最近の原子スペクトルと遷移確率研究

2004/05/31 平田

１．最近の動向

a) 実験

＊FTS(Fourier Transform Spectrometer)が従来の赤外から可視・紫外域まで実用化
＝＞広い波長域にわたって高分光分解能でスペクトルが取得できるようになり、
波長の精度、従って、結果としてのエネルギー準位の桁数が一桁上がった（低
電離イオン）。波長精度は注意深く求めると0.0001Aの精度で求まり、宇宙における
物理定数の変化を議論できるようになった。（fine structure constantはQSOを用いて
10^{-5}のオーダーで減少（物理学としてはGUTの判定で重要、天文学的には無視できる）

(fig.1)

また、スペクトル線の相対強度が精度良く決められるので、準位から、下の準位への遷移
の配分（BR=Branching Ratio、Aの比)が求められ、life-time(=L)と組み合わせて、遷移確
率が精度良く求められるようになった。

上記FTSが各大学実験室に導入されつつある。Kitt PeakのFTSは依然精度
の点で凌駕し、現在も物理屋に良く利用されている。

例：ムードン天文台
W.-U.L.Tchang-Brillet & V.I.Azarov (2002) Phys.Scr. T100, 104-13

figs. 01,02,03

b) 理論

＊ab initio(無仮定)な計算は、Liまでは、現在の実験を越える精度で求まるようになった。しかし、それ以上の複雑な原子ではエネルギー準位でさえ精度良くは求まらない。
実験値を準位値として採用するsemi-empricalな方法がより良い精度で遷移確率を求めることができることが認識されている。KuruczはCowan codeを用いたsemi-empricalな手法で、
強い線では良い遷移確率値を与える。しかし、組成解析に利用する弱い線は実験・理論とも
精度の良い値を得ることは依然困難である。

注１）Seatonが率いたOpacity Projectはab initioで、LS couplingを仮定。従って、各スペクトル線での遷移確率は最近は信用されなくなりつつある。かつてのメンバーも準位値を実験値に換え、またLS couplingをはずして計算を行いだした。相対論的効果や準位間の相互作用などの導入で、各自の開発したコードで互いに精度を競っている。最も進んでいるのはFroese Fischerのグループと思われる。(注：Opacity Projectの後続はIron Project)

c) 実験と理論の併用

＊Cowan codeの普及により、実験屋が理論計算を併用して、線同定の手段に利用しだした。この為、大量の遷移確率が併記されるようになった。丁度、星の大気モデルでの
ATLAS9のように、Cowan codeがこの分野では広く利用されている。

d) astrophysical gf values

＊昔から、solar gf (stellar gf), interstellar gfが求められているが、最近では
"Atomic Physics with the GHRS on the Hubble Space Telescope"のタイトルの下
でのinterstellar gf が目立つ。（但し、そんなに精度があるとは思われない）

２．データベースあるいはwebでとれる大量遷移確率データ

(cf. Reports from IAU Commision 14； Wiese,W.L. 2002, Phys.Scr. T100, 126-7)

*compilation

a) NIST database (http://physics.nist.gov) version 2
しにせ。文献データも含めて、あらゆるデータがあるが、critical compillationを
行っているため、常に’古い’。

nist.bmp

b) VALD (Vienna Atomic Line Data Base) http://www.astro.univie.ac.at/~vald
新興。T.A,Ryabchikova。星のスペクトル合成までできる至れりつくせりのデータベース。立ち上げ時は私のATMLINEより遷移確率入力では劣っていたが、今は、越えてること
を期待（無理だろうなあ）。

vald2.bmp

*各グループの計算結果の集積やプロジェクト

c) TOPbase: http://vizier.u-strasbg.fr/topbase
Opacity Projectの検索システム

d) DREAM (Database on Rare EArths at Mon university)
http://www.umh.ac.be/~astro/dream.html
Z=57-71の希土類元素に対する計算結果。E.Biemont。最近は自分達でＬを測定し、
renormalize

Biemont,E. & P.Quinet (2003) Phys.Scr. T105, 38-54 Lanthanide atoms: review
Table II. Energy levels, lifetimes and transition probabilities of neutral and singly ionized elements:
key references for the period 1981-2001.

Z Element	Levels	Transition probabilities
General interest	[7][8][110][111][112]	[113][114][115][116][117][118][119]
57 La I	[49][50][51][52]	[120]
La II		[121][122][123][124][125][357]
58 Ce I		[126][127][128][129]

Z	Ion		
	Ce II	[53]	[53][127][130][131][132]
59	Pr I	[56]	[133][134][135]
	Pr II	[54][55][57]	[134][135][136]
60	Nd I	[58][61]	[137]
	Nd II	[59][60][138][139]	[140][141][142][143][144]
61	Pm I		
	Pm II	[145]	
62	Sm I	[62][63][64][65][66][67][68][69]	[146][147][148][149][150][151][152][153][154] [155][156][157][158]
	Sm II	[159]	[160][161][162]
63	Eu I	[70][71][72][73][74][75][76][77][78][163]	[78][156][157][164][165][166][167][168]
	Eu II		[165][166][169][170][171][172][173]
64	Gd I	[79][80][81][174]	[129][157][175][176][177][178][179][180][181][182]
	Gd II	[183]	[175][184]
65	Tb I		[185]
	Tb II	[186]	[173][185][187][188][189]
66	Dy I	[82][190][191][192][193]	[3][154][156][194][195][196][197][198][199]
	Dy II	[82][200]	[3][197][196][199][201]
67	Ho I	[202][203][204]	[205]
	Ho II	[203]	[173][205][206]
68	Er I	[83][207]	[154][156][208][209]
	Er II		[210][211]
69	Tm I	[84][85][86]	[212][213][214][215][216][217][218][219][220][221]
	Tm II		[217][219][222][223]
70	Yb I	[97][98][99][100][101][102][103][104][105][106]	[224][225][226][227][228][229][230][231][232][233][234][235] [236][237][238][239][240][241][6][98][156][242]
	Yb II	[87][88][89][90][91][92][93][94][95][96][109]	[92][95][127][241][243][244][245][246][247][248][249][250]
71	Lu I	[107][108]	[251]
	Lu II	[107][108][251][252][253][254][255]	

Table III. Transition probabilities and radiative lifetimes for doubly ionized lanthanides.

Z	Ion	References
57	La III	[121][127][283]
58	Ce III	[284][285][286]
59	Pr III	[287][288]
60	Nd III	[289]
62	Sm III	[290]
63	Eu III	[170][291]
64	Gd III	[184][292]
65	Tb III	[293]
66	Dy III	[294]
67	Ho III	[295][296]
68	Er III	[46][297]
69	Tm III	[298]
70	Yb III	[47][299]
71	Lu III	[251][283]

Table V. Hyperfine structure in lanthanides: main references for the period 1981-2001.

Z	Element	References
General interest		[342][343][344][345][346]
57	La I	[347][348][349][350][351][352][353][354][355]
	La II	[356][357][358][359]
59	Pr I	[360][361][362]
	Pr II	[54][55][57][135][363][364][365][366]
60	Nd I	[58][367][368][369]
	Nd II	[364][370]
61	Pm I	[371]
	Pm II	[145][371]
62	Sm I	[372][373][374][375][376]
	Sm II	[377][378][379]
63	Eu I	[78][318][380][381][382][383][384][385][386][387][388][389][390][391][392][393][394]
	Eu II	[188][319][395][396][397][398][399][400][401][402]
64	Gd I	[403][404][405][406][407][408][409][410]
	Gd II	
65	Tb I	[411][412][413]
	Tb II	[186]
66	Dy I	[195][405][412][414][415]
	Dy II	
67	Ho I	[204][416][417][418]
	Ho II	[206]
68	Er I	[83][405][414][419][420][421][422][423][424]
	Er II	[425][426]
	ErIII	[427]
69	Tm I	[86][428][429][430][431][432]
	Tm II	[433]
70	Yb I	[87][106][371][434][435][436][437][438][439][440][441][442][443][444]
	Yb II	[438][445][446]
71	Lu I	[447][448][449][450]
	Lu II	[254]

Table VII. DREAM database: ions considered and number of transitions included.
More details are given at the address: http://www.umh.ac.be/ astro/dream.shtml

Z	Element	References	Number of transitions
General interest		[504][505][506]	
57	La II	[123]	*
	LaIII	[283]	131
58	Ce II	[53][131]	14970
	CeIII	[285]	*
	Ce IV	[282]	*
59	PrIII	[287][288]	18402

60	NdIII	[289]	52
62	SmIII	[290]	*
63	EuIII	[507]	*
64	GdIII	[292]	*
65	TbIII	[293]	933
66	DyIII	[294]	*
67	HoIII	[295][296]	1324
68	ErIII	[297]	1308
69	Tm II	[223]	7955
	TmIII	[298]	1479
70	Yb II	[94][127][243]	5485
	YbIII	[47][299]	279
	Yb IV	[508]	2770
71	Lu I	[251]	*
	Lu II	[251][253]	107
	LuIII	[251][283]	59

* Table in preparation.

e) Raassen,A.J.J. & P.H.M.Uyling : ftp.wins.uva.nl/pub/orth/
鉄族の膨大な計算。但し中性原子はない。Kuruczより精度良し。

f) SAM Project (Systematic, Accurate, Multiconfiguration calculation):
http://aniara.gsfc.nasa.gov/sam/
C.Froese Fischer率いるグループの結果。論文を張り付けている感があり、データそのものはE-journalでとること多い。軽元素から重元素まであり。最近は精度が非常に良いものがあり、理論値の誤差まで評価している。

g) FERRUM Project (see S.Johansson et al. 2002, Phys.Scr. T100, 71)
FeIIを中心とした一回電離鉄属元素に対して実験から遷移確率を求めるプロジェクト。
スウェーデンの泰斗、S.Johannsonの指揮するグループ。

figs.2,3,4

３．ATMLINE2003

a) 三鷹を通じてCDS (Strasbourg)に納めたのは1994 Dec 13がデータ更新の最終日付。
(1990年までのデータはほぼ収納、90年代は重要なもののみ) 線数：629,771
b) 2000年、Opacity Projectの全二巻のデータ追加：　線数=665,094
c) 2002年秋より、version up作業
d) 2003年：増田、大久保両君のサポート用に拡充：2004/06/01現在:　線数=815,820
＊１０年前に較べての環境の変化は、E-journalの発達であり、総合大学なら最新のものが机上で入手可能、かつ、新しい文献はText化可能なものが多い（駄目ならスキャナー）。
その分、迅速に対応できるが、一方、大量データ生産となっている（多分、効率は１０倍程度）。

増田リスト（Ｂ型星）
：済み (He I,C II,N II, O II, Mg II, Al III, Si II, Si II, S II, Fe II)
更新中 (Al II, Cr II, Fe III, Ni II)
大久保リスト（Ｇ型星）
済み (C I, Li I, O I,Mg I, S II, Fe II, Co I, Y II,Ba II, Ce II, Eu II)
(Na I, Al I, Si I, Cr II, Fe I, Ni I; Sr I: Nd II)
(S I, Ca I, Sc I, II, Ti I, II,V I, Cr I, Mn I, Cu I, Zn I)
希土類：最近Ap星は物理の実験場の感あり(2回電離元素）:DREAM採取は完了
済み (La III,Ce I, II, III, IV; Nd III; Eu I; Tb II, III, Dy I, II, III;
Yb II, III, IV; Er III; Eu I, II, III; Sm III; Pr III; Ho III;
Tm II, III, Lu II, III; Th III)

(dマークがKuruczよりdamping constantsをコピーした最新のもの)

Table. Total number of lines for each ion

	I	II	III	IV	V	VI	VII	VIII	IX	X	XI	XII	XIII	XIV	XV	XVI	XVII	XVIII	XIX	XX	XXI	XXII	XXIII	XXIV	XXV	XXVI	XXVII	XXVIII	XXIX
1 H	318	x	III	x	x	x	x	x	x																				
* 2 He	1980d	203	x	IV	x	x	x	x	x																				
* 3 Li	880d	276d	65	x	V	x	x	x	x																				
* 4 Be	1157d	571n	348d	77	x	VI	x	x	x																				
* 5 B	341d	338n	607n	264d	80	x	VII	x	x																				
* 6 C	8060d	1610d	2006d	931d	342d	436w	x	VIII	x																				
* 7 N	7103N	2418d	1694d	865n	879n	135n	433w	x	IX																				
* 8 O	2694d	3435d	2428d	1854d	722n	555n	258d	431w	x																				
* 9 F	1901n	2222n	4464n	1292n	832n	642n	574n	106n	0																				
*10 Ne	3860	5756n	487	1095n	741n	600n	397N	93N	170N	0	x	x	x	x	x	x	x	x	x										
*11 Na	523d	455n	845n	592n	707n	945n	962N	411N	84N	168N	0	x	x	x	x	x	x	x	x										
*12 Mg	4615d	796d	869n	1200n	435n	1017d	646N	806N	333N	122N	189N	0	x	x	x	x	x	x	x										
*13 Al	1162d	3787d	407d	407n	764n	714n	510N	847N	689N	378N	134N	190N	0	x	x	x	x	x	x										
*14 Si	7960d	1083d	1770d	351d	245n	692n	231N	988d	341N	635N	363N	106N	166N	0	x	x	x	x	x										
15 P	2770_	1454	736	664	252	122	33N	42N	70N	74N	54N	61k	41N	23k	81k	x	x	x	x										
*16 S	1248d	3378d	492d	714n	728n	350n	111N	280N	93N	438d	173N	198N	166N	109N	201N	0	x	x	x										
17 Cl	4067	2168	751	159	79	198	50N	20N	40N	48N	42k	57k	39k	29k	31k	17k	82k	x	x										
*18 Ar	3945d	7581d	1034_	195_	130n	149n	97N	65N	249N	208N	83N	339N	137N	87N	18N	87N	127N	0	x										
19 K	765	85	256	118	220	119	55N	89N	63N	22N	37N	44k	0	0	0	0	0	0	0										
*20 Ca	11435d	928d	2230n	888n	164n	168n	137n	190N	687N	104n	102N	67N	75N	95N	97N	97N	98N	77N	72N	0	x	x	x	x	x	x	x	x	x
21 Sc	7716d	3261d	217	1201	460	127	0NK	0K	0K	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	x	x	x	x	x	x	x	x
22 Ti	13188d	4553d	3250d	150	451	525	0NK	0K	0K	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	x	x	x	x	x	x	x
23 V	17004d	10104	8462	1773d	394	477	0NK	0K	0K	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	x	x	x	x	x	x

```
 24 Cr 17210d44207d 6254d 2484   304d  315n  539nK  46nK  58n   80n   98n  106n  117n  185n  108n   46n   74n   65n   89    82n
   92n   61n   67n   21n    x     x     x     x     x
 25 Mn 11744d19948 14796d 1592   908  1351     0NK   0K    0K    0     0     0     0     0     0     0     0     0     0     0
    0     0     0     0     0     x     x     x     x
*26 Fe 24767d55205d32378d 8202d 3809e 1249e 1003e  104e  170e  197N  186N  330N  222N  198N  184N  369N  224N   96N  236N  415N
  403N  335N  345N  125N   95N    0     x     x     x
 27 Co  8862d11572d 4673  8405  8538d 3636     0NK   0K    0K    0     0     0     0     0     0     0     0     0     0     0
    0     0     0     0     0     0     0     x     x
 28 Ni  5097d28333d12148  6552d 5654-  9902  7206-    0NK   0K    0K    0     0     0     0     0     0     0     0     0     0
    0     0     0     0     0     0     0     0     0     x
 29 Cu  1183d 4712d 1818  1622  1186  1110     0N    0     0     0     0     0     0     0     0     0     0     0     0     0
    0     0     0     0     0     0     0     0     0    x
 30 Zn   325d  629  3515   688   322   307     0N    0     0     0     0     0     0     0     0     0     0     0     0     0
    0     0     0     0     0     0     0     0     0    0
 31 Ga   348d  177d  124d  120   146     0N    0     0     0
 32 Ge   639d  342d   90d  116d  285d  129     0N    0     0
 33 As  1540d 1046d    0N    0     0     0     0     0     0
 34 Se    65   192d    0N    0     0     0     0     0     0
 35 Br   199d   36     0N    0     0     0     0     0     0
 36 Kr    41    50     0N    0     0     0     0     0     0
 37 Rb   210     4     0     0     0     0     0     0     0
 38 Sr   723d  138d  614d  615d  640d    0     0     0     0
 39 Y   4364d 1530d  643d    0     0     0     0     0     0
 40 Zr   797d  773d  771d  116d    0     0     0     0     0
 41 Nb  1254  2058n  928n    0     0     0     0     0     0
 42 Mo  3256d 3245d 3147d 1327   412     0     0     0     0
 43 Tc    14    45     0     0     0     0     0     0     0
 44 Ru  3435   909n   37     0     0     0     0     0     0
 45 Rh   488   281     0     0     0     0     0     0     0
 46 Pd   924n 1155d 1458     0     0     0     0     0     0
 47 Ag   461d  315n  123d    0     0     0     0     0     0
 48 Cd   192    58   273   373     0     0     0     0     0
 49 In   146    19    32     0     0     0     0     0     0
 50 Sn  1136d  154d   59d   28d  181d    0     0     0     0
 51 Sb    79    32    12     0     0     0     0     0     0
 52 Te   563    15     0     0     0     0     0     0     0
 53 I   1302  2388     0     0     0     0     0     0     0
 54 Xe    24  1356n   22     0     0     0     0     0     0
 55 Cs   261    20     0     0     0     0     0     0     0
 56 Ba   377d  183d  484d   39d    0     0     0     0     0
 57 La   304d  480d  181d  369n    0     0     0     0     0
 58 Ce  1031d14884d  567d   17d    0     0     0     0     0
 59 Pr   295d 1523d18433d    0     0     0     0     0     0
 60 Nd   428d 1200d   55d    0     0     0     0     0     0
 61 Pm   229d  252d    0     0     0     0     0     0     0
 62 Sm   611d 1149d   51d    0     0     0     0     0     0
 63 Eu   469d  241d  942d    0     0     0     0     0     0
 64 Gd   645d  943d  169d    0     0     0     0     0     0
 65 Tb   574d 1073d  921d   48d    0     0     0     0     0
 66 Dy  2670d 1687d 1293d    0     0     0     0     0     0
 67 Ho   572d  646d 1325n    0     0     0     0     0     0   Ho 0=14d
 68 Er   783d 1087  1335d    0     0     0     0     0     0
 69 Tm   449d 8012d 1479n    0     0     0     0     0     0
 70 Yb   996d 6849d  279d 2843d    0     0     0     0     0
 71 Lu   137d  121d  108d    0     0     0     0     0     0
 72 Hf   546   443     0     0     0     0     0     0     0
 73 Ta  2229d  498d  724d    0     0     0     0     0     0
 74 W   1783d 2995d 3595d  790d    0     0     0     0     0
 75 Re   938    69     0     0     0     0     0     0     0
 76 Os  1000    49     0     0     0     0     0     0     0
 77 Ir   529    23     0     0     0     0     0     0     0
 78 Pt   425   577   839d    0     0     0     0     0     0
 79 Au   188   528d 1133d  922d 1904d    0     0     0     0
 80 Hg   254   746n   39   293   193     0     0     0     0
 81 Tl   104    42     0     0     0     0     0     0     0
 82 Pb   407    80    17     0     0     0     0     0     0
 83 Bi   816d  255d   73d    0     0     0     0     0     0
 84 Po    15     0     0     0     0     0     0     0     0
 85 At     0     0     0     0     0     0     0     0     0
 86 Rn     2     0     0     0     0     0     0     0     0
 87 Fr     0     0     0     0     0     0     0     0     0
 88 Ra     2    23     0     0     0     0     0     0     0
 89 Ac     0     0     0     0     0     0     0     0     0
 90 Th 10152  6618n 1482n    0     0     0     0     0     0
 91 Pa     0     0     0     0     0     0     0     0     0
 92 U   4715  1619d    0     0     0     0     0     0     0
```