODE を FIX にし、LOG をえらんで対数表示、MAX と MIN で表示区間を指定することができる。凡例を書く場所も AUTHOR の項目で、右上、などと変更できる。数表の表示は、Data Display を選択し、write vertically にすると、数値が縦に並ぶので利用しやすい。

核融合研では、表1に上げた検索機能付きのデータベースのほかに、いくつもの小さなデータベースを作成して公開している。リストが、ホームページ[11]に載っている。これらのデータベースは共同研究などの成果の公開等を目的に作成したもので、検索機能がなく、データをテキストファイルとしてリンクしているだけであるが、項目ごとにダウンロードできるようになっている。現在公開しているのは、二重励起状態のエネルギーレベルとサテライト線、

電子衝突による分子の微分断面積、陽子衝突による水素分子の電離微分断面積、水素分子への電子の解離付着係数、電離平衡時のイオン比、固体表面のスパッタリング収率・反射係数・飛程値、光吸収断面積、電気学会提供の原子分子の電子衝突断面積の推奨データセットとなっている。現在は、林真先生(故人)の収集された原子分子の衝突過程の文献および断面積の未発表データのデータベースの作成を電気学会放電委員会の協力を得て行っている。

4.3 Open-ADAS

ADAS (Atomic Data and Analysis Structure) [16] は、イギリスの Strathclyde 大学と JET が中心となった国際コンソーシアムが運営している原子データと解析用ソフトウェアのパッケージで、核融合プラズマや天体プラズマの分光解析等に有用な原子データや、それを使って作成された様々な2次データを利用したり自分で計算することができる。本講座1.2節aおよびbで紹介した荷電交換分光計測やビーム減衰解析では、ADAS のデータとパッケージを利用してデータの解析を行っている。そのほかにも、発光線強度と電離の数の比、いわゆる S/XB や、放射損失パワー、電離平衡のイオン密度比、などといった計算ができる。また、原子データは、核融合プラズマ関係の様々なシミュレーションコード (Strahl, EDGE2D, B2-IRENE, ERO など) でも利用されている。ADAS の膨大なマニュアルはホームページから参照でき、利用方法に熟知すれば、いろいろ有益に使える。しかしながら、このパッケージを利用するには、研究機関がコンソーシアムに参加(有料)する必要がある。国内では、NIFS と日本原子力研究開発機構が参加している。2009年より ADAS は ITER に絡んで EU からのサポートを得て ADAS-EU プロジェクトを行っている。このプロジェクトの中で若手研究者向けにトレーニングコースを毎年実施し、これはコンソーシアムメンバーでなくても参加ができる。

2008年7月より、ADAS は IAEA との協力により、OPEN-ADAS [17] として、基本的な原子データの公開を始めた。ADAS は、原子データを原子過程等により分類している。OPEN-ADAS で公開されている原子データは、荷電交換断面積 (ADF01)、「Resolved specific ion data collections」(ADF04: エネルギーレベル、基底状態や励起状態間の放射遷移確率と電子衝突励起速度係数が主体で、ファイルによっては、再結合速度係数や荷電交換再結合速度係数なども含み、衝突輻射モデルに使う励起状態のポピュレーションを計算したり発光強度を計算することのできる原子データのセット)、電子衝突電離速度係数 (ADF07)、放射再結合速度係数 (ADF08)、二電子性再結合速度係数 (ADF09)、等核子マスターファイル (ADF11; イオン密度を電離平衡等で計算するために必要なデータ、実効再結合速度係数 ACD、実効電離速度係数 SCD、荷電交換 Cross Coupling Coefficients CCD、準安定状態 (Metastable) を区別してイオン密度を計算する際に必要となる Cross Coupling Coefficients XCD と、Parent Cross Coupling Coefficients QCD、励起によるライン発光による放射パワー

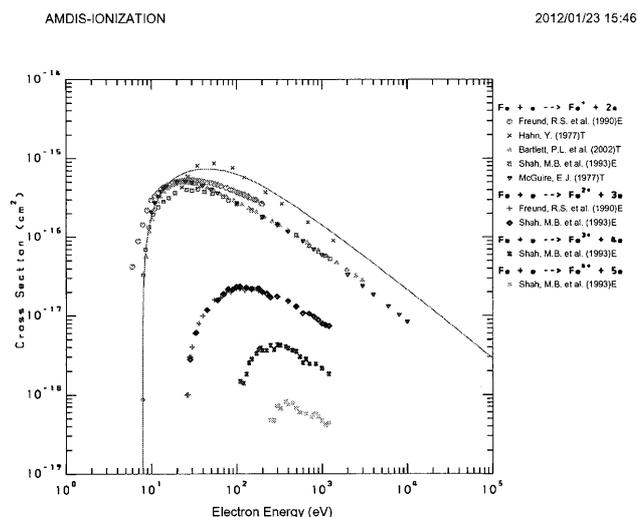


図9 AMDISION データベースで Fe の電離断面積の検索を行い、そのうち、Fe の 1 電子～4 電子電離の断面積を表示させた。実線は、1 電子電離断面積の Lotz の経験則 [12] である。各シンボルに対する文献の著者のリストのなかで、末尾の E は実験、T は理論を示す。評価済みデータは V で示される(この図にはない)。

PLT, 再結合及び制動放射による放射パワー PRB, 荷電交換による放射パワー PRC, 個々の発光線による放射パワー PLS の9種類がある), 荷電交換再結合発光係数 (ADF12), 光子1個あたりの電離の係数, いわゆる S/XB (ADF13), 発光係数 PEC (ADF15), 実効ビーム阻止能係数 (ADF21), 実効ビーム発光係数 (ADF22) となっている。これらのデータを読み込むためのフォートランプログラムもダウンロードができるようになっている。フォーマットなどの説明は, マニュアル (Appendix) の中に記載されている。データファイルはテキスト形式で, データに対するコメントも記されている。ADAS のデータファイルは, データセットの形になっており, 例えば, あるイオンの ADF04 のファイルがあれば, そのイオンの衝突輻射モデルを構築してスペクトル合成ができるようになっていて, 利用しやすい。

ADAS の原子データは, 基本的には NIFS のデータベースと同様に, 一つの衝突過程等に対して, 異なる著者によって得られた複数のデータセットが存在する。データは, 学術雑誌に発表された原著論文のある理論計算データであったり, ADAS のグループが複数のデータを比較・検討して広い衝突エネルギー領域に適用できるようにして作成したデータなど, いろいろなものが存在する。また, 励起状態に対して微細構造レベルまで分解したデータ (resolved) と分解していないデータ (unresolved) といった違いがあったり, 準安定励起状態 (Metastable) を区別した場合と区別しない場合というものもある。原子データを利用して計算した2次データ, 例えば, 発光係数 (Photo Emission Coefficients, PEC) は, 計算に用いた原子データのセットが異なれば, 異なった値となり, それぞれのファイルに記述されているコメントをよく読んでから利用する必要がある。

データの検索は, 「Freeform search」としてキーワードなど自由な検索語による検索, 波長領域指定による検索, イオン指定による検索, データクラスによる検索が用意されている。例えば, 波長領域指定の検索をした場合の例を図10に示す。波長, イオン, データクラス, 遷移, データファイル名が表示され, データファイルをクリックすると, データファイルの詳細な説明が表示され, ファイルがダウンロードできる。ここでヒットしたものは, 発光係数 (PEC) と光子1個あたりの電離の数 S/XB, 荷電交換再結合による発光係数 (QEF) である。データファイル名は, 典型的には, “データファイルの中身を示す3文字” + “データ生成年” “元素” “データ生産者名イニシャル” “イオン”.dat (例えば, pec93#c_llr#c3.dat) であるとか, “等電子イオン系列” “データ生産者” “生成年” “イオン”.dat (例えば, lilike_wjd92#c.dat) といったような規則で作られている。イオン指定での検索は, あらゆるデータクラスのファイルがヒットする。Freeform 検索で, 適切なキーワードを複数指定したほうが, データを探しやすい。いろいろ試してみると良い。

4.4 そのほかのデータベース

文献[1]の第17章にあるように, 様々な原子分子データベースがインターネット上で公開されている。大気化学とか, 応用分野ごとに特化して収集されたデータベースがいろいろあるが, 異なる分野からであっても利用できるものは多い。

その中に記述されていないデータベースとして, GRI-Mech[18]をここでは紹介する。これは, 燃焼化学のための化学反応の速度係数のデータベースであるため, 酸素, メタンなどの炭化水素, 二酸化炭素など, 燃焼に用いられるガス分子に限られるが, 低温のプロセスプラズマなど応用プラズマ分野の化学反応を調べるのにも用いることができる。[18]のトップページから「Reaction Rate Coefficients」

Wavelength	Ion	Data Type	Transition	File Details
1000A	w ³⁺	ADF15	36 ⁹ 10 _{1,5} - 36 ⁹ 13 ₂	pec40#w_1s#v53.dat
1000.3A	w ²⁺	ADF15	66 ⁹ 10 _{12,5} - 66 ⁹ 10 ₁₀	pec40#w_1s#v50.dat
1001.5A	w ⁴⁺	ADF15	6096445265c51851e ⁹ _{29,2} - 6096445265c51851m ⁹ _{29,2}	pec40#w_c#v41.dat
1001.52A	w ³⁺	ADF15	6096445265c52851n ⁹ _{2,2} - 6096445265c534 ⁹ _{2,2}	pec40#w_1c#v3.dat
1002A	w ³⁺	ADF15	6096445265c52851n ⁹ _{2,2} - 6096445265c534 ⁹ _{2,2}	pec40#w_1c#v3.dat
1002.3A	o ²⁺	ADF13	182.2s1.2p3 ⁹ _{2,2} - 182.2s2.2p2 ⁹ _{2,2}	sx066#_p#v02.dat
1002.3A	o ²⁺	ADF15	182.2s1.2p3 ⁹ _{2,2} - 182.2s2.2p2 ⁹ _{2,2}	pec56#_p#v02.dat
1002.3A	o ²⁺	ADF13	182.2s1.2p3 ⁹ _{2,2} - 182.2s2.2p2 ⁹ _{2,2}	sx180#_p#v02.dat
1002.3A	o ²⁺	ADF15	182.2s1.2p3 ⁹ _{2,2} - 182.2s2.2p2 ⁹ _{2,2}	pec56#_p#v02.dat
1003.01A	u ²⁺	ADF15	24525518 ⁹ _{2,2} - 24525516 ⁹ _{2,2}	pec40#w_1s#v31.dat
1003.44A	w ²⁺	ADF15	6096345265c ⁹ _{2,2} - 6096345265c ¹ _{2,2}	pec40#w_1c#v12.dat
1003.5A	c ¹⁺	ADF13	2s1.2p1.3s1 ⁹ _{2,2} - 2s2.2p1 ⁹ _{2,2}	sx066#_p#v11.dat
1003.5A	c ¹⁺	ADF15	2s1.2p1.3s1 ⁹ _{2,2} - 2s2.2p1 ⁹ _{2,2}	pec56#_p#v11.dat
1003.5A	c ¹⁺	ADF13	2s1.2p1.3s1 ⁹ _{2,2} - 2s2.2p1 ⁹ _{2,2}	sx066#_p#v11.dat

図10 OPEN-ADAS [17] で, 波長領域を指定して検索した結果の例。波長, イオン名, データクラス, 遷移, データファイル名が表示され, データファイルをクリックするとデータファイルの詳細な説明が表示されダウンロードできる。

Field Entry	First	Second	Third	Action
				by KEYS
LIST	any	any	any	list of species
ALL	any	any	any	all reactions (op use larger browser memory)
ACTIVE	any	any	any	reaction whose rate constants were used as active parameters (op use larger browser memory)
				by SPECIES NAME
CH4	any	except and	empty	all reactions of CH4
CH4	only	any	any	
OH	or	H2	any	reactions involving either OH or H2
CH3	and	O2	any	reactions between CH3 and O2
CH3	and	M	any	reactions involving CH3 and M
C2H5	and	(N)	any	reactions involving C2H5 and (N)
				by REACTION NUMBER
	any	empty	reaction 5	

図11 GRI-Mech[18]データベースの検索画面。画面下に入力フォームがあり, 画面上部にリストアップされた分子名や, プルダウンメニューを選択して, 検索を実行する。

Number	Reaction	Rate Coefficient $A T^n \exp(-E/RT)$			Served as Optimization Variable in GRI-Mech Releases
		A (mol,cm ³ ,s)	n (T in K)	E (cal/mol)	
118	HO ₂ + CH ₃ → O ₂ + CH ₄	1.00E+12			1.1; 1.2; 2.1; 3.0

CH₄ and O₂ Find Reactions Instructions

図12 GRI-Mech[18]データベースで、CH₄とO₂で検索した結果、一つの化学反応がヒットした。速度係数をアレニウスの式で表した場合のパラメータがリストで示される。Numberの数字をクリックすると、データの詳しい情報が得られる。

を選択すると、図11に示す検索画面が表示される。ページの上部に検索方法についての説明、下部に検索条件をいれる入力フォームがある。第1入力欄には、CH₄などの分子名を入れるが、ここにLISTと入力して検索を実行すると、このデータベースで扱っている分子のリストが表示される。2番目がプルダウンメニューで、分子ごとに選択できるものが表示されている。第3入力欄に標的分子等を入力して、検索を実行する。第3入力欄の説明にanyとあるものは、いろいろな分子が指定できる。例として、CH₄とO₂を指定してみると、図12に示すような結果が得られた。これは、4.1節の図5で示したものの逆の反応過程である。このデータベースは、一つの反応過程については、一つのデータのみを表示するようになっている。反応係数は、アレニウスの式のパラメータで表示されるが、図12の場合は、温度によらない一定値が示された。Numberに示された数字をクリックするとデータの詳細が表示され、データの出典や、温度ごとの速度係数、エントロピーやエンタルピーなどのデータが示される。

検索結果は、化学反応シミュレーションソフトウェアCHEMKIN（詳細化学反応解析支援ソフトウェア、市販品）で使えるフォーマットでの出力も可能になっている。

また、GRI-Mechでは、分子の熱化学基礎データとして、200–2000Kの温度に対する熱容量、標準エントロピー、分子形成の標準エンタルピーの値もデータベースとして用意している。熱化学基礎データはNISTのChemistry Webbook [6]にもあるので比較できる。Webbookはリファレンスごとに値が表示される。

以上、いくつかのデータベースの利用方法を紹介した。ここで紹介しなかったデータベースも、文献[1]の第17章

やリンクリストが[19]にあるので、是非一度のぞいてみて、自分の必要とするデータはどこから探することができるか、調べてみてほしい。

参考文献

- [1] 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）。
- [2] GENIE, <http://www-amdis.iaea.org/GENIE/>
- [3] Standard Reference Data, <http://www.nist.gov/srd/>
- [4] Atomic Spectra Database, ver.4, <http://www.nist.gov/pml/data/asd.cfm>
- [5] NIST Physical Reference Data, <http://www.nist.gov/pml/data/>
- [6] <http://webbook.nist.gov/chemistry/>
- [7] <http://physics.nist.gov/PhysRefData/Ionization/Xsection.html>
- [8] <http://kinetics.nist.gov/kinetics/index.jsp>
- [9] <http://kinetics.nist.gov/solution/>
- [10] W. Ritz, *Astrophys. J.* **28**, 237 (1908).
- [11] NIFS Database, <http://dbshino.nifs.ac.jp/>
- [12] W. Lotz, *Z. Phys.* **261**, 241 (1968); **220**, 466 (1969); *J. Opt. Spc. Am.* **58**, 236 (1968); **58**, 915 (1965).
- [13] Y. Nakai *et al.*, *Phys. Scr.* **T28**, 77 (1989).
- [14] N. Matsunami *et al.*, IPPJ-AM-52, *Inst. Plasma Phys., Nagoya Univ.*, 1987.
- [15] R. Ito *et al.*, IPPJ-AM-41, *Inst. Plasma Phys., Nagoya Univ.*, 1985.
- [16] ADAS, <http://www.adas.ac.uk/>
- [17] OPEN-ADAS, <http://open.adas.ac.uk/>
- [18] GRI-Mech 3.0, <http://www.me.berkeley.edu/gri-mech/>
- [19] <http://dpc.nifs.ac.jp/dblinks1.html>