

自由ガス模型のコードのマニュアル
(FREE コード)

1965年7月

日本原子力研究所

Japan Atomic Energy Research Institute

自由ガス模型のコードのマニュアル

(FREE コード)

要 旨

FREE は自由ガス模型によって熱中性子散乱法則、散乱核の Legendre モーメントおよび温度に依存する熱中性子源スペクトルを計算するコードである。

本マニュアルは Van Hove の式から出発して散乱法則および散乱核の Legendre モーメントを解析的な式として導出し、温度に依存する熱中性子源スペクトルを数値的に出す手順が説明されている。さらにこのコードを使用する時の入力、出力の形式が述べられている。

1964 年 12 月

シグマ研究専門委員会

桂木 学, 石黒 幸雄, 筒井 恒夫

Manual of Free Gass Model-Code

(FREE-Code)

Summary

The code FREE is prepared to calculate, by the free gas model, the thermal neutron scattering law, Legendre moments of the scattering kernel and the thermal neutron source spectrum. The manual shows the analytical expressions for the scattering law and for the Legendre moments of the scattering kernel, which are derived from the Van Hove's formula for the differential cross section. It also shows how the thermal neutron source spectrum, dependent on the moderator temperature, is calculated numerically. Finally, the formats for the input and output are illustrated.

Dec. 1964

SATORU KATURAGI, YUKIO ISHIGURO, TUNEO TUTUI
Japanese Nuclear Data Committee

目 次

1. 序 論	1
2. 自由ガス模型の散乱断面積および散乱法則	1
3. 散乱核の Legendre Moments の計算	2
4. 熱中性子源スペクトルの計算	6
5. IN-PUT の説明	7
6. フローチャート	8
参考文献	9

Contents

1. Introduction	1
2. Scattering law and scattering cross section of the free gas-model	1
3. Calculation of the Legendre Moments of scattering cross section	2
4. Calculation of the source spectrum for thermal neutrons	6
5. Description of input and output formats	7
6. Flow-chart of calculation	8
References	9

1. 序 論

物質による熱中性子の散乱は考えている系の原子構造および原子の運動に影響される。熱中性子散乱に関して多数の研究がおこなわれ、種々の模型が散乱物質について考えられてきた。自由ガス模型は種々の模型の基準となるものである。化学結合を考慮した模型でも入射してくる中性子のエネルギーが大きく散乱前後のエネルギーの差の大きい時には、この自由ガス模型で使われる温度、質量を変えることによって近似できるので、この模型は熱外エネルギー領域から熱エネルギー領域に入ってくる熱中性子源スペクトルの計算に役立つ。このコードによって計算できる主な量は

- (i) 散乱法則
- (ii) 散乱核のルジャンドル展開係数
- (iii) 全断面積
- (iv) 熱中性子源スペクトル

であり、主な制限は

- (i) エネルギー数 ≤ 100
- (ii) ルジャンドル展開係数 ($L=0\sim 3$)

である。

2. 自由ガス模型の散乱断面積および散乱法則

よく知られているように、nuclear potential として Fermi pseudopotential を用い、Born 近似をおこなえば、熱中性子散乱断面積は Van Hove⁽¹⁾ に従うと次の式で与えられる。

$$\frac{d^2\sigma}{d\Omega dE} = \frac{\sigma_f}{4\pi} \left(\frac{A+1}{A}\right)^2 \sqrt{\frac{E}{E_0}} S_1(\kappa, \omega) \quad (2-1)$$

ここで E , E_0 はそれぞれ散乱前および後のエネルギー、 A は散乱体の質量中性子質量の比、 S_1 は散乱過程を通じて系に与えられるエネルギー ($\hbar\omega$)、運動量 ($\hbar\kappa$) の関数で散乱体の性質に依存する。

自由ガス模型に対しては $S_1(\kappa, \omega)$ 次のようになる⁽²⁾。すなわち、

$$\begin{aligned} S_1(\kappa, \omega) &= \int_{-\infty}^{\infty} dt \exp(it(E-E_0)) \exp\left\{\frac{1}{A}(E+E_0-2\mu\sqrt{EE_0})(it-Tt^2)\right\} \\ &= \left(\frac{A}{2\pi T\kappa^2}\right)^{\frac{1}{2}} \exp\left\{-\frac{A}{2T\kappa^2}\left(\omega + \frac{\kappa^2}{2A}\right)^2\right\} \end{aligned} \quad (2-2)$$

ここで

$$\frac{1}{2}\kappa^2 = E + E_0 - 2\mu\sqrt{EE_0}$$

$$\omega = E - E_0$$

T は散乱体の温度で ev 表わされている。

一方、散乱体の温度および質量に無関係でその力学的構造のみに依存する関数“散乱法則”^{(3), (4)} は次の式

$$\left. \begin{aligned} S(\alpha, \beta) &= T S_1(\kappa, \omega) e^{\frac{\beta}{2}} \\ \alpha &= \frac{1}{AT}(E + E_0 - 2\mu\sqrt{EE_0}) \\ \beta &= \frac{E - E_0}{T} \end{aligned} \right\} \quad (2-3)$$

で定義される。自由ガスの場合には式 (2-2), (2-3) から次のようになる。

$$S(\alpha, \beta) = \frac{1}{2} \left(\frac{1}{\pi\alpha} \right)^{\frac{1}{2}} \exp \left\{ -\frac{1}{4\alpha} (\alpha + \alpha)^2 \right\} \quad (2-4)$$

“散乱法則” に関連して次の量が重要である^{(3), (4)}

$$p(\beta) = \beta^2 \lim_{\alpha \rightarrow 0} \frac{1}{\alpha} S(\alpha, \beta) \quad (2-5)$$

$p(\beta)$ の値を推定するため、このコードでは $S(\alpha, \beta)/\alpha$ も計算できるようになっている。

3. 散乱核の Legendre Moments の計算

散乱核 $\sigma(E_0, E, \mu)$ を Legendre 関数 $P_L(\mu)$ で展開すれば

$$\sigma(E_0, E, \mu) \equiv \frac{d\sigma}{d\Omega dE} = \sum_L \frac{2}{2L+1} \sigma_L(E_0 \rightarrow E) P_L(\mu) \quad (3-1)$$

ただし,

$$\begin{aligned} \sigma_L(E_0, E) &= \int_{-1}^1 P_L(\mu) \sigma(E_0 \rightarrow E, \mu) d\mu \\ &= \frac{4\pi}{\sigma_f} \left(\frac{A+1}{A} \right)^2 \left(\frac{E}{E_0} \right)^{\frac{1}{2}} \int_{-1}^1 S_1(\kappa, \omega) P_L(\mu) d\mu \end{aligned} \quad (3-2)$$

$\overline{S_L(E_0, E)} \equiv \int_{-1}^1 S_1(\kappa, \omega) P_L(\mu) d\mu$ とすると、式 (2-2) から

$$T \overline{S_L} = \int_{-\infty}^{\infty} du \exp iuy \int_{-1}^1 du P_L(\mu) \exp \left\{ \frac{1}{A} (\varepsilon + \varepsilon_0 - 2\mu\sqrt{\varepsilon\varepsilon_0}) (iu - u^2) \right\} \quad (3-3)$$

ここで、 $y = \frac{\omega}{T}$, $\varepsilon = \frac{E}{T}$, $\varepsilon_0 = \frac{E_0}{T}$, $u = Tt$ と置いた。あるいは u から $\rho = u - \frac{i}{2}$ と変数変換して

$$T \overline{S_L} = \exp \left(-\frac{y}{2} \right) \int_{-\infty}^{\infty} d\rho \exp(i\rho y) \times \int_{-1}^1 d\mu P_L(\mu) \exp \left\{ \frac{-1}{A} (\varepsilon + \varepsilon_0 - 2\mu\sqrt{\varepsilon\varepsilon_0}) \left(\rho^2 + \frac{1}{4} \right) \right\} \quad (3-4)$$

一方、 $P_L(\mu)$ は μ に関する多項式であるから、式 (3-4) を計算する時 $P_L(\mu)$ の代りに μ^m について計算すればよい。これを $\overline{I^m}$ とすれば

$$\begin{aligned} e^{\frac{y}{2}} \overline{I^m} &= \int_{-\infty}^{\infty} d\rho \exp i\rho y \int_{-1}^1 d\mu \mu^m \exp \left\{ \frac{-1}{A} (\varepsilon + \varepsilon_0 - 2\mu\sqrt{\varepsilon\varepsilon_0}) \left(\rho^2 + \frac{1}{4} \right) \right\} \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} d\rho \exp i\rho y \left[\frac{A\mu^m}{2\sqrt{\varepsilon\varepsilon_0} \left(\rho^2 + \frac{1}{4} \right)} \left\{ \exp \left[\frac{-1}{A} (\varepsilon + \varepsilon_0 - 2\mu\sqrt{\varepsilon\varepsilon_0}) \left(\rho^2 + \frac{1}{4} \right) \right] \right\} \right]_{-1}^1 \\ &\quad - \int \frac{mA\mu^{m-1}}{2\sqrt{\varepsilon\varepsilon_0} \left(\rho^2 + \frac{1}{4} \right)} \left\{ \exp \left[\frac{-1}{A} (\varepsilon + \varepsilon_0 - 2\mu\sqrt{\varepsilon\varepsilon_0}) \left(\rho^2 + \frac{1}{4} \right) \right] \right\} d\mu \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} d\rho \exp i\rho y \left[\frac{A}{2\sqrt{\varepsilon\varepsilon_0} \left(\rho^2 + \frac{1}{4} \right)} \left\{ \exp \left[-\frac{1}{A} (\sqrt{\varepsilon} + \sqrt{\varepsilon_0})^2 \left(\rho^2 + \frac{1}{4} \right) \right] \right\} \right] \\ &\quad - (-1)^m \exp \left[-\frac{1}{A} (\sqrt{\varepsilon} + \sqrt{\varepsilon_0})^2 \left(\rho^2 + \frac{1}{4} \right) \right] - m \left(\frac{A}{2\sqrt{\varepsilon\varepsilon_0} \left(\rho^2 + \frac{1}{4} \right)} \right)^3 \\ &\quad \times \left\{ \exp \left[-\frac{1}{A} (\sqrt{\varepsilon} - \sqrt{\varepsilon_0})^2 \left(\rho^2 + \frac{1}{4} \right) \right] - (-1)^m \exp \left[-\frac{1}{A} (\sqrt{\varepsilon} + \sqrt{\varepsilon_0})^2 \left(\rho^2 + \frac{1}{4} \right) \right] \right\} \\ &\quad + m(m-1) \left(\frac{A}{2\sqrt{\varepsilon\varepsilon_0} \left(\rho^2 + \frac{1}{4} \right)} \right)^3 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 & \times \left\{ \exp \left[-\frac{1}{A} (\sqrt{\varepsilon} - \sqrt{\varepsilon_0})^2 \left(\rho^2 + \frac{1}{4} \right) \right] \right. \\
 & \left. - (-1)^m \exp \left[-\frac{1}{A} (\sqrt{\varepsilon} + \sqrt{\varepsilon_0})^2 \left(\rho^2 + \frac{1}{4} \right) \right] \right\} \\
 & - m(m-1)(m-2) \left(\frac{A}{2\sqrt{\varepsilon\varepsilon_0} \left(\rho^2 + \frac{1}{4} \right)} \right)^4 \left\{ \exp \left[-\frac{1}{A} (\sqrt{\varepsilon} - \sqrt{\varepsilon_0})^2 \left(\rho^2 + \frac{1}{4} \right) \right] \right. \\
 & \left. - (-1)^{m-1} \exp \left[-\frac{1}{A} (\sqrt{\varepsilon} + \sqrt{\varepsilon_0})^2 \left(\rho^2 + \frac{1}{4} \right) \right] \right\} + \dots \quad (3-5)
 \end{aligned}$$

上式 (3-5) の中の積分は下に示すように、積分 $J^n(\alpha, \beta)$ を計算して求められる。

$$\begin{aligned}
 J^n(\alpha, \beta) &= e^{-\alpha\beta^2 - \beta y} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{(\rho^2 + \beta^2)^n} \exp(-\alpha\rho^2) \cos \rho y d\rho \\
 &= e^{-\alpha\beta^2 - \beta y} (-1)^{n-1} \frac{1}{(n-1)!} \frac{\partial^{n-1}}{\partial(\beta^2)^{n-1}} \int_0^{\infty} \frac{1}{\rho^2 + \beta^2} \exp(-\alpha\rho^2) \cos \rho y d\rho \\
 &= e^{-\alpha\beta^2 - \beta y} (-1)^{n-2} \frac{1}{(n-1)!} \frac{\partial^{n-1}}{\partial(\beta^2)^{n-1}} \\
 & \quad \times \left[\frac{\pi}{4\beta} e^{\alpha\beta^2} \left\{ e^{-\beta y} E_{rfc} \left(\sqrt{\alpha} \beta - \frac{y}{2\sqrt{\alpha}} \right) + e^{\beta y} E_{rfc} \left(\sqrt{\alpha} \beta + \frac{y}{2\sqrt{\alpha}} \right) \right\} \right], \quad n \geq 1 \quad (3-6)
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 \text{ただし, } E_{rfc}(x) &= \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_x^{\infty} e^{-t^2} dt \\
 &= 1 - E_{rf}(x) = 1 - \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^x e^{-t^2} dt
 \end{aligned}$$

このコード内での $E_{rf}(x)$ の計算については付録を参照されたい。

式 (3-6) の初めの数項を示すと次のようになる。

$$J_{\pm}^1(\alpha, \beta) \equiv \frac{\pi}{4\beta} e^{\alpha\beta^2} \left\{ e^{\mp\beta y} E_{rfc} \left(\sqrt{\alpha} \beta \mp \frac{y}{2\sqrt{\alpha}} \right) \right\} \quad (3-7)$$

とおけば, $\frac{\partial}{\partial\beta^2} = \frac{1}{2\beta} \frac{\partial}{\partial\beta}$ から

$$\frac{1}{2\beta} \frac{\partial\beta}{\partial} J_{\pm}^1 = \left(-\frac{1}{\beta^2} + 2\alpha \mp y \right) J_{\pm}^1(\alpha, \beta) - \frac{\sqrt{\pi\alpha}}{2\beta^2} e^{-\frac{y^2}{4\alpha}} \quad (3-8)$$

$$J^1(\alpha, \beta) = e^{-\alpha\beta^2 - \beta y} \{ J_{+}^1(\alpha, \beta) + J_{-}^1(\alpha, \beta) \} \quad (3-9)$$

$$\begin{aligned}
 J^2(\alpha, \beta) &= e^{-\alpha\beta^2 - \alpha y} \left\{ -\frac{1}{2} \frac{1}{\beta} \frac{\partial\beta}{\partial} J^1(\alpha, \beta) \right\} \\
 &= e^{-\alpha\beta^2 - \alpha y} \left\{ \left(\frac{1}{2\beta^2} - \alpha + \frac{y}{2\beta} \right) J_{+}^1(\alpha, \beta) \right. \\
 & \quad \left. + \left(\frac{1}{2\beta^2} - \alpha - \frac{y}{2\beta} \right) J_{-}^1(\alpha, \beta) + \frac{\sqrt{\pi}\sqrt{\alpha}}{2\beta^2} e^{-\frac{y^2}{4\alpha}} \right\} \quad (3-9)
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 J^3(\alpha, \beta) &= e^{-\alpha\beta^2 - \alpha y} \left\{ -\frac{1}{4} \frac{1}{\beta} \frac{\partial\beta}{\partial} J^2(\alpha, \beta) \right\} \\
 &= e^{-\alpha\beta^2 - \alpha y} \left\{ \frac{1}{2} \left(\frac{1}{2\beta^2} - \alpha + \frac{y}{2\beta} \right)^2 J_{+}^1(\alpha, \beta) \right. \\
 & \quad + \frac{1}{2} \left(\frac{1}{2\beta^2} - \alpha - \frac{y}{2\beta} \right)^2 J_{-}^1(\alpha, \beta) + \left(\frac{1}{4\beta^4} + \frac{y}{8\beta^3} \right) J_{+}^1(\alpha, \beta) \\
 & \quad \left. + \left(\frac{1}{4\beta^4} - \frac{y}{8\beta^3} \right) J_{-}^1(\alpha, \beta) + \sqrt{\pi} \left(\frac{1}{8\beta^4} - \frac{\alpha}{4\beta^3} \right) \sqrt{\alpha} e^{-\frac{y^2}{4\alpha}} + \frac{\sqrt{\pi}\sqrt{\alpha}}{4\beta^4} e^{-\frac{y^2}{4\alpha}} \right\} \\
 &= e^{-\alpha\beta^2 - \alpha y} \left[\left\{ \frac{1}{2} \left(\frac{1}{2\beta^2} - \alpha + \frac{y}{2\beta} \right)^2 + \left(\frac{1}{4\beta^4} + \frac{y}{8\beta^3} \right) \right\} J_{+}^1(\alpha, \beta) \right.
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& + \left\{ \frac{1}{2} \left(\frac{1}{2\beta^2} - \alpha - \frac{y}{8\beta^3} \right)^2 + \left(\frac{1}{4\beta^4} - \frac{y}{8\beta^3} \right) \right\} J_{-1}(\alpha, \beta) \\
& + \sqrt{\pi} \left(\frac{3}{8\beta^4} - \frac{\alpha}{4\beta^4} \right) \sqrt{\alpha} e^{-\frac{y^2}{4\alpha}} \quad (3-10)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
J^4(\alpha, \beta) & = e^{-\alpha\beta^2 - \alpha y} \left\{ -\frac{1}{6} \frac{1}{\beta} \frac{\partial}{\partial \beta} J^3(\alpha, \beta) \right\} \\
& = e^{-\alpha\beta^2 - \alpha y} \left[\frac{1}{3} \left(\frac{1}{2\beta^2} - \alpha + \frac{y}{2\beta} \right) \left\{ \frac{1}{2} \left(\frac{1}{2\beta^2} - \alpha + \frac{y}{2\beta} \right)^2 \right. \right. \\
& \quad \left. \left. + \left(\frac{1}{4\beta^4} + \frac{y}{8\beta^3} \right) \right\} J_+'(\alpha, \beta) + \frac{1}{3} \left(\frac{1}{2\beta^2} - \alpha - \frac{y}{2\beta} \right) \right. \\
& \quad \left. \times \left\{ \frac{1}{2} \left(\frac{1}{2\beta^2} - \alpha - \frac{y}{2\beta} \right)^2 + \frac{1}{4\beta^4} - \frac{y}{8\beta^3} \right\} J_{-1}(\alpha, \beta) \right. \\
& \quad \left. + \left(\frac{1}{4\beta^6} - \frac{\alpha}{6\beta^4} + \frac{3y}{16\beta^5} - \frac{\alpha y}{12\beta^3} + \frac{y^2}{24\beta^4} \right) J_{+1}(\alpha, \beta) \right. \\
& \quad \left. + \left(\frac{1}{4\beta^6} - \frac{\alpha}{6\beta^4} - \frac{3y}{16\beta^5} + \frac{\alpha y}{12\beta^3} + \frac{y^2}{24\beta^4} \right) J_{-1}(\alpha, \beta) \right. \\
& \quad \left. + \frac{1}{12\beta^2} \left\{ \frac{1}{2} \left(\frac{1}{2\beta^2} - \alpha + \frac{y}{2\beta} \right)^2 + \frac{1}{4\beta^4} + \frac{y}{8\beta^3} \right\} \right. \\
& \quad \left. \times \sqrt{\pi} \sqrt{\alpha} e^{-\frac{y^2}{4\alpha}} \right. \\
& \quad \left. + \frac{1}{12\beta^2} \left\{ \frac{1}{2} \left(\frac{1}{2\beta^2} - \alpha - \frac{y}{2\beta} \right)^2 + \left(\frac{1}{4\beta^4} - \frac{y}{8\beta^3} \right) \right\} \right. \\
& \quad \left. \times \sqrt{\pi} \sqrt{\alpha} e^{-\frac{y^2}{4\alpha}} + \left(\frac{1}{4\beta^6} - \frac{\alpha}{8\beta^5} \right) \sqrt{\pi} \sqrt{\alpha} e^{-\frac{y^2}{4\alpha}} \right] \quad (3-11)
\end{aligned}$$

ゆえに式 (3-5) の \bar{I}^m の初めの4項はこれらの $J^n(\alpha, \beta)$ を使って次の式で与えられる。

$$I^0 = \frac{A}{2\sqrt{3\varepsilon'}} \{ J^1(\alpha^-, \beta) - J^1(\alpha^+, \beta) \}_{\beta=\frac{1}{2}} \quad (3-12)$$

$$\begin{aligned}
\bar{I}^1 & = \frac{A}{2\sqrt{\varepsilon\varepsilon'}} \{ J^1(\alpha^-, \beta) + J^1(\alpha^+, \beta) \}_{\beta=\frac{1}{2}} \\
& \quad - \frac{A^2}{4\varepsilon\varepsilon'} \{ J^2(\alpha^-, \beta) - J^2(\alpha^+, \beta) \}_{\beta=\frac{1}{2}} \quad (3-13)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\bar{I}^2 & = \frac{A}{2\sqrt{\varepsilon\varepsilon'}} \{ J^1(\alpha^-, \beta) - J^1(\alpha^+, \beta) \}_{\beta=\frac{1}{2}} \\
& \quad - \frac{2A^2}{4\varepsilon\varepsilon'} \{ J^2(\alpha^-, \beta) + J^2(\alpha^+, \beta) \}_{\beta=\frac{1}{2}} \\
& \quad + \frac{2A^3}{8(\varepsilon\varepsilon')^{3/2}} \{ J^3(\alpha^-, \beta) + J^3(\alpha^+, \beta) \}_{\beta=\frac{1}{2}} \quad (3-14)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\bar{I}^3 & = \frac{A}{2\sqrt{\varepsilon\varepsilon'}} \{ J^1(\alpha^-, \beta) + J^1(\alpha^+, \beta) \}_{\beta=\frac{1}{2}} \\
& \quad - \frac{3A^2}{4\varepsilon\varepsilon'} \{ J^2(\alpha^-, \beta) - J^2(\alpha^+, \beta) \}_{\beta=\frac{1}{2}} \\
& \quad + \frac{6A^3}{8(\varepsilon\varepsilon')^{3/2}} \{ J^3(\alpha^-, \beta) + J^3(\alpha^+, \beta) \}_{\beta=\frac{1}{2}} \\
& \quad - \frac{6A^4}{16(\varepsilon\varepsilon')^2} \{ J^4(\alpha^-, \beta) - J^4(\alpha^+, \beta) \}_{\beta=\frac{1}{2}} \quad (3-15)
\end{aligned}$$

ただし, $\alpha^- = \frac{1}{A}(\sqrt{\varepsilon} - \sqrt{\varepsilon'})^2$, $\alpha^+ = \frac{1}{A}(\sqrt{\varepsilon} + \sqrt{\varepsilon'})^2$ とおいた。

$$\sigma_L(E_0, E) = \frac{\sigma_f}{4\pi} \left(\frac{A}{1+A} \right)^2 \left(\frac{\varepsilon}{\varepsilon_0} \right)^{\frac{1}{2}} \overline{S_L(E_0, E)}$$

ここで

$$\left. \begin{aligned} \overline{S_0(E_0, E)} &= 2 \frac{1}{T} \overline{I^0} \\ \overline{S_1(E_0, E)} &= 2 \frac{1}{T} \overline{I^1} \\ \overline{S_2(E_0, E)} &= 2 \frac{1}{2T} (3\overline{I^2} - \overline{I_0}) \\ \overline{S_3(E_0, E)} &= 2 \frac{1}{2T} (3\overline{I^2} - \overline{I_0}) \end{aligned} \right\} \text{for } E_0 \geq E \quad (3-16)$$

ただし、 $E > E_0$ に対しては微細約合より $S_L(E_0, E) = S_L(E, E_0)e^{-\nu}$, $A/\sqrt{\varepsilon_0\varepsilon} = q$ とおけば $\overline{I_m}$ ($m=0\sim 3$) は次のようになる。

$$\overline{I^0} = \frac{q}{2} \{J^1(\alpha^-) - J^1(\alpha^+)\} \quad (3-17)$$

$$\overline{I^1} = \frac{q}{2} \{J^1(\alpha^-) + J^1(\alpha^+)\} - \frac{q^2}{4} \{J^2(\alpha^-) - J^2(\alpha^+)\} \quad (3-18)$$

$$\overline{I^2} = \frac{q}{2} \{J^1(\alpha^-) - J^1(\alpha^+)\} - \frac{q^2}{2} \{J^2(\alpha^-) + J^3(\alpha^+)\} + \frac{q}{4} \{J^3(\alpha^-) - J^3(\alpha^+)\} \quad (3-19)$$

$$\begin{aligned} \overline{I^3} &= \frac{q}{2} \{J^1(\alpha^-) + J^1(\alpha^+)\} - \frac{3}{4} q^2 \{J^2(\alpha^-) - J^2(\alpha^+)\} \\ &\quad + \frac{3}{4} q^3 \{J^3(\alpha^-) + J^3(\alpha^+)\} - \frac{3}{8} q^4 \{J^4(\alpha^-) - J^4(\alpha^+)\} \end{aligned} \quad (3-20)$$

ここで

$$J^1(\alpha) = K^+(\alpha) + K^-(\alpha) \quad (3-21)$$

$$J^2(\alpha) = (2 - \alpha + y)K^+(\alpha) + (2 - \alpha - y)K^-(\alpha) + 2U(\alpha) \quad (3-22)$$

$$\begin{aligned} J^3(\alpha) &= \left\{ \frac{1}{2}(2 - \alpha + y)^2 + (4 + y) \right\} K^+(\alpha) \\ &\quad + \left\{ \frac{1}{2}(2 - \alpha - y)^2 + (4 - y) \right\} K^-(\alpha) \\ &\quad + \left(6 - \frac{\alpha}{2} \right) U(\alpha) \end{aligned} \quad (3-23)$$

$$\begin{aligned} J^4(\alpha) &= \frac{1}{3}(2 - \alpha + y) \left\{ \frac{1}{2}(2 - \alpha + y)^2 + (4 + y) \right\} K^+(\alpha) \\ &\quad + \frac{1}{3}(2 - \alpha + y) \left\{ \frac{1}{2}(2 - \alpha - y)^2 + (4 - y) \right\} K^-(\alpha) \\ &\quad + \left(16 - \frac{8}{3}\alpha + 6y - \frac{2}{3}\alpha y + \frac{2}{3}y^2 \right) K^+(\alpha) \\ &\quad + \left(16 - \frac{8}{3}\alpha - 6y + \frac{2}{3}\alpha y + \frac{2}{3}y^2 \right) K^-(\alpha) \end{aligned} \quad (3-24)$$

ただし

$$K^+(\alpha^\pm) = \frac{\pi}{2} \left\{ 1 - \operatorname{erf} \left(\frac{\sqrt{\alpha^\pm}}{2} + \frac{A}{2} \sqrt{\alpha^\mp} \right) \right\} e^{-\nu}$$

$$K^-(\alpha^\pm) = \frac{\pi}{2} \left\{ 1 - \operatorname{erf} \left(\frac{\sqrt{\alpha^\pm}}{2} - \frac{A}{2} \sqrt{\alpha^\mp} \right) \right\}$$

$$U(\alpha^\pm) = \sqrt{\pi} \sqrt{\alpha^\pm} \exp \left(-\frac{A^2}{4} \alpha^\mp - \frac{\alpha^\pm}{4} - \frac{y}{2} \right)$$

4. 熱中性子源スペクトルの計算の説明

切断エネルギー以上では中性子束が C/E で与えられるとすれば、源 $S(E)$ は次の式で与えられる。

$$S(E) = C \int_{E_R}^{\infty} \sigma_0(E'E) \frac{dE'}{E'} \quad (4-1)$$

ただし、 E_R は切断エネルギー

われわれは $\sigma_0(E', E)$ として次に示す二の場合について源 $S(E)$ を計算できるようにした。

a) 温度の影響がない場合

この場合はよく知られているように $\sigma_0(E', E)$ は次の式

$$\sigma_0(E', E) = \begin{cases} \sigma_f \frac{(A+1)^2}{4A} \frac{1}{E} & \text{for } \alpha E' < E < E' \\ 0 & \text{otherwise} \end{cases} \quad (4-2)$$

で与えられるから、源 $S(E)$ は

$$S(E) = \begin{cases} c \sigma_f \frac{(A+1)^2}{4A} \left(\frac{1}{E_R} - \frac{\alpha}{E} \right) & \text{for } E > \alpha E_R \\ 0 & \text{for } E \leq \alpha E_R \end{cases} \quad (4-3)$$

ここで $\alpha = \left(\frac{A-1}{A+1} \right)^2$

b) 温度の影響を考える場合

前節で求めた $\sigma_0(E', E)$ を用いて計算をおこなうことにした。数値計算をする時、マトリックス σ_{0ij} ($= \sigma_0(E_j, E_i)$) の次元の大きさには限度があるから、源の式 (4-1) は次のように二つの項に分けて計算した。

$$\begin{aligned} S(E) &= C \left\{ \int_{E_R}^{E_{N_1}} \sigma_0(E', E) \frac{dE'}{E'} + \int_{E_{N_1}}^{\infty} \sigma_0(E', E) \frac{dE'}{E'} \right\} \\ &= S_1(E) + S_2(E) \end{aligned} \quad (4-4)$$

ここで E_{N_1} は σ_{0ij} を計算する場合の上限のエネルギー

第1項 $S_1(E)$ は前節で求めた $\sigma_0(E', E)$ を用い、そして第2項 $S_2(E)$ は式 (4-2) で近似して計算した。すなわち、

$$S_1(E) = \begin{cases} c \sigma_f \frac{(A+1)^2}{4A} \left(\frac{1}{E_{N_1}} - \frac{\alpha}{E} \right) & \text{for } E > \alpha E_{N_1} \\ 0 & \text{for } E \leq \alpha E_{N_1} \end{cases} \quad (4-5)$$

$$S_2(E_i) = \frac{c}{2} \sum_{j=N}^{N_1-1} \left(\frac{\sigma_{0ij}}{E_j} + \frac{\sigma_{0ij+1}}{E_{j+1}} \right) (E_{j+1} - E_j) \quad (4-6)$$

式 (4-6) では積分は梯形公式を用いた。

誤差関数の数値計算について

$$\text{関数 } \operatorname{erf}(x) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^x e^{-t^2} dt$$

近似式(rand approximation)

a) $0 \leq x \leq 5$

$$\eta = \frac{1}{1+px} \quad \text{とすれば}$$

$$\text{efr}(x) = 1 - (a_1\eta + a_2\eta^2 + a_3\eta^3 + a_4\eta^4 + a_5\eta^5) \times \frac{2}{\sqrt{\pi}} e^{-x^2}$$

$$p = .3275, 911 \quad a_1 = .2258, 3694, 6$$

$$a_2 = -.2521, 2866, 8$$

$$a_3 = 1.2596, 9513, 0$$

$$a_4 = -1.2878, 2245, 3$$

$$a_5 = .9406, 4607, 0$$

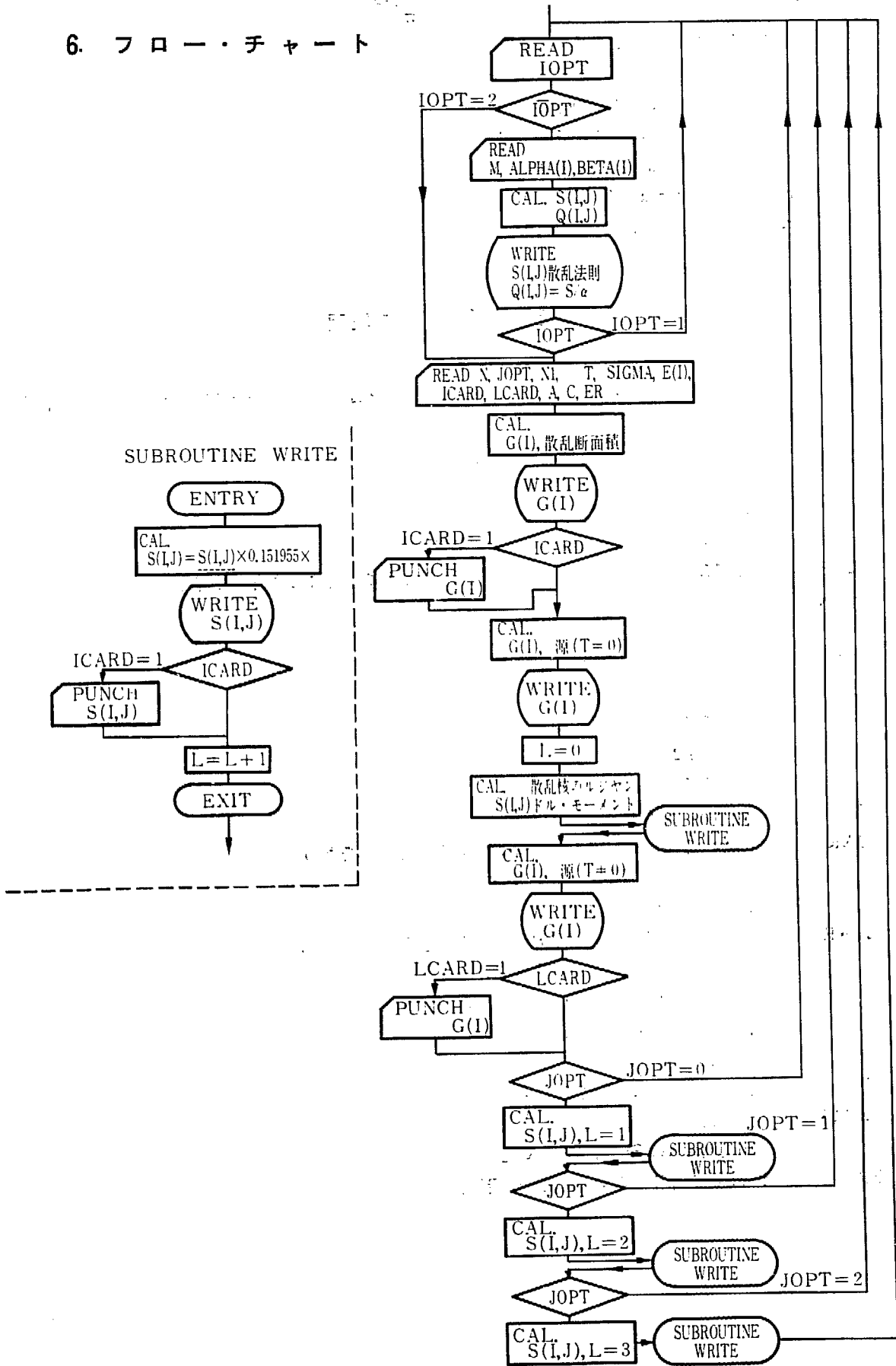
b) $\text{erf}(x) = 1$, for $x > 5$

c) $\text{erf}(x) = -\text{erf}(-x)$, for $x < 0$

5. IN-PUT の説明

IOPT	1) Scattering Law 2) Legendre Moments of Scattering Matrix のいずれを計算するかをきめる。 1. ……1) のみ この時 [5] 以下の Data は不用 2. ……2) のみ [2]~[4] の Data 不用 3. ……1), 2) とともに calculate
M	$\dim(\alpha_i)$ および $\dim(\beta_i)$, ただし $M \leq 100$
ALPHA	α_i , 7E 10.5 の FORMAT で [3] のように必要なだけ続けて書く.
BETA	β_j 同上
N	$\dim(\sigma_{ij})$, ただし, $N < 100$
JOPT	σ_{ij}^L の calculate する範囲 1. …… $L=0$ のみ 2. …… $L \leq 1$ 3. …… $L \leq 2$ 4. …… $L \leq 3$
N_i	$\dim(E_i)$, ただし, $N < N_i \leq 100$
ICARO	Source を CARD で OUT-PUT するかどうかをきめる。 1. CARO で OUT-PUT する。 その他 " " しない
LCARD	σ_{ij}^L を CARD で OUT-PUT するかどうかをきめる。 1. CARD で OUT-PUT する。 その他 " " しない。
A	散乱体原子と中性子の質量の比
C	速中性子の規格定数
T	散乱体の温度で, 単位は (eV)
SIGMA	自由原子の散乱断面積
E_i	E_i 記入は ALPHA, BETA と同じ.
ER	Source を計算する場合の積分の下限

6. フロー・チャート



	1	10	11	20	21	30	31	40	41	50	51	60	61	70	71 ~
[1]	1	IOPT*													
[2]	1	M*													
[3]	$\frac{(M+6)}{7}$	ALPHA(1)	ALPHA(2)	ALPHA(3)	ALPHA(4)	ALPHA(5)	ALPHA(6)	ALPHA(7)							
		ALPHA(8)			ALPHA(M)										
[4]	$\frac{(M+6)}{7}$	BETA(1)	BETA(2)	BETA(3)	BETA(4)	BETA(5)	BETA(6)	BETA(7)							
		BETA(8)			BETA(M)										
[5]	1	N*	JORT*	NI*	ICARD	LCARD*									
[6]	1	A	C	T	SIGMA										
[7]	$\frac{(M+6)}{7}$	E(1)	E(2)	E(3)	E(4)	E(5)	E(6)	E(7)							
		E(8)			E(NI)										
[8]	1	ER													

注 1) *印の DATA は FIX POINT NUMBER 例 IOPT=3 のとき $\frac{1 \quad 10}{00 \ 00 \ 00 \ 00 \ 03}$

注 2) その他は ELOATING POJNT NUMBER 例 ALPHA(1)=0.5 のとき $\frac{1 \quad 10}{+. \ 50000+00}$

謝 辞

このコード作成にあたり、種々有益な示唆をいただいた高橋博氏らシグマ委員会の諸氏に深く感謝します。

参考文献

- (1) L. VON HOVE; *Phys. Rev.*, **95**, 249 (1956)
- (2) A.C. ZEMACH, et al.; *Phys. Rev.*, **101**, 118 (1956)
- (3) P.A. EGELSTAFF, et al.; *Nuclear Sci. and Eng.*, **12**, 260 (1962)
- (4) P.A. EGELSTAFF; *Nuclear Sci. and Eng.*, **12**, 250 (1962)