

Egelstaff-Schofield 模型のコードのマニュアル
(E. S. コード)

1965 年 10 月

日本原子力研究所

Japan Atomic Energy Research Institute

Egelstaff-Schofield 模型のコードのマニュアル

(E. S. コード)

要 旨

E. S. コードは、Egelstaff-Schofield の方法を用いて散乱法則、散乱核とその Legendre モーメント及び熱外領域からの熱中性子源を計算する IBM 7090 用コードである。束縛運動に対する振動数分布、分子振動のエネルギー準位及び拡散運動のパラメータなどに対して実験値を用いることにより、結晶の格子振動、分子の内部振動、液体分子の拡散運動の効果を入れることができる。従って液体、固体いずれの減速材に対しても適用できる。計算は非干渉散乱についてのみおこなわれる。

1964 年 12 月

シグマ研究専門委員会

松岡謙一，新井公雄

Manual of Egelstaff-Schofield Model Code (E. S. Code)

Summary

The ES-code is an IBM-7090 FORTRAN programme based on the method of Egelstaff-Schofield for calculating scattering laws, scattering kernels and their Legendre moments, and thermal neutron sources from the slowingdown region. Making use of the experimental values of frequency distributions for bounded motions, energy levels of molecular vibrations and parameters of diffusive motions, we can take into consideration the effects of lattice vibrations of crystals, internal vibrations of molecules, and diffusive motions of molecules in liquids. This code is applicable to both liquid and solid moderators. The programming is carried out only for incoherent scatterings.

Dec., 1964

KEN-MASUOKA, KIMIO ARAI
Nuclear Data Committee

目 次

1. まえがき	1
2. Egelstaff-Schofield の方法の概要	1
3. $p(\beta)$ とそれを含む積分	3
4. 散乱法則の計算	6
5. 散乱核の Legendre モーメントおよび源の計算	9
6. プログラムの説明	11
7. インプットの説明	15
8. アウトプットの説明	17
参考文献	17
付録 A.1. インプットシート	

Contents

1. Foreword	1
2. Brief description of the method of Egelstaff-Schofield	1
3. $p(\beta)$ and related integrals	3
4. Calculation of scattering laws	6
5. Legendre moments of scattering kernels and thermal neutron sources	9
6. Programme description	11
7. Input data	15
8. The output	17
References	17
Appendix A.1. Input format sheet	

1. ま え が き

通常の熱中性子原子炉においては、核分裂の大部分が熱領域で起るために、熱中性子スペクトルの詳細を知ることが炉の特性を理解する上で重要な課題となるが、熱中性子の持つエネルギーは減速材原子の結合エネルギーと同程度であるので、熱中性子と減速材原子との散乱の取扱いにおいて、化学結合の効果を取入れることが必要になる。

しかし、現実の減速材はいずれも、化学結合を正確に考慮した計算が可能になるほど単純なものではなく、したがって散乱断面積を理論的に計算するためには、その原子構造や原子運動に対して適当な単純化を行ない、計算を可能にするようなモデルを考えるのが普通である。すでにこのような方法に基いて種々の減速材に対する熱中性子散乱断面積の計算がなされてきているが、この場合にはモデルの妥当性に対する吟味がそれほど簡単ではない上に、個々の減速材に対してそれぞれ最も適したモデルを与える必要がある。

他方、このようなモデルに頼ることをやめて、必要な情報をすべて実験的に求めようとしても、特に大き

な運動量変化に対する散乱の実験の困難さのために、現在の所、実験データだけで閉じた情報が得られるまでには至っていない。

ここで取り上げた Egelstaff-Schofield の方法⁽¹⁾ は現在利用できる実験データから出発し、これを理論の助けを借りて外挿する方法を与えるもので、限られた散乱の実験から原子炉計算に必要な広い範囲にわたっての散乱核を計算することを可能にする。束縛運動に対する振動数分布、分子振動のエネルギー拡散運動のパラメータなどに対し実験的に求められた値を用いることにより、結晶の場合のような格子振動、分子の内部振動、液体に特有の分子の拡散運動の効果を取り入れることができ、したがって、軽水、重水、黒鉛、ベリリウムなど種々の減速材に対して適用可能である。ただし、取扱いは非干渉散乱に限られる。

この Egelstaff-Schofield の方法を用いて、散乱法則、散乱核の Legendre モーメントおよび減速領域からの熱中性子源を計算するコードについて報告する。このコードは E. S. コードと名付けられる。

2. Egelstaff-Schofield の方法の概要

よく知られているように、同種の粒子から成る系による熱中性子の微分散乱断面積はつぎの式で与えられる。

$$\begin{aligned} \frac{d^2\sigma}{d\Omega dE} &\equiv \sigma(E_0 \rightarrow E, \mu) \\ &= \frac{\sigma_f}{4\pi kT} \left(1 + \frac{1}{A}\right)^2 \sqrt{\frac{E}{E_0}} \\ &\quad \exp\left(-\frac{\beta}{2}\right) S(\alpha, \beta) \dots\dots\dots (2.1) \end{aligned}$$

$$\alpha = \frac{1}{AkT} (E_0 + E - 2\sqrt{E_0 E}) \mu \dots\dots\dots (2.2)$$

$$\beta = \frac{1}{kT} (E - E_0) \dots\dots\dots (2.3)$$

- ここで μ : 散乱角の余弦
- E_0 : 中性子の散乱前のエネルギー
- E : 中性子の散乱後のエネルギー
- A : 散乱体粒子の質量と中性子の質量との比

- σ_f : 自由原子の散乱断面積
- T : 系の温度
- k : ボルツマン定数

α および β はその定義から明らかなように、それぞれ中性子の運動量変化の二乗およびエネルギー変化に比例した量である。このような変数を導入し、かつ (2.1) 式で $\exp\left(-\frac{\beta}{2}\right)/kT$ なる因子をあらわに残しておくことにより、散乱法則 $S(\alpha, \beta)$ は散乱体の質量や温度によらず、同じ力学的運動をする系に対して普遍的な関数になり、しかも detailed balance の原理から、 β に関する偶関数になる。これが $S(\alpha, \beta)$ なる関数を用いる利点であり、実験データの整理などに大変都合である。

ここで van Hove⁽²⁾ によって導入された自己相関関数が、すべての時間について位置座標に関する Gauss 関数になっているという、いわゆる Gauss 近似⁽³⁾ を用いることにすると、散乱法則 $S(\alpha, \beta)$ は Gauss 関

数の“幅” $w(t)$ によって次のように表わされる。

$$S(\alpha, \beta) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \exp[-\alpha w(t) + i\beta t] dt \quad (2.4)$$

ここで t は h/kT を単位として測った時間である。これからわかるように、微分散乱断面積を求めることは、Gauss 近似の下では、 $w(t)$ なる関数を決定することに帰着する。(2.4) 式に対する非 Gauss 項の補正は α^2 のオーダーであることが知られている。

いま (2.4) 式の Fourier 変換に対する逆変換を行なうと、

$$w(t) = -\frac{1}{\alpha} \ln \left[\int_{-\infty}^{\infty} S(\alpha, \beta) \exp(-i\beta t) d\beta \right] \quad (2.5)$$

が得られる。この式は、 α の一つの固定した値に対する散乱の実験データから $w(t)$ が決定できることを示している。しかし実際問題としてはこのような手続きで $S(\alpha, \beta)$ を求めることは困難である。というのは、Fourier 変換の計算を十分な精度でおこなうことが難しい上に、非 Gauss 項の効果を考慮に入れることもでき難いからである。Egelstaff は散乱の実験データを利用して次のような手続きで $w(t)$ を求め得ることを示した。

いま次の式で $p(\beta)$ なる関数を定義する。

$$p(\beta) = \beta^2 \cdot \lim_{\alpha \rightarrow 0} \frac{S(\alpha, \beta)}{\alpha} \quad (2.6)$$

$p(\beta)$ は比較的小さい α に対する散乱の実験から、それぞれの β に対して得られる一連の $S(\alpha, \beta)/\alpha$ を $\alpha=0$ に外挿することにより求められる関数である。この $p(\beta)$ は、結晶の場合振動数分布 $\rho(\beta)$ と次のような関係にあることはよく知られている。

$$\rho(\beta) = \frac{2}{\beta} \sinh \frac{\beta}{2} \cdot p(\beta) \quad (2.7)$$

もっと一般の場合にも、(2.7) 式を一般化された振動数分布 $\rho(\beta)$ の定義式と考えることができる。散乱法則の性質から、このように定義された $\rho(\beta)$ は 1 に規格化される。

$$\int_0^{\infty} \rho(\beta) d\beta = 2 \int_0^{\infty} \frac{\sinh \beta/2}{\beta} p(\beta) d\beta = 1 \quad (2.8)$$

このとき、 $w(t)$ は $p(\beta)$ によって次のように表わされる。

$$w(t) = 2 \int_0^{\infty} \frac{\cos h \cdot \beta/2 - \cos \beta t}{\beta^2} p(\beta) d\beta \quad (2.9)$$

$S(\alpha, \beta)$ の計算は後で述べるように、 α の小さい値に

対してはフォノン展開の方法を用い、 α の大きい所では鞍部点法を用いるが、この場合でも $p(\beta)$ を含む単純な積分で記述できるので、数値計算の点で好都合である。さらに (2.6) 式のような極限操作で $p(\beta)$ を決定することにより、干渉散乱がある場合でも、干渉散乱が α の小さい所だけで寄与することを考慮して、干渉項の効がない α の範囲での実験データを用いて $\alpha=0$ に外挿することにより非干渉の $S(\alpha, \beta)$ だけを取り出すことができる。特に結晶の場合にはこのような手続きで干渉効果を消去する方法はかなり有効である。

このように Egelstaff の方法では、一般化された振動数分布の中に散乱系の特性がすべて含まれているので、E. S. コードでは $p(\beta)$ または $\rho(\beta)$ を入力として散乱法則、散乱核、散乱断面積などを計算するようになっていいる。

特に液体内の原子運動を取扱う際には、液体に固有な拡散運動を考慮する必要があるが、拡散運動は α, β の小さい所でのみ $S(\alpha, \beta)$ に寄与するので (2.6) 式のような手続きからは定められない。そこで液体に対しては、

$$w(t) = w_b(t) + w_d(t) \quad (2.10)$$

のように $w(t)$ を束縛部分と拡散部分とに分けて取扱う。束縛運動には結晶と同様の格子振動、分子振動、束縛回転などの自由度があり、これらの運動に対しては $w_b(t)$ は t が大きいとき有限に保たれる。中性子散乱の実験から (2.6) 式の手続きで求められるのは、この束縛運動に対する一般化された振動数分布—— $\rho_b(\beta)$ または $p_b(\beta)$ ——である。

一方、拡散運動については、単純な拡散方程式で記述できるとすれば $w_d(t) = 2d|t|$ となる。ここで d は t/M を単位とした自己拡散係数である。しかしこの形は、非常に短い時間の間では粒子はどんな場合でも自由粒子のように振舞うという物理的事実を正しく表わしておらず、また拡散運動が起るまでの緩和時間が考慮されていない。

E. S. コードではこの不備を補う便宜的な方法として、

$$w_d(t) = 2d \left[\left(t^2 + c^2 + \frac{1}{4} \right)^{\frac{1}{2}} - c \right] \quad (2.11)$$

のような形を仮定している。このとき

$$w_d(t) \rightarrow \frac{d}{c} \left(t^2 + \frac{1}{4} \right) : t \rightarrow \frac{i}{2} \quad (2.12)$$

$$w_d(t) \rightarrow 2d(|t| - c) : t \rightarrow \infty \quad (2.13)$$

となり、短い時間間隔では実際の質量の $\frac{c}{d}$ 倍の質量を持った粒子の自由運動を表わし、十分時間が経過した後は単純な拡散運動に帰着することを示している。 hc/kT は拡散を行なうまで粒子がその平衡の位置のまわりに留まっている時間と考えることができる。

(2.1) 式の形の $w_d(t)$ を仮定することにより、拡散運動に対する散乱法則 $S_d(\alpha, \beta)$ を解析的に表現することが可能になる。パラメータ c と d は、中性子散乱の準弾性ピークの測定値を $S_d(\alpha, \beta)$ と Debye-Waller 因子との積に合わせることによって決定することができる。 d はまた液体内の粒子の拡散の実験からも定められる。

このようにして得られる $w(t)$ から $S(\alpha, \beta)$ を計算するには、つぎのような方法を用いる。まず、小さい α に対しては束縛部分 $S_b(\alpha, \beta)$ を結晶の場合にならってフォノン展開の方法で求め、拡散部分 $S_d(\alpha, \beta)$ には解析的な形を用いる。全体の $S(\alpha, \beta)$ は Fourier 変換の convolution の定理によって

$$S(\alpha, \beta) = \int_{-\infty}^{\infty} S_d(\alpha, \beta') S_b(\alpha, \beta - \beta') d\beta' \quad (2.14)$$

3. $p(\beta)$ とそれを含む積分

幅 $w(t)$ の (2.10) 式のような分離に対応して、 $p(\beta)$ も束縛部分と拡散部分に分けられる。

$$p(\beta) = p_b(\beta) + p_d(\beta) \quad (3.1)$$

E. S. コードでは束縛部分については $p_b(\beta)$ または $\rho_b(\beta)$ のいずれかを β の等間隔の分点に対してインプットするようになっている。 $\rho_b(\beta)$ の方をインプットするときは、

$$p_b(\beta) = \frac{\beta}{2 \sinh \cdot \beta/2} \rho_b(\beta) \quad (3.2)$$

によって $p_b(\beta)$ をコードの中で計算させる。

後の Debye-Waller 因子などの計算の際に、 $\beta=0$ における $p_b(\beta)/\beta^2$ の値が必要になる。束縛運動の振動数分布は、一般に振動数の小さい領域で振動数の二乗に比例した形をもつので、 $\beta=0$ の近くでは $p_b(\beta)/\beta^2$ あるいは $\rho_b(\beta)/\beta^2$ は一定値に近づくことになり ($\beta \rightarrow 0$ で $p_b(\beta) \approx \rho_b(\beta)$ である)、コードではこの値をインプットとして用いる。

拡散部分については、前の章で述べたように、二つのパラメータ c, d を含む (2.11) 式の形の $w_d(t)$ を仮定しているが、(2.9) 式からもわかるように、 $w(t)$

で与えられる。

つぎに大きい α に対しては短い衝突時間の近似を用いて、全体の $S(\alpha, \beta)$ を一度に計算するが、この際鞍部点の方法を使って被積分項を調べ、どのような (α, β) の組に対してこの近似を用いるかを決する判定条件を置く。

E. S. コードでは束縛項および拡散項に加えて、任意の δ 関数型の振動数分布 (レベル数 4 以下) が存在する場合も計算できる。これらの振動が等方的であるとして、

$$p_0(\beta) = \sum_{\alpha=1}^{\infty} \frac{A_x \beta_x}{2 \sinh \cdot \beta_x/2} \delta(\beta - \beta_x) \quad (2.15)$$

ここで β_x は kT を単位とした x 番目のレベルのエネルギーで A_x はその強度である。 $p_0(\beta)$ に対する散乱法則 $S_0(\alpha, \beta)$ は、フォノン展開によってよく知られた形⁽⁴⁾ に表現できるので、結局このような光学レベルをも含めた全体の $S(\alpha, \beta)$ は (2.14) 式と同じような convolution によって計算される。

の二階導関数と $p(\beta)$ とは互に Fourier 変換で結びつけられるので、 $p_d(\beta)$ は

$$p_d(\beta) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \ddot{w}_d(t) \exp(i\beta t) dt \\ = \frac{2d}{\pi} \left(c^2 + \frac{1}{4} \right)^{\frac{1}{2}} \beta K_1 \left[\left(c^2 + \frac{1}{4} \right)^{\frac{1}{2}} \beta \right] \quad (3.3)$$

のように解析的に求められる。ここで $K_1(x)$ は第二種の変形 Bessel 関数である。(3.3) 式から、

$$p_d(0) = \frac{2d}{\pi} \quad (3.4)$$

$$\int_0^{\infty} \frac{2}{\beta} \sinh \frac{\beta}{2} \cdot p_d(\beta) d\beta = \frac{d}{c} \quad (3.5)$$

が得られる。一般に c は d に比べてはるかに大きいので、 $p_d(\beta)$ は原点でかなり鋭い特異性を示す関数であり、 d と c がそれぞれピークの高さと幅を表わす尺度となる。

さらに、Einstein 型の光学レベルをも考慮に入れる場合には、(2.15) 式に表われる各レベルの β_x と A_x をインプットしなければならない。

このように三つの項の和として表わされる全体の

$p(\beta)$ は, (2.8) 式のように規格化されていなければならない。このため, C_N をインプットとしてつぎのような規格化の計算を行なっている。

$$\theta = \frac{C_N}{2 \int_0^{\beta_{\max}^*} \frac{1}{\beta} \sinh \frac{\beta}{2} \cdot p^*(\beta) d\beta} \dots (3.6)$$

$$\theta' = \frac{1 - \frac{d}{c}}{C_N + \sum_x A_x^*} \dots (3.7)$$

$$p_b(\beta) = \theta' \theta p_b^*(\beta) \dots (3.8)$$

$$A_x = \theta' A_x^* \dots (3.9)$$

ここで $p_b^*(\beta)$ および A_x^* は始めにインプットした値で, 規格化される前の数値であることを示す。このような規格化によって, 束縛部分に対する x 番目の光学レベルの相対的強度は A_x^*/C_N となり, インプットデータだけで決定できる。光学レベルを入れないときは, C_N には 0 でない任意の値を与えておけばよい。なお, この規格化の計算で拡散部分は影響を受けない。

(3.6) 式に表われる β_{\max}^* は, $P_b^*(\beta)$ を与える際の β の最大値である。通常は, $S(\alpha, \beta)$ の計算をもっと広い β の範囲について行なう必要があるので, $S(\alpha, \beta)$ を計算させる β の最大値 $\bar{\beta}_{\max}$ (実際には $\bar{\beta}_{\max}$ に対応する β の分点数) を β_{\max}^* とは独立に指定することになっている。 α については, β の場合と同様, 分点の幅と数とを指定する方式のほかに, 任意の不等間隔の分割に対応する分点の値をすべて入力することも可能である。ただし $\alpha=0$ では $S(\alpha, \beta) = \delta(\beta)$ となるので, $\alpha=0$ は除かなければならない。

つぎに, 後の計算に必要な, $p(\beta)$ を含む積分をいくつか計算しておく。まず Debye-Waller 因子の計算や, 鞍部点の方法による $S(\alpha, \beta)$ の計算などのためにつぎの積分値を求める。

$$f_n(\tau) = \begin{cases} 2 \int_0^\infty \beta^{n-2} \sinh \beta \tau \cdot p(\beta) d\beta, & n=1, 3, 5 \\ 2 \int_0^\infty \beta^{n-2} \cosh \beta \tau \cdot p(\beta) d\beta, & n=0, 2, 4, 6 \end{cases} \dots (3.10)$$

ここで定義された $f_n(\tau)$ は, (2.9) 式を使って, $w(t)$ と次のような関係にあることが示される。

$$w(i\tau) = - \left[f_0(\tau) - f_0\left(\frac{1}{2}\right) \right] \dots (3.11)$$

$$w^{(n)}(i\tau) = - (-i)^n f_n(\tau), \quad n \geq 1 \dots (3.12)$$

$f_n(\tau)$ の計算は, 束縛部分 $f_{bn}(\tau)$ については, 規格化された $p_b(\beta)$ を用いて $[0, \beta_{\max}^*]$ の積分範囲で数

値積分によって求める。この際パラメータ τ の値としては $\tau = \frac{1}{2}$ のほか後で示すように, すべての (α, β) の組に対して,

$$f_1(\tau) = -\frac{\beta}{\alpha} \dots (3.13)$$

の関係を満たすような τ の値を決定し, この τ の値に対して $f_n(\tau)$ を計算しなければならない。しかし与えられた (α, β) の組に対して, 毎度このような手続きで数値積分を行なうのは大変煩雑なので, ここではつぎのような方法を用いる。すなわち, $f_1(\tau)$ が τ に関して単調増加であることに着目して, τ の値を 0 から 0.1 ずつ増加させて $f_{b1}(\tau)$ を計算させ,

$$f_{b1}(\tau^*) > \frac{\bar{\beta}_{\max}}{\alpha_{\min}} \dots (3.14)$$

となるような τ^* を求める。ここで α_{\min} は α の最初の分点の値である。つぎに $[0, \tau^*]$ の区間を 100 等分して, 各分点での $f_{bn}(\tau)$ の値を計算して τ に対する数表の形にしておく。

拡散部分についても同様の計算が必要であるが, この場合には, (2.11) 式によって $w_d(t)$ の形が与えられているので, (3.11), (3.12) 式から直ちに $f_{dn}(\tau)$ が解析的に求められる。

$$\left. \begin{aligned} f_{d0}(\tau) - f_{d0}\left(\frac{1}{2}\right) &= -2d(\gamma^{-1} - c) \\ f_{d1}(\tau) &= 2d\gamma\tau \\ f_{d2}(\tau) &= 2d\gamma(1 + \gamma^2\tau^2) \\ f_{d3}(\tau) &= 6d\gamma^3\tau(1 + \gamma^2\tau^2) \\ f_{d4}(\tau) &= 6d\gamma^3(1 + \gamma^2\tau^2)(1 + 5\gamma^2\tau^2) \\ f_{d5}(\tau) &= 30d\gamma^5\tau(1 + \gamma^2\tau^2)(3 + 7\gamma^2\tau^2) \\ f_{d6}(\tau) &= 90d\gamma(1 + \gamma^2\tau^2)(1 + 14\gamma^2\tau^2 \\ &\quad + 21\gamma^4\tau^4) \end{aligned} \right\} \dots (3.15)$$

ただし

$$\gamma = \left(-\tau^2 + c^2 + \frac{1}{4} \right)^{-\frac{1}{2}} \dots (3.16)$$

(3.15) 式を使って前と同じ τ の分点で $f_{dn}(\tau)$ の値を求め, $f_{dn}(\tau)$ と加え合せたものを作る。

$$f_n(\tau) = f_{bn}(\tau) + f_{dn}(\tau), \quad 0 \leq n \leq 6 \dots (3.17)$$

このようにしておけば, (α, β) の任意の組に対して (3.13) 式の関係を満たすような τ の値と, その τ に対する $f_n(\tau)$ の値は, すべて内挿によって求めることができる。

(3.15) 式で $n=0$ については $f_{d0}(\tau)$ と $f_{d0}(\frac{1}{2})$ の差だけが求められているに過ぎないが, $f_{d0}(\tau)$ そのものは, (3.10) 式の定義と (3.4) 式とからわかるよう

に積分が発散するので、定義できない関数である。しかし鞍部点の方法で必要なのは、もともと $w(i\tau) = -[f_0(\tau) - f_0(\frac{1}{2})]$ であり、したがって拡散部分に関しては $f_{d0}(\tau) - f_{d0}(\frac{1}{2})$ の値さえ正しく求められていれば十分であるので、(3.17) 式で $f_n(\tau)$ を作る際には、 $f_{d0}(\tau) - f_{d0}(\frac{1}{2})$ をあらためて $f_{d0}(\tau)$ として扱った。これに対して束縛部分では、Debye-Waller 因子の計算の際に、(3.10) 式で定義される $f_{b0}(\frac{1}{2})$ の値が必要になるが、この場合には先にも述べたように、 $\beta=0$ の近くで $p_b(\beta)$ が β^2 に比例した形をもつので、 $f_{b0}(\tau)$ そのものが確定した値をもつ。なお、新しく定義し直した $f_{d0}(\tau)$ については $f_{d0}(\frac{1}{2})=0$ なので、 $f_{b0}(\frac{1}{2})=f_0(\frac{1}{2})$ となる。

最後に、フォノン展開による $S(\alpha, \beta)$ の計算のために、つぎのような Fourier 変換の計算を行なう。

$$T_n(\beta) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \left[\frac{B(t)}{B} \right]^n \exp(i\beta t) dt, \quad n \geq 0 \tag{3.18}$$

$$B(t) = 2 \int_0^{\infty} \cos \beta t \frac{p_b(\beta)}{\beta^2} d\beta = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{p_b(\beta)}{\beta^2} \cdot \exp(i\beta t) d\beta \tag{3.19}$$

$$B = B(0) = 2 \int_0^{\infty} \frac{p_b(\beta)}{\beta^2} d\beta (= f_{b0}(0)) \tag{3.20}$$

(3.19) 式で $p_b(\beta)$ が β の偶関数であることを使っている。 δ 関数の Fourier 変換による表示と、convolution の定理とから、 $T_n(\beta)$ は次のように表わされる。

$$T_0(\beta) = \delta(\beta) \tag{3.21}$$

$$T_1(\beta) = \frac{1}{B} \frac{p_b(\beta)}{\beta^2} \tag{3.22}$$

$$T_n(\beta) = \int_{-\infty}^{\infty} T_{n-1}(\beta') T_1(\beta - \beta') d\beta', \quad n \geq 2 \tag{3.23}$$

すべての $T_n(\beta)$ がつぎのように 1 に規格化されていることは明らかである。

$$\int_{-\infty}^{\infty} T_n(\beta) d\beta = 1 \tag{3.24}$$

また、 $p_b(\beta)$ と同様 $T_n(\beta)$ もすべて β の偶関数である。

$T_1(\beta)$ は $p_b(\beta)$ と同じ変域 $[0, \beta_{max}^*]$ で 0 でない値を持つが、 n が 2 以上の $T_n(\beta)$ については、Convolution による表現 (3.23) 式からわかるように、 n が増加するにつれて、その値が 0 でない変域は $[0, 2\beta_{max}^*]$ $[0, 3\beta_{max}^*]$ のように次第に広がって行く。たゞしコードの中では、 $T_n(\beta) < 10^{-20}$ のときは $T_n(\beta) = 0$

と置いている。

Convolution 積分 (3.23) は数値計算上かなり時間を要するので、通常はあまり多くの n についてこれを行なうことは困難である (E.S. コードでは $2 \leq n \leq NE$ の範囲で (3.23) 式の積分を行ない、NE としては最大 6 までの値を指定できる)。しかし幸いなことに、 n が増加するにつれて、 $T_n(\beta)$ は常に β に関する Gauss 関数に近づくことが中心極限定理によって保証されている。すなわち、 $T_1(\beta)$ を変数 β の分布と考えれば、 $T_1(\beta)$ が偶関数であることから、平均値は 0 であり、したがって、

$$T_n(\beta) \rightarrow \left(\frac{1}{2\pi n E_2} \right)^{\frac{1}{2}} \exp\left(-\frac{\beta^2}{2n E_2} \right); \quad n \rightarrow \infty \tag{3.25}$$

が成立つ。ここに

$$E_2 = \int_{-\infty}^{\infty} \beta^2 T_1(\beta) d\beta = \frac{2}{B} \int_0^{\beta_{max}^*} \beta^2 \cdot p_b(\beta) d\beta \left(= \frac{f_{b2}(0)}{B} \right) \tag{3.26}$$

は分布 $T_1(\beta)$ の標準偏差の二乗である。つぎに Gauss 関数からのずれを考慮した近似式を求めるを試みる。

(3.19) 式から、一般に連続な振動数分布に対してつぎの関係が成立つ。

$$|B(t)| < B; \quad t \neq 0 \tag{3.27}$$

$$B(t) \rightarrow 0; \quad t \rightarrow \infty \tag{3.28}$$

したがって、 n が大きいときには、(3.18) 式の積分において、 $t=0$ のまわりの小さな領域だけが積分に主な寄与をするので、 $\frac{B(t)}{B}$ を t のべきで展開して

$$\frac{B(t)}{B} = \sum_{\nu=0}^{\infty} \frac{E_{\nu}}{\nu!} (it)^{\nu} \tag{3.29}$$

係数 E_{ν} は (3.19) 式から容易に定まり、

$$E_{\nu} = \begin{cases} \frac{2}{B} \int_0^{\beta_{max}^*} \beta^{\nu-2} p_b(\beta) d\beta = \frac{f_{b\nu}(0)}{B} & n: \text{偶数} \\ 0 & n: \text{奇数} \end{cases} \tag{3.30}$$

となる。特に

$$E_0 = 1 \tag{3.31}$$

は (3.20) 式から明らかである。 $\ln\left[\frac{B(t)}{B} \right]$ を同様に展開して、

$$\ln\left[\frac{B(t)}{B} \right] = \sum_{\nu=0}^{\infty} \frac{F_{\nu}}{\nu!} (it)^{\nu} \tag{3.32}$$

係数 F_{ν} は E_{ν} を使ってつぎのように表わされる。

$$\left. \begin{aligned} F_0 &= 0 \\ F_2 &= E_2 \\ F_4 &= E_4 - 3E_2^2 \\ F_6 &= E_6 - 15E_2E_4 + 30E_2^3 \end{aligned} \right\} \dots\dots\dots (3.33)$$

奇数項の係数はすべて0である。(3.18)式を変形して、

$$\begin{aligned} T_n(\beta) &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left[n \ln\left(\frac{B(t)}{B}\right)\right] \\ &\quad \cdot \exp(i\beta t) dt \\ &= \frac{1}{2\pi\sqrt{nF_2}} \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left[-\frac{t^2}{2} + i\frac{\beta t}{\sqrt{nF_2}}\right] \\ &\quad \cdot \exp\left[\sum_{\nu=2}^{\infty} \frac{nF_{2\nu}}{(2\nu)!} \left(\frac{it}{\sqrt{nF_2}}\right)^{2\nu}\right] dt \\ &= \frac{1}{2\pi\sqrt{nF_2}} \sum_{\nu=0}^{\infty} G_{\frac{1}{2}\nu}^{(n)} \int_{-\infty}^{\infty} (it)^{2\nu} \\ &\quad \cdot \exp\left[-\frac{t^2}{2} + i\frac{\beta t}{\sqrt{nF_2}}\right] dt \end{aligned} \dots\dots\dots (3.34)$$

こゝでつぎのような展開をおこなった。

$$\exp\left[\sum_{\nu=2}^{\infty} \frac{nF_{2\nu}}{(2\nu)!} \left(\frac{it}{\sqrt{nF_2}}\right)^{2\nu}\right] = \sum_{\nu=0}^{\infty} G_{\frac{1}{2}\nu}^{(n)} (it)^{2\nu} \dots\dots\dots (3.35)$$

$$\left. \begin{aligned} G_0^{(n)} &= 1 \\ G_2^{(n)} &= 0 \\ G_4^{(n)} &= \frac{F_4}{4!nF_2^2} \\ G_6^{(n)} &= \frac{F_6}{6!n^2F_2^3} \end{aligned} \right\} \dots\dots\dots (3.36)$$

Hermite 多項式に対する積分表示：

$$\begin{aligned} H_n(x) &= (-1)^n \exp\left(\frac{x^2}{2}\right) \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} (it)^n \\ &\quad \cdot \exp\left(-\frac{t^2}{2} + itx\right) dt \dots\dots\dots (3.37) \end{aligned}$$

を用いて、

$$\begin{aligned} T_n(\beta) &= \left(\frac{1}{2\pi nF_2}\right)^{\frac{1}{2}} \exp\left(-\frac{\beta^2}{2nF_2}\right) \\ &\quad \sum_{\nu=0}^{\infty} G_{\frac{1}{2}\nu}^{(n)} H_{2\nu}\left(\frac{\beta}{\sqrt{nF_2}}\right) \\ &= \left(\frac{1}{2\pi nE_2}\right)^{\frac{1}{2}} \exp\left(-\frac{\beta^2}{2nE_2}\right) \left[1 + \frac{1}{24n}\right. \\ &\quad \cdot \left(\frac{E_4}{E_2^2} - 3\right) H_4\left(\frac{\beta}{\sqrt{nE_2}}\right) + O\left(\frac{1}{n^2}\right) \left. \right] \end{aligned} \dots\dots\dots (3.38)$$

たゞし

$$H_4(x) = x^4 - 6x^2 + 3 \dots\dots\dots (3.39)$$

E. S. コードでは $(NE+1) \leq NEE$ の範囲の $T_n(\beta)$ に対しては、 $H_4\left(\frac{\beta}{\sqrt{nE_2}}\right)$ の項までを含む (3.38) 式を使って計算をおこなっている。NEE としては最大 15 までの値を指定できる。

4. 散乱法則の計算

2章で述べたように、散乱法則の計算は、 α の小さい領域と大きい領域とに分けて行なわれる。

まず α の小さい領域では、束縛運動に対する散乱法則 $S_b(\alpha, \beta)$ は結晶の場合のフォノン展開の方法にならって計算することができる。

(2.9) 式を (2.4) 式に代入して (3.10), (3.19) 式の定義を使えば、

$$\begin{aligned} S_b(\alpha, \beta) &= \frac{1}{2\pi} \exp\left[-\alpha f_{b0}\left(\frac{1}{2}\right)\right] \\ &\quad \int_{-\infty}^{\infty} \exp[\alpha B(t)] \exp(i\beta t) dt \\ &= \exp\left[-\alpha f_{b0}\left(\frac{1}{2}\right)\right] \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(B\alpha)^n}{n!} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} &\quad \cdot \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \left[\frac{B(t)}{B}\right]^n \exp(i\beta t) dt \\ &= \exp\left[-\alpha f_{b0}\left(\frac{1}{2}\right)\right] \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(B\alpha)^n}{n!} \\ &\quad \cdot T_n(\beta) \dots\dots\dots (4.1) \end{aligned}$$

こゝに $T_n(\beta)$ はすでに (3.18) 式で定義され、(3.21) ~ (3.23), および (3.38) 式で具体的に計算される関数であり、 $\exp[-\alpha f_{b0}(\frac{1}{2})]$ は束縛運動に対する Debye-Waller 因子を表わす。(3.24) 式で示されているように、すべての $T_n(\beta)$ は 1 に規格化されているので、 $B\alpha$ の値が収斂の度合を決める尺度になる。

(4.1) 式の第一項は弾性散乱を表わし、その強度は

Debye-Waller 因子を通じて振動数分布に依存する。散乱法則を弾性散乱と非弾性散乱部分に分けて書けば、

$$S_b(\alpha, \beta) = \exp\left[-\alpha f_0\left(\frac{1}{2}\right)\right] \delta(\beta) + S_b^{\text{in}}(\alpha, \beta) \quad (4.2)$$

$$S_b^{\text{in}}(\alpha, \beta) = \exp\left[-\alpha f_0\left(\frac{1}{2}\right)\right] \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(\alpha)^n}{n!} T_n(\beta) \quad (4.3)$$

と表わせる (前の章で注意したように、われわれの記号では $f_{b0}(\frac{1}{2}) = f_0(\frac{1}{2})$ である)。

拡散運動の散乱法則の計算に対しては、フォノン展開の方法は適用できないが、(2.11) 式の形の $w_a(t)$ に対しては $S_a(\alpha, \beta)$ が解析的に求まって

$$S_a(\alpha, \beta) = \frac{1}{\pi} \exp(2cd\alpha) \frac{2d\alpha\left(c^2 + \frac{1}{4}\right)^{\frac{1}{2}}}{[\beta^2 + (2d\alpha)^2]^{\frac{1}{2}}} \cdot K_1\left[\left(c^2 + \frac{1}{4}\right)^{\frac{1}{2}} \{\beta^2 + (2d\alpha)^2\}^{\frac{1}{2}}\right] \quad (4.4)$$

となる。結局、全体の $S(\alpha, \beta)$ は (2.14) 式を用いてつぎのように表わされる。

$$S(\alpha, \beta) = \exp\left[-\alpha f_0\left(\frac{1}{2}\right)\right] S_a(\alpha, \beta) + \int_{-\infty}^{\infty} S_a(\alpha, \beta') S_b^{\text{in}}(\alpha, \beta - \beta') d\beta' \quad (4.5)$$

(4.5) 式右辺第二項の convolution 積分は数値的に行なわれる。コードの中では、散乱法則の値が 10^{-15} より小さくなれば 0 と置いている。

(4.2) 式と (4.5) 式とを比べてみればわかるように、束縛運動に対しては δ 関数で表わされる鋭い弾性ピークは、拡散運動を伴う液体の場合には、その幅が広がり、いわゆる準弾性ピークを示すようになる。

(4.4) 式から、 α が十分小さくて $2cd\alpha \ll 1$ のとき、 $\beta=0$ の近くで $S_a(\alpha, \beta)$ はつぎのように近似される。

$$S_a(\alpha, \beta) \simeq \frac{1}{\pi} \exp(2cd\alpha) \frac{2d\alpha}{\beta^2 + (2d\alpha)^2} \simeq \frac{1}{\pi} \frac{2d\alpha}{\beta^2 + (2d\alpha)^2} \quad (4.6)$$

これは単純な拡散運動に対する $w_a(t)$ の形 (2.13) から直接に得られるものであり、このとき準弾性ピークの半値幅は $2d\alpha$ となる。逆に $2cd\alpha \gg 1$ となるような十分大きい α に対しては、 $S_a(\alpha, \beta)$ は自由ガスの場合と類似の Gauss 関数になり、その $1/e$ 幅は

$$\Delta\beta = \left[\frac{2d\alpha}{\left(c^2 + \frac{1}{4}\right)^{\frac{1}{2}}} \right]^{\frac{1}{2}} \quad (4.7)$$

で与えられる。これは単純な拡散運動に固有の Lorentz ピークの幅 $2d\alpha$ に比べて小さくなっているが、このことは実験的にも裏付けられている。

フォノン展開の収斂が悪くなるような領域では、鞍部点の方法が有力になる。よく知られているように、この方法は (2.4) 式の積分において、積分路を t の実軸から複素平面における鞍部点を通るように変え、鞍部点におけるとうげ路に沿って積分を計算するものであるが、いまの場合、鞍部点は虚軸上にあり、とうげ路は実軸の平行になっているので特に簡単である。すなわち、 $S(\alpha, \beta)$ はつぎのように計算される。

$$S(\alpha, \beta) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \exp[-\alpha w(t+i\tau)] + i\beta(t+i\tau) dt \quad (4.8)$$

ここで τ は被積分関数の t に関する 1 階の微係数が $t=0$ で 0 になるように選ぶ。したがって、 τ は与えられた α と β に対してつぎの式から求められる。

$$w(i\tau) = i \frac{\beta}{\alpha} \quad (4.9)$$

これは (3.12) 式の定義を使えば、(3.13) 式に一致し、したがってそこで述べた手続きによって τ が決定される。

$w(t+i\tau)$ を t のべきで Taylor 展開することにより、 $S(\alpha, \beta)$ はつぎのように表わされる。

$$S(\alpha, \beta) = \frac{1}{2\pi} \exp\left[-\alpha\left\{f_0\left(\frac{1}{2}\right) - f_0(\tau) + \tau f_1(\tau)\right\}\right] \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left[-\frac{1}{2}\alpha f_2(\tau)t^2\right] \cdot \exp[\alpha R(t)] dt \quad (4.10)$$

ここでふたび (3.11)、(3.12) 式の定義を使った。また

$$R(t) = \sum_{n=3}^{\infty} \frac{(-i)^n}{n!} f_n(\tau) t^n \quad (4.11)$$

(4.10) 式の $\exp[\alpha R(t)]$ を $\alpha R(t)$ のべきで展開し、(4.11) 式を用いれば、(4.10) 式の積分は項別に行なうことができ、結果は $\alpha f_2(\tau)$ の漸近展開の形に表わすことができる。 $\frac{1}{\alpha f_2(\tau)}$ の二乗まで取る近似を行なえば、

$$S(\alpha, \beta) = \left(\frac{1}{2\pi\alpha f_2(\tau)}\right)^{\frac{1}{2}} \exp\left[-\alpha\left\{f_0\left(\frac{1}{2}\right) - f_0(\tau) + \tau f_1(\tau)\right\}\right] \times \left[1 + \left(\frac{1}{\alpha f_2(\tau)}\right) C_1(\tau)\right]$$

$$+\left(\frac{1}{\alpha f_2(\tau)}\right)^2 C_2(\tau) \dots\dots\dots(4.12)$$

が得られる。ここで

$$C_1(\tau) = \frac{1}{8} g_4 - \frac{5}{24} g_3^2 \dots\dots\dots(4.13)$$

$$C_2(\tau) = \frac{385}{1152} g_3^4 - \frac{35}{64} g_3^2 g_4 + \frac{7}{48} \left(\frac{5}{8} g_4^2 + g_3 g_5\right) - \frac{1}{48} g_6 \dots\dots\dots(4.14)$$

$$g_n(\tau) = \frac{f_n(\tau)}{f_2(\tau)}, \quad n=3\sim 6 \dots\dots\dots(4.12)$$

(4.12) 式で β は (4.9) 式あるいは (3.12) 式で求められる τ を通じてはいつてくる。

$S(\alpha, \beta)$ の計算の際に、フォノン展開の方法を用いるか、鞍部点の方法を用いるかの判定については Mc Latchie によって Hawell で作られた LEAP コードにある判定条件をそのまま用いることにする。すなわち、つぎの三つの条件：

$$\frac{\beta_{\max}^2}{\alpha f_2(\tau)} \leq 0.25 \dots\dots\dots(4.16)$$

$$\frac{f_4(\tau)}{8\alpha f_2^2(\tau)} \leq 0.04 \dots\dots\dots(4.17)$$

$$\frac{f_3^2(\tau)}{4!\alpha f_2^3(\tau)} \leq 0.04 \dots\dots\dots(4.18)$$

をすべて満足する場合には鞍部点の方法を用い、一つでも満足しない場合にはフォノン展開の方法を用いる。ここで β_{\max} は Mc Latchie によれば β_{\max}^* を取ることになっているが、特に液体の場合などでは β_{\max}^* はかなりあいまいなので、E. S. コードでは β_{\max} を β_{\max}^* とは別にインプットできるようにしてある。

この三つの条件を用いて実際計算を行なってみると、多くの場合に α のかなり大きな値に対してもフォノン展開の方法に進むことがまれでない。(4.1) 式からわかるように、 $\beta\alpha$ の値が展開の収斂性を規定するので、 α が大きければそれだけ多くのフォノン数を取る必要があるが、コードの中で取り得るフォノン数にも制限があるので、さらにもう一つの条件：

$$B\alpha > HD \dots\dots\dots(4.19)$$

を追加し、この条件を満たすときは上の三つの条件に優先して鞍部点の方法に進むようにした。HD はインプットである。

最後に、(2.15) 式で与えられるような光学レベルに対する散乱法則 $S_0(\alpha, \beta)$ はつぎのように表わされることが知られている⁽⁴⁾。

$$S_0(\alpha, \beta) = \exp[-\alpha\lambda] \cdot \left(\sum_x \prod_{n_x=-\infty}^{\infty}\right) \prod_x$$

$$\cdot I_{n_x} \left(\frac{\alpha A_x}{\beta_x \sinh \frac{\beta_x}{2}} \right) \beta \left(\beta - \sum_x n_x \beta_x \right) \dots\dots\dots(4.20)$$

$$\lambda = \sum_x \frac{A_x}{\beta_x} \coth \frac{\beta_x}{2} \dots\dots\dots(4.21)$$

ここで $I_{n_x}(x)$ は第一種の変形 Bessel 関数である。

したがって、このような光学レベルの存在を考慮に入れる場合には、すでにフォノン展開、あるいは鞍部点のいずれかの方法で求めた散乱法則を改めて $S_r(\alpha, \beta)$ と書くとき、全体の $S(\alpha, \beta)$ は $S_r(\alpha, \beta)$ と $S_0(\alpha, \beta)$ の convolution によって求められ、つぎのように表わされる。

$$S(\alpha, \beta) = \exp[-\alpha\lambda] \cdot \left(\sum_x \prod_{n_x=-\infty}^{\infty}\right) S_r(\alpha, \beta) \cdot \left(\sum_x \prod_{n_x=-\infty}^{\infty}\right) I_{n_x} \left(\frac{\alpha A_x}{\beta_x \sinh \frac{\beta_x}{2}} \right) \dots\dots\dots(4.22)$$

E. S. コードでは、それぞれのレベルに対して n_x を最大 50 まで取ることができる。

このようにして求められた散乱法則から微分および全散乱断面積を求めるには (2.1)~(2.3) 式を用いるが、この際 detailed balance の原理と Placzek のモーメント定理⁽⁵⁾ が成立していなければならない。Detailed balance の原理は、中性子の吸収やもれのない系で、中性子スペクトルが Maxwell 分布になることを保証するもので、

$$M(E_0) \sigma(E_0 \rightarrow E, \mu) = M(E) \sigma(E \rightarrow E_0, \mu) \dots\dots\dots(4.23)$$

と表わされる。ここで $M(E)$ は

$$M(E) = \frac{E}{(kT)^2} \exp\left(-\frac{E}{kT}\right) \dots\dots\dots(4.24)$$

である。 $\sigma(E_0 \rightarrow E, \mu)$ は (2.1) 式で与えられているので、(4.23) 式は直ちに $S(\alpha, \beta)$ に対するつぎの条件式に書き改められる。

$$S(\alpha, \beta) = S(\alpha, -\beta) \dots\dots\dots(4.25)$$

(4.4) 式の $S_d(\alpha, \beta)$ がこの関係を満していることは一見して明らかである。また 3 章で述べたように $T_n(\beta)$ がすべて β の偶関数であることから、(4.3) 式の展開を有限項で打切る近似を行なっても、 $S_0(\alpha, \beta)$ はやはり (4.25) 式を満足する。つぎに鞍部点の方法による $S(\alpha, \beta)$ の近似式 (4.12) については、(3.10) 式の定義により、 n が偶数か奇数かによって $f_n(\tau)$ がそれぞれ τ の偶関数か奇関数になることを考慮すれば、(4.12) 式の $S(\alpha, \beta)$ は τ の偶関数になるが、

を決める式 (3.13) で $-\beta$ に対しては $-\tau$ が対応するので、この場合もやはり、detailed balance の原理は保たれている。最後に、(4.20) 式では、 $I_n(x) = I_{-n}(x)$ であるから、それぞれの x について n_x で和を取る際に、常に正負の n_x を組にするように注意しておけば、たとえ有限項で打切る近似を行なっても、(4.25) 式は満たされる。

モーメント定理は、高エネルギーにおいて全散乱断面面積が自由原子の断面面積になることを保証するもので、中性子熱化の問題においては detailed balance の原理と同様に重要な役割を果す。 $w(t)$ を用いてこの定理を書き表わせば、

$$w\left(\frac{i}{2}\right) = 0 \dots\dots\dots (4.26)$$

$$\dot{w}\left(\frac{i}{2}\right) = i \dots\dots\dots (4.27)$$

となる ((2.8), (2.9) 式参照)。いま (2.4) 式を逆変換して、(4.25) 式を使うと、

$$2 \int_0^\infty S(\alpha, \beta) \cos \beta t d\beta = \exp[-\alpha w(t)] \dots\dots (4.28)$$

および、これを t について一度微分した式

$$2 \int_0^\infty S(\alpha, \beta) \sin \beta t d\beta = \alpha \dot{w}(t) \exp[-\alpha w(t)] \dots\dots\dots (4.29)$$

が得られる。したがって、 $S(\alpha, \beta)$ を用いて表わしたモーメント定理は、

$$\theta_0 \equiv 2 \int_0^\infty S(\alpha, \beta) \cosh \frac{\beta}{2} d\beta = 1 \dots\dots\dots (4.30)$$

$$\theta_1 \equiv \frac{2}{\alpha} \int_0^\infty S(\alpha, \beta) \beta \sinh \frac{\beta}{2} d\beta = 1 \dots\dots\dots (4.31)$$

となる。モーメント定理については、フォノン展開や鞍部点の方法で適当な有限項で打切る近似をおこなうことに対応して近似的にしか成立しないので、E. S. コードでは θ_0 および θ_1 をそれぞれの α に対して計算させ、モーメント定理がどの程度成立しているかをチェックできるようにしてある。

5. 散乱核の Legendre モーメントおよび源の計算

この章では、熱中性子スペクトルの計算に直接用いられる、散乱核の Legendre モーメントや源などの計算について述べる。

散乱核 $\sigma(E_0 \rightarrow E, \mu)$ を Legendre 展開した形をつぎのように表わす。

$$\sigma(E_0 \rightarrow E, \mu) = \sum_{l=0}^{\infty} \frac{2l+1}{4\pi} \sigma_l(E_0 \rightarrow E) P_l(\mu) \dots\dots\dots (5.1)$$

このとき、Legendre 多項式 $P_l(\mu)$ の直交性から、Legendre モーメント $\sigma_l(E_0 \rightarrow E)$ は、

$$\begin{aligned} \sigma_l(E_0 \rightarrow E) &= 2\pi \int_{-1}^1 \sigma(E_0 \rightarrow E, \mu) P_l(\mu) d\mu \\ &= \frac{\sigma_f}{2kT} \left(1 + \frac{1}{A}\right)^2 \sqrt{\frac{E}{E_0}} \exp \cdot \left(-\frac{\beta}{2}\right) \int_{-1}^1 S(\alpha, \beta) P_l(\mu) d\mu \dots\dots\dots (5.2) \end{aligned}$$

となる。ここで (2.1) 式の関係を使った。 E_0 と E とが与えられたとき、 β は定数となり、 α は μ の関数として (2.2) 式で表わされるので、すでに計算した $S(\alpha, \beta)$ を使って (5.2) 式の積分を数値的に行なうことができる。この数値積分には 10 点以下の Gauss 座標を用いている。実際には $E \geq E_0$ すなわち $\beta \geq 0$

に対してしか $S(\alpha, \beta)$ を求めてないが、 $E < E_0$ に対しては先に述べた detailed balance の原理を使って計算することができる。

散乱核 $\sigma(E_0 \rightarrow E, \mu)$ を散乱後のエネルギー E について積分したものは、散乱の角度分布を与える。

$$\sigma(E_0, \mu) = \int_0^{E_c} \sigma(E_0 \rightarrow E, \mu) dE \dots\dots\dots (5.3)$$

$\sigma(E_0, \mu)$ を (5.1) 式と同様の形に Legendre 展開したとき、モーメント $\sigma_l(E_0)$ は

$$\begin{aligned} \sigma_l(E_0) &= 2\pi \int_{-1}^1 \sigma(E_0, \mu) P_l(\mu) d\mu \\ &= \int_0^{E_c} \sigma_l(E_0 \rightarrow E) dE \dots\dots\dots (5.4) \end{aligned}$$

で与えられる。(5.3), (5.4) 式で E_c は熱カットオフ・エネルギーを表わし、 E_c より高いエネルギー領域では減速過程のみが起るとみなせるように適当に E_c の値を選んでインプットする。

l の値としては P-3 近似までの計算に用いられるように、0 から 3 までについて計算を行なう。

(5.4) 式からわかるように、 $\sigma_0(E_0)$ は全散乱断面面積を表わす。また $\sigma_1(E_0)$ が求められれば、散乱角の余弦の平均値 $\bar{\mu}$ 、輸送断面積 σ_{tr} はそれぞれ

$$\bar{\mu}(E_0) = \frac{\sigma_1(E_0)}{\sigma_0(E_0)} \dots\dots\dots (5.5)$$

$$\sigma_{tr}(E_0) = \sigma_0(E_0) - \sigma_1(E_0) \dots\dots\dots (5.6)$$

で与えられる。

拡散運動が存在しないとき、フォノン展開の方法で計算される $S(\alpha, \beta)$ には、(4.2) 式で示されるように δ 関数で表わされる弾性散乱部分で含まれるが、計算機では δ 関数は処理できないので (5.2) 式で求められる $\sigma_l(E_0 \rightarrow E)$ には、 $E=E_0$ のとき弾性散乱部分が除かれていることに注意すべきである。また、(5.4) 式の E についての積分の際には $E=E_0$ からの寄与が必ず含まれるので、 δ 関数の部分は別に解析的に計算を行なって付加える。この計算はつぎのようにする。

(4.2) 式の δ 関数の部分を (5.2) 式に代入して E について積分すれば

$$\begin{aligned} \sigma_l^{el}(E_0) &= \frac{\sigma_f}{2} \left(1 + \frac{1}{A}\right)^2 \int_{\mu_1}^{\mu_2} d\mu P_l(\mu) \\ &\cdot \exp\left[-f_0\left(\frac{1}{2}\right) \frac{2E_0}{AkT} (1-\mu)\right] \\ &= \frac{\sigma_f}{2} \left(1 + \frac{1}{A}\right)^2 e^{-K} \int_{\mu_1}^{\mu_2} d\mu P_l(\mu) e^{K\mu} \\ &\dots\dots\dots (5.7) \end{aligned}$$

ただし

$$K = f_0\left(\frac{1}{2}\right) \frac{2E_0}{AkT} \dots\dots\dots (5.8)$$

μ の積分範囲はもともと $[-1, 1]$ であるが、これを $E=E_0$ の場合の α の範囲に直すと、

$$0 \leq \alpha \leq \frac{4E_0}{AkT} \dots\dots\dots (5.9)$$

となる。しかし、鞍部点の方法による計算には弾性散乱部分は既に含まれているので、いまの場合、 α の範囲はフォノン展開を行なう α の範囲内に限られる。 $\beta=0$ 、すなわち $\tau=0$ の場合のフォノン展開を行なう α の最大値 $\bar{\alpha}$ は、(4.16)~(4.19) 式から

$$\bar{\alpha} = \text{Min}\left(\frac{HD}{B}, \text{Max}\left(\frac{4\beta_{\text{max}}^2}{f_2(0)}, \frac{f_4(0)}{0.32 f_2^2(0)}\right)\right) \dots\dots\dots (5.10)$$

となるので、(5.7) 式を計算する α の範囲は、(5.9) 式の代わりに、つぎようになる。

$$0 \leq \alpha \leq \text{Min}\left(\bar{\alpha}, \frac{4E_0}{AkT}\right) \dots\dots\dots (5.11)$$

これをふたたび μ の範囲に直せば、積分の下限と上限はそれぞれ、

$$\mu_1 = 1 - \frac{AkT}{2E_0} \text{Min}\left(\bar{\alpha}, \frac{4E_0}{AkT}\right) \dots\dots\dots (5.12)$$

$$\mu_2 = 1 \dots\dots\dots (5.13)$$

これから $\sigma_l^{el}(E_0)$ はつぎのように計算される。

$$\sigma_0^{el}(E_0) = \frac{\sigma_f}{2} \left(1 + \frac{1}{A}\right)^2 \frac{1}{K} [1 - e^{-K^*}] \dots\dots\dots (5.14)$$

$$\begin{aligned} \sigma_1^{el}(E_0) &= \frac{\sigma_f}{2} \left(1 + \frac{1}{A}\right)^2 \frac{1}{K} \left[\left(1 - \frac{1}{K}\right) \right. \\ &\left. + e^{-K^*} \left(\delta + \frac{1}{K}\right)\right] \dots\dots\dots (5.15) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \sigma_2^{el}(E_0) &= \frac{\sigma_f}{2} \left(1 + \frac{1}{A}\right)^2 \frac{1}{K} \left[\left(1 - \frac{3}{K} + \frac{3}{K^2}\right) \right. \\ &\left. - e^{-K^*} \left(\frac{3\delta^2 - 1}{2} + \frac{3\delta}{K} + \frac{3}{K^2}\right)\right] \dots\dots\dots (5.16) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \sigma_3^{el}(E_0) &= \frac{\sigma_f}{2} \left(1 + \frac{1}{A}\right)^2 \frac{1}{K} \left[\left(1 - \frac{6}{K} \right. \right. \\ &\left. \left. + \frac{15}{K^2} - \frac{15}{K^3}\right) + e^{-K^*} \left(\frac{5\delta^3 - 3\delta}{2} \right. \right. \\ &\left. \left. + \frac{15\delta^2 - 3}{2K} + \frac{15\delta}{K^2} + \frac{15}{K^3}\right)\right] \dots (5.17) \end{aligned}$$

ただし

$$K^* = \text{Min}\left(f_0\left(\frac{1}{2}\right)\bar{\alpha}, 2K\right) \dots\dots\dots (5.18)$$

$$\delta = \frac{K^*}{K} - 1 \dots\dots\dots (5.19)$$

入射エネルギー E_0 が小さいとき、 $K^*=2K$ となり、したがって、

$$\sigma_0^{el}(E_0) \rightarrow \sigma_f \left(1 + \frac{1}{A}\right)^2 \equiv \sigma_b \dots\dots\dots (5.20)$$

$$\sigma_l^{el}(E_0) \rightarrow 0, \quad l \geq 1 \dots\dots\dots (5.21)$$

すなわち、散乱は等方的となり、全散乱断面積は束縛原子の断面積 σ_b に近づく。

同じような意味での追加は (4.30) 式の θ_0 に対しても必要であり、非弾性部分の $S_{in}(\alpha, \beta)$ を使って計算した結果に $\exp\left(-\alpha f_0\left(\frac{1}{2}\right)\right)$ を加えておかねばならない (ただし、 $0 \leq \alpha \leq \bar{\alpha}$ なる α の範囲に限る)。

拡散運動が存在する場合には、(4.5) 式からわかるように、 δ 関数が $S_d(\alpha, \beta)$ で置き換えられるので、原理的には数値計算が可能であるが、実際の液体では c は非常に大きく、逆に d は小さいので、(4.4) 式で与えられる $S_d(\alpha, \beta)$ は $\beta=0$ の近くで δ 関数に似た特異性を持つ関数になる。したがって (5.4) 式の E での積分の際には、 $E=E_0$ の近くで分点の幅を非常に小さく取らない限り、数値積分の誤差が非常に大きいものになってしまう。もともと、この準弾性散乱の部分は α の小さい領域でのみ寄与するので、 E あるいは β について積分した結果の $\sigma_l(E_0)$ や θ^0 に対する追加部に関する限り、これを δ 関数として取扱

うことが許されると考えられる。そこで E. S. コードでは、拡散運動がある場合でも、(5.14)~(5.17)式を用いてある。

最後に、熱カットオフ・エネルギー E_c より高いエネルギー領域から熱領域へ減速される中性子源 $\chi_0(E)$ は、

$$\chi(E) = \int_{E_c}^{E_0} \sigma_0(E_0 \rightarrow E) \frac{dE_0}{E_0} \dots \dots \dots (5.22)$$

によって求める。ここで減速領域での中性子スペクトルは $1/E$ で与えられると仮定している。また源については $l=0$ だけを計算する。

6. プログラムの説明

E. S. コードは、FORTRAN II 形式で IBM 7090 用に使われている (近い将来 FORTRAN IV 形式にも書換える予定である)。容量の関係で二つのチェイ

ンに分割されており、それぞれいくつかのサブルーチンを持っている。各サブルーチンの説明と全体のフローチャートをつぎに示す。

CHAIN 1 で必要な SUBROUTINES

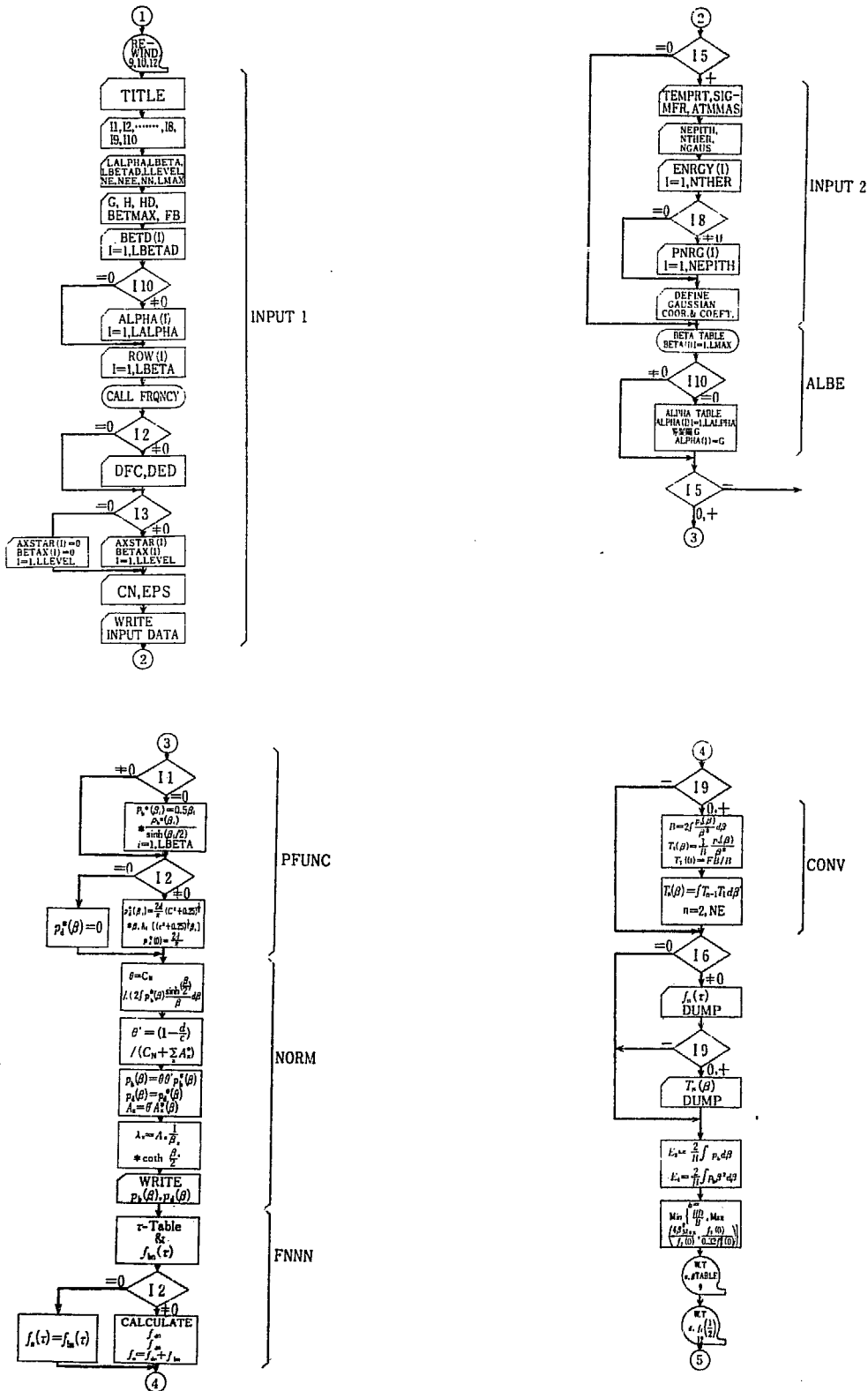
For S.	NAME & ARGUMENTS	DIMENSION	REMARKS
S	INPUT 1		散乱法則の計算に必要な Input Data の読み込み。
S	FRQNCY (H.ROW, LBETA)	ROW (200)	β の Mesh 幅 H と Mesh 数 LBETA から p または ρ を計算し ROW に結果を Store する。INPUT 1 で使用。 現在 Dummy Routine である。
S	INPUT 2		散乱核及び源で必要な Input Data の読み込み。
S	ALBE		α -Table ($\alpha=\alpha_1$ から等間隔 G で) および β -Table ($\beta=0$ から等間隔 H で) を作る。但し α_1 を読み込む時は読み込みが優先する。
S	PFUNC		束縛運動の p 関数と拡散運動の p 関数の計算。
S	NORM		p 関数の規格化と、 $\lambda_x = A_x \cdot \frac{1}{\beta_x} \coth \frac{\beta_x}{2}$ の計算
S	FNNN		$f_n(\tau_1)$ を計算し Table を作る。
S	CONV		$T_n(\beta)$ を計算し Table を作る。 ($n=1, \dots, NE; \beta=0, \dots$)。
S	SHORT		$S_r(\alpha, \beta)$ の計算 (鞍部点)。 α, β は固定。
S	SDD		$S_d(\alpha, \beta)$ の計算。 α は固定。
S	SBB		$S_b(\alpha, \beta)$ の計算 (フォノン展開)。 α は固定。
S	OPTMOD		光学モードを考慮に入れた $S(\alpha, \beta)$ の計算。 α は固定。
S	MOMENT (ABAR)		モーメント定理のチェック。 $S'_r(\alpha, \beta)$ の計算; $\theta_0(\alpha), \theta_1(\alpha)$ の計算。
F	FINV (F, T, Y, LIMIT)	F(101), T(101)	$\tau = f^{-1}(y)$ F: 関数値 Table, T: 変数 Table, Y: y の値。 linear interpolation で τ を求める。 LIMIT: Mesh 数。
F	FINTER (F, T, X, LIMIT)	F(600), T(900)	F: 関数値 Table, T: 変数 Table, X: τ の値。 linear interpolation で y を求める。 LIMIT: Mesh 数。

F	CONVOL (F, G, K, ILIMIT, JLIMIT, D)	F(300), G(300)	$h(x_k) = \int f(t) g(t-x_k) dt$ F: $f(t)$, G: $g(t)$, D: Δt , K: k of x_k , ILIMIT: max i of $f(t_i)$ JLIMIT: max j of $g(t_j)$
F	BINTGL (F, H, LIMIT, FUNC, T, K, EPS)	F(300)	$\int f(\beta) \cdot \text{FUNC}(\beta) d\beta$ F: $f(\beta)$, H: mesh 幅, LIMIT: Mesh 数 EPS: ϵ (相対誤差判定), FUNC: 関数型 T, K: FUNC に必要.
F	TYPE 1 (T, K, B)		$\beta^K \sinh(\tau \cdot \beta)$, T: τ , B: β
F	TYPE 2 (T, K, B)		$\beta^K \cosh(\tau \cdot \beta)$, T: τ , B: β K: integer (0 を含む)
S	FTK 1 (X)	COMMON ANS	ANS = $K_1(x)$ (Bessel function)
S	BESSEL (X, ARBSL, N)	ARBSL (50)	x : argument に対して $I_0(x) \dots I_N(x)$ までが ARBSL に入る. N: N of $I_N(x)$.
S	FTI1 (x)	COMMON AI	AI = $I_1(x)$ 但し FTK1(x) の中で使用するのみ.
S	WRITE1		$S(\alpha, \beta)$ を計算した結果を OUTPUT する.

CHAIN 2 で必要な SUBROUTINES

For S.	NAME & ARGUMENTS	DIMENSION	REMARKS
F	SINTER (F, A, B, LALPHA, LBETA, XA, XB)	F(20, 1200) A(50), B(50)	$y = S(\alpha, \beta)$ F: 関数値 Table, A: α -Table, B: β -Table XA: α の値, XB: β の値. XA, XB から linear interpolation で y を求める.
F	EINTGL (F, E, LIMIT)	F(70), E(70)	$\int f(E) dE$ F: 関数値, E: 変数, LIMIT: E_i の mesh 数. 不等間隔での積分.
S	OUT (L, NTHR)		$\sigma_i(E_0 \rightarrow E)$ を Tape 4 に書く.
S	OUTPUT (NTHR, CHI)	CHI(50)	Tape 4 を読み $\sigma_i(E_0 \rightarrow E)$ と $\chi_0(E)$ を Tape 11 に BCD で書く (Punched Cards にするため).

Flow chart



7. インプットの説明

Item No.	Number of cards	Format	Symbol	Notation in Text	Description
1	1	72 H			タイトル・カード
2	2	8 I 10	I 1 I 2 I 3 I 4 I 5 I 6 I 7 I 8 I 9 I 10		<p>I 1≠0: $p_b^*(\beta)$ を input, I 1=0: $\rho_b^*(\beta)$ を input</p> <p>I 2≠0: 拡散運動あり, I 2=0: なし</p> <p>I 3≠0: 光学モードあり, I 3=0: なし</p> <p>I 4≠0: モーメント定理チェックをおこなう, I 4=0: 行なわない</p> <p>I 5>0: 散乱核まで計算する</p> <p>I 5=0: 散乱法則だけを計算する</p> <p>I 5<0: すでに計算して tape にとってある散乱法則を用いて散乱核だけを計算する</p> <p>I 6≠0: $f_n(\tau)$, $T_n(\beta)$ を output する, I 6=0: しない</p> <p>I 7≠0: $S_d(\alpha, \beta)$, $S_b(\alpha, \beta)$, $S_r(\alpha, \beta)$ を始めに与えた β mesh 幅 H ごとにすべて output する</p> <p>I 7=0: しない</p> <p>I 8≠0: 源の計算を行なう, I 8=0: 行なわない</p> <p>I 9>0: フォン展開だけで計算する</p> <p>I 9<0: 鞍部点法だけで計算する</p> <p>I 9=0: 判定条件に従って, コードの中でいずれかを選ぶ</p> <p>I 10≠0: α の値をすべて任意に input する</p> <p>I 10=0: α mesh 幅 G を与えて等間隔の α を使う</p>
3	1	8 I 10	LALPHA LBETA LBETAD LLEVEL NE NEE NN LMAX	β^*_{max}	<p>α mesh の数</p> <p>$p_b^*(\beta)$ または $\rho_b^*(\beta)$ を input する際の β mesh の数</p> <p>最終的な $S(\alpha, \beta)$ を output させるときの β mesh の数</p> <p>光学レベルの数</p> <p>$T_n(\beta)$ を convolution で正確に計算させるフォノンの数</p> <p>$T_n(\beta)$ を計算するフォノンの総数</p> <p>光学レベルに対するフォノンの数 (各レベルに共通)</p> <p>$S(\alpha, \beta)$ を計算させる β mesh の数</p>
4	1	5 F 10.0	G H HD BETMAX FB		<p>α mesh の幅 (I 10=0 のとき必要, I 10≠0 の時ブランク)</p> <p>β mesh の幅</p> <p>フォノン展開か, 鞍部点法かの判定条件に用いる定数</p> <p>同上</p> <p>$p_b(\beta)/\beta^2(\beta=0)$ の値</p>
5	$\left\lfloor \frac{LBETAD+6}{7} \right\rfloor$	7 F 10.0	BETAD(I)		最終的な $S(\alpha, \beta)$ を output させるときの β の値 (I=1, LBETAD)
6	$\left\lfloor \frac{LALPHA+6}{7} \right\rfloor$	7 F 10.0	ALPHA(I)		α の値 (I=1, LALPHA) (I 10≠0 のとき必要, I 10=0 のとき item 6 は飛ばす)
7	$\left\lfloor \frac{LBETA+6}{7} \right\rfloor$	7 E 10.0	ROW(I)	p_b^* or ρ_b^*	$p_b^*(\beta)$ または $\rho_b^*(\beta)$ の値 (I=1, LBETA)
8	1	2 F 10.0	DFC DFD	c d	<p>拡散パラメータ } (I 2≠0 のとき必要</p> <p> " } (I 2=0 のとき, item 8 は飛ばす)</p>
9	LLEVEL	2 F 10.0	AXSTAR(I) BETAX(I)	A_x^* β_x	<p>光学レベルの強度</p> <p> " のエネルギー (kT 単位) } (I=1, LLEVEL)</p> <p>(I 3≠0 のとき必要, I 3=0 のとき item 9 は飛ばす)</p>

10	1	2F10.0	CN EPS ₂	C _N	規格化定数 収斂判定の定数
(以下 I5≠0 のときだけ必要)					
11	1	3F10.0	TEMPRT SIGMFR ATMMAS	T σ _r A	減速材温度 (°C) 自由原子の断面積 (barn) 減速材原子の質量と中性子の質量との比
12	1	3 I 10	NEPITH NHER NGAUS		減速領域のエネルギー mesh の数 (I8≠0 のときのみ必要) 熱領域のエネルギー mesh の数 μ についての積分の際の Gauss 座標の数
13	$\left\lfloor \frac{NHER+6}{7} \right\rfloor$	7F10.0	ENRGY(I)		熱領域のエネルギーの値 (eV), (I=1, NHER)
14	$\left\lfloor \frac{NEPITH+6}{7} \right\rfloor$	7F10.0	PNRG(I)		減速領域のエネルギーの値 (eV), (I=1, NEPITH) (I8≠0 のときのみ必要)

別紙にインプット・フォーマットと例を示す。

コードの上の制限はつぎの通りである。

LALPHA ≤ 20

LBETA ≤ 200

LBETAD ≤ 50

LLEVEL ≤ 4

NE ≤ 6

NEE ≤ 15

NN ≤ 50

NEPITH ≤ 50

NHER ≤ 50

NGAUS ≤ 10

BETAD(LBETAD) ≤ BETA(LMAX)

最後の条件は $S(\alpha, \beta)$ をアウトプットさせるときの β の最大値が $S(\alpha, \beta)$ を計算させる範囲としてあらかじめ与えた β の最大値を越えてはならないことを示している。別紙の例では、BETAD(LBETAD)=20 であり、他方 $H=0.198$, $LMAX=444$ より、BETA(LMAX)87.7 となり、条件を満している。

つぎにインプット作成上の注意を二三述べる。

1) I5<0 の場合。散乱核の計算を、エネルギー mesh の数や、エネルギーの値を変えて行ないたい場合には、散乱法則までの計算は共通なので散乱法則の結果をテープに保存しておき、必要に応じて item 11 以降のインプットを変えることにより、散乱核の計算だけを行なうことができる。た

だし、この場合でも item 1 からデータをすべてそろえる必要がある(大部分の値は使用しないので明らかに不要データについてはカード枚数だけを揃えておけばよい)。

2) I7≠0 の場合。最終的な $S(\alpha, \beta)$ は別に与える β の値 BETAD(I) (I=1, LBETAD) に対していつでも output されるが I7≠0 とすれば β mesh 幅 H ごとに $S_d(\alpha, \beta)$, $S_b(\alpha, \beta)$, $S_r(\alpha, \beta)$ がすべて output される。

3) I10≠0 の場合。I10≠0 によって α の値をすべて input する場合 $\alpha=0$ は与えてはならない。最後に使用するテープについてまとめておく。

Tape No.		使用目的
physical	logical	
A 4	4	temporary
B 3	3	chain
A 5	9	α, β の Table と $S(\alpha, \beta)$
B 5	10	temporary
A 6	11	$\sigma_t(E_0 \rightarrow E')$, $\chi_0(E_0)$: punch
B 6	12	$\bar{\alpha}$, $f_0(1/2)$ および $S^1(\alpha, \beta)$ (I2≠0 の場合)

(注) 1. $S^1(\alpha, \beta) = \int_{-\infty}^{\infty} S_d(\alpha, \beta') S_b^{ln}(\alpha, \beta - \beta') d\beta'$

2. 後に I5<0 によって散乱核だけの計算を行なうためには、A5 と B6 のテープを保存しておかねばならない。

8. アウトプットの説明

- 1) タイトル
- 2) item 2~4 および item 7~10 のインプットのリスト
- 3) 規格化された $p_b(\beta)$, $p_d(\beta)$, $\rho_b(\beta)$, $\rho_d(\beta)$ の表
- 4) $f_n(\tau)$ の表 ($I6 \neq 0$ のとき)
- 5) $T_n(\beta)$ の表 ($I6 \neq 0$, $I9 \geq 0$ のとき)
 ただし、ここでアウトプットされるのは convolution によって計算される $T_n(\beta)$ だけである。
- 6) $S_d(\alpha, \beta)$, $S_b(\alpha, \beta)$, $S_r(\alpha, \beta)$, $S(\alpha, \beta)$ ($I7 \neq 0$ のとき)
 α の値を固定して $1 \leq \beta \leq LMAX$ の範囲の β に対して mesh 幅 H ごとにアウトプットされる。ただし $S(\alpha, \beta)$ の値が 10^{-15} 以下になれば 0 とする。
 ある α の値に対して、すべての β について鞍部点法を用いる場合には $S_d(\alpha, \beta)$, $S_b(\alpha, \beta)$ は計算されない。一つでもフォノン展開法を用いる β があれば、すべての β について $S_d(\alpha, \beta)$, $S_b(\alpha, \beta)$ が計算され、アウトプットされる。
- 7) モーメントチェック ($I4 \neq 0$ のとき)
 α と θ_0 および α と θ_1 の表をアウトプットする。
- 8) $S(\alpha, \beta)$ の整理された表
 別に与えた β の mesh BETAD(I) に対して、全体の $S(\alpha, \beta)$ を見易い形にして表にする。

以下 $I5 \neq 0$ のときだけ

- 9) item 11~14 のインプットのリスト
- 10) 源 $\lambda_0(E)$
- 11) 以下のアウトプットの形は $I2$ が 0 か否かで少し異なる。
 $I2 \neq 0$ の場合
 $\sigma_l(E \rightarrow E')$, $\sigma_l(E)$ をつぎのようにアウトプットする。
 SIGMAL (E-EDASH) E =
 SIGML(E) = L = 0

EDASH	SIGMA	EDASH	SIGMA
—	—	—	—
—	—	—	—
EDASH	SIGMA		
—	—		
—	—		

すなわち、まず E を固定し、そのときの $\sigma_l(E)$ の値を SIGML(E), $\sigma_l(E \rightarrow E')$ の値を E' に対する表として SIGMA の所へアウトプットする。これを $l=0$ から 3 までくり返してからつぎの E の値へ進む。

$I2 \neq 0$ の場合

$\sigma_l(E \rightarrow E')$ については同じであるが、 $\sigma_l(E)$ の値は上の場合のように E のつぎにアウトプットされないので、 $\sigma_l(E \rightarrow E')$ のアウトプットが全部終わったあとで、 $\sigma_l(E)$ だけをまとめて表の形として出される。

SIGMAL (E)

E	L=0	L=1	L=2	L=3
—	—	—	—	—
—	—	—	—	—

このコード化に当り、理論の定式化に関して、日本原子力研究所炉物理第一研究室の高橋 博氏および炉物理第二研究室の後藤頼男氏に全面的な御協力を頂いた。また、シグマ委員会熱中性子グループの諸氏には折に触れ、有益な御助言を頂いた。ここに厚く感謝の意を表する。

参 考 文 献

- (1) P. A. EGELSTAFF, P. SCHOFIELD: *Nucl. Sci. Eng.*, 12, 260 (1962)
- (2) L. VAN HOVE: *Phys. Rev.*, 95, 249 (1954)
- (3) G. H. VINEYARD: *Phys. Rev.*, 110, 999 (1958)
- (4) A. C. ZEMACH, R. J. GLAUBER: *Phys. Rev.*, 101, 118 (1956)
- (5) G. PLACZEK: *Phys. Rev.*, 86, 377 (1952)

インプット フォーマット シート

プログラム名 ES

No.	1 2 3 4 5 6 7 8 9 10 11 12 13 14 15 16 17 18 19 20 21 22 23 24 25 26 27 28 29 30 31 32 33 34 35 36 37 38 39 40 41 42 43 44 45 46 47 48 49 50 51 52 53 54 55 56 57 58 59 60 61 62 63 64 65 66 67 68 69 70 71 72 73 74 75 76 77 78 79 80								フォーマット記号 その他																																																																								
	1	ENERGY (22) 4 8 4				ENERGY (23) 5 2 9							6 2 5				6 7 6				7 2 9				7 8 4																																																							
2	ENERGY (29) 8 4 1				ENERGY (30) 9																																																																												
3	PNRG (1) 9				PNRG (2) 1							1 4				1 6				1 8				2				7F10.0																																																				
4	PNRG (8) 2 2				PNRG (9) 2 4							2 8				PNRG (12) 3																																																																
	1 2 3 4 5 6 7 8 9 10 11 12 13 14 15 16 17 18 19 20 21 22 23 24 25 26 27 28 29 30 31 32 33 34 35 36 37 38 39 40 41 42 43 44 45 46 47 48 49 50 51 52 53 54 55 56 57 58 59 60 61 62 63 64 65 66 67 68 69 70 71 72 73 74 75 76 77 78 79 80																																																																																