

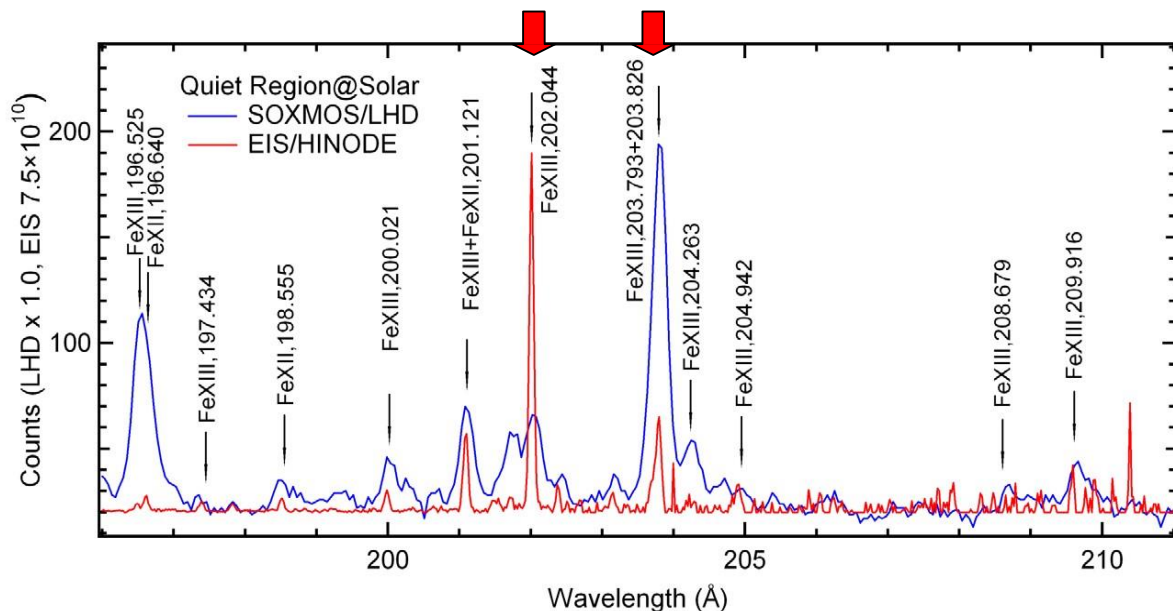
スペクトル線解析のための 原子データコードと原子データ ベース

村上泉

自然科学研究機構核融合科学研究所／総研大／宇宙研

スペクトル線とプラズマ分光診断

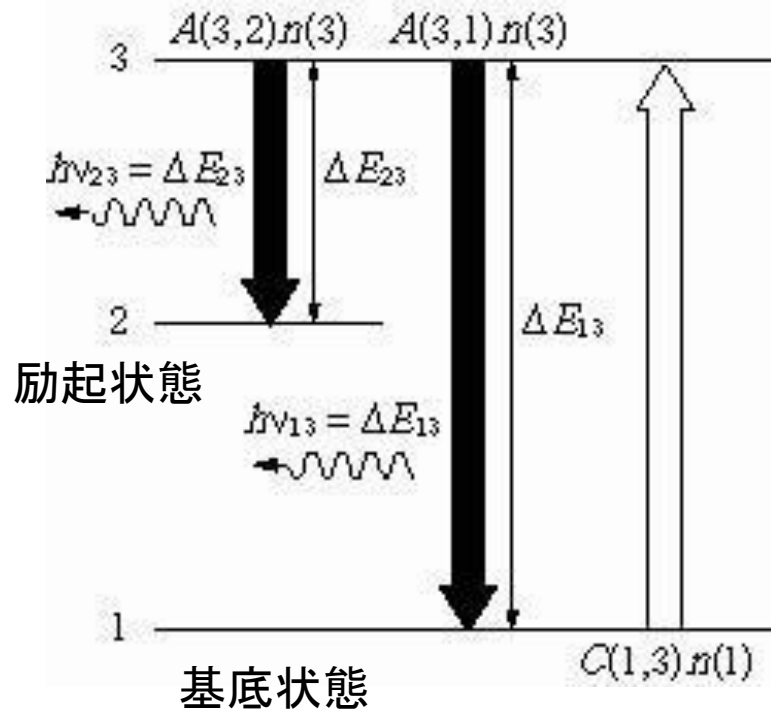
- プラズマの分光計測 => スペクトル
- 連続光 + 発光線 (吸収線)
- 発光線 -> プラズマの物理状態の診断 (電子温度、電子密度、イオン温度、イオン密度 etc)
- 強度比の電子温度 / 密度依存性を使ったプラズマ診断



- 発光線強度 $I(i,j) \propto n(i)A(i,j)$
- 上準位のポピュレーション密度 $n(i)$ は電子温度、密度に依存する
これを計算するための原子コードと原子データベースが必要

静穏太陽 ($10^9-10^{10} \text{cm}^{-3}$) からのスペクトルと実験室プラズマ (LHD, 10^{13}cm^{-3}) のスペクトル

離散的なエネルギー準位とスペクトル線



発光線の波長 λ = 原子に固有
遷移確率 A = 遷移に固有

励起レート C = 電子温度に依存

原子は固有な離散的なエネルギー準位を持つ
(水素の場合 $E = -Ry/n^2$)

発光は、(電子密度が低いコロナモデルの場合)

1. 電子が基底状態から電子衝突で励起

$$(C(1,3)n(1)n_e)$$

2. 放射遷移で準位のエネルギー差を光として放出して
下の準位へおりの $h\nu = \Delta E = hc/\lambda$ <発光線>

3から1への遷移 自然放出確率 = A係数 $A(3,1)$
上準位3の励起原子の占有密度 $n(3)$ (電子が3の状態にある密度)

$$n(3) = C(1,3)n_e n(1) / (A(3,1) + A(3,2))$$

発光線強度 = $A(3,1)n(3)$ → 電子温度・密度に依存
(単位体積単位時間あたりの光子の放出回数)

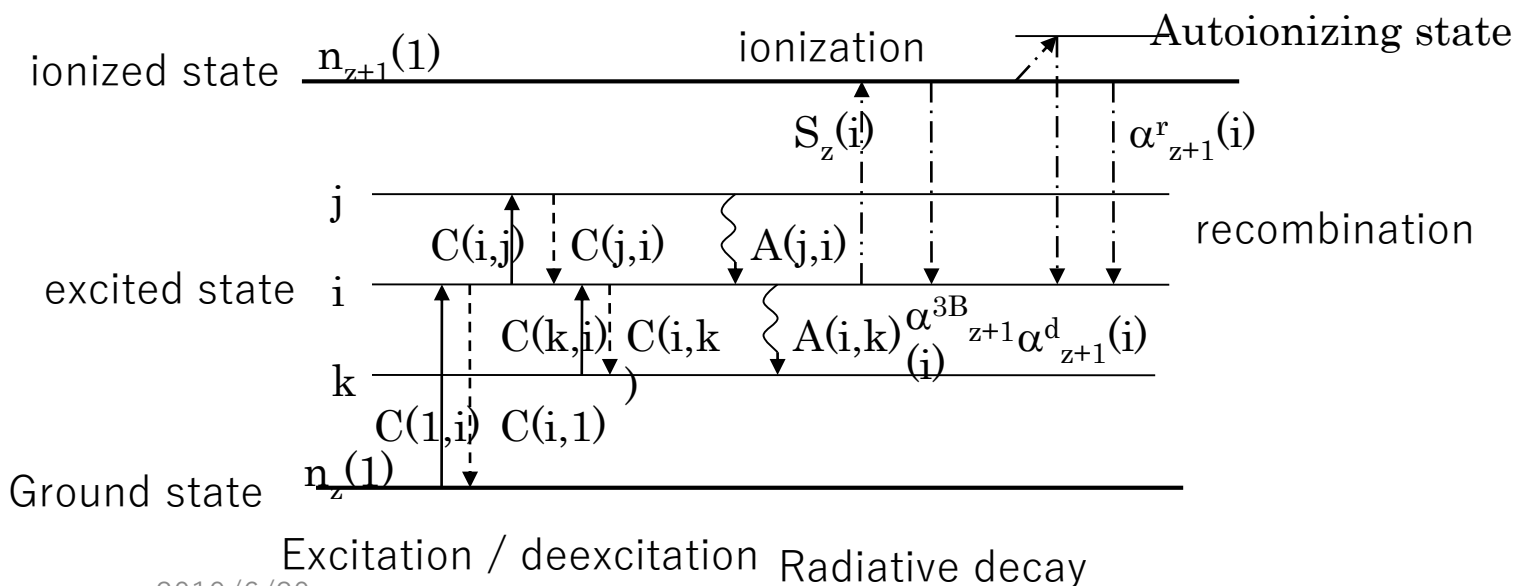
原子イオンの衝突輻射モデル

- イオン密度は**輸送方程式**

$$\frac{\partial}{\partial t} n_z + \vec{\nabla} \cdot \{ n_z \vec{v}_z - D_z \vec{\nabla} n_z \} = -S_z^{ion} n_e n_z - \alpha_z^{rec} n_e n_z + S_{z-1}^{ion} n_e n_{z-1} + \alpha_{z+1}^{rec} n_e n_{z+1} + S_z$$

- イオンの各励起状態のポピュレーション密度を解く**レート方程式**

$$\frac{dn_z(i)}{dt} = - \left[\left\{ \sum_{k<i} C_z(i,k) + \sum_{j>i} C_z(i,j) + S_z(i) \right\} n_e + \sum_{k<i} A(i,k) \right] n_z(i) + \sum_{k<i} C_z(k,i) n_e n_z(k) + \sum_{j>i} \{ C_z(j,i) n_e + A_z(j,i) \} n_z(j) + \{ \alpha_{z+1}^{3B}(i) n_e + \alpha_{z+1}^d(i) + \alpha_{z+1}^r(i) \} n_e n_{z+1} \quad (1)$$



準定常近似
 $dn_z(i)/dt=0$
 衝突輻射モデル

モデルで使う原子データの精度、エネルギー準位をどの程度考慮するかで、原子モデルの精度が決まる

XSPEC (An X-Ray Spectral Fitting Package)

- X線天体のスペクトルをフィッティングするパッケージ
- 各Detectorに対応 (装置応答関数)
- 多様なプラズマモデルを有する = 多様なモデルスペクトルを有する
continuum: power-law / blackbodies / thermal bremsstrahlung
/comptonization/ etc
photoelectric absorption, edges etc (energy dependent factor)
発光線 (default model に加えられる)
- Line broadening など対応
- Line identification
 - Bearden (1967) (fluorescence lines)
 - mekal (Mewe et al. 1985; Mewe et al. 1986)
 - APEC -- AtomDB
- Abundance tables いろいろ

XSPEC内の原子データ

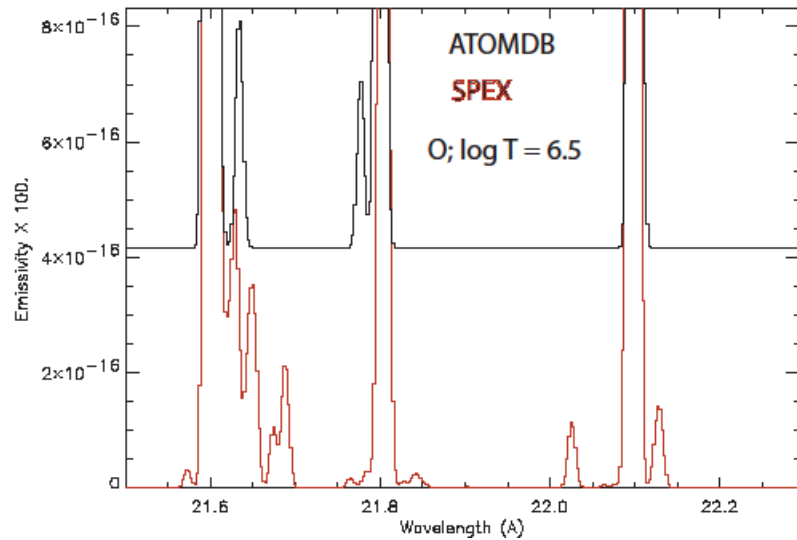
- Mekal (Mewe-Kaastra-Liedahl thermal plasma 1995)
f_{ij}, S_z, C_{ij}, α : 経験則を導出して用いている
fluorescence line を含む
- Equil (ionization equilibrium collisional plasma)
ionization fractions and spectra calculation from AtomDB
- Nei (simple nonequilibrium ionization plasma model)
Kazik Borkowski (2001)
ionization, excitation-autoionization, dielectronic recombination,
radiative recombination を考慮
S_z: Arnaud & Raymond (1992), Lennon et al. (1987) など
- Apec (APEC emission spectrum from atomDB)
continuum + line emission

AtomDB

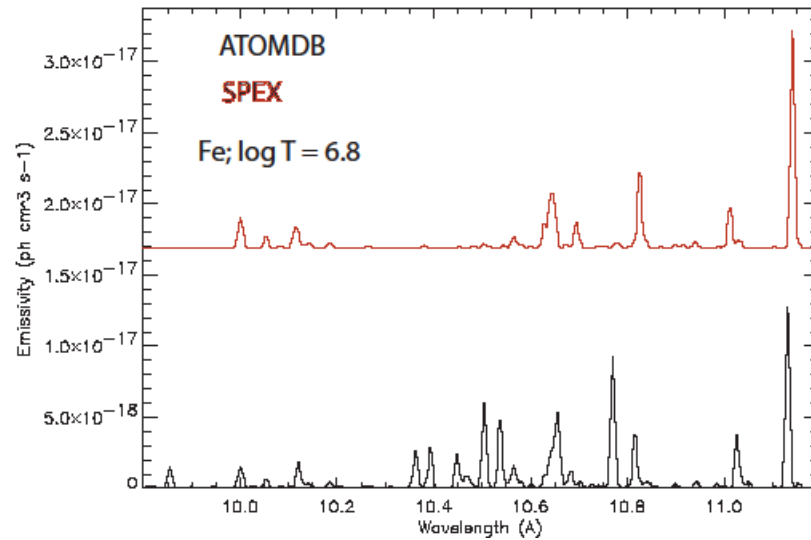
- AtomDB atomic database, APED (The Astrophysical Plasma Emission Database) : fundamental atomic data
- Astrophysical Plasma Emission Code (APEC)のspectral model Output
- For optically thin plasma in ionization equilibrium
- Atomic dataは、新しいデータに適宜アップデート
 - 波長：NISTデータベース
 - 励起速度係数、再結合速度係数：新しいデータが出るとアップデート
 - 電離速度係数はArnaud & Raymond
- 発光線強度は衝突輻射モデルで計算 (10^{14-27}cm^{-3}), 10^{14}cm^{-3} 以下はコロナモデル
- 電離と再結合は別に解く
- 荷電交換反応、三体再結合過程は無視、内殻励起過程は含まない
- Optical depth effect: 取り込む際は、escape probability formalism
- 電場、磁場の効果は無視、拡散も無視
- Continuum は主に放射再結合過程、2光子
- Fluorescence lineは含まない；DRサテライト線は含む
- High n line は入っているが、まだ十分ではない

鉄のスペクトル ATOMDBとMEKAL/SPEXの比較

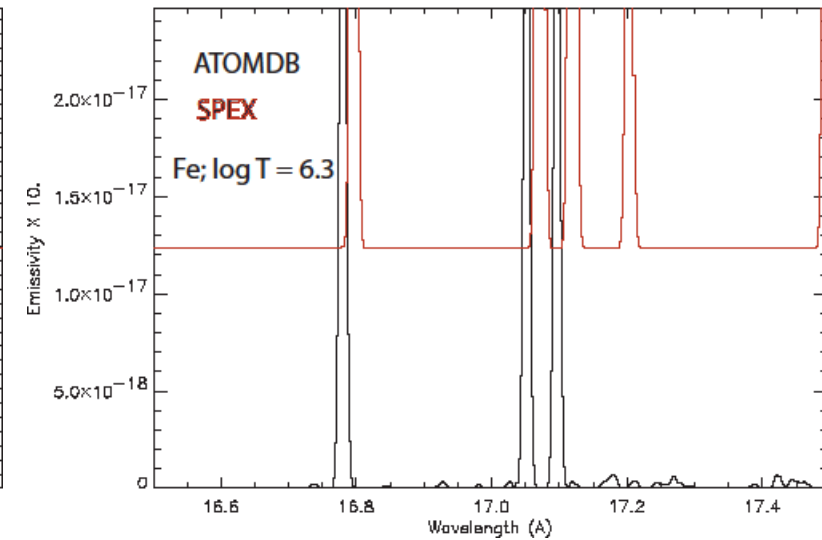
<http://www.atomdb.org/Issues/mekalspex.php>



DR satellite lines



High n lines



Inner-shell excitation lines

NIFS Atomic and Molecular Database

URL=<http://dbshino.nifs.ac.jp/>

Nifs database information

What's New:

- Munoz, A. J.Phys.Conf.Ser. 133 012002 (2008) [AMDIS Molecule] H₂O
- Fremont, F. Phys.Rev.A 74 012717 (2006) [AMDIS Molecule] H₂O
- Vinodkumar, M. Eur.Phys.J.D 61 p579-585 (2011) [AMDIS Molecule] H₂O
- Zheng, R. Phys. Scr. 80 015301 (2009) [AMDIS Molecule] H₂O
- Munoz, A. Int.J.Mass Spec. 277 p175-179 (2008) [AMDIS Molecule] H₂O
- Sossah, A.M. Astrophys.J.Sup.Ser. 020:12 (2012) [AMDIS Excitation] Cl²⁺
- Kristic, P.S. Nucl. Instrum. Methods Phys Res B 241 n 58-67 (2005) [CHART Molecule] H in H₂.

[\[Japanese\]](#)

NIFS DATABASE.
<National Institute for Fusion Science>

Atomic and Molecular Numerical Databases

Cross Sections and Rate Coefficients for Ionization, Excitation, and Recombination by Electron Impact
 Charge Transfer by Heavy Particle Collisions, and Collision Processes of Molecules,
 Sputtering Yields of Solids, and Back Scattering Coefficients from Solids

Bibliographic Databases

Fusion and Plasma Sciences, Atomic and Molecular Physics, and Atomic Collision Processes

Made by [A&M Data Research Section](#)

More detailed information is [here](#). Samples on Numerical Data are [here](#).
 We welcome your data submission. Details are [here](#).
 We welcome your comments and suggestions. Please send email to arndb-admin@nifs.ac.jp

NIFS Database Entrance

[ENTER](#)

Information on the Database Service

Please use the URL <http://dbshino.nifs.ac.jp/> to connect to the NIFS database.
 Thank you for your cooperation.

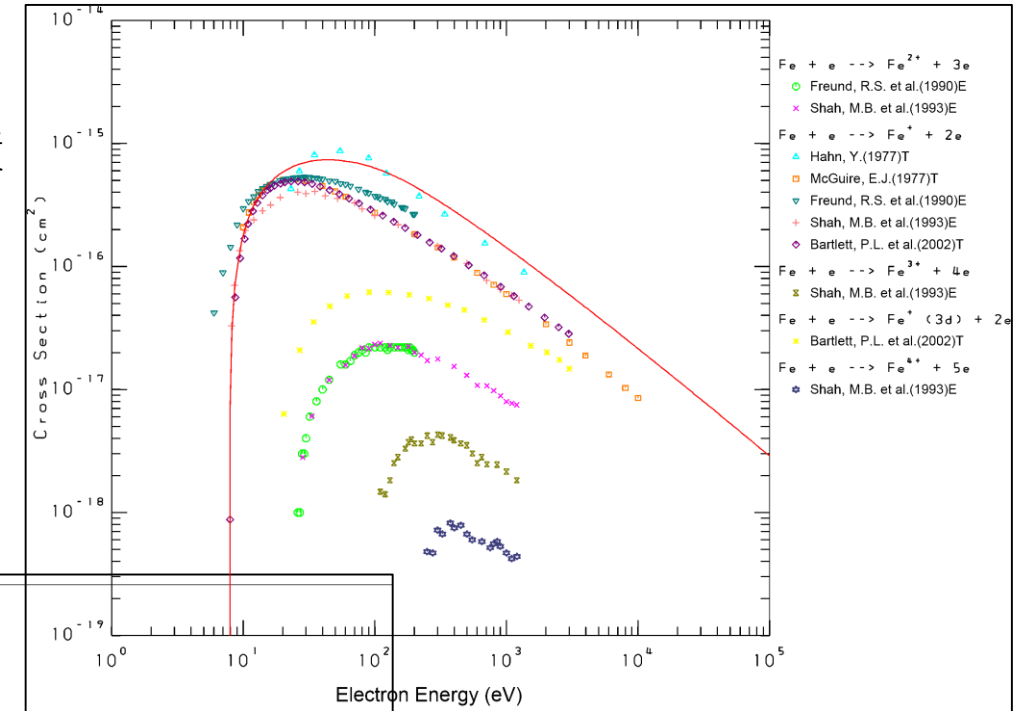
Free Access to Databases on Atomic and Molecular Data provided by NIFS:

- [ALADDIN](#) (Ionization Cross Sections and Excitation Rate Coefficients by Electron Impact)
- [Data for Autoionizing States](#) (Energy Levels of Autoionizing States and Satellite Lines by Dielectronic Recombination)
- [Differential Cross Sections for Molecules by Electron Impact](#)
- [Differential Cross Sections of Ionization for Atomic Hydrogen by Proton Impact](#)
- [Electron Dissociative Attachment to Molecular Hydrogen](#)
- [Hayashi's bibliographic database](#) for electron and photon collision cross sections with atoms and molecules
- [ION FRACTION](#) (Ion Abundance Tables in Ionization Equilibrium)
- [Photoabsorption database](#) (Oscillator strength spectra and related quantities of 9 atoms and 23 molecules over the entire energy region)
- [Recommended data set of electron collision cross sections of atoms and molecules](#) (compiled by The Institute of Electrical Engineers of Japan)
- [Sputtering yield, Reflection coefficient and Range value of solid surfaces](#) (Calculated by Dr. W. Eckstein)
- [IPPI-AM publications](#) (Reports on atomic data for fusion research published by the Institute of Plasma Physics, Nagoya University from 1977 to 1989)
- [NIFS-DATA publications](#)

[Links to Other Atomic and Molecular Databases](#)

By the [Atomic and Molecular Process Research Section](#),
 Fusion System Research Division, Department of Helical Plasma Research, [NIFS](#)

電離断面積



Data Number 9

Record No=21888
 Fe + e → Fe⁺(3d) + 2e
 Bartlett, P.L. et al.
 Phys. Rev. A 66 (2002) 012707
 NDP = 17
 When the original data has no error bars for Y, 0 is displayed for the Y error (+, -) columns.

X = Electron energy (eV)	Y = Cross section (cm ²)	Y Error Plus (cm ²)	Y Error Minus (cm ²)
2.028000e+01	6.315000e-18	0.000000e+00	0.000000e+00
2.683000e+01	2.089000e-17	0.000000e+00	0.000000e+00
3.421000e+01	3.549000e-17	0.000000e+00	0.000000e+00
4.560000e+01	4.759000e-17	0.000000e+00	0.000000e+00
6.168000e+01	5.722000e-17	0.000000e+00	0.000000e+00
9.048000e+01	6.185000e-17	0.000000e+00	0.000000e+00
1.270000e+02	6.159000e-17	0.000000e+00	0.000000e+00
1.822000e+02	5.885000e-17	0.000000e+00	0.000000e+00
2.577000e+02	5.488000e-17	0.000000e+00	0.000000e+00
3.590000e+02	4.847000e-17	0.000000e+00	0.000000e+00
4.786000e+02	4.455000e-17	0.000000e+00	0.000000e+00
6.767000e+02	3.689000e-17	0.000000e+00	0.000000e+00
1.030000e+03	2.917000e-17	0.000000e+00	0.000000e+00
1.534000e+03	2.270000e-17	0.000000e+00	0.000000e+00
2.030000e+03	2.002000e-17	0.000000e+00	0.000000e+00
2.532000e+03	1.738000e-17	0.000000e+00	0.000000e+00
3.000000e+03	1.479000e-17	0.000000e+00	0.000000e+00

Data Number 10

DB Name		Contents	Period	Records (Apr. 11, 2019)
AMDIS	EXC	原子・イオンの電子衝突励起断面積・速度係数	1961-2017	762,897
	ION	原子・イオンの電子衝突電離断面積・速度係数		
	DIO	分子の電子衝突解離断面積		
	REC	原子イオンの再結合断面積・速度係数		
CHART		原子・イオン衝突電離、荷電交換断面積	1957-2013	7,646
AMDIS MOL (AMOL)		分子と電子の衝突過程断面積・速度係数	1956-2015	5,349
CHART MOL (CMOL)				
SPUTY		固体表面でのスツパタリング収率	1931-2007	2,349
BACKS		固体表面での後方散乱係数	1976-2002	485
(AM Bibliographic database)				
ORNL		衝突過程に関する文献データベース (ORNL, USA)	1959-2009	78,097

Collaboration with HINODE/EIS team (2004~)

- ひのでEISの解析のための鉄イオンの原子データ・原子モデルの検証、原子モデルの構築
- 電子衝突励起速度係数の収集と評価 (Fe I ~ Fe XXV)
- 陽子衝突断面積の収集と評価 (Fe X ~ Fe XXVI)
- 鉄イオンの衝突輻射モデルの構築 (Fe X ~ Fe XXVI)
- CoBIT装置 (小型電子ビームイオントラップ装置) の開発
- 実験室プラズマ (LHD、EBIT/CoBIT)を用いたスペクトル線計測による原子モデルの検証 Fe X~XVI, XVII, XXIII