

2008 年度 修士論文

高密度天体における
電気伝導と熱伝導に関する研究

上智大学大学院 博士前期過程
理工学研究科 物理学専攻 宇宙物理学研究室

B0776015 坂本 佑

目次

要約	6
1 序論	7
1.1 背景	7
1.1.1 研究対象	7
1.2 関連研究	12
1.3 研究目的	16
2 理論	17
2.1 高密度天体における物質の状態	17
2.1.1 電子系	17
2.1.2 原子核系	18
2.2 Ziman 公式	22
2.3 Flowers and Itoh 1976	27
2.3.1 ボルツマン方程式	27
2.3.2 輸送係数に関する変分原理	27
2.3.3 相対論的 Ziman 公式	31
2.3.4 液体金属における場合	34
2.3.5 Mott 散乱断面積	35
2.4 Itoh, Mitake, Iyetomi, and Ichimaru 1983	38
2.4.1 誘電関数	38
2.4.2 電気伝導度、熱伝導度	40
2.4.3 構造因子	42
2.4.4 運動量移行ベクトルの範囲	44
2.5 Itoh, Uchida, Sakamoto, Kohyama, and Nozawa 2008	47
2.5.1 第二ボルン近似	47
2.5.2 有限の原子核サイズ効果	48
2.5.3 構造因子	49

2.6	解析的フィッティング式	71
2.7	核種の混合	75
2.8	第二ボルン近似の精度の評価	77
3	結論	81
3.1	結果	81
3.1.1	有限の原子核サイズ効果の寄与	81
3.1.2	第二ボルン近似項の寄与	81
3.1.3	電気伝導度と熱伝導度	81
3.1.4	フィッティング式の精度	81
	謝辞	102
	付録 A プログラムリスト	106
A.1	$\langle S \rangle$ のフィッティング式	106
A.2	$\langle S \rangle$ の数値計算	119
A.3	Young et al. の構造因子	143
A.4	$\langle S \rangle^{DS}$ と $\langle S \rangle^{1B+2B}$ の比較	151

図目次

1	惑星状星雲 NGC6543 (猫目星雲)(NASA)	9
2	球状星団 M4 のなかの白色矮星 (右図の矢印で示された星)(NASA) . .	10
3	シリウス A(左) とシリウス B(右) の想像図 (NASA)	11
4	中性子星 ベラ・パルサー (NASA)	13
5	高密度天体 RX J1856.5-3754 (NASA)	14
6	中性子星 3C58 (NASA)	15
7	完全縮退且つ液体状態の領域	20
8	完全縮退且つ液体状態の領域	21
9	Ziman における液体構造因子のグラフ	26
10	電子遮蔽の寄与	39
11	Thomas-Fermi、Lindhard、Jancovici の誘電関数の比較	41
12	IHNC による構造因子	46
13	二つの構造因子の比較	50
14	二つの構造因子の比較	51
15	運動量移行ベクトルの範囲	53
16	$\langle S_0 \rangle$ の値 ^{12}C	54
17	$\langle S_{-1} \rangle$ の値 ^{12}C	55
18	$\langle S_{+1} \rangle$ の値 ^{12}C	56
19	$\langle S_0 \rangle$ の値 ^{56}Fe	57
20	$\langle S_{-1} \rangle$ の値 ^{56}Fe	58
21	$\langle S_{+1} \rangle$ の値 ^{56}Fe	59
22	$\langle S \rangle$ の値 ^1H	60
23	$\langle S \rangle$ の値 ^4He	61
24	$\langle S \rangle$ の値 ^{12}C	62
25	$\langle S \rangle$ の値 ^{14}N	63
26	$\langle S \rangle$ の値 ^{16}O	64
27	$\langle S \rangle$ の値 ^{20}Ne	65

28	〈S〉の値 ^{24}Mg	66
29	〈S〉の値 ^{28}Si	67
30	〈S〉の値 ^{32}S	68
31	〈S〉の値 ^{40}Ca	69
32	〈S〉の値 ^{56}Fe	70
33	有限の原子核サイズ効果の寄与 ^{12}C	82
34	有限の原子核サイズ効果の寄与 ^{56}Fe	83
35	有限の原子核サイズ効果の寄与 ^{12}C	84
36	有限の原子核サイズ効果の寄与 ^{56}Fe	85
37	第二ボルン近似項の寄与 ^{12}C	86
38	第二ボルン近似項の寄与 ^{56}Fe	87
39	電気伝導度 ^{12}C	88
40	電気伝導度 ^{56}Fe	89
41	電気伝導度 ^{26}Al	90
42	電気伝導度 ^{63}Cu	91
43	熱伝導度 ^{12}C	92
44	熱伝導度 ^{56}Fe	93
45	熱伝導度 ^{26}Al	94
46	熱伝導度 ^{63}Cu	95
47	フィッティング式の相対誤差 ^{12}C	96
48	フィッティング式の相対誤差 ^{56}Fe	97
49	フィッティング式と数値計算の比較 ^{12}C	98
50	フィッティング式と数値計算の比較 ^{56}Fe	99

表目次

1	IHNC で得られた構造因子	44
2	$\langle S_{-1} \rangle(u, 0.1)$ と $\langle S_{-1} \rangle(u, 180)$ におけるフィッティング式の係数	72
3	$\langle S_0 \rangle(u, 0.1)$ と $\langle S_0 \rangle(u, 180)$ におけるフィッティング式の係数	73
4	$\langle S_{+1} \rangle(u, 0.1)$ と $\langle S_{+1} \rangle(u, 180)$ におけるフィッティング式の係数	73
5	v, w, z におけるフィッティング式の係数	74
6	第二ボルン近似の結果と Doggett and Spencer (1956) の結果の比較	80

要約

本研究は、白色矮星や中性子星などの高密度天体における電気伝導度と熱伝導度について、高精度な計算を行うことを目的としている。この計算により、それら高密度天体の進化について深く研究することが可能となる。

この研究を先行する「高密度天体における輸送過程の研究」から、二つの点で進歩が見られた。

まず一つ目に、原子核の電子のクーロン散乱において、第二ボルン近似の項を含んだ計算を行っている。これにより、以前の計算精度を大幅に改良するものとなった。

二つ目に、有限の原子核サイズ効果を考慮している。それにより高密度において精度を高めることができた。

また、天体が一つの原子核で構成される場合だけでなく、核種が混合している場合においても同様の計算を行った。なぜなら、天体が一つの原子核で構成されることは稀であり、大半の場合は核種の混合により構成されているからである。

更に、フィッティング式を求めている。高い精度を持ちつつも単純化することに成功しており、実用性が非常に優れたものとなった。

以上がこの論文の主な内容である。

1 序論

1.1 背景

本論文では、高密度天体のうち、とりわけ白色矮星の内部や中性子星の外殻に存在するものを対象として、その物性を特徴づける物理量の一つである輸送係数、特に電気伝導と熱伝導に関する研究が主となる。高密度天体における物質の輸送係数は、白色矮星や中性子星の構造や進化を理解する上で不可欠な量である。高密度天体の温度について考えるとき、その温度の低下は、プラズマニュートリノ過程をはじめとする輻射によって起こる。その際、中心部の方がより冷却される場合があるが、その場合有限の時間で熱伝導によって外殻へ熱が伝わる。初期にはニュートリノによる冷却が重要であるが、その後は熱伝導による冷却が重要になる。同時に電気伝導は、強い磁場を持っていると考えられるパルサーの磁場の減衰に関係している。また、光の吸収係数は電子伝導によるものと輻射によるものがあるが、中性子星の外殻の内側の境界の温度 T_b と表面温度 T_s の関係を決めるときに最も重要な吸収係数は、イオンが液体状態にあるときの電子伝導によるものであることが知られている (Gudmundsson-Pethick-Epstein, 1982)。電子伝導による吸収係数は熱伝導度 κ により $4acT^3/3\kappa\rho$ (a は輻射密度定数、 ρ は密度) と表されるから、イオンが液体状態にある時の輸送係数を正確に求めることは重要である。つまり、星の内部構造や星の進化を決定する上で、輸送特性の果たす役割は非常に大きい。これらの理由から、以前より高密度天体における輸送係数についての研究が盛んに行われ、十分に良い計算結果が得られてきた。しかし、最近の観測技術の向上に伴い、更に高精度の理論計算が期待されるようになった。以上のような背景から必要性を感じ、この研究に着手した。本論文で取り扱う系は、古典的な液体状態である。

1.1.1 研究対象

本研究の対象は、高密度天体と呼ばれるものである。中性子星や白色矮星などがそれに当たる。本章では、それらの天体について詳しく話そう。詳細は次章に任せるとして、ここでは、概観だけを述べたいと思う。

白色矮星 白色矮星は、恒星が進化の終末期にとりうるものの一つである。太陽程の質量を持つ恒星は、水素の核融合反応により中心核がヘリウム等になって温度が上昇すると赤色巨星となり、水素で構成される外層部は惑星状星雲として宇宙空間に放出され、残った中心核が白色矮星となる。図 1 の中心部の白い星が、これから冷却することで白色矮星となる。図 2 では、左図の四角い部分を拡大したのが右図になり、右図中の丸で囲まれた小さな白い点が白色矮星である。どの位小さいかと言うと、地球半径程度の大きさしかない。しかし、質量は太陽質量と同程度～数分の 1 程度であるため、非常に密度が高い。約 $1t/cm^{-3}$ である。これが高密度天体と呼ばれる所以である。

白色矮星として良く知られているのが、シリウス B である。想像図であるが、図 3 にこれを載せる。シリウス B は、半径が太陽の 0.016 倍、質量が 1.06 倍、平均密度が水の 40 万倍とされる。そこから、表面重力は太陽の約 4100 倍、地球と比較すると約 11 万 6000 倍と計算される。その密度の高さのために原子内にある電子は、フェルミ縮退している。そしてパウリの排他律のため、それ以上の縮退状態を形成できない。白色矮星がその形を保っているのは、縮退圧の圧力勾配と星自身の重力が釣り合っているためである。その形を保っていらなくなるのは、太陽質量のおよそ 1.4 倍以上の場合である。電子の縮退圧では重力による星の収縮を支えきれず、中性子星となるか、重力崩壊を引き起こして一気に重力エネルギーを開放させ爆発するかのいずれかとなる。

白色矮星を構成する物質は、核融合反応によって生じた、ヘリウム、炭素、酸素、ネオン、マグネシウムなどがある。本研究でもこれらの物質は全て考慮している。特に炭素は、多くの結果をこの論文に載せている。また、白色矮星は通常の恒星のように、気体とプラズマから成り立っていると考えられている。

白色矮星が光と熱を発しているのは、恒星の中心核であった時の余熱と重力による圧力によってである。この星は、もはやエネルギー源が無く、数百億年かけて次第に低温になり、最後は黒色矮星となって電磁波による観測ができなくなるとされている。あと約 50 億年もすれば太陽もこのような終焉を迎えるだろうと言われている。

中性子星 中性子星は、質量が大きい恒星の進化の最晩年の形の一つである。中性子星は質量が太陽程度、半径 10km 程度、大気の厚さは 1m 程度で、薄いプラズマ層である。中性子が主な成分であり、中性子から成る大きな原子核の塊のようなものである。原子核では、陽子と中性子が自由に動ける状態で、厳密には違いますが液体に近い状態であり、その

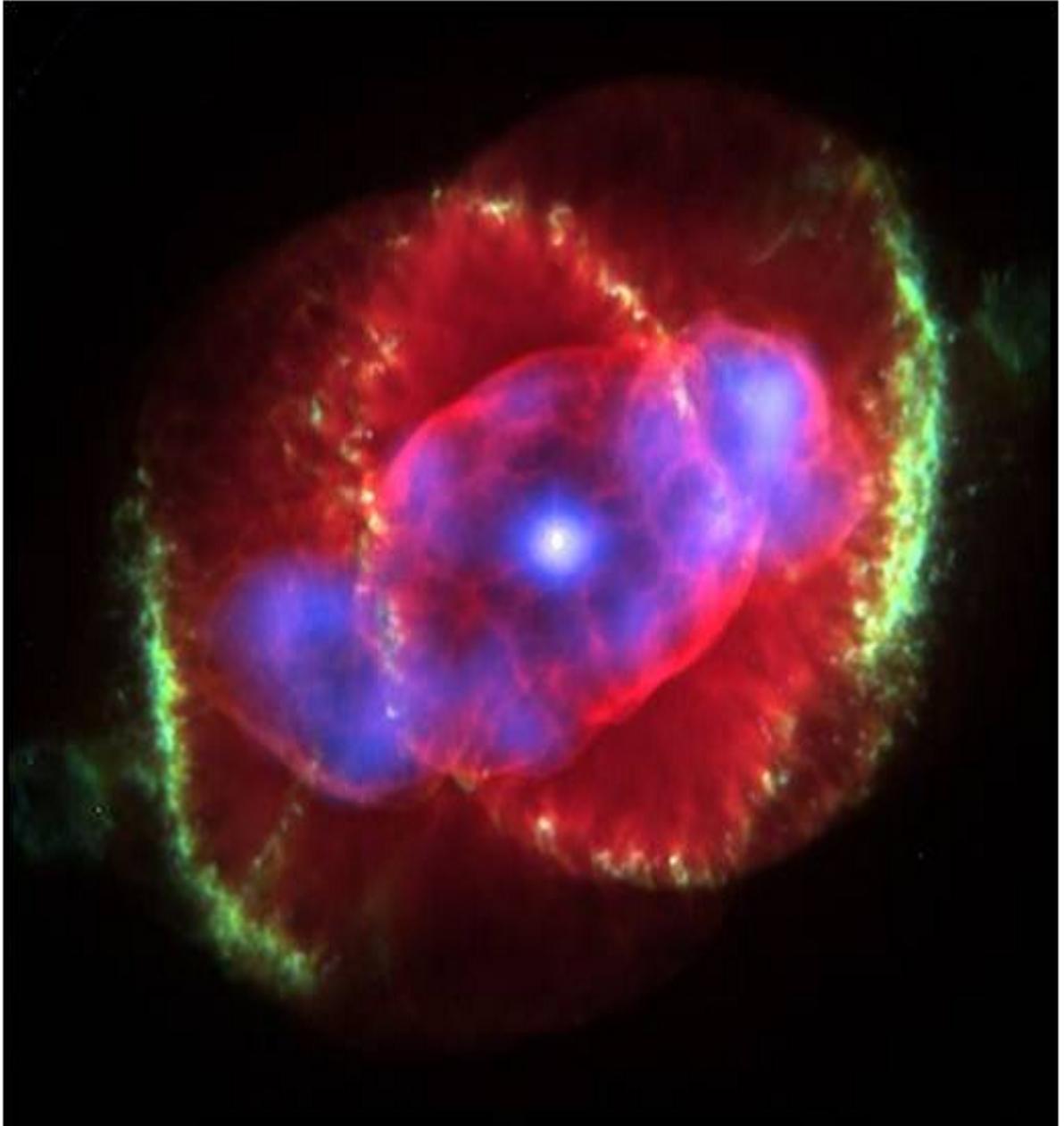


图 1 惑星状星雲 NGC6543 (猫目星雲)(NASA)

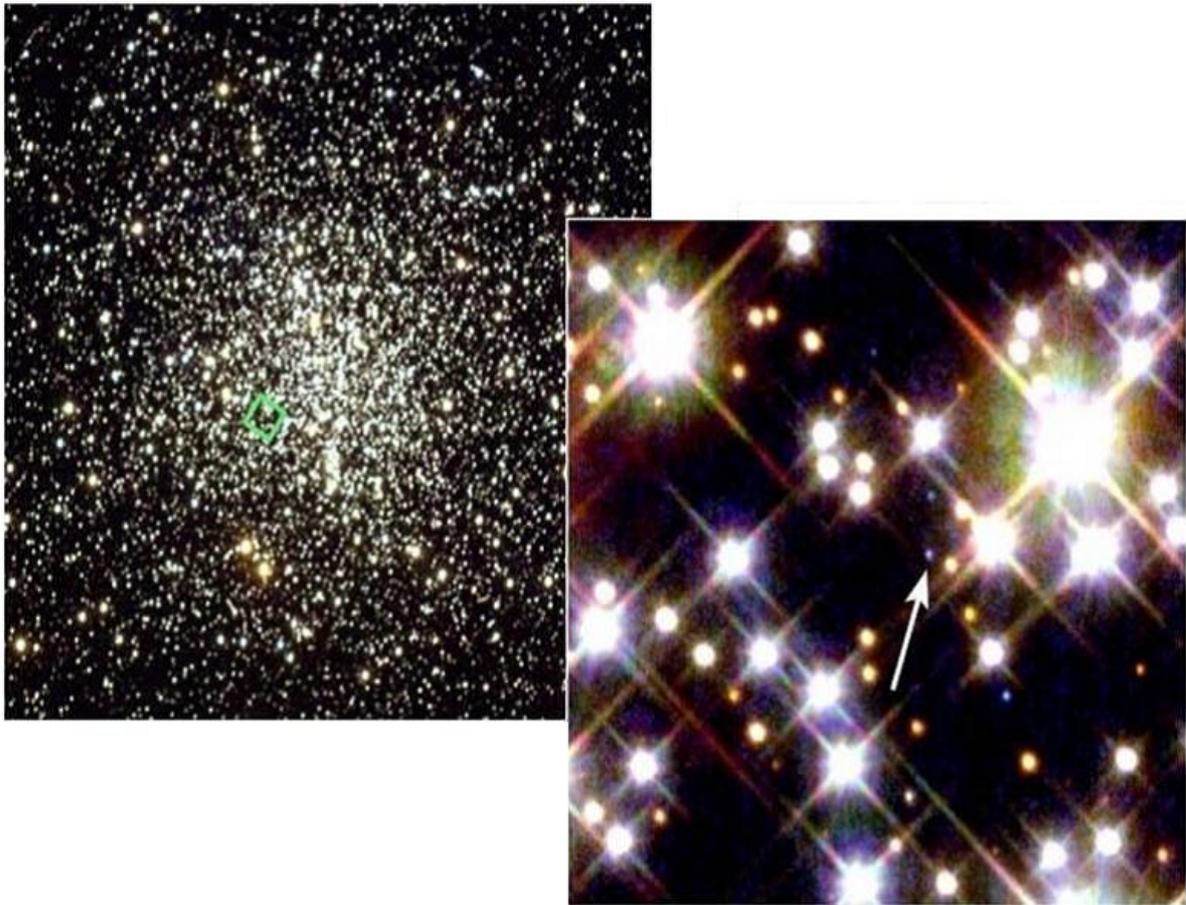


図2 球状星団 M4 のなかの白色矮星（右図の矢印で示された星）(NASA)

高密度のため液体状態を超えた超流動状態になっていると考えられている。密度は太陽の密度の 10^{14} 倍以上もあると言われ、具体的な数値で表すと 10 億 tcm^3 である。白色矮星と比べても非常に高密度であるため、中性子星表面での重力は地球の重力の 2×10^{11} 倍もの大きさがあり、脱出速度は光速の $1/3$ に達する。中性子星は大質量の恒星の超新星爆発によってその中心核から作られるが、中性子星の質量は約 1.4 太陽質量以上、約 3 太陽質量までの範囲である。これより重い場合には重力が中性子の縮退圧に打ち勝って極限まで収縮し、ブラックホールになる。上限の質量は、太陽質量の 1.5 倍から 2.5 倍の範囲にあると考えられている。

中性子星の表面は通常の原子核や電子からなる。内部には中性子過剰核と呼ばれる非常に中性子の多い原子核でできた層がある。このような原子核は地球上では非常に短時間で



図3 シリウス A(左) とシリウス B(右) の想像図 (NASA)

崩壊してしまうが、中性子星内部では非常に圧力が高いために安定して存在できる。さらに内部では、「中性子ドリップ」と呼ばれる、原子核から中性子が外へ漏れ出す現象が見られる。この領域には原子核と自由電子と自由中性子が存在する。

内核の密度は、数 km ほどの厚さで、 $\rho_0 = 2.8 \times 10^{16} \text{gcm}^{-3}$ を標準原子核密度とすると、密度は $2\rho_0$ より大きく、中心部は $10 \sim 15\rho_0$ の密度に達する。

外核の密度は、密度はおよそ $0.5 \sim 2\rho_0$ であり数 km の厚さである。ほとんどが中性子で数パーセントの陽子、電子、ミューオンが含まれている。これらは強く縮退している。

重力崩壊によって非常に小さくに圧縮されたため、角運動量保存の法則によって元の恒星よりもかなり高速に回転している。中性子星に強い磁気がある場合、その磁極から電

磁波を放出している。そして、2つの磁極を結ぶ線が自転軸と一致していない場合、中性子星が高速で自転していれば、電磁波が放出する方向を変えながら放たれるので、パルサーとなる。中性子星自身は可視光線を発していないため、パルサーとして実在が確認された。

さらに最近では、中性子星より密度の高い、クォークで出来たクォーク星が提案され、その候補となる星も見つかっている。このクォーク星の存在を初めて予測したのが、私の研究室の伊藤直紀教授の博士論文である。

最近の話になると、NASAのX線観測衛星チャンドラによる観測で、普通の中性子星とは違った天体が2つ見つかった。一方は中性子星には小さすぎ、もう一方は温度が低すぎるものだ。チャンドラとハッブル宇宙望遠鏡で「みなみのかんむり座」にある天体RX J1856.3-3754を観測したところ、この天体の直径がたった11.3kmしかないことがわかった。これは、超新星爆発のあとにできる非常に密度の高い天体、中性子星よりもずっと小さく密度が高い。研究者たちによると、この天体がクォーク星ではないかと考えられている。

一方、カシオペア座にある天体3C58は、1181年の超新星爆発の時にできたと考えられている。この爆発は日本の「明月記」に記録されている。予想されるX線の放射が観測されなかったことから、研究者たちは3C58は100万度よりも低温であると結論づけた。中性子星がどのように冷えていくのかという問題に対して強い制限を与える天体となるだろうが、この天体も（少なくとも一部は）クォークでできている可能性があるらしい。

このように、観測の技術の発展に伴い、新しい事実が見つかっていくことは非常に興味深い。

1.2 関連研究

液体金属状態にある高密度物質の輸送係数はこれまで多くの人により調べられてきた (Hubbard-Lampe 1969, Canuto 1970)。ここでは研究の発展を順を追って説明して行きたい。

まず、Ziman (1960) によって得られた液体金属における電気抵抗率の式から考えていく。この式を電子が相対論的に運動する場合に拡張したのが、Flowers and Itoh (1976) である。また液体構造因子の導入、相対論的な Thomas-Fermi の誘電関数を用いて、相対

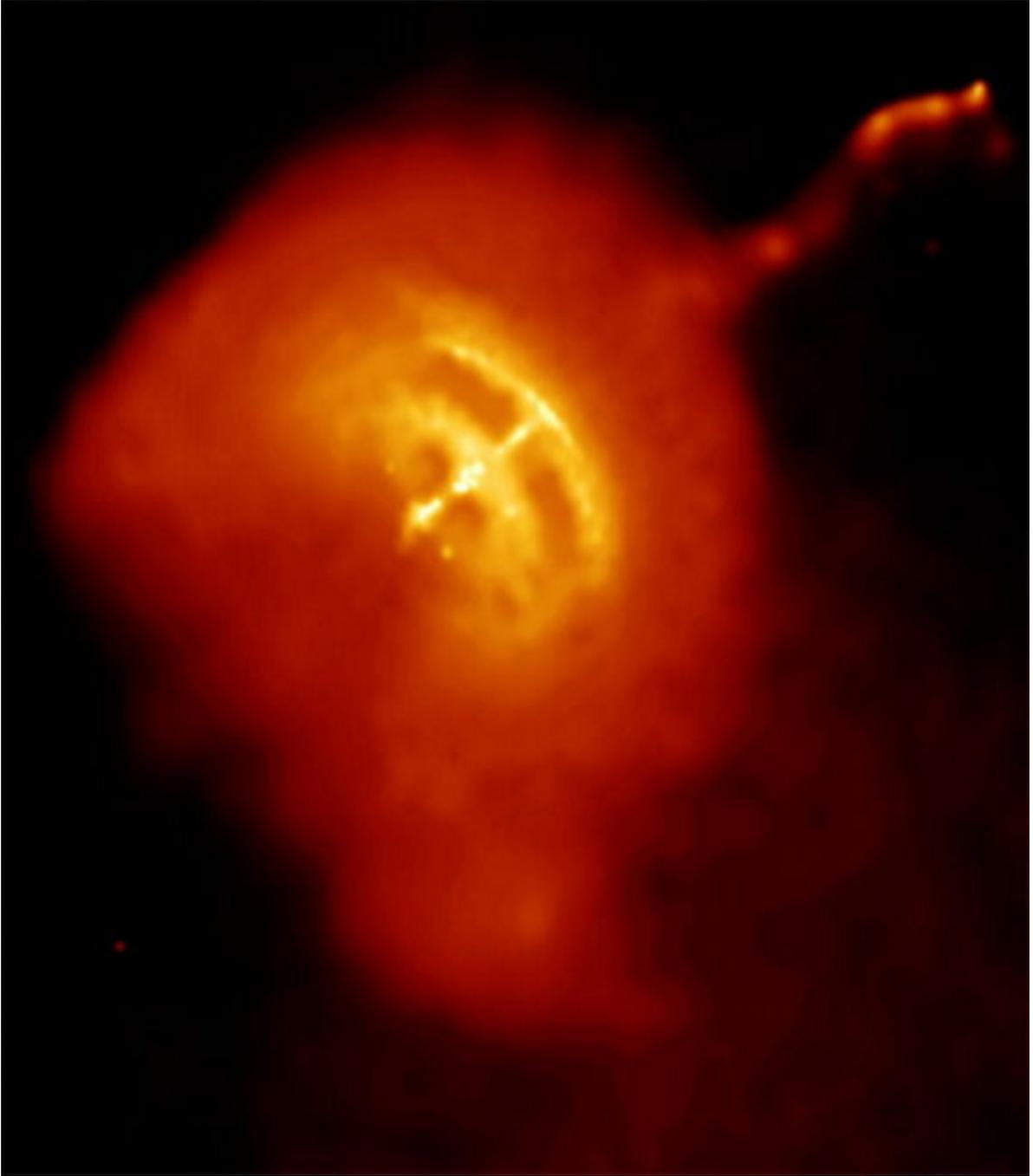


図4 中性子星 ベラ・パルサー (NASA)



図 5 高密度天体 RX J1856.5-3754 (NASA)

論的に拡張された輸送特性の総合的な研究が行われた。これらの計算では、Nearly Free Electron モデルに基づき、Ziman 公式 (Ziman 1961) が使用されているが、Ziman 公式には二つの本質的な物理量が存在する。前述したように、一つは、静的構造因子 $S(k)$ であり、もう一つは、電子の静的誘電関数 $\epsilon(k, 0)$ である。

続いて、Yakovlev and Upin (1981) によって、Flowers and Itoh (1976) の修正と近似式による単純化が行われた。Yakovlev and Upin は、Hubbard-Lampe の計算から簡単な解

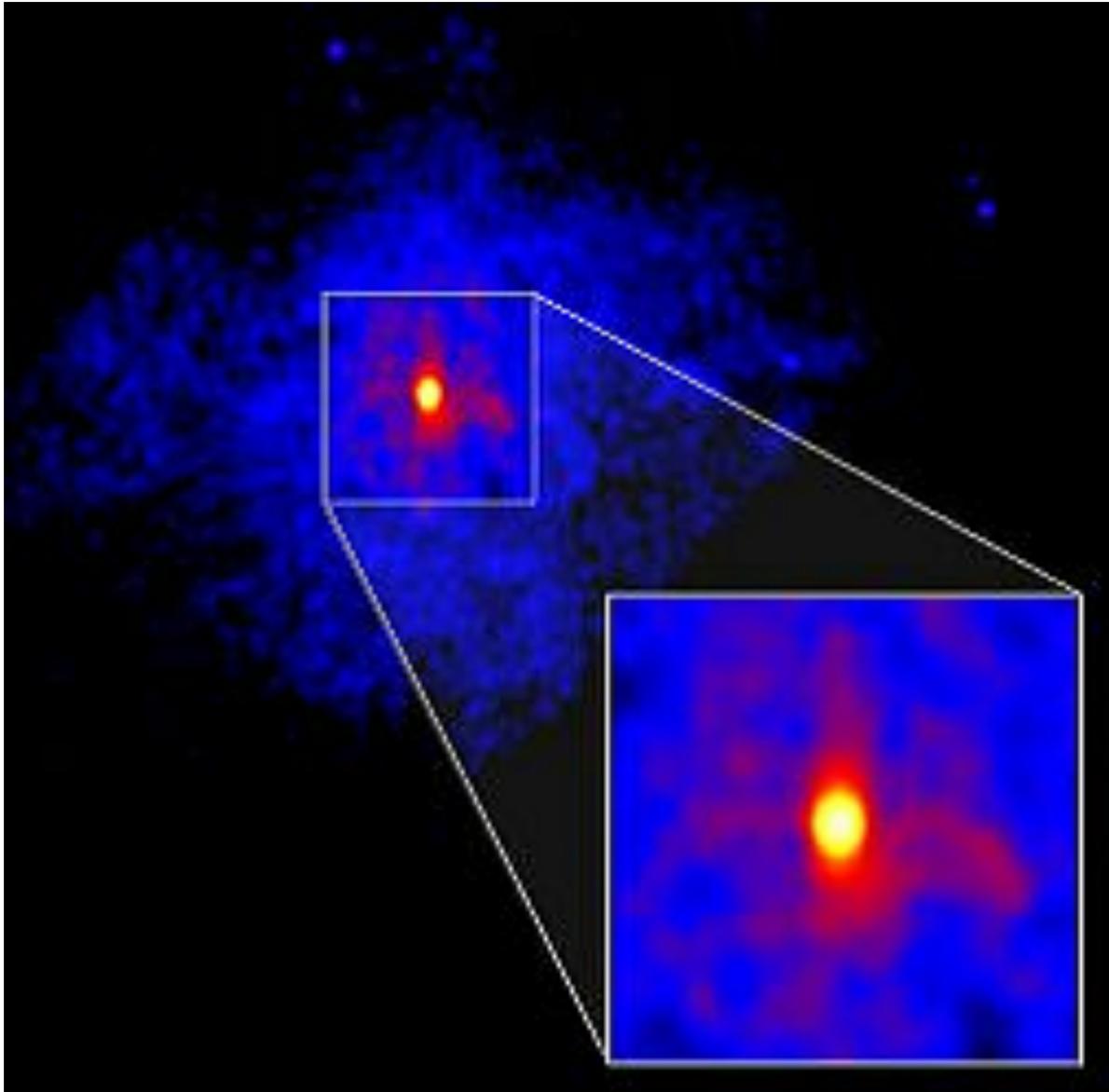


図 6 中性子星 3C58 (NASA)

析的表現を提出し、それまで最も精度の良い計算とされてきた Flowers and Itoh の計算が彼らの表式による値と因子 2~3 だけ異なることを指摘している。

液体状態における詳細な計算は、Itoh, Mitake, Iyetomi and Ichimaru(1983)や Mitake, Ichimaru and Itoh(1983)で行われた。ここではより Improved Hyper-Netted Chain (IHNC) scheme を用いて計算された正確な構造因子によって計算の精度を高めている。またその静的構造因子として Galam-Hansen(1976) の Monte-Carlo の値も用いて、IHNC のものと

比較している。更に Jancovici の誘電関数を導入している。その研究を更に進め、液体状態において第二ボルン近似項の寄与も含めた計算を行ったのが、本研究である。

なおこの修士論文に先立って、Itoh, Uchida, Sakamoto, Kohyama and Nozawa によって The Astrophysical Journal に論文 THE SECOND BORN CORRECTIONS TO THE ELECTRICAL AND THERMAL CONDUCTIVITIES OF DENSE MATTER IN THE LIQUID METAL PHASE が発表された。この修士論文はそれを、研究の発展が分かりやすいように先行研究を基に段階を踏まえて、詳しくまとめたものである。

1.3 研究目的

電気伝導度、熱伝導度の第二ボルン近似は、液体金属相の高密度で様々な元素組成において計算されている。第二ボルン近似を含めることは、 $Z \leq 26$ の原子核による電子のクーロン散乱において十分に正確な値を取っている。ここで、私たちの方法は、準解析的な手法を用いる。これは、原子核の電子のクーロン散乱において断面積の完全な数値を使用した以前の研究とは異なるものである。なぜこの準解析的な手法を取ったかと言うと、信頼に足る Z 依存性と ρ 依存性を持つ結果が得られるからである。以前の完全な数値的方法では、限られた数の原子核による電子の散乱断面積の数値しか利用できていない。その限られた数値とは、 $Z = 6, 13, 29, 50, 82, 92$ である。また電子のエネルギーは、 $0.05\text{MeV}, 0.1\text{MeV}, 0.2\text{MeV}, 0.4\text{MeV}, 0.7\text{MeV}, 1\text{MeV}, 2\text{MeV}, 4\text{MeV}, 10\text{MeV}$ である。この以前の結果との詳細な比較をすることで、本研究における結果の正確さを評価する。

2 理論

本章の構成を述べる。

2.1 では、まず取り扱う高密度天体とはどのような物理系なのかを考察する。2.2 では、始まりである Ziman の液体金属の電気抵抗率の式を見せる。

次に、研究の発展が分かりやすいように、先行する研究を追いながら説明していく。2.3 では、ボルツマン方程式 (輸送方程式) の Ziman による解を求める。そして、その解を相対論的な場合に拡張する。また、求めた輸送係数に対して、液体状態という条件を付け加え、構造因子についても説明する。2.4 では、誘電関数や以前よりも正確な構造因子について書いている。2.5 では、より高精度の値を求めるために第二ボルン近似まで計算する。また有限の原子核サイズ効果について述べる。

2.6 では、実用性のために解析的なフィッティング式を求める。2.7 では核種が混合した場合について述べ、電気伝導度と熱伝導度の式を拡張している。2.8 では第二ボルン近似の精度の評価を行った。

2.1 高密度天体における物質の状態

想定している高密度天体における物質の状態とは、 $10^6 \leq \rho \leq 2.4 \times 10^{14} \text{ gcm}^{-3}$, $10^8 \leq T \leq 10^{10} \text{ K}$ 程度の物質で、それらは主に序論で述べたような白色矮星内部または中性子星の外殻を構成している。このような状態の物質がどのような構造をしているかを考える。そのために電子系と原子核系に分けて考察する。

2.1.1 電子系

密度が 10^6 gcm^{-3} 以上の高密度状態では、電子のフェルミエネルギー ϵ_F は、非常に大きな値を取る。

このように、電子のもつ運動エネルギーが原子核とのクーロン力による束縛エネルギー ($\sim 13.6Z^2 \text{ eV}$) と比べて十分大きな値をとるため、全ての原子が完全電離状態にあると考えられる。これは圧力電離と呼ばれる。

また、 $\epsilon_F \geq mc^2$ ($5.11 \times 10^5 \text{ eV}$) であるため、電子は相対論的に運動している。

また、温度は最大で 10^{10} K 程度であり、その熱運動のエネルギー $k_B T$ は 10^6 eV 以下と

なる。したがって、ここで考察する大部分の温度密度領域では、 $\epsilon_F \gg k_B T$ であることが分かる。このような電子は、フェルミ統計の効果が重要な役割を占める縮退した電子系である。

高密度天体では、このような電子により、電荷や熱が伝搬される。

2.1.2 原子核系

電子をはぎ取られた原子核群は、平均してそのド・ブロイ波長 ($\sim 10^{-13}$ cm) が原子核間距離 ($\sim 10^{-5}$ cm) に比べて十分小さいため、古典統計に従うイオンプラズマを作る。ここで取り扱う物質は、一様に分布した電子気体を背景とする、古典的一成分プラズマ (OCP) とよく一致するため、それを採用している。

OCP について詳しく話そう。クーロン相互作用による強結合状態にあり、古典統計に従うイオン系と縮退電子がつくる負電荷背景からなる系、いわゆる高密度プラズマは、種々の物理系で実現されている。宇宙物理学の領域では、高密度天体である白色矮星の内部や、中性子星の外殻などである。そのため高密度プラズマの物性はこれまで多くの研究者の関心をひいてきた。

高密度プラズマのもっとも簡単な取扱いとして電子系の分極を無視したこの OCP モデルがある。OCP 系の熱力学的状態は、結合定数 Γ のみで指定される。その定義は以下の通りである。

$$\Gamma \equiv \frac{Z^2 e^2}{a k_B T} = 2.275 \times 10^{-1} \frac{Z^2}{T_8} \left(\frac{\rho_6}{A} \right)^{\frac{1}{3}} \quad (1)$$

分母は運動エネルギーで、分子はクーロン相互作用のエネルギーである。ここで a はイオン球半径 $a = [3/(4\pi n_i)]^{\frac{1}{3}}$, n_i はイオンの数密度、 T_8 は 10^8 K を単位とした温度、 ρ_6 は 10^6 gcm $^{-3}$ を単位とした密度である。

高密度な強結合状態とは、 $\Gamma \geq 1$ で特徴づけられる。つまり、イオン同士はクーロン相互作用によって強く結び付き、荷電粒子系に特有な長距離相関のみならず短距離相関も系の性質を決める上で、重要な役割を演じている。

OCP 系については、広範囲の計算機実験が行われ、その熱力学的性質や静的な相関特性は定量的にかなりの精度で解明されている。内部エネルギー、自由エネルギーに対する内挿式や動径分布関数、静的構造因子の数表が様々な Γ に対し与えられている。

この論文では、液体状態の場合のみを考えている。この場合に一致する最近の基準は、

$1 \ll \Gamma < 175$ として (Potekhin and Chabrier 2000) によって与えられている。

それに加えて、 T_F によっても領域が絞られる。図 7 と図 8 で、線で示された領域となる。炭素に比べ、鉄では非常に狭いことがわかる。

$$T \ll T_F = 5.930 \times 10^9 \left(\left[1 + 1.018 \left(\frac{Z}{A} \right)^{\frac{2}{3}} \rho_6^{\frac{2}{3}} \right]^{\frac{1}{2}} - 1 \right) \quad (2)$$

ここで T_F はフェルミ温度である。

ところで、原子核の電子捕獲は吸熱反応なので、通常の物質では起こらない。しかし、高密度になると電子のフェルミエネルギーは非常に大きくなり、 $\rho > 10^8 \text{ gcm}^{-3}$ では吸熱反応のエネルギーによりフェルミエネルギーのほうが大きくなるために、電子捕獲が可能になる。このようにして、neutron-rich な原子核ができるようになる。

また、さらに密度が増加し、 $\rho > 4.3 \times 10^{11} \text{ gcm}^{-3}$ になると中性子が原子核に束縛されず、原子核の外にこぼれ出て来るようになる。これを neutron-drip と言う。そして原子核の密度である $2.4 \times 10^{14} \text{ gcm}^{-3}$ 程度になると、最早原子核は定義できなくなる。したがって、密度が高くなるにつれて、neutron-rich な原子核から中性子が染み出し、やがて全空間が自由な中性子、陽子、電子の流体によって占められるようになる。

このように密度が変化するにつれて、安定であった原子核も変化する。中性子星のように高密度な状態において最も安定に存在する原子核を neutron star matter と言う。

ここで取り扱う高密度天体における物質は、主に白色矮星の内部や中性子星の外殻を構成している物質である。白色矮星の構造についてはすでに詳しい計算がなされており、その構造は、全質量の $\sim 0.23\%$ にあたる外側の部分を除き、縮退した電子領域になっていると考えられている。

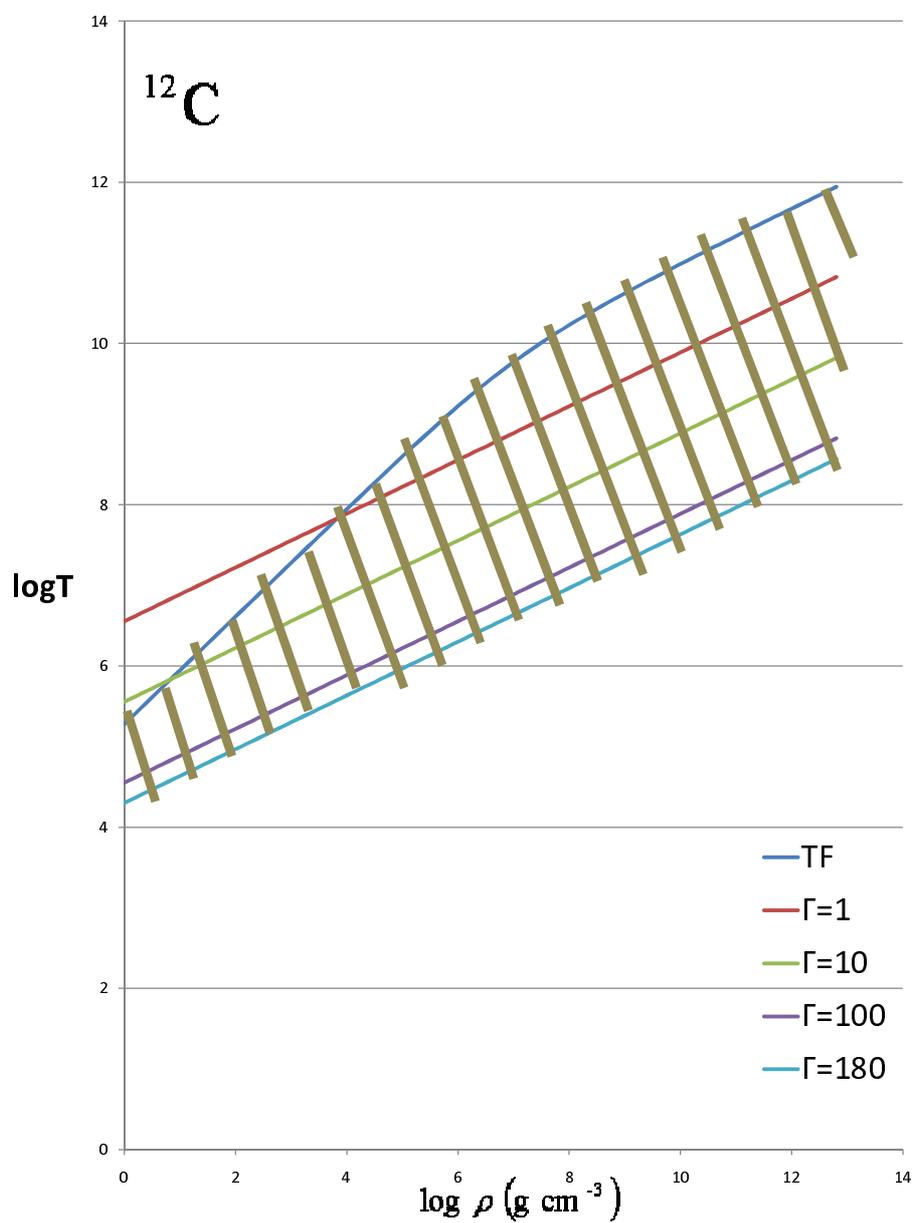


図 7 完全縮退且つ液体状態の領域

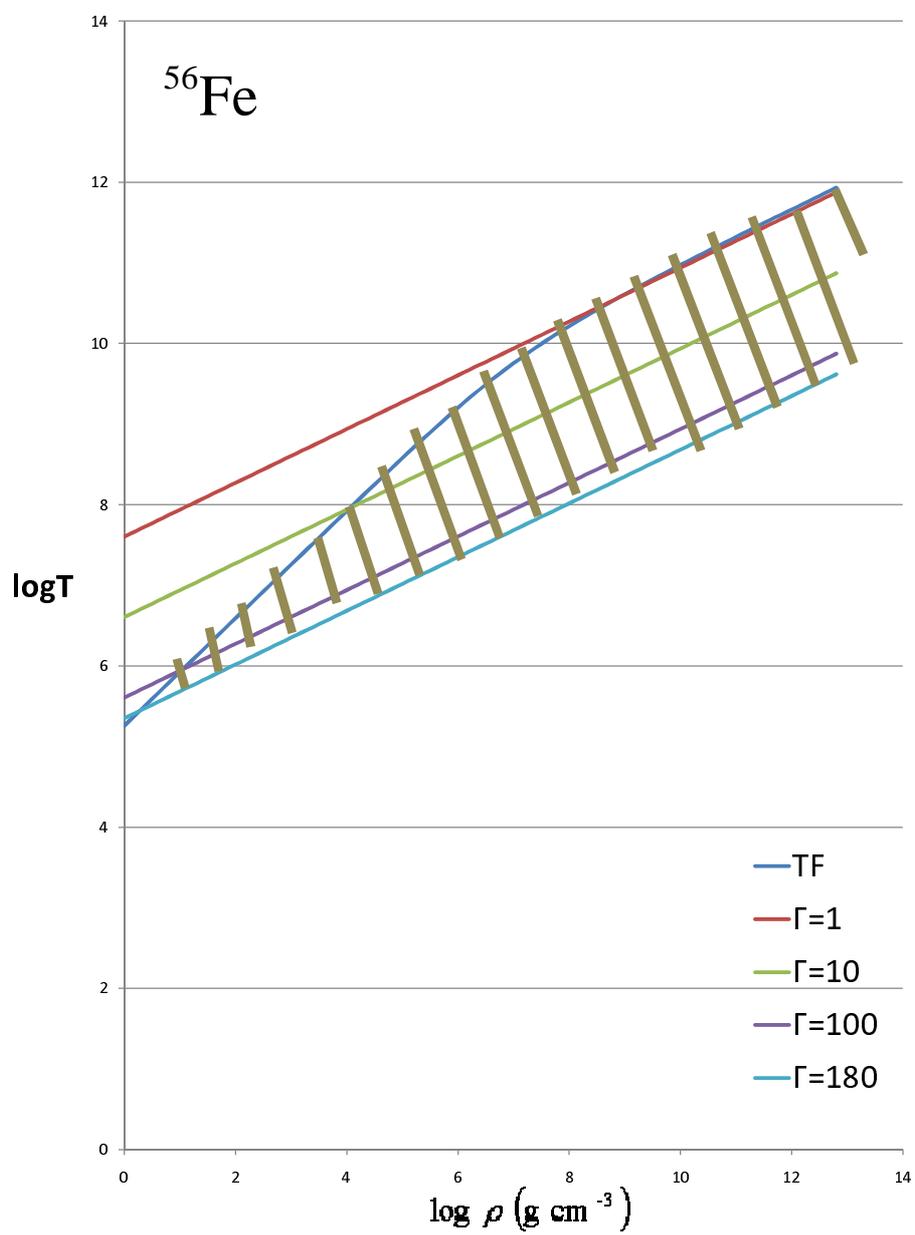


図 8 完全縮退且つ液体状態の領域

2.2 Ziman 公式

高密度天体の輸送特性を考える上で、Ziman の固体物理学の基礎の知識が基となっている。Ziman によって求められた液体金属における電気抵抗率が本研究の出発点となる。これは自由電子モデルを仮定して得られたものである。

Nearly Free Electron(NFE) モデル

Ziman 公式の基礎となる NFE モデルの成立条件は次の三点にまとめられる。

1 電子相互作用が十分弱い。その効果は誘電関数を通してのみ考える。この条件は数値的にあまり明らかでないが、本論文で考慮した $T < 0.1T_F, r_s < 0.5$ の領域では満足されていると考えられる。

2 電子とイオンの相互作用は弱く、電子 - イオン散乱の断面積の計算において一次のボルン近似を適用できる。次章で第一ボルン近似項までを考慮した相対論的な式に Ziman の拡張する。この近似が妥当であるための条件は、電子のフェルミエネルギー ϵ_F と $Ze^2/2(a_B/Z)$ を比較して、

$$\epsilon_F \lesssim Ze^2/2(a_B/Z)$$

あるいは

$$r_s \lesssim 1.4/Z$$

実際には遮蔽効果を考慮することによって、この条件をさらに緩めることができる。

3 電子の平均自由行程 Λ がイオン間の相関距離より長い。このとき、電子の状態として自由電子のものをとることができる。

電気抵抗率を求める上で、電子 - フォノン相互作用を考える。それを取り扱う最も簡単な方法は、金属中の伝導電子が、X 線や中性子、遅い電子の非弾性回折の場合と同様に格子振動により非弾性的に回折されると仮定することである。これは断熱原理によって正当化される。このとき、状態 \mathbf{k} から \mathbf{k}' への遷移に対する行列要素は、

$$S_{\mathbf{k}'\mathbf{k}} = iV_a(\mathbf{K})(\mathbf{K} \cdot \mathbf{U}_q) \quad (3)$$

と書ける。ここで、 $\mathbf{K} = \mathbf{k}' - \mathbf{k}$ である。散乱が N 過程か U 過程かのよって、 $\mathbf{q} = \mathbf{K}$ か $\mathbf{q} = \mathbf{K} - \mathbf{g}$ かが異なる。 $U_{\mathbf{q}}$ は波動ベクトル \mathbf{q} の格子振動のベクトル振幅である。また、 $V_a(\mathbf{K})$ は、この遷移に対しての、単一原子もしくはイオンのポテンシャルの行列要素である。

$S_{\mathbf{k}'\mathbf{k}}$ の絶対値の二乗を取り、摂動論によって散乱確率を計算すれば、格子をつくる各原子は平均的な有効微分散乱断面積

$$\bar{\sigma}(\mathbf{K}) = \sigma_a(\mathbf{K})N|\mathbf{K} \cdot \mathbf{U}_{\mathbf{q}}|^2 \quad (4)$$

を持つ。ここで、 $\sigma_a(\mathbf{K})$ は、一つだけの原子が持っている微分散乱断面積の散乱ベクトル \mathbf{K} に対する値である。

この式によれば、各原子は独立に電子を散乱するということである。しかし、その散乱の強さはある原子が格子中の近傍原子に対し、どれだけ変位したかに依っている。全ての \mathbf{q} に対してとった因子 $|\mathbf{K} \cdot \mathbf{U}_{\mathbf{q}}|^2$ の平均値は、デバイーワラー因子の理論に現れており、イオンの格子点からの平均二乗変位を格子間隔との比で表している。しかし、 \mathbf{K} のある値についての各散乱過程を調べる場合、一定の波動ベクトルをもつ一組の格子変位からの散乱を考える必要がある。つまり、近傍イオンの変位の相互作用が重要となる。

$N|\mathbf{K} \cdot \mathbf{U}_{\mathbf{q}}|^2$ は構造因子の二乗に対する一つの近似であり、原子の位置に関する対相関関数のフーリエ変換に比例する。

$$\bar{\sigma}(\mathbf{K}) = \sigma_a(\mathbf{K})S(\mathbf{K}) \quad (5)$$

これは液体に対しても成り立つ。本研究においては液体状態における電気伝導度と熱伝導度を求めているため、このことは重要である。伝導電子の散乱は、液体のなかの原子の動径方向分布関数に依存している。

電気抵抗を求める上では、この構造因子を考慮し、様々な格子の振動数からの寄与を解析する必要がある。また、電子が散乱されるときには、電子エネルギーの変化を考慮する必要がある。最初に述べたように断熱原理が保証されており、この原理によれば、格子がある配位で凍結してしていると仮定し、その僅かに周期が乱された格子中で、電子の散乱を計算できる。イオンの運動がもたらす力学的な効果はエネルギーの変化のみである。

よって、電子 - フォノン相互作用の問題は、 $\sigma_a(\mathbf{K})$ を計算することに重きが置かれる。もし、原子が浅いポテンシャル $V(\mathbf{r})$ を持ち、原子が運動するとき、ポテンシャルがひずむことなくついてゆけば、ボルン近似により単位立体角 Ω 当たりの微分散乱断面積に

対し、

$$\frac{\partial \sigma_a}{\partial \Omega} = \left(\frac{m}{2\pi\hbar n_i} \right)^2 |V_a(\mathbf{K})|^2 \quad (6)$$

を得る。ここで n_i はイオンの数密度であり、また、

$$V_a(\mathbf{K}) = n_i \int V_a(\mathbf{r}) e^{-i\mathbf{K}\cdot\mathbf{r}} d\mathbf{r} \quad (7)$$

は、単位格子に規格されたイオンのポテンシャルのフーリエ変換である。

実際のイオンのポテンシャルはボルン近似で散乱断面積を取り扱うには強すぎる。偽ポテンシャル形式を、バンド構造の計算と同様に電子 - 格子相互作用の計算に用いることができる。つまり、6 式の V_a のフーリエ成分を一個の原子の偽ポテンシャルの対応する成分に置き換えるべきであるということである。だが、イオンの変位によって生じるポテンシャルの変化は電子ガスの電荷分布の変化による効果を採用しなければいけない。これは、裸のイオンのポテンシャルのフーリエ成分を誘電関数で割ることによって近似できる。

6 式の原子ポテンシャルの重ね合わせを、偽原子ポテンシャルの重ね合わせにすると、

$$\frac{\partial \sigma_a}{\partial \Omega} = \left(\frac{m}{2\pi\hbar n_i} \right)^2 |w_s(\mathbf{K})|^2 \quad (8)$$

を得る。ここで、 $w_s(\mathbf{K})$ は中性偽原子ポテンシャルのフーリエ変換である。これは、散乱に対する摂動関数の全ての次数において正しいわけではないが、NFE モデルを仮定した場合の金属においては辻褓が合っている良い近似となる。

$w_s(\mathbf{K})$ の振る舞いは、全ての金属に対しほとんど変わらない。裸のイオンに対する偽ポテンシャル $w_b(\mathbf{K})$ は価電荷 Ze による長距離クーロン場を含む。そのため、そのフーリエ変換は以下のように振る舞う。

$$w_b(\mathbf{K}) \approx -\frac{4\pi Z n_i e^2}{K^2} + V'(\mathbf{K}) \quad (9)$$

ここで、 $V'(\mathbf{K})$ は、 $V(\mathbf{r})$ がイオン殻の内部でどのような形をとっても、 $\mathbf{K} \rightarrow 0$ で有限である。この式にある特異点は、 $\mathbf{K} = 0$ における $\epsilon(\mathbf{K})$ の特異点により打ち消される。これらをまとめると、

$$\begin{aligned} w_s(\mathbf{K}) &= \frac{w_b(\mathbf{K})}{\epsilon(\mathbf{K})} \approx \frac{-4\pi Z n_i e^2 / K^2 + V'(\mathbf{K})}{1 + 4\pi e^2 n(\epsilon_F) / K^2} \\ &\approx \frac{-\frac{2}{3}\epsilon_F + (K^2/\lambda^2)V'(\mathbf{K})}{(1 + K^2/\lambda^2)} \end{aligned} \quad (10)$$

ここで、 $n(\epsilon_F)$ はエネルギーの状態密度、 ϵ_F はフェルミエネルギーであり、 λ はスクリーニングパラメータである。

さて、ここで電気伝導度に関する基本的な式を与える。

$$\sigma = \frac{1}{4\pi^3} \frac{e^2}{\hbar} \frac{1}{3} \int \Lambda dS_F \quad (11)$$

ここで、 Λ は平均自由行程である。散乱確率は微分散乱断面積 $\sigma(\theta)$ で表されるので、 Λ は以下のように与えられる。

$$\frac{1}{\Lambda} = n_i 2\pi \int_0^\pi (1 - \cos \theta) \sigma(\theta) \sin(\theta) d\theta \quad (12)$$

液体金属における電気抵抗率は、式 5、8、11、12 から、以下のように求められる。これは自由電子モデルを仮定して得られたものである。

$$\frac{1}{\sigma} = \rho = \frac{3\pi}{4} \frac{1}{\hbar^2 e^2 v_F^2 k_F^2} \frac{1}{n_i} \int_0^{2k_F} |w_s(K)|^2 S(K) K^3 dK \quad (13)$$

ここで、 v_F はフェルミ速度、 k_F はフェルミ波数、 $|w_s(k)|^2$ は中性偽原子の形状因子、 $S(k)$ は液体の構造因子である。

構造因子は、中性子または X 線回折によって実験的に決定される。実際、大部分の液体金属において原子は同じような構造をとっているので各原子の大きさによる補正を加えさえすれば、ただ一つの標準的な曲線によって近似的に表現される。図 9 は、液体金属の典型的な構造因子の、いろいろな原子価に対する $2k_F$ および温度依存を示している。 k の値が小さいときには、構造因子は小さい。原子の密度分布がほぼ一定だからである。着目する原子を囲む近接原子の最初の殻の位置において動径方向分布は構造因子にピークをもたらす。その位置を越えると、1 のまわりを振動しているだけである。

宇宙物理学で用いられる構造因子は、後述する。

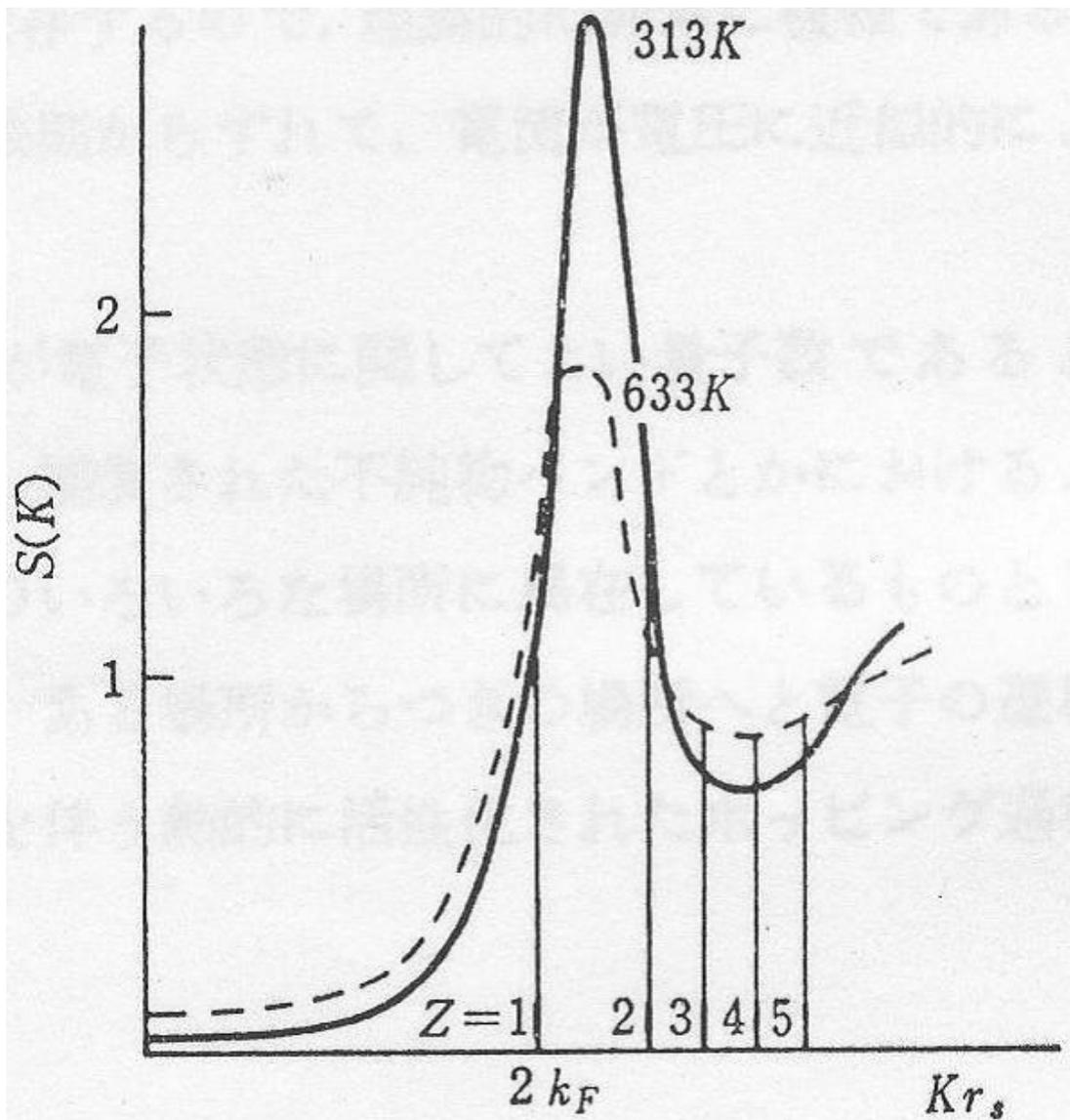


図9 Zimanにおける液体構造因子のグラフ

2.3 Flowers and Itoh 1976

2.3.1 ボルツマン方程式

想定する高密度天体における物質において、電子は相対論的に運動している。そのため、上の Ziman の公式を相対論的に拡張する必要性がある。

まず始めに、ボルツマン方程式から考えていく。ここでは、Ziman(1960)に基づいている。

空間の点 r 近傍で、状態 k にある電子の局所的な濃度を表す量 $f_k(\mathbf{r})$ の時間に伴った変化は、拡散による分布関数の変化 \dot{f}_{diff} 、電場や磁場による変化 \dot{f}_{field} 、散乱による分布関数の変化 \dot{f}_{scatt} の三つが考えられる。定常状態では、

$$\dot{f}_{diff} + \dot{f}_{field} + \dot{f}_{scatt} = 0 \quad (14)$$

であり、これがボルツマン方程式と呼ばれる式である。14 は平衡状態での分布関数 f_k^0 を用いると、

$$-\mathbf{v}_k \cdot \frac{\partial f_k^0}{\partial T} \nabla T - \mathbf{v}_k \cdot \mathbf{e} \frac{\partial f_k^0}{\partial \epsilon_k} \mathbf{E} = \int [(f_k - f_k^0) - (f_{k'} - f_{k'}^0)] \gamma_{k \rightarrow k'} d\mathbf{k}' \quad (15)$$

となる。ただし、磁場を 0、かつ弾性散乱として取り扱っている。また、 $\gamma_{k \rightarrow k'}$ は運動量 \mathbf{k} の状態から \mathbf{k}' を持つ状態への遷移確率である。

2.3.2 輸送係数に関する変分原理

電気伝導度と熱伝導度を求める上でオonserガーの理論により、ある系に流れている流束を $\mathbf{J}_1, \mathbf{J}_2, \dots, \mathbf{J}_n$ とし、その原因である力を $\mathbf{X}_1, \mathbf{X}_2, \dots, \mathbf{X}_n$ とすると、

$$\mathbf{J}_i = \sum_j L_{ij} \mathbf{X}_j \quad (16)$$

$$\dot{S}_{macro} = \sum_i \mathbf{X}_i \cdot \mathbf{J}_i \quad (17)$$

という関係が得られる。ここで係数 L_{ij} は i, j について対称である。これはおonserガーの相反定理と呼ばれている。 \dot{S}_{macro} はマクロに見たときの不可逆的エントロピー生成率を表す。

電荷流束を考える。その時、

$$\mathbf{J}_1 = \mathbf{J} \quad (18)$$

$$\mathbf{X}_1 = \frac{\mathbf{E}}{T} \quad (19)$$

となり、 \mathbf{X}_1 は絶対起電力となる。また電気伝導度 σ は、

$$\mathbf{J} = \sigma \mathbf{E} \quad (20)$$

という関係があるので、17 式より、

$$\frac{1}{\sigma} = \frac{T \dot{S}_{macro}}{J^2} \quad (21)$$

である。また熱伝導率 κ は、エネルギー流束を \mathbf{U} とすると、

$$\mathbf{U} = \kappa(-\nabla T) \quad (22)$$

であり、

$$\dot{S}_{macro} = \nabla \cdot \frac{\mathbf{U}}{T} \quad (23)$$

という関係から、

$$\frac{1}{\kappa} = \frac{T^2 \dot{S}_{macro}}{\mathbf{U}^2} \quad (24)$$

となる。

高密度天体における物質では、電荷や熱は主に電子によって運ばれる。そこで、フェルミ粒子の平衡分布を $f^0(\epsilon)$ とすると、

$$f^0(\epsilon) = \frac{1}{e^{(\epsilon-\mu)/k_B T} + 1} \quad (25)$$

であり、 μ は化学ポテンシャルである。局所的分布を $f(\epsilon)$ 、その平衡からのずれを δf とし、関数 ϕ を以下のように定義する。

$$\delta f = f(\epsilon_k) - f^0(\epsilon_k) - \phi(k) \frac{\partial f^0}{\partial \epsilon_k} \quad (26)$$

$$\phi(k) f^0(\epsilon_k) [1 - f^0(\epsilon_k)] / k_B T \quad (27)$$

ここで、 k は運動量である。この δf を用いて、電流密度 \mathbf{J} と、エネルギー流束 \mathbf{U} を次のように表わせる。

$$\mathbf{J} = \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} e\mathbf{v}\delta f(\epsilon_k) \quad (28)$$

$$\mathbf{U} = \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} (\epsilon_k - \mu)\mathbf{v}\delta f(\epsilon_k) \quad (29)$$

である。ただし \mathbf{v} はキャリア速度を表す。ここでエネルギー流束は、全エネルギーではなく、内部エネルギーから自由エネルギーを引いたものを表す。電子の自由エネルギーは化学ポテンシャル μ である。

次に、 \dot{S}_{macro} の値を求める。ここで、ボルツマン方程式に戻る。15 に 26 と 27 を代入することで、

$$-\mathbf{v}_k \cdot \frac{\partial f_k^0}{\partial T} \nabla T - \mathbf{v}_k \cdot \mathbf{e} \frac{\partial f_k^0}{\partial \epsilon_k} \mathbf{E} = \frac{1}{k_B T} \int (\phi_k - \phi_{k'}) \Gamma_{k \rightarrow k'} d\mathbf{k}' \quad (30)$$

$$\Gamma_{k \rightarrow k'} = f_{k^0}(1 - f_{k^0})\gamma_{k \rightarrow k'} \quad (31)$$

を得る。ここで、

$$X(\mathbf{k}) = -\mathbf{v}_k \cdot \frac{\partial f_k^0}{\partial T} \nabla T - \mathbf{v}_k \cdot \mathbf{e} \frac{\partial f_k^0}{\partial \epsilon_k} \mathbf{E} \quad (32)$$

とおく。また、

$$\Gamma\phi = \frac{1}{k_B T} \int (\phi_k - \phi_{k'}) \Gamma_{k \rightarrow k'} d\mathbf{k}' \quad (33)$$

という散乱演算子 Γ を導入すると、二つの関数 ϕ, ψ に対して内積をとり、

$$\langle \phi, \Gamma\psi \rangle = \frac{1}{2k_B T} \int (\phi_k - \phi_{k'}) \Gamma_{k \rightarrow k'} (\psi_k - \psi_{k'}) d\mathbf{k} d\mathbf{k}' \quad (34)$$

となる。この関係を使うと、14 式を次のように書き表わせる。

$$\langle \phi, X \rangle = \langle \phi, \Gamma\phi \rangle \quad (35)$$

$$\langle \phi, X \rangle = \int \phi_k (\dot{f}_{kfield} + \dot{f}_{kdiff}) d\mathbf{k} \quad (36)$$

$$\langle \phi, \Gamma\phi \rangle = - \int \phi_k \dot{f}_{kscatt} d\mathbf{k} \quad (37)$$

である。

フェルミ粒子のエントロピーは

$$S = -k_B \int [f_{\mathbf{k}} \ln f_{\mathbf{k}} + (1 - f_{\mathbf{k}}) \ln(1 - f_{\mathbf{k}})] d\mathbf{k} \quad (38)$$

で与えられる。これは平衡状態において成り立つ。しかし、ここで平衡からのずれが小さい場合にも近似的に成り立つと仮定する。上式を時間で微分すると、

$$\dot{S} \approx -\frac{1}{T} \int \phi_{\mathbf{k}} \dot{f}_{\mathbf{k}} d\mathbf{k} + \frac{1}{T} \int \epsilon_{\mathbf{k}} \dot{f}_{\mathbf{k}} d\mathbf{k} \quad (39)$$

が得られる。ただし、第二項は平均エネルギーの増加に伴うエントロピーの増加率を表すが、ここでは考慮しない。定常状態では、 $\dot{f}_{\mathbf{k}} = 0$ となるため、 S は定数である。つまり、

$$\begin{aligned} \dot{S} &= -\frac{1}{T} \int \phi_{\mathbf{k}} \dot{f}_{\mathbf{k}} d\mathbf{k} \\ &= -\frac{1}{T} \int \phi_{\mathbf{k}} (\dot{f}_{\mathbf{k}field} + \dot{f}_{\mathbf{k}scatt}) d\mathbf{k} \\ &= 0 \end{aligned} \quad (40)$$

ここで、 \dot{f}_{diff} は温度勾配に関する項であるため、 \dot{f}_{field} に含まれるとした。したがって、

$$\begin{aligned} \dot{S}_{scatt} &= \frac{\langle \phi, \Gamma \phi \rangle}{T} \\ &= \frac{1}{2k_B T^2} \int \int (\phi_{\mathbf{k}} - \phi_{\mathbf{k}'})^2 \Gamma_{\mathbf{k} \rightarrow \mathbf{k}'} d\mathbf{k} d\mathbf{k}' \end{aligned} \quad (41)$$

が得られる。

ここで、例えば、 \mathbf{E} だけが存在した場合には、

$$\begin{aligned} \dot{S}_{field} &= -\frac{1}{T} \langle \phi, X \rangle \\ &= -\frac{1}{T} \mathbf{E} \cdot \mathbf{J} \end{aligned} \quad (42)$$

が得られ、これを 21 と比較すると、

$$\dot{S}_{macro} = -\dot{S}_{field} = \dot{S}_{scatt} \quad (43)$$

となる。この関係式は、温度勾配の場合にも成り立つので、マクロなエントロピー生成率をミクロな散乱によるエントロピー生成率に置き換えられるということである。 σ と κ を求めるには、 \dot{S}_{macro} に 41 を代入すればよい。

2.3.3 相対論的 Ziman 公式

ここでは、Flowers and Itoh (1976) の論文に基づき、電気伝導度と熱伝導度を求める。

高密度天体における物質の電子は相対論的であり、このような電子の散乱の計算方法については、Bjorken and Drell (1965) の手法に依る。ここでは、 $\hbar = c = k_B = 1$ の単位によって書かれる。 α は微細構造定数である。

電子が電磁相互作用を通して、背景の粒子と散乱する過程を考える。

$$\mathcal{H}(x) = e\bar{\psi}(x)\gamma_\mu\psi(x)A^\mu(x) \quad (44)$$

ここで、 $\phi(x)$ は電子場の演算子、 $A^\mu(x)$ は背景の電磁気ポテンシャルである。運動量 \mathbf{p} 、エネルギー ϵ 、スピンの z 成分として σ をもつ電子が、電荷 Ze 、密度 $\rho(x)$ の背景の粒子によって散乱され、運動量 \mathbf{p}' 、エネルギー ϵ' 、スピンの z 成分として σ' をもったとする。このような散乱では、以下のような四元電磁ポテンシャル $A^\mu(x)$ の第 0 成分 (スカラーポテンシャル) だけを生じさせる。

$$A^0(x) = \int \frac{Ze}{q^2\epsilon(\mathbf{q}, \omega)} \exp[i\mathbf{q} \cdot (x - x')] \rho(x') d^4x' \quad (45)$$

また、そのように遷移する過程における行列要素 S は、以下ようになる。

$$S_{fi} = \left(\frac{m}{\epsilon_p} \frac{m}{\epsilon_{p'}}\right)^{\frac{1}{2}} 4\pi\alpha Z \bar{u}(\mathbf{p}', \sigma') \gamma^0 u(\mathbf{p}, \sigma) \times \int_{-\infty}^{\infty} dt \exp[-i(\epsilon_p - \epsilon_{p'})t] \frac{1}{|p - p'|^2 \epsilon(\mathbf{p} - \mathbf{p}', \epsilon_p - \epsilon_{p'})} \langle f | c_{p'}^+ c_p \rho(\mathbf{p} - \mathbf{p}', t) | i \rangle \quad (46)$$

m は電子質量、 $u(\mathbf{p}, \sigma)$ は電子 \mathbf{p}, σ におけるスピノル、 c_p^+, c_p はそれぞれ生成演算子と消滅演算子である。平衡転移率 $\Gamma_{p-p'}$ を計算するために、 S_{fi} の二乗の絶対値を取り、終状態で総和を取り、始状態で熱平均を行う。

$$\Gamma_{p-p'} = \sum_{\sigma\sigma'} |\bar{u}(\mathbf{p}', \sigma') \gamma^0 u(\mathbf{p}, \sigma)|^2 \frac{m}{\epsilon_p} \frac{m}{\epsilon_{p'}} \langle c_p^+ c_{p'} c_{p'}^+ c_p \rangle \int dt e^{i\omega t} \frac{\langle \rho(\mathbf{q}, t) \rho^+(\mathbf{q}, 0) \rangle}{|q^2 \epsilon(q, \omega)|^2} \quad (47)$$

$\omega = \epsilon_p - \epsilon_{p'}$, $\mathbf{q} = \mathbf{p} - \mathbf{p}'$, 角ブラケットは熱平均を意味する。電子が平衡にあり、統計的に独立しているとき電子熱平均は、

$$\langle c_p^+ c_{p'} c_{p'}^+ c_p \rangle = f(\epsilon_p) [1 - f(\epsilon_{p'})] \quad (48)$$

$$f(\epsilon) = \frac{1}{e^{\beta(\epsilon - \mu)} + 1} \quad (49)$$

となる。

背景のゆらぎを記述するための、動力的な形状因子は、

$$S'(\mathbf{q}, \omega) = \int dt e^{i\omega t} \langle \rho(\mathbf{q}, t) \rho^+(\mathbf{q}, 0) \rangle - 2\pi\delta(\omega) \sum_{\mathbf{K}} |\rho(\mathbf{K})|^2 \quad (50)$$

となり、 K は逆格子ベクトルである。最後の項は格子の存在する場所のブラッグ回折のピークを差し引いたもの。ブラッグ回折は、電子をブロッホ状態にし、実際の散乱には寄与しない。

今エントロピー生成率は、

$$T\dot{S} = \frac{1}{2k_B T} \int [\phi(p) - \phi(p')]^2 \sum_{\sigma\sigma'} |\bar{u}(\mathbf{p}', \sigma') \gamma^0 u(\mathbf{p}, \sigma)|^2 m^2 (4\pi\alpha Z)^2 \frac{1}{|q^2 \epsilon(q, \omega)|^2} \\ \times f(\epsilon_p) [1 - f(\epsilon_{p'})] \frac{d^3 p}{\epsilon_p (2\pi)^3} \frac{d^3 p'}{\epsilon_{p'} (2\pi)^3} S'(\mathbf{q}, \omega) (2\pi)^4 \delta^4(p - p' - q) \frac{d^4 q}{(2\pi)^4} \quad (51)$$

フェルミ関数は、フェルミ面近傍にある電子を制限するため、 $\frac{\omega}{qv_F}$ の最低次で $\Gamma_{p-p'}$ に値をつけることが可能であり、電子の積分からそれを取り除く。四次のデルタ関数を用いて、再び $\frac{\omega}{qv_F}$ の最低次に戻すと、

$$\int \frac{d^3 p}{2\epsilon_p} \frac{d^3 p'}{2\epsilon_{p'}} f(\epsilon_p) [1 - f(\epsilon_{p'})] \delta^4(p - p' - q) \approx \frac{1}{2} \pi \frac{\omega}{(e^{\beta\omega} - 1) q} \Theta(2p_e - q) \quad (52)$$

誘電関数を記述するための試行関数の標準的な選択は、

$$\phi(p) = \mathbf{p} \cdot \hat{\mathbf{v}} \quad (53)$$

\mathbf{v} は電場方向の単位ベクトルである。そのとき、

$$T\dot{S} = \frac{2}{3} \frac{\epsilon_F^2}{(2\pi)^3} \int_0^{2p_e} q^3 dq |v(\mathbf{q}, 0)|^2 \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} \beta \omega n(\omega) S'(q, \omega) \quad (54)$$

$n(\omega)$ はボーズ分布。 $(\mathbf{q} \cdot \hat{\mathbf{v}})^2$ を $\frac{q^2}{3}$ で置き換えると、

$$|v(\mathbf{q}, 0)|^2 = \frac{1}{2} \left(\frac{m}{\epsilon_F}\right)^2 \sum_{\sigma\sigma'} \frac{|\bar{u}(\mathbf{p}', \sigma') \gamma^0 u(\mathbf{p}, \sigma)|^2}{|q^2 \epsilon(q, \omega)|^2} (4\pi\alpha Z)^2 \quad (55)$$

電荷流束は、 ϕ の選択によって簡単に値を求められる。

$$\mathbf{J} = \alpha^{\frac{1}{2}} n_e v_f \hat{\mathbf{v}} \quad (56)$$

n_e は電子の数密度、 v_F はフェルミ速度。

$$\frac{1}{\sigma} = \rho = \frac{2}{3} \frac{\epsilon_e^2}{(2\pi)^3} \int_0^{2q_F} q^3 dq |v(\mathbf{q}, 0)|^2 \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} \beta \omega n(\omega) S'(q, \omega) / \alpha n_e^2 \quad (57)$$

緩和時間 τ_σ を導入し、Drude モデルによると、

$$\sigma = n_e \alpha \tau_\sigma / m^* \quad (58)$$

m^* は、以下で定義される有効質量である。

$$\frac{p}{m^*} = \frac{\partial \epsilon_p}{\partial p} \quad (59)$$

非相対論的な電子における D. C. 緩和時間における Baym に由来する結果の相対論的拡張が、 $\frac{1}{\tau_\sigma}$ である。

$$\frac{1}{\tau_\sigma} = \frac{2}{3} \frac{m^*}{(2\pi)^3} \frac{1}{n_e} \int_0^{2p_e} q^3 dq |v(\mathbf{q}, 0)|^2 \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} \beta \omega n(\omega) S'(q, \omega) / \alpha n_e^2 \quad (60)$$

熱伝導における ϕ の選択は、

$$\phi(p) = (\epsilon_p \mu) \mathbf{p} \cdot \hat{\mathbf{v}} \quad (61)$$

そのときエネルギー流束は、

$$\mathbf{U} = \hat{\mathbf{v}} p_e^3 / 9\beta^2 \quad (62)$$

緩和時間によって書かれる熱伝導度は、

$$\kappa = p^3 T \tau_\kappa / 6m^* \quad (63)$$

ここで、

$$\frac{1}{\tau_\kappa} = \frac{2}{3} \frac{\epsilon_e}{n_e (2\pi)^3} \frac{1}{n_e} \int_0^{2p_e} dq |v(\mathbf{q}, 0)|^2 \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} \beta \omega n(\omega) S'(q, \omega) / \alpha n_e^2 [q^3 + (\frac{\beta\omega}{\pi})^2 q (3p_e^2 - \frac{1}{2}q^2)] \quad (64)$$

$S'(q, \omega)$ は、散乱中心との相互作用を考慮に入れており、集団モードと単一粒子励起からの寄与を含んでいる。

いくつかの散乱機構が現れるとき、緩和時間の逆数を足し合わせなければいけない。

$$\frac{1}{\tau} = \sum_i \frac{1}{\tau_i} \quad (65)$$

最も重要な過程は、 τ が最小、つまり $\frac{1}{\tau}$ が最大の時である。もし例えば、いくつかの電荷のキャリア（伝導電子）がある時、まず特定の電気伝導度を求めるために、特定のキャリアにおける緩和時間を加えなければいけない。それから、異なるキャリアの伝導度を足し合わせることで、全体の電気伝導度が得られる。

$$\sigma = \sum_i \sigma_i \quad (66)$$

2.3.4 液体金属における場合

得られた電気伝導度と熱伝導度の式は、固体状態でも液体状態でも成り立つ。状態の違いは動的構造因子 $S(\mathbf{k}, \omega)$ で表される。この論文では液体状態を考えているため、この $S(\mathbf{k}, \omega)$ に液体のイオン相関を導入すれば良い。高温（固体の融解温度付近、またはそれ以上）のとき、 $S'(\mathbf{k}, \omega)$ の振動数依存性は重要でなくなる。そのため、動力的形状因子を静的構造因子に近似できる。この $S(\mathbf{k}, \omega)$ を振動数の全領域にわたって積分すると、波数空間での密度ゆらぎのスペクトルに対応する静的構造因子が得られる。これを、 $S(\mathbf{k})$ と書くと、その定義は、

$$S(\mathbf{k}) = \frac{1}{n_z} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} S(\mathbf{k}, \omega) \quad (67)$$

であり、 n は単位体積に含まれるイオンの個数である。また、 $S(\mathbf{k})$ は次のようにフーリエ変換することにより動径分布関数 $g(\mathbf{r})$ となる。

$$S(\mathbf{k}) = 1 + \int d^3\mathbf{r} \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}) g(\mathbf{r}) \quad (68)$$

これは一つの粒子を原点に見出したとすると、そこから \mathbf{r} だけ離れた点の周りの特性体積 $\frac{1}{n}$ 中に他の粒子を見出す確率に等しい。すなわち、粒子間に相関がなければ $g(\mathbf{r}) = 1$ であり、 $S(\mathbf{k}) = 1$ である。

高温極限つまり、イオンの古典極限

$$\beta\omega \rightarrow 0, \beta\omega n(\omega) \rightarrow 1 \quad (69)$$

によって、式 57 は、

$$\frac{1}{\sigma} = \rho = \frac{2}{3} \frac{\epsilon_e^2}{(2\pi)^3} \int_0^{2p_e} q^3 dq |v(\mathbf{q}, 0)|^2 S(q) / \alpha n_e^2 \quad (70)$$

となる。

2.3.5 Mott 散乱断面積

ここで、一つの電子が一つの原子核によって散乱される場合の散乱断面積について考える。単位立体角 $d\Omega$ 辺りの微分散乱断面積は、

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{4Z^2\alpha^2m^2}{q^4} |\bar{u}(\mathbf{p}', \sigma') \gamma^0 u(\mathbf{p}, \sigma)|^2 \quad (71)$$

と表される。

71 式を終状態にわたって和をとり、始状態にわたって平均をとると、

$$\frac{d\bar{\sigma}}{d\Omega} = \frac{4Z^2\alpha^2m^2}{2q^4} \sum_{\sigma\sigma'} |\bar{u}(\mathbf{p}', \sigma') \gamma^0 u(\mathbf{p}, \sigma)|^2 \quad (72)$$

スピンの合計は以下のように書きなおされる。

$$\begin{aligned} & \sum_{\sigma'\sigma} \bar{u}_\alpha(\mathbf{p}', \sigma') \gamma_{\alpha\beta}^0 u_\beta(\mathbf{p}, \sigma) u_\lambda^\dagger(\mathbf{p}, \sigma) \gamma_{\lambda\delta}^{0\dagger} \gamma_{\delta\alpha}^{0\dagger} u_\sigma(\mathbf{p}', \sigma') \\ &= \sum_{\sigma'\sigma} \bar{u}_\alpha(\mathbf{p}', \sigma') \gamma_{\alpha\beta}^0 u_\beta(\mathbf{p}, \sigma) \bar{u}_\delta(\mathbf{p}, \sigma) \gamma_{\delta\alpha}^{0\dagger} u_\sigma(\mathbf{p}', \sigma') \end{aligned} \quad (73)$$

ここで、通常、繰り返される指標にわたる総和を暗に意味している。これは、一般的な式の特別な場合である。

$$|\bar{u}(f) \Gamma u(i)|^2 = [\bar{u}(f) \Gamma u(i)] [\bar{u}(i) \bar{\Gamma} u(f)] \quad (74)$$

ここで、 $\Gamma = \gamma^0 \Gamma^\dagger \gamma^0$ であり、特に、

$$\overline{\gamma^\mu} = \gamma^\mu$$

$$\overline{i\gamma^5} = i\gamma^5$$

$$\overline{\gamma^\mu \gamma^5} = \gamma^\mu \gamma^5$$

また

$$\overline{\not{a} \not{b} \not{c} \cdots \not{p}} = \not{p} \cdots \not{c} \not{b} \not{a}$$

スピンの和は、もし今エネルギー生成演算子を用いると、トレースを減らすことができる。

$$\begin{aligned} \sum_{\sigma} \bar{u}_\beta(\mathbf{p}, \sigma) \bar{u}_\lambda(\mathbf{p}, \sigma) &= \sum_{r=1}^4 \epsilon_r w_\beta^r(p) \bar{w}_\lambda^r(p) \left(\frac{\mathbf{p} + m}{2m} \right)_{\gamma\lambda} \\ &= \left(\frac{\mathbf{p} + m}{2m} \right)_{\beta\lambda} = [\Lambda_+(\mathbf{p})]_{\beta\lambda} \end{aligned} \quad (75)$$

72 式においてスピンの和は、以下ようになる。

$$\sum_{\alpha\beta} \sum_{\sigma'} (\gamma^0 \frac{\mathbf{p} + m}{2m} \gamma^0)_{\alpha\beta} u_{\beta}(\mathbf{p}', \sigma') = \sum_{\alpha\beta} (\gamma^0 \frac{\mathbf{p} + m}{2m} \gamma^0)_{\alpha\beta} (\frac{\mathbf{p}' + m}{2m})_{\alpha\beta} \quad (76)$$

ここで再び同様にの手法を用いる。この最後の表現はトレースであり、それは、行列の対角要素の和である。

$$\gamma^0 \frac{\mathbf{p} + m}{2m} \gamma^0 \frac{\mathbf{p}' + m}{2m} \quad (77)$$

それゆえに、72 式は以下の用に書かれる。

$$\frac{d\bar{\sigma}}{d\Omega} = \frac{4Z^2 \alpha^2 m^2}{2q^4} \text{Tr} \gamma^0 \frac{\mathbf{p} + m}{2m} \gamma^0 \frac{\mathbf{p}' + m}{2m} \quad (78)$$

ここで、奇数の γ 行列のトレースは 0 になることを用いると、78 式は、以下のようになる、

$$\frac{d\bar{\sigma}}{d\Omega} = \frac{Z^2 \alpha^2}{2q^4} [\text{Tr} \gamma^0 \mathbf{p} \gamma^0 \mathbf{p}' + m^2 \text{Tr}(\gamma^0)^2] \quad (79)$$

さらに、

$$\text{Tr} \phi_1 \cdots \phi_n = a_1 \cdot a_2 \text{Tr} \phi_3 \cdots \phi_n - a_1 \cdot a_3 \text{Tr} \phi_2 \phi_4 \cdots \phi_n + \cdots + a_1 \cdot a_n \text{Tr} \phi_2 \cdots \phi_{n-1}$$

特に、

$$\text{Tr} \phi_1 \phi_2 \phi_3 \phi_4 = 4[a_1 \cdot a_2 \cdot a_3 \cdot a_4 + a_1 \cdot a_4 \cdot a_2 \cdot a_3 - a_1 \cdot a_3 \cdot a_2 \cdot a_4] \quad (80)$$

また、

$$\text{Tr} 1 = 4$$

$$\text{Tr} \phi \psi = \text{Tr} \psi \phi = \frac{1}{2} \text{Tr}(\phi \psi + \psi \phi) = a \cdot b \text{Tr} 1 \quad (81)$$

を用いると、最終的な答えが以下のように得られる。

$$\frac{d\bar{\sigma}}{d\Omega} = \frac{Z^2 \alpha^2}{2q^4} (8\epsilon_p \epsilon_{p'} - 4\mathbf{p} \cdot \mathbf{p}' + 4m^2) \quad (82)$$

微分散乱断面積は、散乱エネルギー $\epsilon = \epsilon_p = \epsilon_{p'}$ と散乱角 θ で表現できる。力学的な関係を用いて、

$$\mathbf{p} \cdot \mathbf{p}' = \epsilon^2 - p^2 \cos \theta = m^2 + 2\beta^2 \epsilon^2 \sin^2 \frac{\theta}{2} \quad (83)$$

$$q^2 = 4p^2 \sin^2 \frac{\theta}{2} \quad (84)$$

よって、

$$\frac{d\bar{\sigma}}{d\Omega} = \frac{Z^2\alpha^2}{4p^2\beta^2 \sin^4 \frac{\theta}{2}} (1 - \beta^2 \sin^2 \frac{\theta}{2}) \quad (85)$$

これが Mott 散乱断面積の式である。また、 $\beta \rightarrow 0$ で Rutherford 散乱断面積となる。 $\beta = \frac{v}{c}$ は無次元量の速さ、 θ は散乱角である。

以上のことから電気伝導度と熱伝導度の式を変形し、 \hbar, c, k_B を戻して、

$$\frac{1}{\sigma} = \frac{4e^2 Z \epsilon_e}{3\pi n_e \hbar^3 c^4} \int_0^{2p_e} dq q^3 \frac{1 - \hbar q^2 c^2 / 4\epsilon_e^4}{|q^2 \epsilon(q, 0)|^2} S(q) \quad (86)$$

$$\frac{1}{\kappa} = \frac{4e^2 Z \epsilon_e}{n_e \pi^3 \hbar^3 c^4 k_B^2 T} \int_0^{2p_e} dq q^3 \frac{1 - \hbar q^2 c^2 / 4\epsilon_e^4}{|q^2 \epsilon(q, 0)|^2} S(k) \quad (87)$$

を得る。

2.4 Itoh, Mitake, Iyetomi, and Ichimaru 1983

Itoh, Mitake, Iyetomi, and Ichimaru (1983) の論文において、二つの進歩が見られた。一つは、Jancovici の誘電関数を用いていること。二つ目に、正確な液体構造因子を導入したことである。

2.4.1 誘電関数

誘電関数とは、電子遮蔽を考慮した関数である。電子遮蔽とは、イオンによるクーロン場が周りの電子ガスによって遮蔽され、イオンから比較的離れた位置を通過する電子には、クーロン場が見えにくくなる効果で、小さな運動量移行を持つ電子からの寄与を抑える。この論文では、相対論を考慮した縮退電子の誘電関数を取り入れた。(Jancovici 1962)

$$\begin{aligned} \epsilon(k, 0) = 1 + \frac{k_{TF}^2}{k^2} \left[\frac{2}{3}(1+b^2)^{\frac{1}{2}} - \frac{2q^2b}{3} \sinh^{-1}b \right. \\ \left. + (1+b^2)^{\frac{1}{2}} \frac{b^2+1-3q^2b^2}{6qb^2} \ln \left| \frac{1+q}{1-q} \right| + \frac{2q^2b^2-1}{6qb^2} (1+q^2b^2)^{\frac{1}{2}} \ln \left| \frac{q(1+b^2)^{\frac{1}{2}} + (1+q^2b^2)^{\frac{1}{2}}}{q(1+b^2)^{\frac{1}{2}} - (1+q^2b^2)^{\frac{1}{2}}} \right| \right] \end{aligned} \quad (88)$$

これが Jancovi の誘電関数である。ここで、 $k_{TF} = (12\pi m_e n_e)^{\frac{1}{2}} e / (\hbar k_F)$ は、非相対論的な電子におけるトーマス - フェルミ波数であり、 $q = k / (2k_F)$ は、 $2k_F$ 単位の運動量移行、 b は無次元の相対論的パラメータ

$$b = \frac{\hbar k_F}{m_e c} = \frac{1}{137.036} \left(\frac{9\pi}{4} \right)^{\frac{1}{3}} r_s^{-1} \equiv \alpha \left(\frac{9\pi}{4} \right)^{\frac{1}{3}} r_s^{-1} \quad (89)$$

そして、 r_s は電子密度パラメータで以下のように与えられる。

$$r_s = 1.388 \times 10^{-2} (A/Z)^{1/3} \rho_6^{-1/3} \quad (90)$$

この電子遮蔽の寄与を示したのが図 2.4.1 である。 q が 1 に近づくにつれて、電子遮蔽の寄与がほとんどないことを表している。具体的な値で言うと、 $q = 0.1 (k = k_F/5)$ の時 $\epsilon(k_F, 0) = 1.369$ 、 $q = 0.5 (k = k_F)$ の時 $\epsilon(k_F, 0) = 1.012$ 、 $q = 1 (k = 2k_F)$ の時 $\epsilon(2k_F, 0) = 1.001$ となる。

次にこの Jancovici の誘電関数の極限形を考えよう。

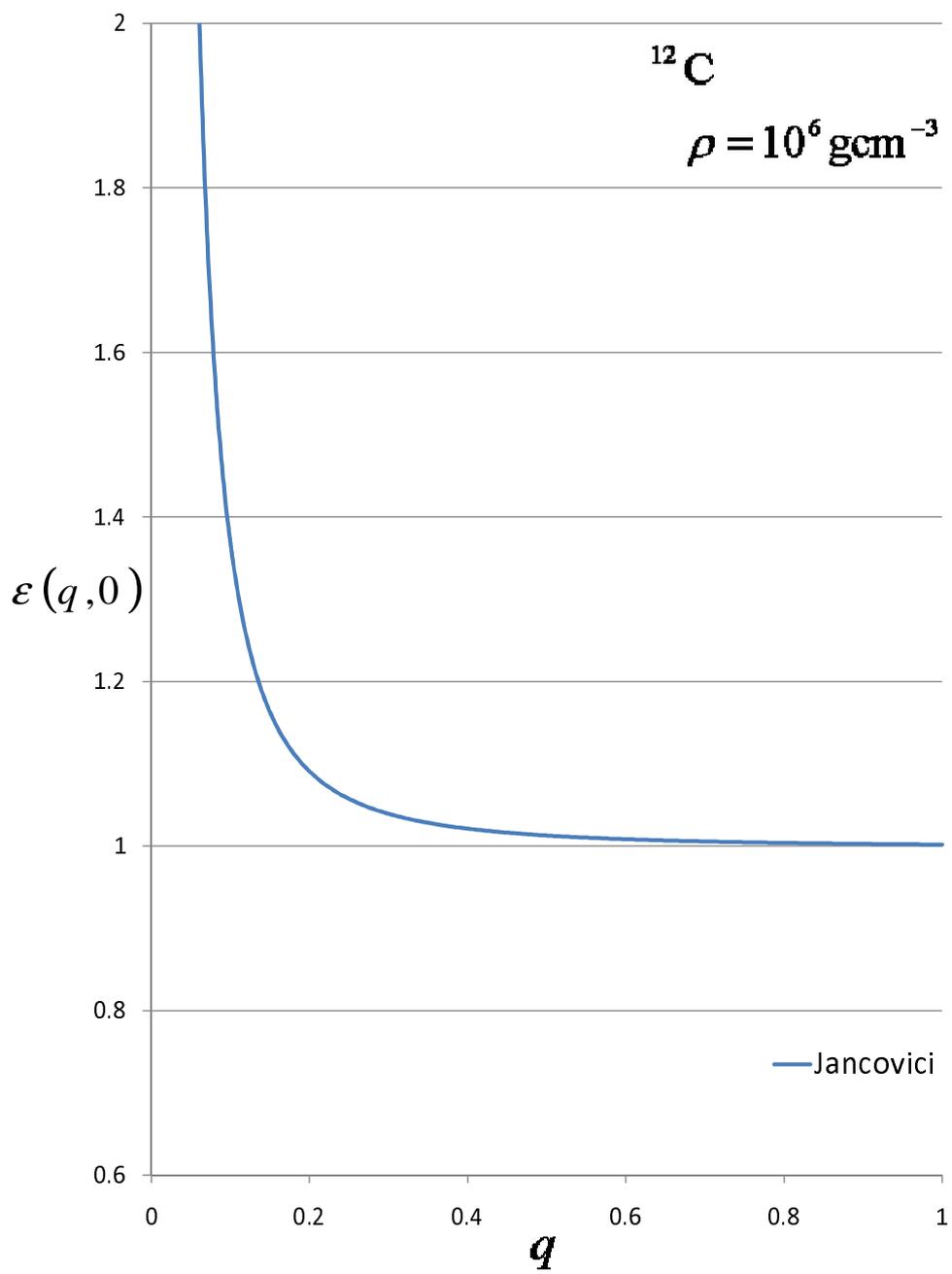


図 10 電子遮蔽の寄与

非相対論的極限 b に関し二次まで展開すると、

$$\epsilon(k, 0) = 1 + \frac{k_{TF}^2}{k^2} \left\{ \frac{1}{2} + \frac{1}{4q}(1-q^2) \ln \left| \frac{1+q}{1-q} \right| \right\} + b^2 \frac{k_{TF}^2}{k^2} \left\{ \frac{3}{8}(1-q^2) + \frac{1}{16q}(1-4q^2+3q^4) \ln \left| \frac{1+q}{1-q} \right| \right\} \quad (91)$$

$b \rightarrow 0$ の極限をとると、これは Lindhard の誘電関数

$$\epsilon(k, 0) = 1 + \frac{k_{TF}^2}{k^2} \left\{ \frac{1}{2} + \frac{1}{4q}(1-q^2) \ln \left| \frac{1+q}{1-q} \right| \right\} \quad (92)$$

に帰着する。

長波長極限 $q \rightarrow 0$ の極限をとると、

$$\epsilon(k, 0) = 1 + \frac{k_{TF}^2}{k^2} (1+b^2)^{\frac{1}{2}} \quad (93)$$

これは相対論的な Thomas-Fermi の誘電関数である。Flowers and Itoh (1976) で用いられていた誘電関数は、この Thomas-Fermi の誘電関数である。

2.4.2 電気伝導度、熱伝導度

Flowers and Itoh 1976 において 相対論的に拡張された電気伝導度と熱伝導度の式を、 Z 依存性と ρ 依存性が分かるように変換すると、以下ようになる。

$$\sigma = 8.693 \times 10^{21} \frac{\rho_6}{A} \frac{1}{(1+b^2)\langle S \rangle} \text{ s}^{-1} \quad (94)$$

$$\kappa = 2.363 \times 10^{17} \frac{\rho_6 T_8}{A} \frac{1}{(1+b^2)\langle S \rangle} \text{ ergscm}^{-1} \text{ s}^{-1} \text{ K}^{-1} \quad (95)$$

$$\begin{aligned} \langle S \rangle &= \int_0^1 d\left(\frac{k}{2k_F}\right) \left(\frac{k}{2k_F}\right)^3 \frac{S(k/2k_F)}{[(k/2k_F)^2 \epsilon(k/2k_F, 0)]^2} \\ &\quad - \frac{b^2}{1+b^2} \int_0^1 d\left(\frac{k}{2k_F}\right) \left(\frac{k}{2k_F}\right)^5 \frac{S(k/2k_F)}{[(k/2k_F)^2 \epsilon(k/2k_F, 0)]^2} \\ &\equiv \langle S_{-1} \rangle - \frac{b^2}{1+b^2} \langle S_{+1} \rangle \end{aligned} \quad (96)$$

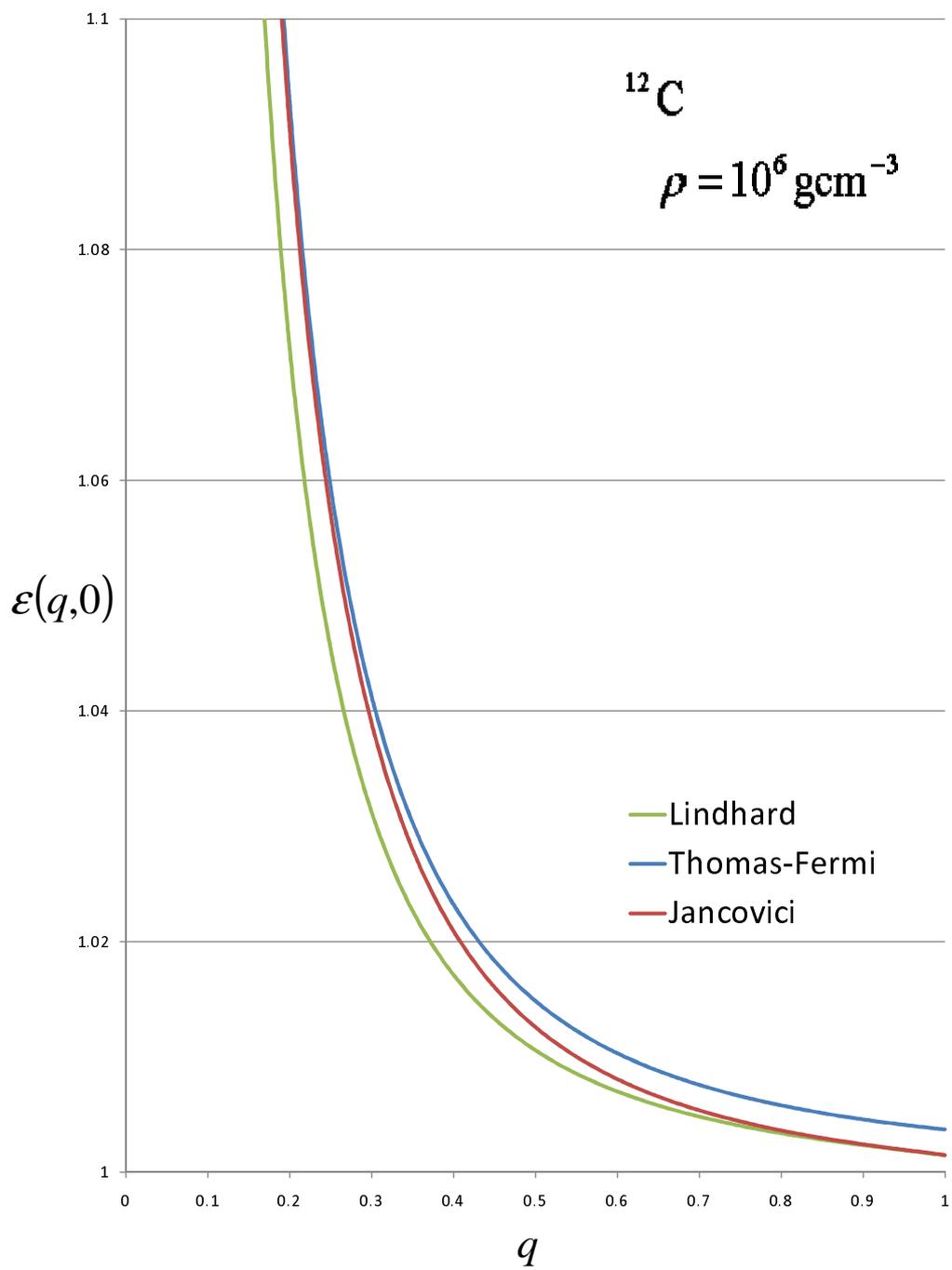


図 11 Thomas-Fermi、Lindhard、Jancovici の誘電関数の比較

2.4.3 構造因子

この論文で用いられる構造因子は、Iyetomi and Ichimaru (1982) によって improved hypernetted-chain (IHNC) scheme から計算されているものである。

解析的方法として、古典液体の研究において発展した積分方程式であり、とりわけ OCP の記述に有効であることが知られていたのが Hypernetted Chain(HNC) 方程式である。様々な解析的理論の中で Hypernetted Chain(HNC) 近似法が荷電粒子系の場合には優れていることが、計算機実験結果との比較などから知られている。しかし、相関関数の形状、内部エネルギーの Γ に関するふるまい、圧縮率に関する検討などから改良すべき多くの点も指摘されていた。

この HNC 方程式の短距離相関を改良する研究が Iyetomi and Ichimaru 1982 において行われた。Iyetomi and Ichimaru では、OCP 系を例にとり、新しい HNC 近似法を発展させている。それはプラズマ理論の枠組みの中で系統的に行われ、また応用面から計算の簡便さも考慮されている。 $\Gamma \ll 1$ の領域においても計算機実験とほとんど変わらぬ結果が得られた積分が Improved HNC(IHNC) である。

その構造因子は、Galam-Hansen(1976) の Monte-Carlo の値と比較されている。Monte Carlo 法のような計算機実験は、強結合 OCP の解明のための有効な方法であり、Brush-Sahlin-Teller(1966), Hansen(1973), Slattery-Doolen-Dewitt(1980) らにより行われ、内部エネルギー、動径分布関数 $g(r)$ 、あるいは静的構造因子 $S(k)$ などが求められている、これらの結果とよく一致する値が得られている。

$S(k)$ の値はこの IHNC scheme で計算された値を、表 1 に Γ の値によつての無次元の波数 ak の関数として載せている。

長波長領域 $ak < 1$ では、下の式 (Ichimaru 1982) を用いる。

$$S(k) = \left[\frac{3\Gamma}{(ak)^2} + \frac{1}{k_B T} \left(\frac{\partial P}{\partial n} \right)_T \right]^{-1} \quad (97)$$

$$\frac{1}{k_B T} \left(\frac{\partial P}{\partial n} \right)_T = 0.73317 - 9.39890\Gamma + 0.34141\Gamma^{1/4} + 0.05484\Gamma^{-1/4} \quad (98)$$

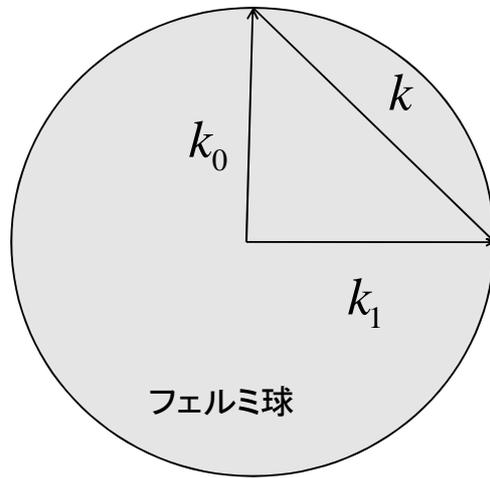
ak	$\Gamma = 1$	$\Gamma = 3$	$\Gamma = 6$	$\Gamma = 10$	$\Gamma = 20$	$\Gamma = 40$	$\Gamma = 80$	$\Gamma = 100$	$\Gamma = 125$	$\Gamma = 160$
1.00	0.267	0.111	0.059	0.037	0.190	0.010	0.005	0.004	0.003	0.002
1.20	0.353	0.159	0.088	0.055	0.029	0.015	0.008	0.006	0.005	0.004
1.40	0.437	0.214	0.123	0.079	0.042	0.022	0.011	0.009	0.007	0.006
1.60	0.516	0.277	0.166	0.109	0.006	0.032	0.017	0.013	0.011	0.009
1.80	0.588	0.345	0.217	0.147	0.083	0.045	0.024	0.019	0.015	0.012
2.00	0.653	0.417	0.277	0.194	0.113	0.062	0.033	0.027	0.022	0.017
2.20	0.709	0.492	0.346	0.252	0.152	0.086	0.047	0.038	0.031	0.025
2.40	0.757	0.566	0.423	0.321	0.204	0.120	0.066	0.054	0.045	0.036
2.60	0.799	0.637	0.506	0.403	0.272	0.166	0.094	0.078	0.064	0.052
2.80	0.833	0.704	0.593	0.497	0.359	0.232	0.136	0.113	0.094	0.076
3.00	0.863	0.766	0.680	0.601	0.470	0.325	0.200	0.168	0.140	0.114
3.20	0.887	0.820	0.765	0.710	0.604	0.456	0.299	0.255	0.215	0.178
3.40	0.907	0.866	0.842	0.817	0.757	0.636	0.458	0.399	0.344	0.290
3.60	0.923	0.905	0.908	0.916	0.919	0.867	0.711	0.643	0.572	0.496
3.80	0.937	0.936	0.962	0.999	1.068	1.129	1.091	1.045	0.978	0.894
4.00	0.948	0.960	1.004	1.062	1.185	1.367	1.564	1.611	1.626	1.617
4.20	0.958	0.979	1.032	1.102	1.255	1.510	1.925	2.098	2.289	2.509
4.40	0.965	0.993	1.050	1.123	1.276	1.529	1.953	2.134	2.364	2.645
4.60	0.972	1.002	1.060	1.128	1.260	1.454	1.721	1.814	1.917	2.020
4.80	0.977	1.009	1.062	1.121	1.221	1.338	1.436	1.454	1.454	1.440
5.00	0.981	1.013	1.060	1.106	1.172	1.218	1.201	1.177	1.135	1.081
5.20	0.984	1.015	1.055	1.089	1.122	1.113	1.031	0.988	0.934	0.871
5.40	0.987	1.016	1.048	1.069	1.075	1.029	0.914	0.863	0.809	0.747
5.60	0.990	1.016	1.040	1.051	1.036	0.966	0.836	0.785	0.732	0.673
5.80	0.991	1.015	1.032	1.034	1.004	0.921	0.789	0.739	0.689	0.634

ak	$\Gamma = 1$	$\Gamma = 3$	$\Gamma = 6$	$\Gamma = 10$	$\Gamma = 20$	$\Gamma = 40$	$\Gamma = 80$	$\Gamma = 100$	$\Gamma = 125$	$\Gamma = 160$
6.00	0.993	1.014	1.025	1.020	0.980	0.892	0.765	0.720	0.672	0.622
6.20	0.994	1.012	1.019	1.008	0.963	0.877	0.762	0.722	0.680	0.635
6.40	0.995	1.011	1.013	0.999	0.952	0.874	0.775	0.742	0.709	0.673
6.60	0.996	1.010	1.008	0.993	0.947	0.880	0.803	0.779	0.758	0.735
6.80	0.997	1.008	1.005	0.988	0.947	0.893	0.843	0.831	0.822	0.817
7.00	0.998	1.007	1.002	0.986	0.950	0.912	0.891	0.892	0.899	0.913
7.40	0.999	1.005	0.998	0.984	0.964	0.959	0.997	1.023	1.058	1.108
7.80	0.999	1.003	0.996	0.987	0.981	1.004	1.080	1.116	1.157	1.201
8.20	1.000	1.002	0.996	0.991	0.996	1.034	1.114	1.144	1.169	1.188
8.60	1.000	1.001	0.996	0.994	1.006	1.044	1.098	1.111	1.122	1.126
9.00		1.001	0.997	0.998	1.011	1.037	1.050	1.045	1.034	1.019
9.40		1.000	0.998	1.000	1.011	1.022	1.001	0.983	0.960	0.933
9.80		1.000	0.999	1.001	1.009	1.006	0.968	0.946	0.924	0.898
10.20			0.999	1.002	1.006	0.994	0.953	0.936	0.918	0.900
10.60			1.000	1.002	1.002	0.988	0.957	0.949	0.942	0.939
11.00			1.000	1.001	1.000	0.987	0.974	0.976	0.983	0.998
11.40				1.001	0.998	0.989	0.994	1.004	1.018	1.040
11.80				1.001	0.998	0.994	1.011	1.024	1.040	1.058
12.20				1.000	0.998	0.999	1.019	1.030	1.040	1.047
12.60				1.000	0.998	1.002	1.019	1.024	1.026	1.023
13.00					0.999	1.004	1.014	1.013	1.010	1.002
13.80					1.000	1.003	0.998	0.991	0.983	0.973
14.60					1.000	1.000	0.992	0.988	0.985	0.984
15.40						0.999	0.996	0.998	1.003	1.010
16.20						0.999	1.002	1.006	1.010	1.013
17.00						1.000	1.003	1.004	1.004	1.001
17.80						1.000	1.001	0.999	0.996	0.993
18.60							0.999	0.998	0.996	0.995
19.40							0.999	0.999	1.000	1.002
20.20							1.000	1.001	1.002	1.004

表 1 IHNC で得られた構造因子

2.4.4 運動量移行ベクトルの範囲

散乱積分 $\langle S \rangle$ を積分する際の範囲は、 $0 \leq k \leq 2k_F$ であり、イオン系の波数に翻訳する必要がある。イオン系の波数の場合は、 $0 \leq k \leq \frac{2}{a} \left(\frac{9\pi Z}{4} \right)^{\frac{1}{3}}$ となり、 Z によって変化する。 a は、イオン球半径で、 $a = \left(\frac{3}{4\pi n_c} \right)^{\frac{1}{3}}$



Z による積分範囲の違いは、 $Z = 2, 6, 26$ の場合において、後に図 15 に示している。

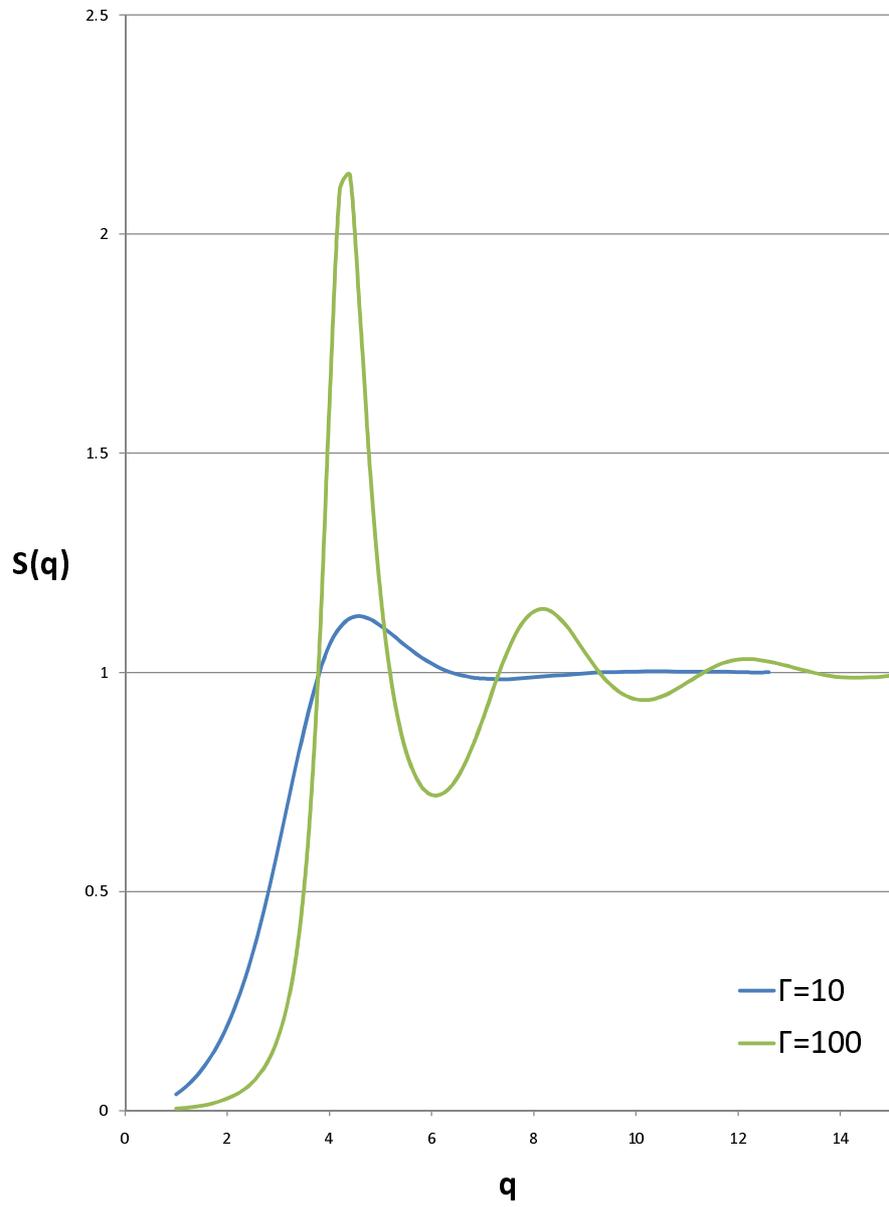


図 12 IHNC による構造因子

2.5 Itoh, Uchida, Sakamoto, Kohyama, and Nozawa 2008

本研究の主な改善点は三つである。一つは、第二ボルン近似項まで計算を行ったこと。二つ目に、有限の原子核サイズ効果を考慮していること。三つ目に、以前と異なる構造因子を用いたことである。

2.5.1 第二ボルン近似

Itoh, Mitake, Iyetomi, and Ichimaru (1983) では、ボルン近似は一次の項までしか計算されていない。本研究で二次の項まで計算することで精度を高めることを期待している。

McKinley and Feshbach 1948; Feshbach 1952 で与えられた第二ボルン近似項まで含めた Mott 散乱断面積は、

$$\sigma = \sigma_R \left[1 - \beta^2 \sin^2 \frac{\theta}{2} + \pi \alpha \sin \frac{\theta}{2} (1 - \sin \frac{\theta}{2}) \right] \quad (99)$$

ここで、 σ_R は Rutherford 散乱断面積である。

これを考慮し、Itoh, Mitake, Iyetomi, and Ichimaru (1983) では、 $\langle S \rangle = \langle S \rangle^{1B}$ であった散乱積分 $\langle S \rangle$ が、本研究においては以下ようになる。

$$\sigma = 8.693 \times 10^{21} \frac{\rho_6}{A} \frac{1}{(1+b^2)\langle S \rangle} \text{ s}^{-1} \quad (100)$$

$$\kappa = 2.363 \times 10^{17} \frac{\rho_6 T_8}{A} \frac{1}{(1+b^2)\langle S \rangle} \text{ ergscm}^{-1} \text{ s}^{-1} \text{ K}^{-1} \quad (101)$$

$$\langle S \rangle = \langle S \rangle^{1B} + \langle S \rangle^{2B} \quad (102)$$

$$\begin{aligned} \langle S \rangle^{1B} &= \int_0^1 d\left(\frac{k}{2k_F}\right) \left(\frac{k}{2k_F}\right)^3 \frac{S(k/2k_F) |f(k/2k_F)|^2}{[(k/2k_F)^2 \epsilon(k/2k_F, 0)]^2} \\ &\quad - \frac{b^2}{1+b^2} \int_0^1 d\left(\frac{k}{2k_F}\right) \left(\frac{k}{2k_F}\right)^5 \frac{S(k/2k_F) |f(k/2k_F)|^2}{[(k/2k_F)^2 \epsilon(k/2k_F, 0)]^2} \\ &\equiv \langle S_{-1} \rangle - \frac{b^2}{1+b^2} \langle S_{+1} \rangle \end{aligned} \quad (103)$$

$$\begin{aligned}
\langle S \rangle^{2B} &= \pi Z \alpha \frac{b}{(1+b^2)^{1/2}} \\
&\times \left(\int_0^1 d\left(\frac{k}{2k_F}\right) \left(\frac{k}{2k_F}\right)^4 \frac{S(k/2k_F) |f(k/2k_F)|^2}{[(k/2k_F)^2 \epsilon(k/2k_F, 0)]^2} \right. \\
&\quad \left. - \int_0^1 d\left(\frac{k}{2k_F}\right) \left(\frac{k}{2k_F}\right)^5 \frac{S(k/2k_F) |f(k/2k_F)|^2}{[(k/2k_F)^2 \epsilon(k/2k_F, 0)]^2} \right) \\
&\equiv \pi Z \alpha \frac{b}{(1+b^2)^{1/2}} (\langle S_0 \rangle - \langle S_{+1} \rangle) \tag{104}
\end{aligned}$$

2.5.2 有限の原子核サイズ効果

Itoh, Mitake, Iyetomi, and Ichimaru (1983) では、有限の原子核サイズ効果が導入されていない。しかし、電子のド・ブロイ波長が原子核に比べて十分に小さい場合（すなわち電子の運動量移行が大きい場合）、電子は原子核の内部構造を見ることになる。このような場合にはイオンの大きさを考慮しなければならない。これを有限の原子核サイズ効果と言う。本研究では、この効果を導入することで精度を高める。この効果は点電荷によるクーロン場を緩和し、大きな運動量移行を持つ電子からの寄与を抑える。電荷が一葉な球形に分布していると仮定し、それをフーリエ変換すると atomic form factor $f(q)$ が次のように求められる。

$$f(q) = -3 \frac{(2k_F r_c q) \cos(2k_F r_c q) - \sin(2k_F r_c q)}{(2k_F r_c q)^3} \tag{105}$$

ここで、 r_c も neutron star matter の場合、neutron-drip の前後で変化する。すなわち、

$$r_c = 1.15 \times 10^{-13} A^{\frac{1}{3}} \text{cm} (\rho < 4.3 \times 10^{11} \text{gcm}^{-3}) \tag{106}$$

$$r_c = 1.83 \times 10^{-13} Z^{\frac{1}{3}} \text{cm} (\rho > 4.3 \times 10^{11} \text{gcm}^{-3}) \tag{107}$$

Yakovlev and Upin (1981) は、これを 1 としている。その比較は、後述する。

2.5.3 構造因子

本研究では、Young et al.(1991) によって計算された古典的な一成分プラズマの構造因子を用いている。これは、 $\Gamma \geq 1$ の時においてである。

$0.1 \leq \Gamma \leq 0.2$ の場合は、以下のような *Debye - Hückel* の式を用いる。

$$S(k) = [1 + \frac{3\Gamma}{(ak)^2}]^{-1} \quad (108)$$

既に述べた Iyetomi and Ichimaru の IHNC 構造因子 $S(k)$ と比較する。

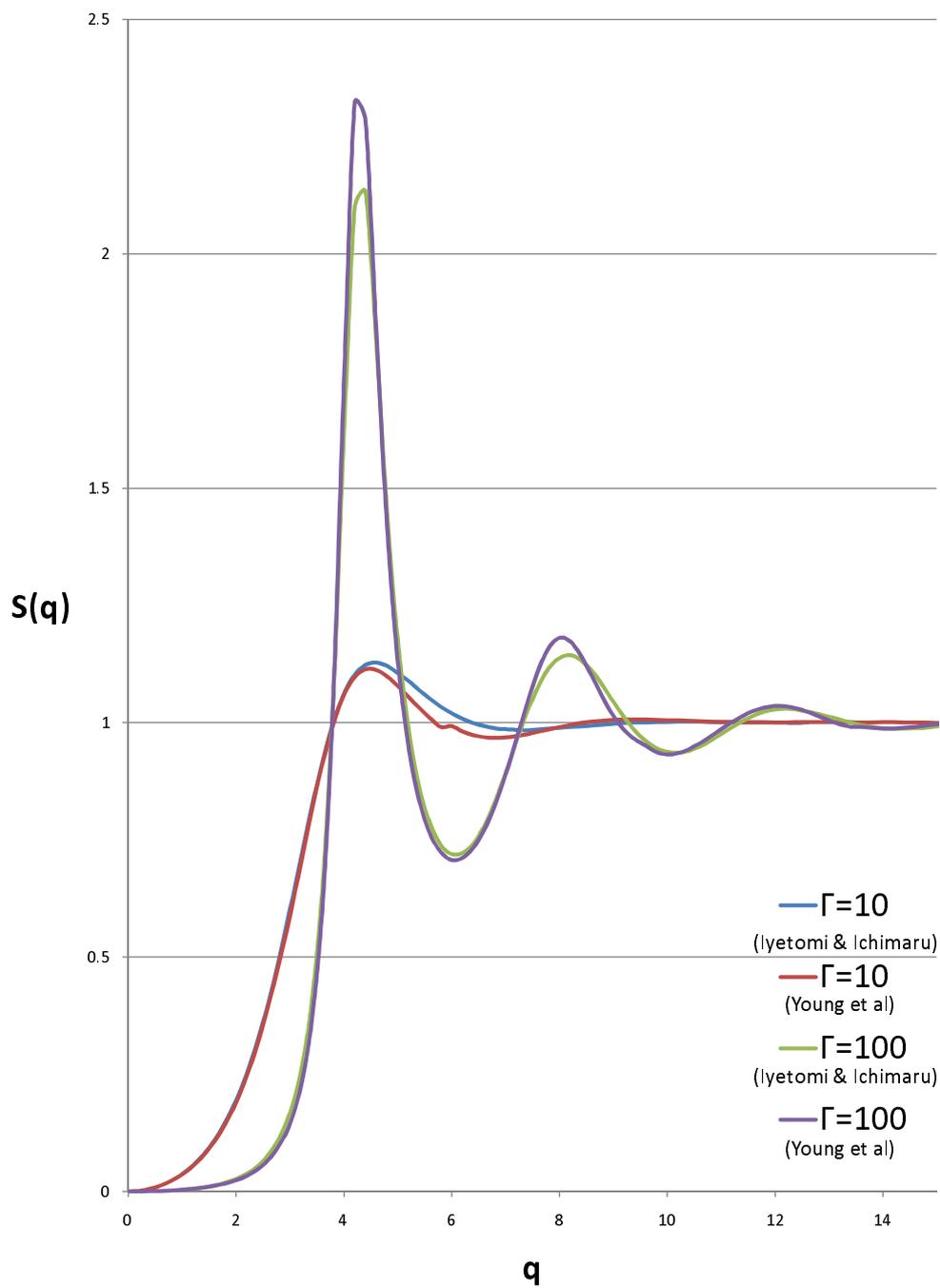


図 13 二つの構造因子の比較

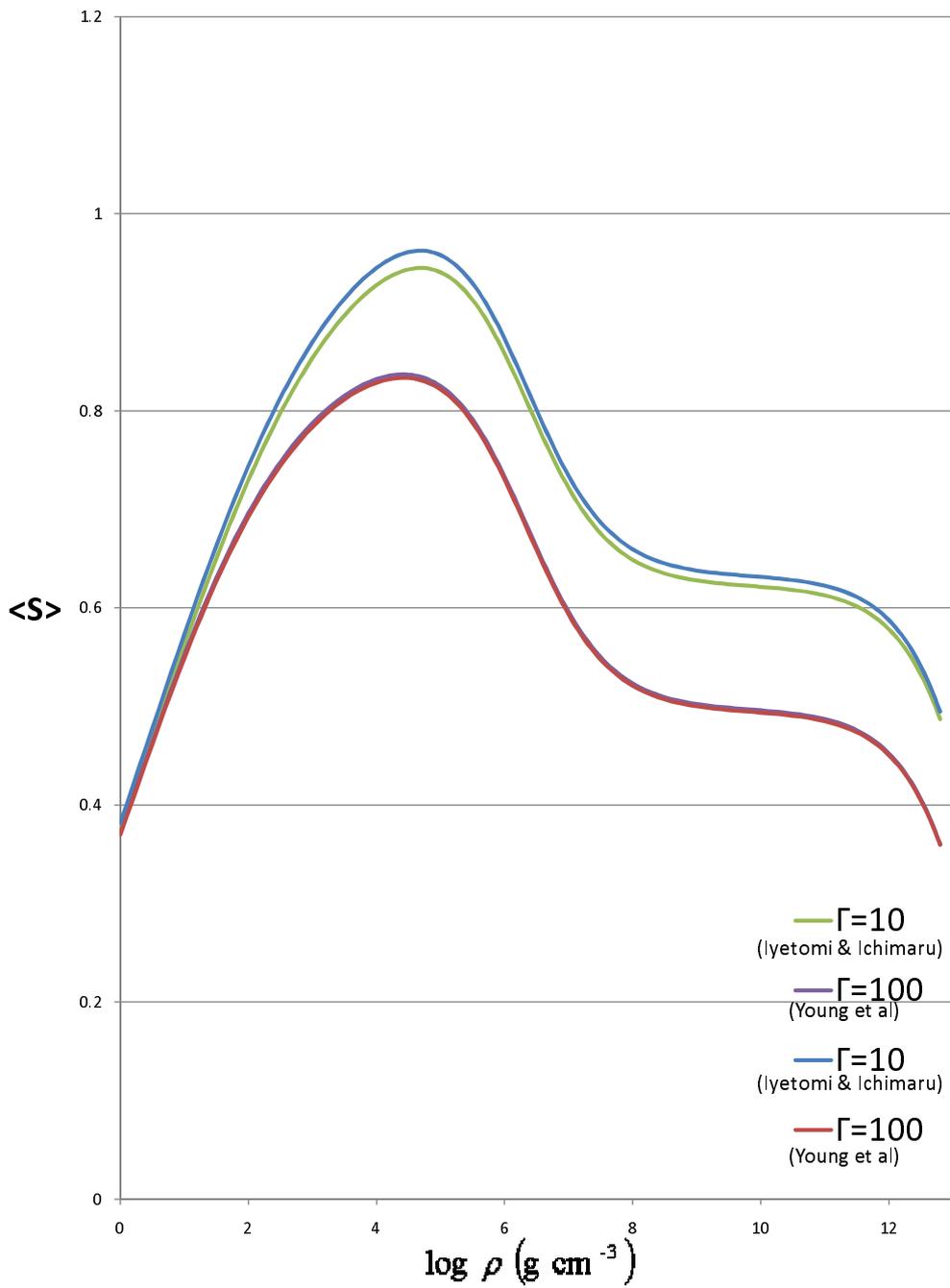


図 14 二つの構造因子の比較

以上の理論に基づき実際に計算した結果をこれ以降で見たい。

まず $\langle S_0 \rangle$, $\langle S_{-1} \rangle$, $\langle S_{+1} \rangle$ の値を、 ^{12}C と ^{56}Fe の場合において図で示した。

次に、散乱積分 $\langle S \rangle$ の計算は、 ^1H , ^4He , ^{12}C , ^{14}N , ^{16}O , ^{20}Ne , ^{24}Mg , ^{28}Si , ^{32}S , ^{40}Ca , ^{56}Fe の場合において計算を行った。これらの結果を図 22 から図 32 に示した。

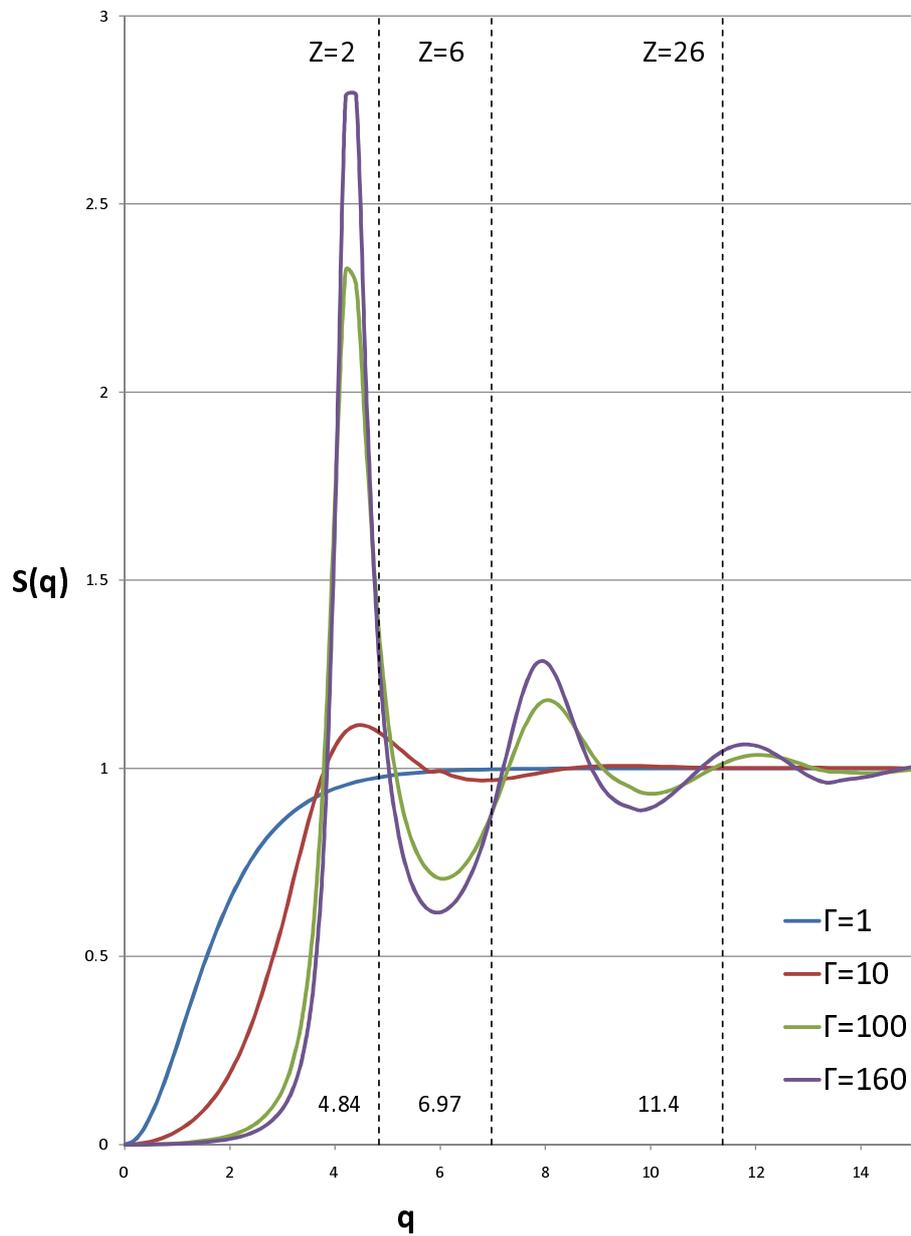


図 15 運動量移行ベクトルの範囲

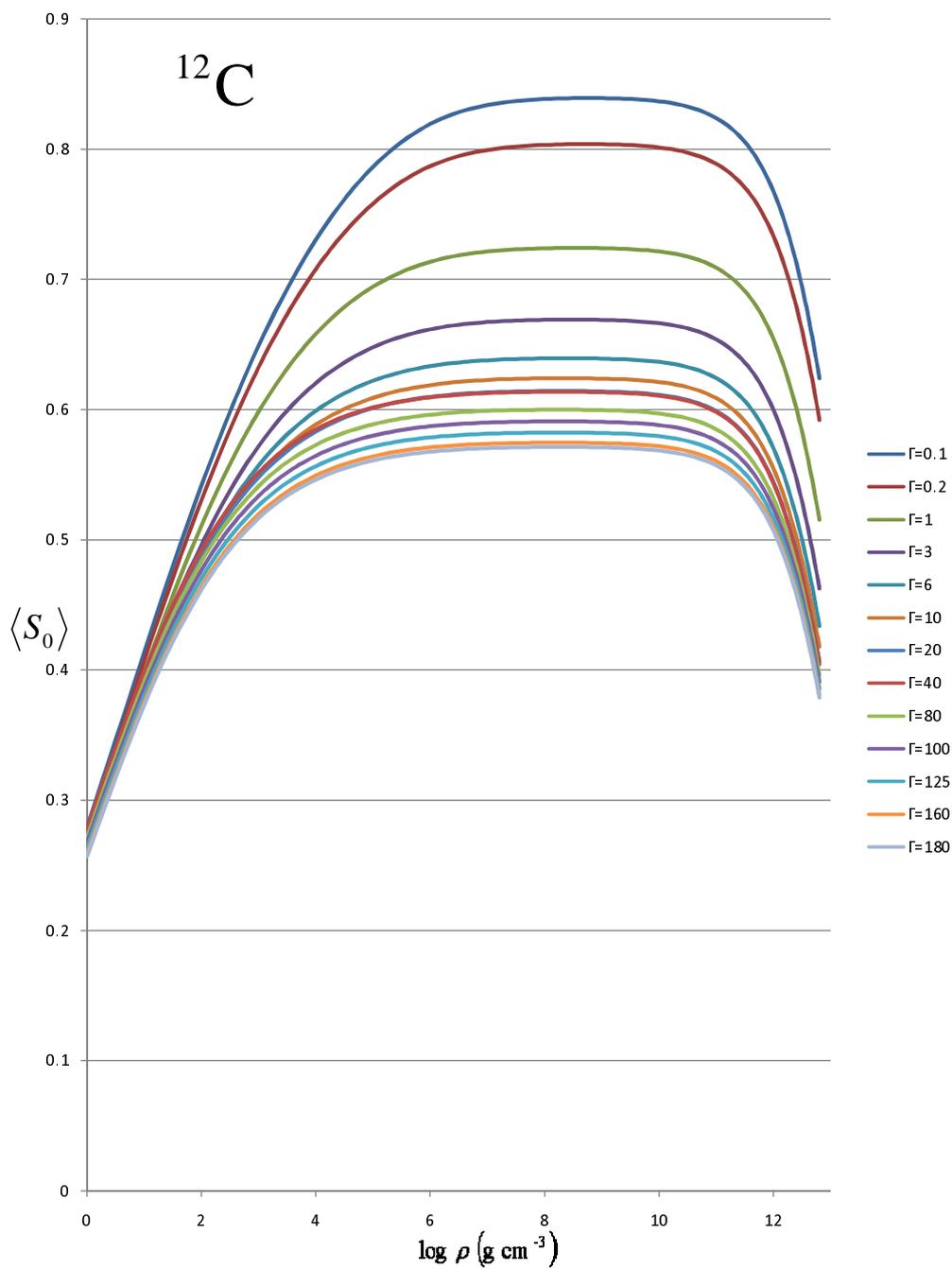


図 16 $\langle S_0 \rangle$ の値 ^{12}C

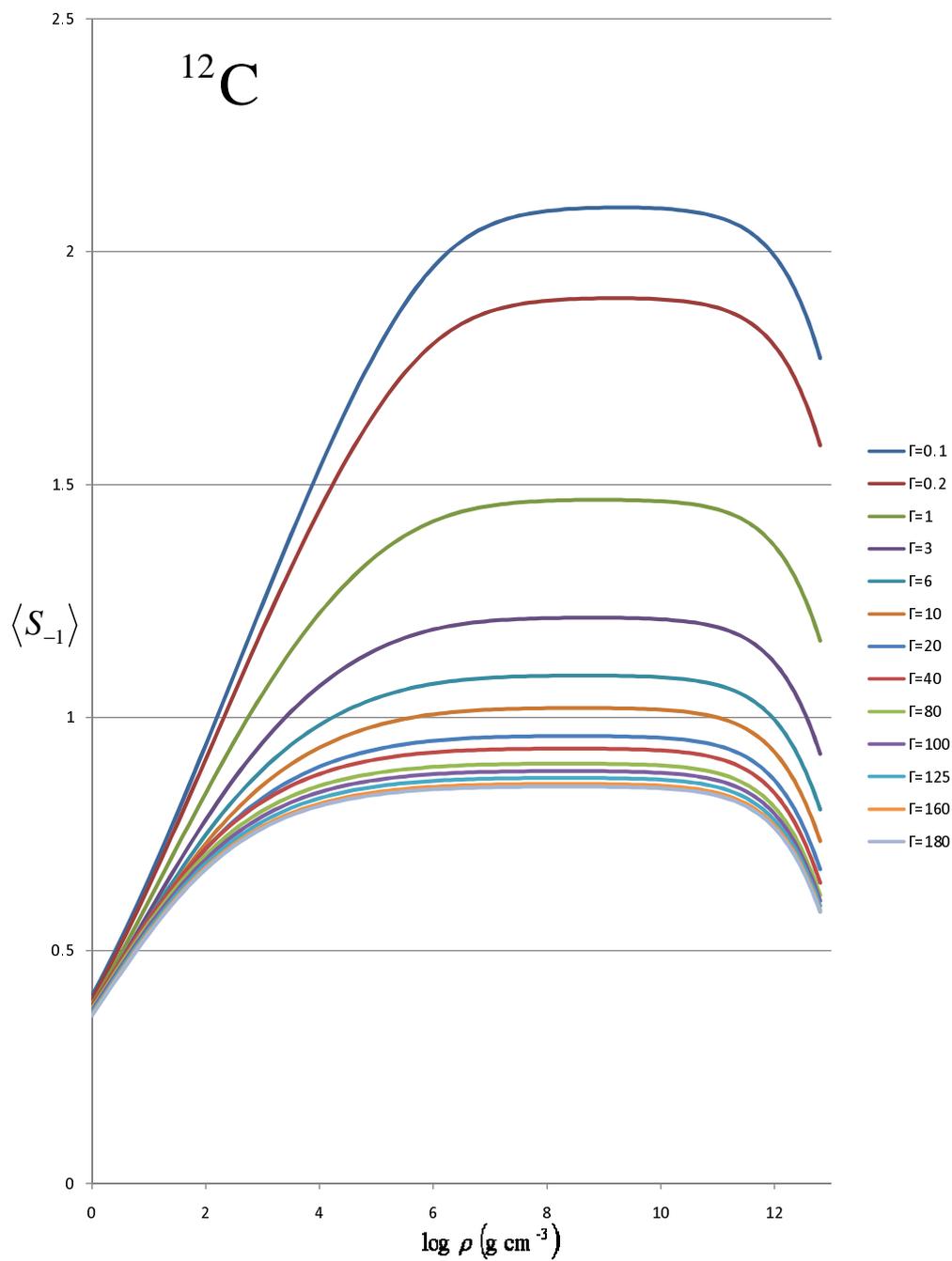


図 17 $\langle S_{-1} \rangle$ の値 ^{12}C

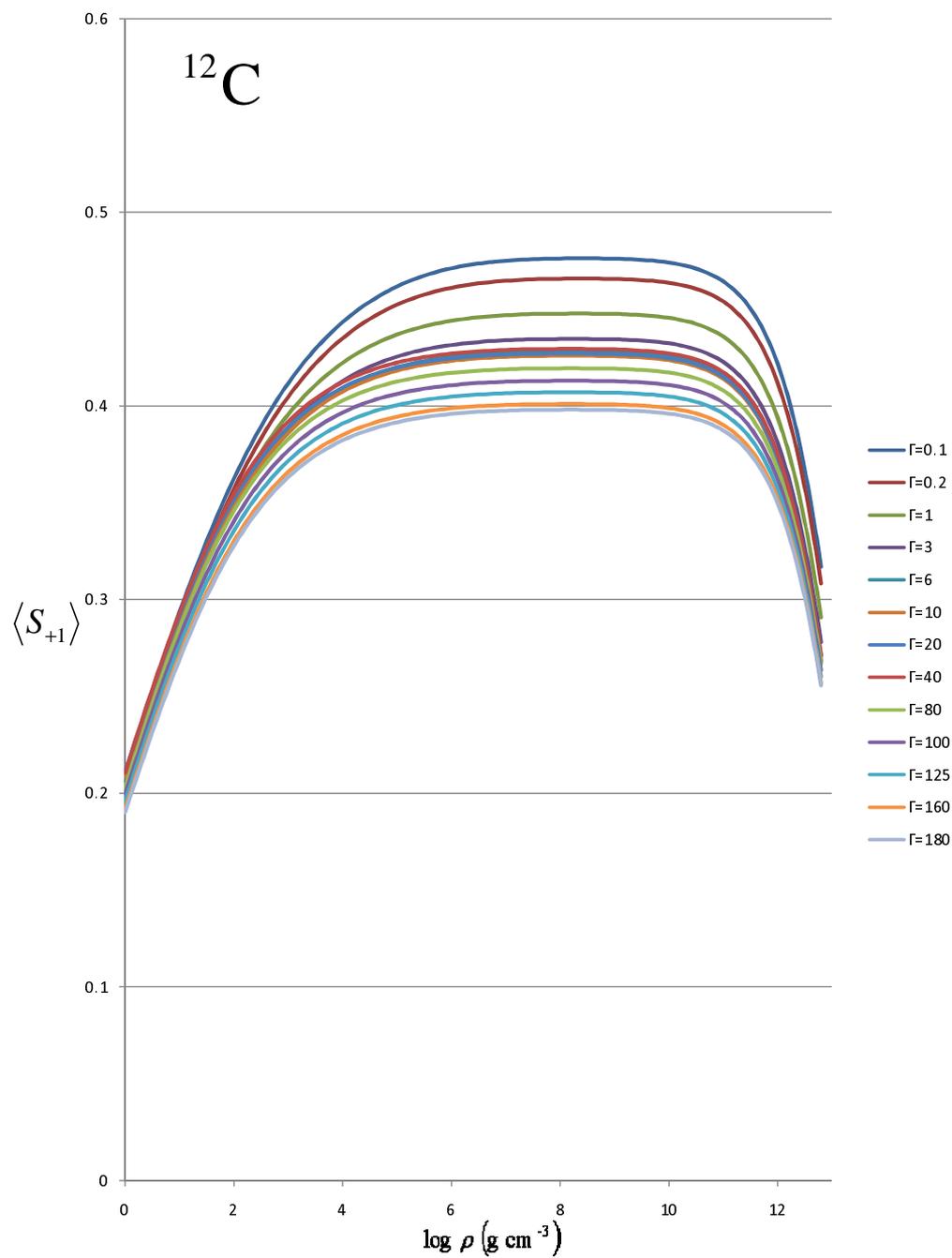


図 18 $\langle S_{+1} \rangle$ の値 ^{12}C

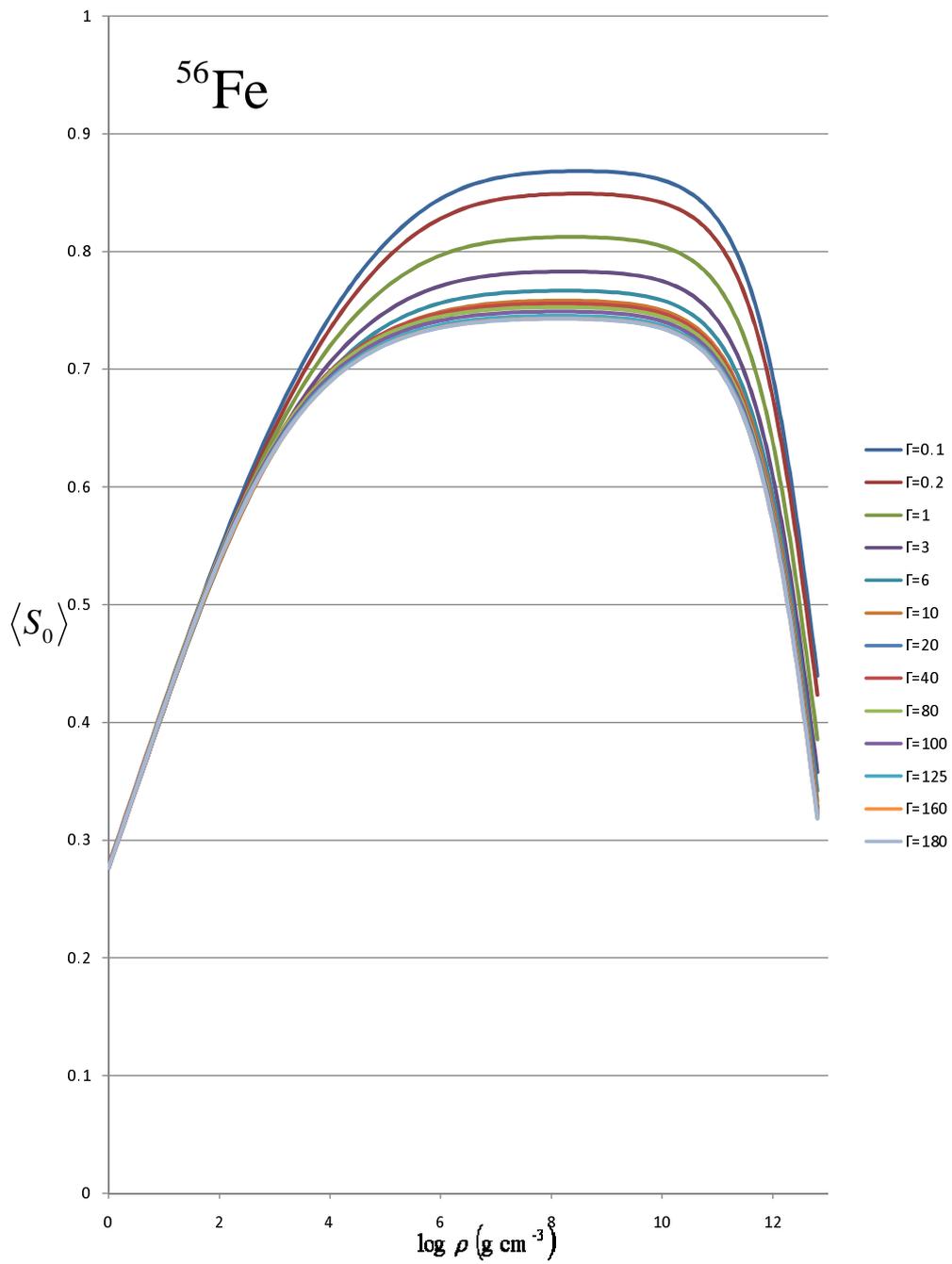


図 19 $\langle S_0 \rangle$ の値 ^{56}Fe

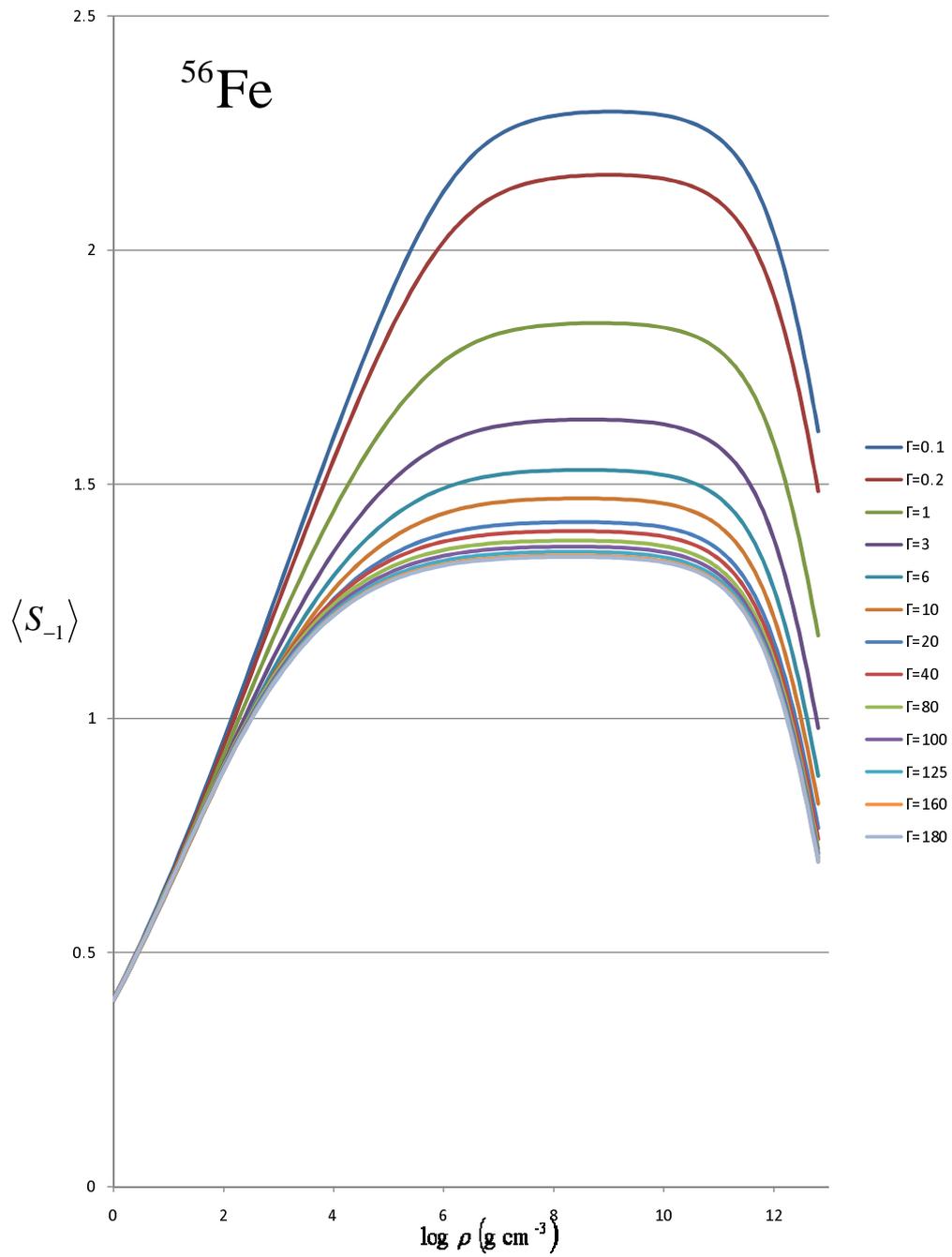


図 20 $\langle S_{-1} \rangle$ の値 ^{56}Fe

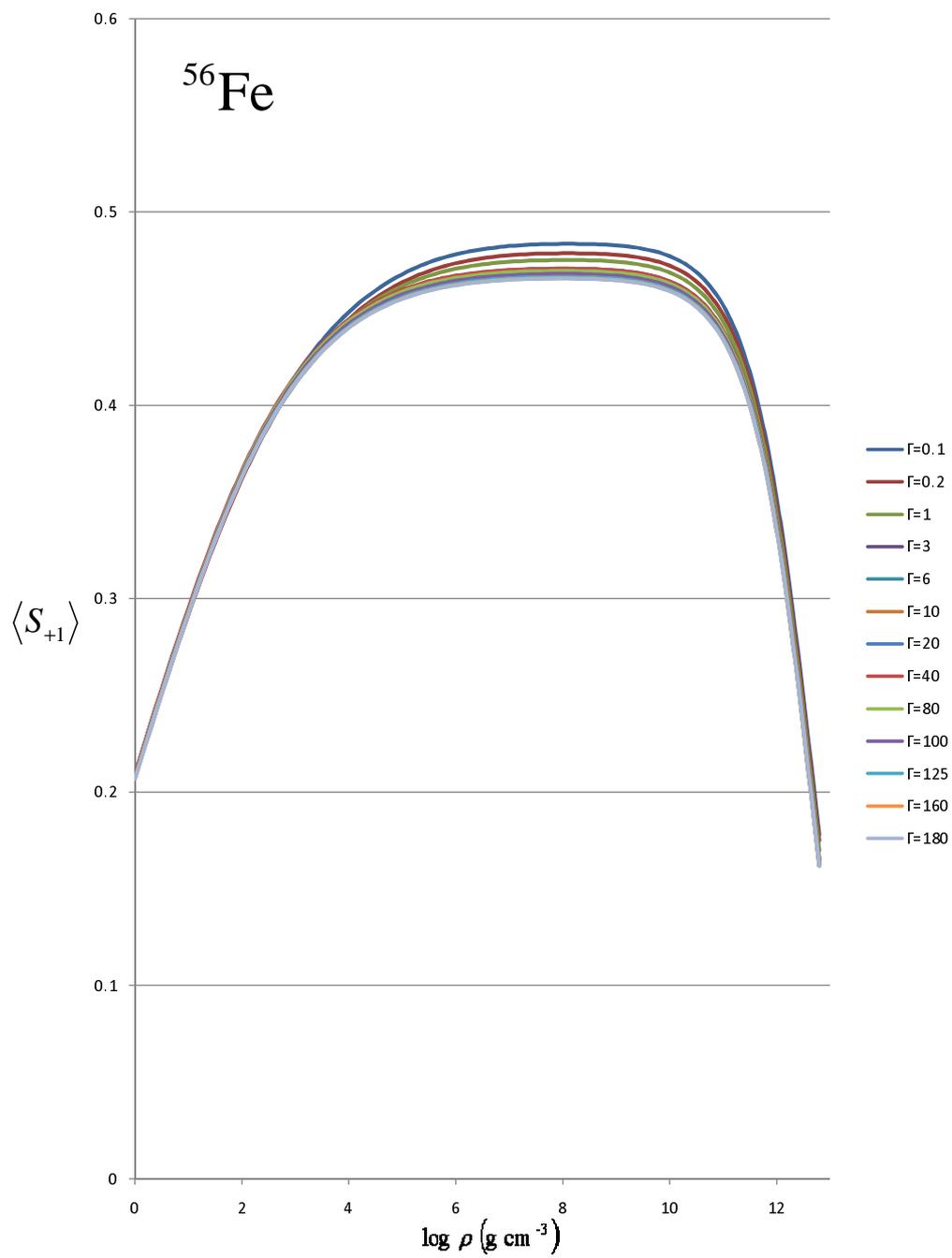


図 21 $\langle S_{+1} \rangle$ の値 ^{56}Fe

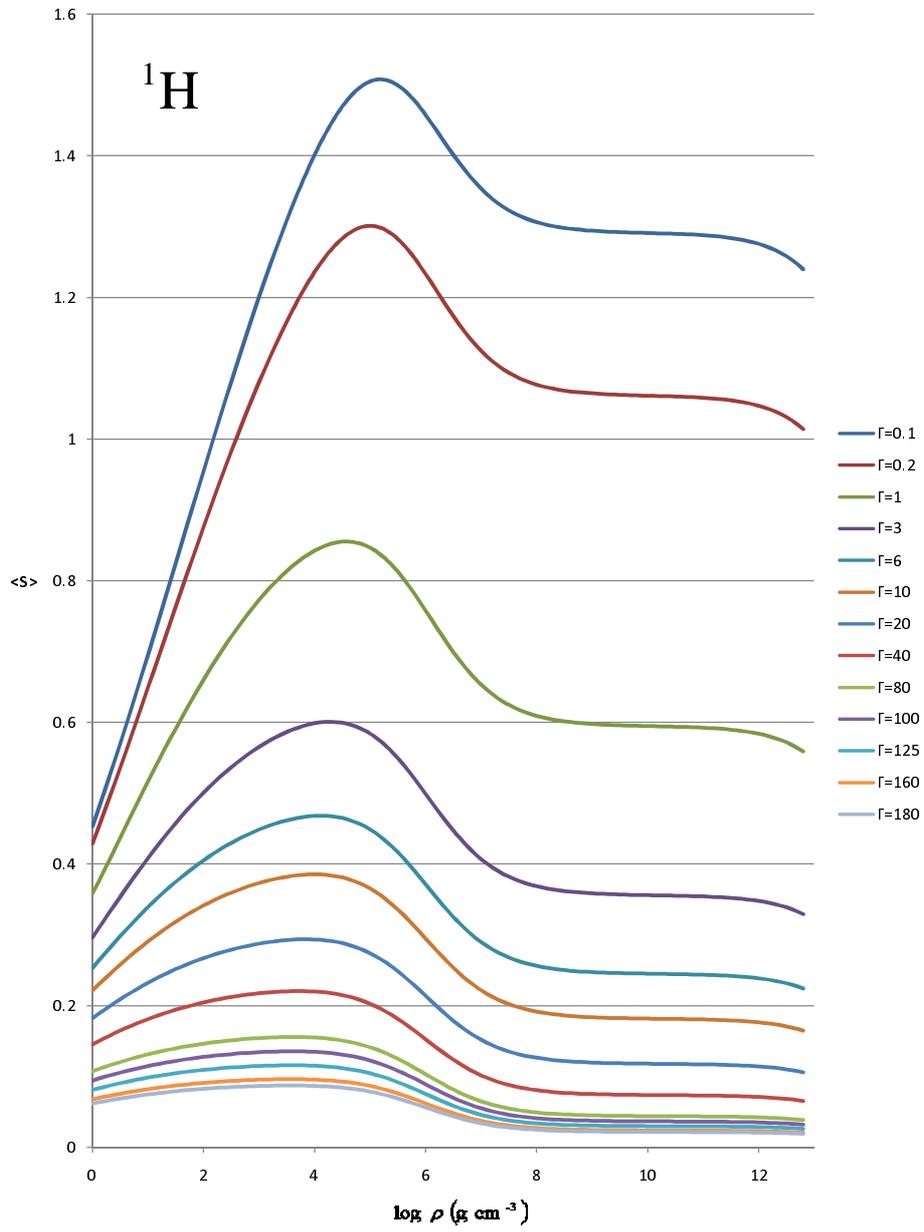


図 22 $\langle S \rangle$ の値 ${}^1\text{H}$

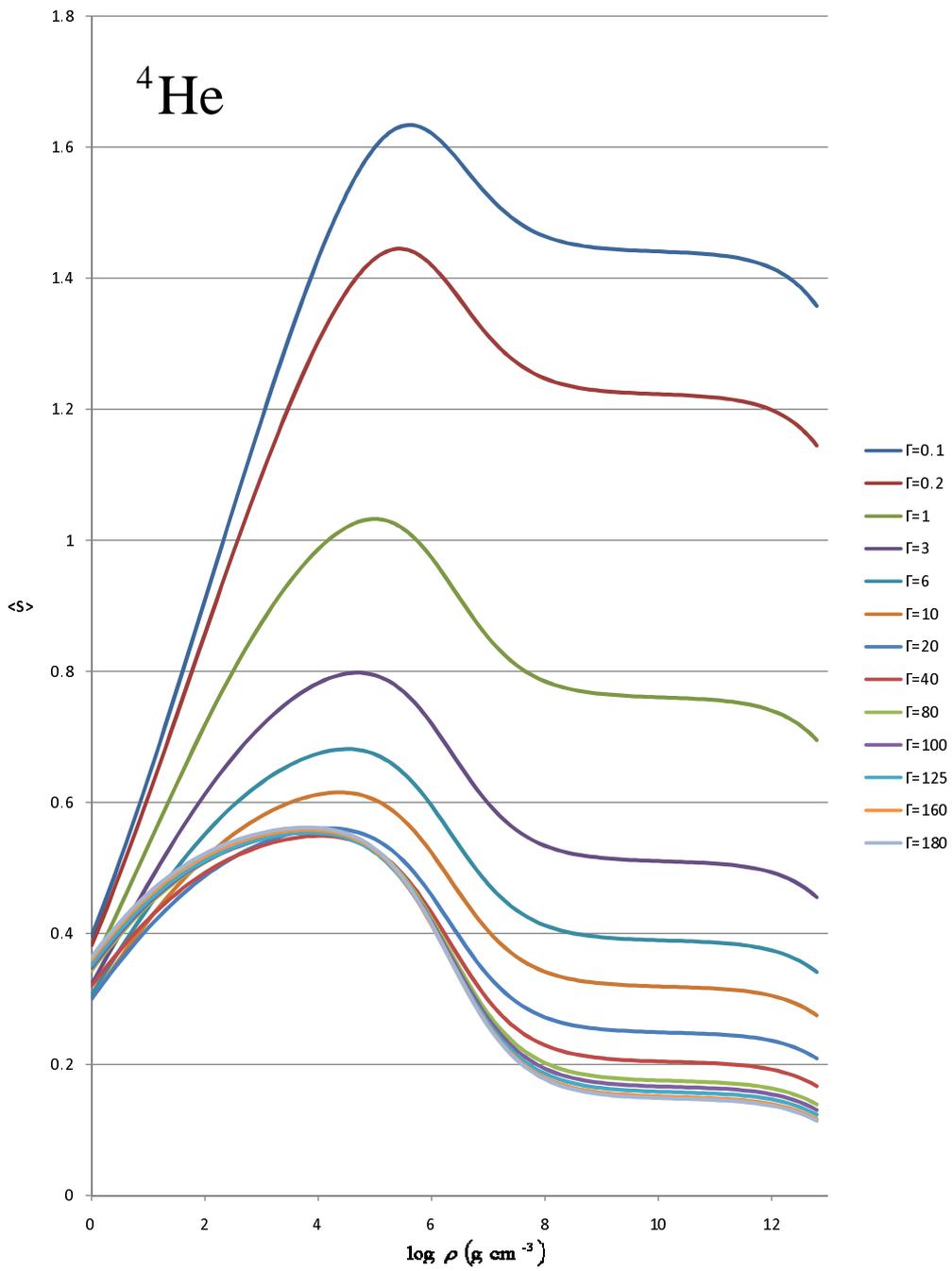


図 23 $\langle S \rangle$ の値 ${}^4\text{He}$

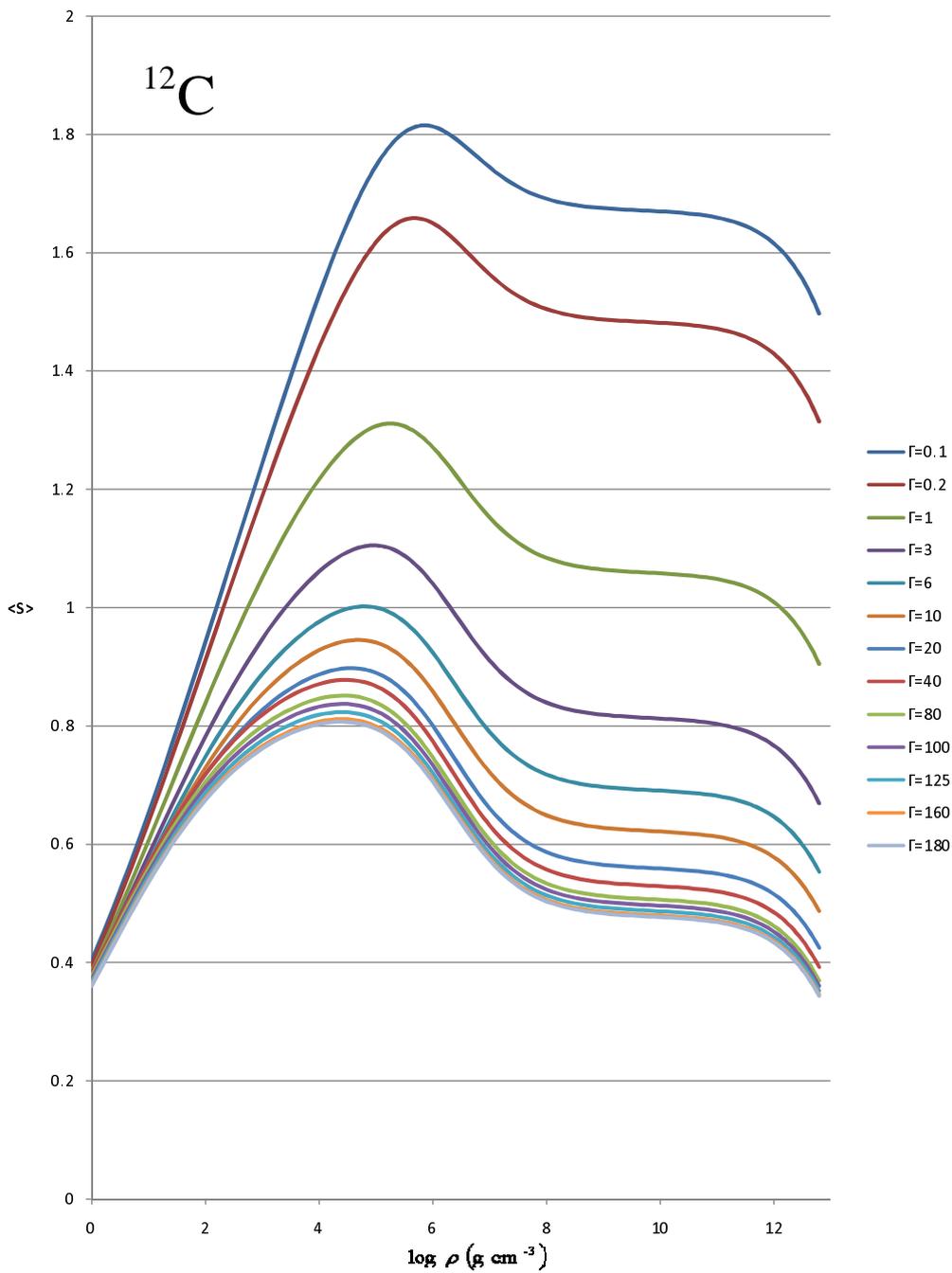


図 24 $\langle S \rangle$ の値 ^{12}C

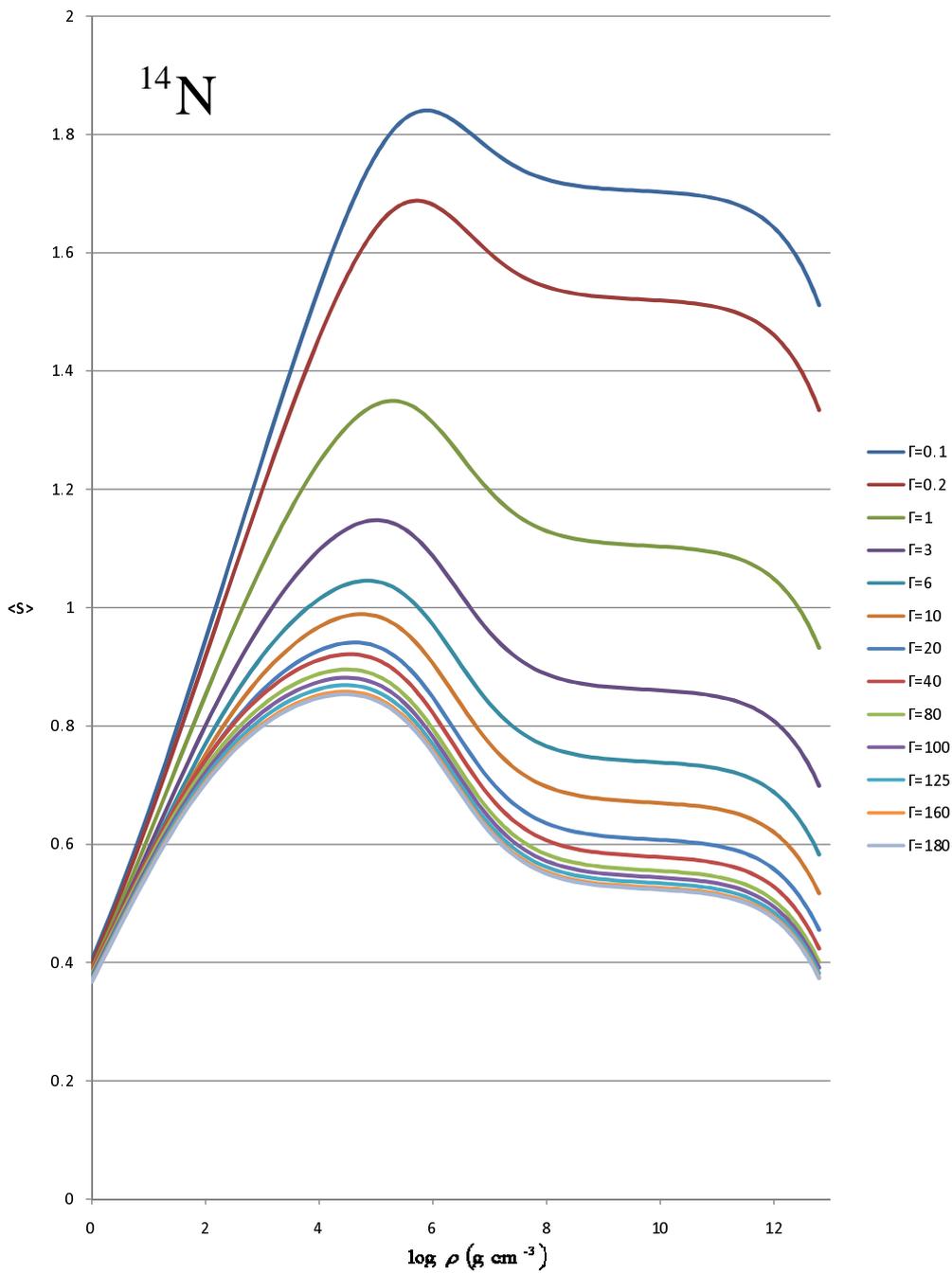


図 25 $\langle S \rangle$ の値 ^{14}N

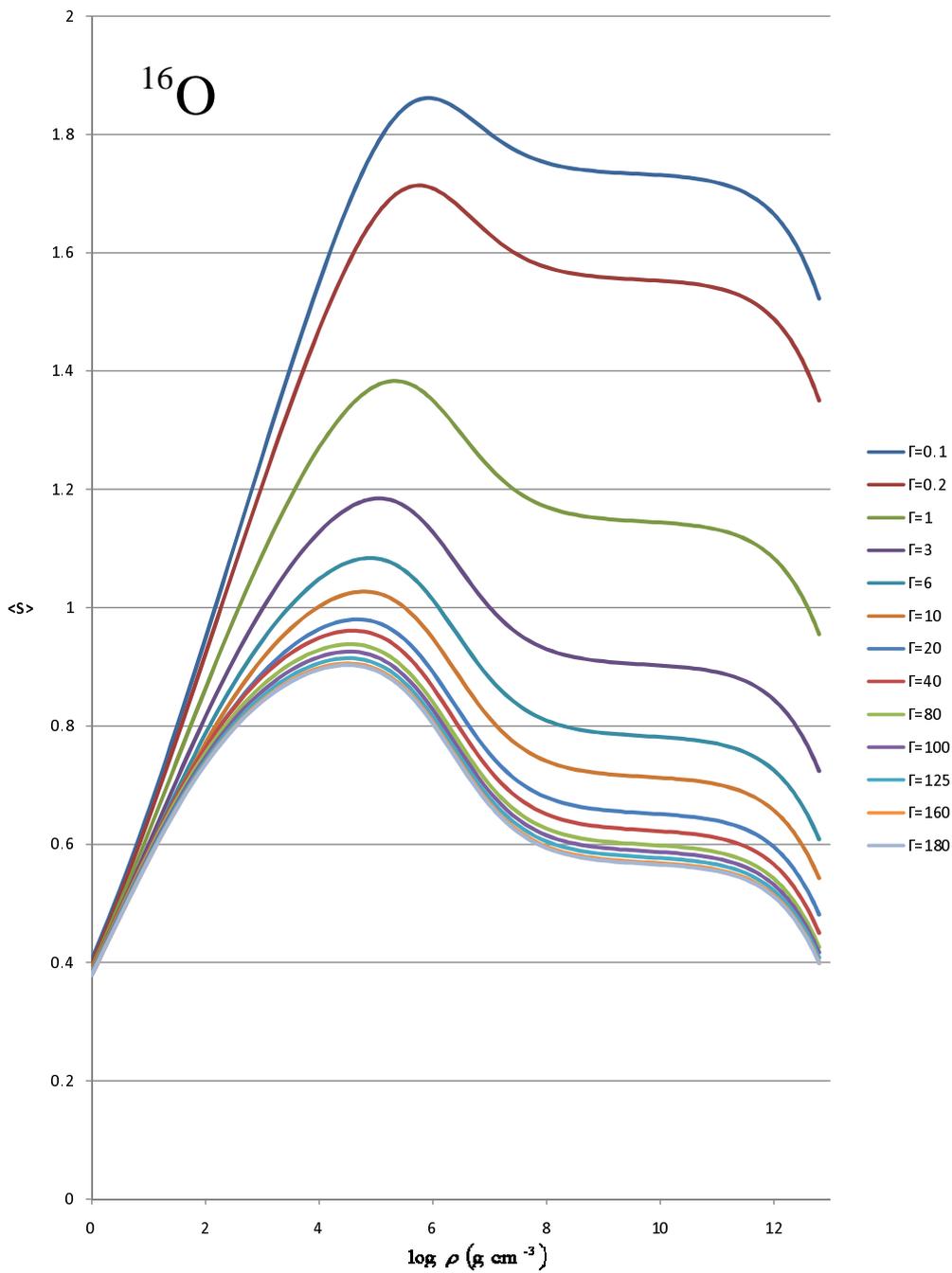


図 26 $\langle S \rangle$ の値 ^{16}O

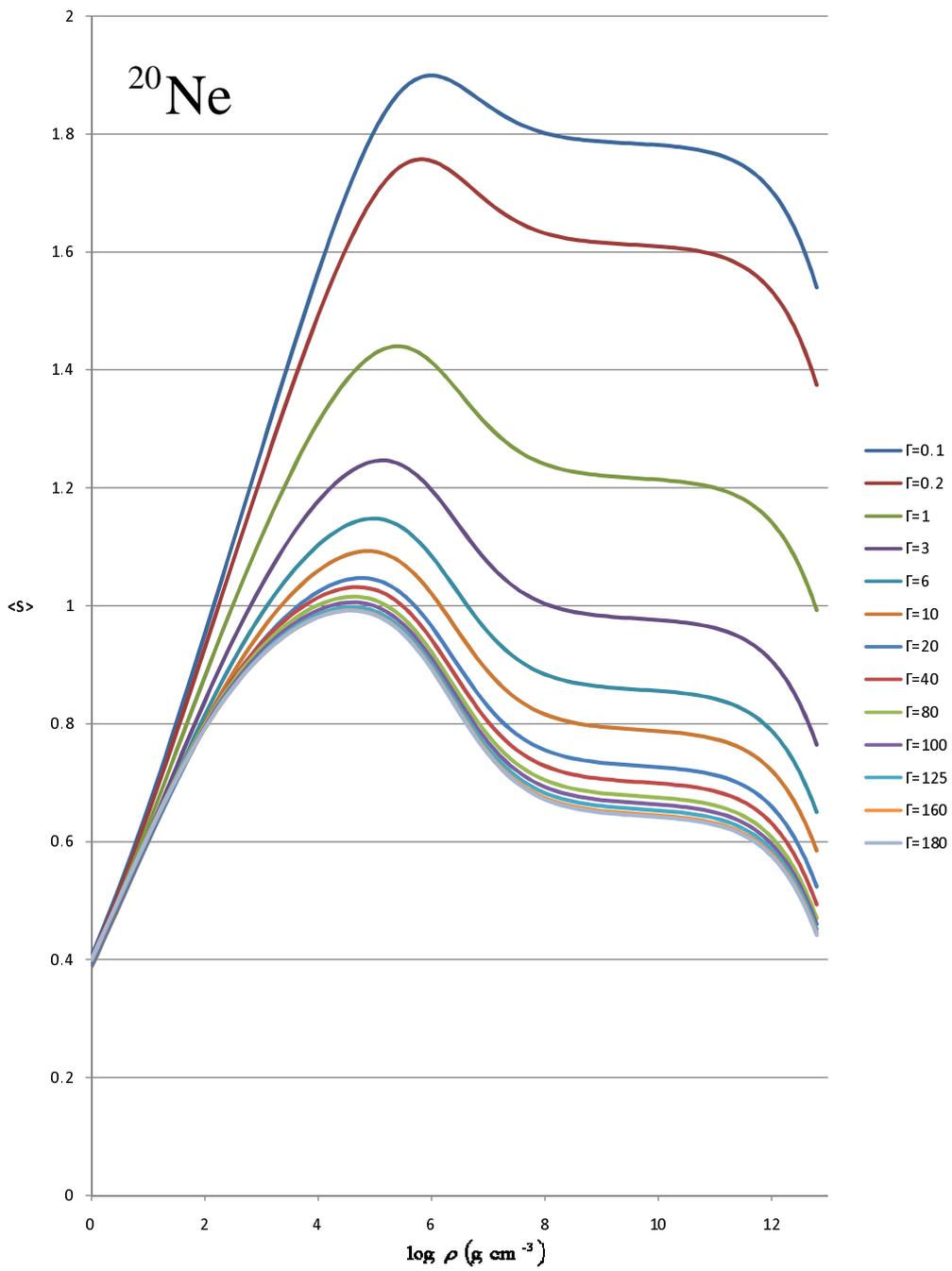


図 27 $\langle S \rangle$ の値 ^{20}Ne

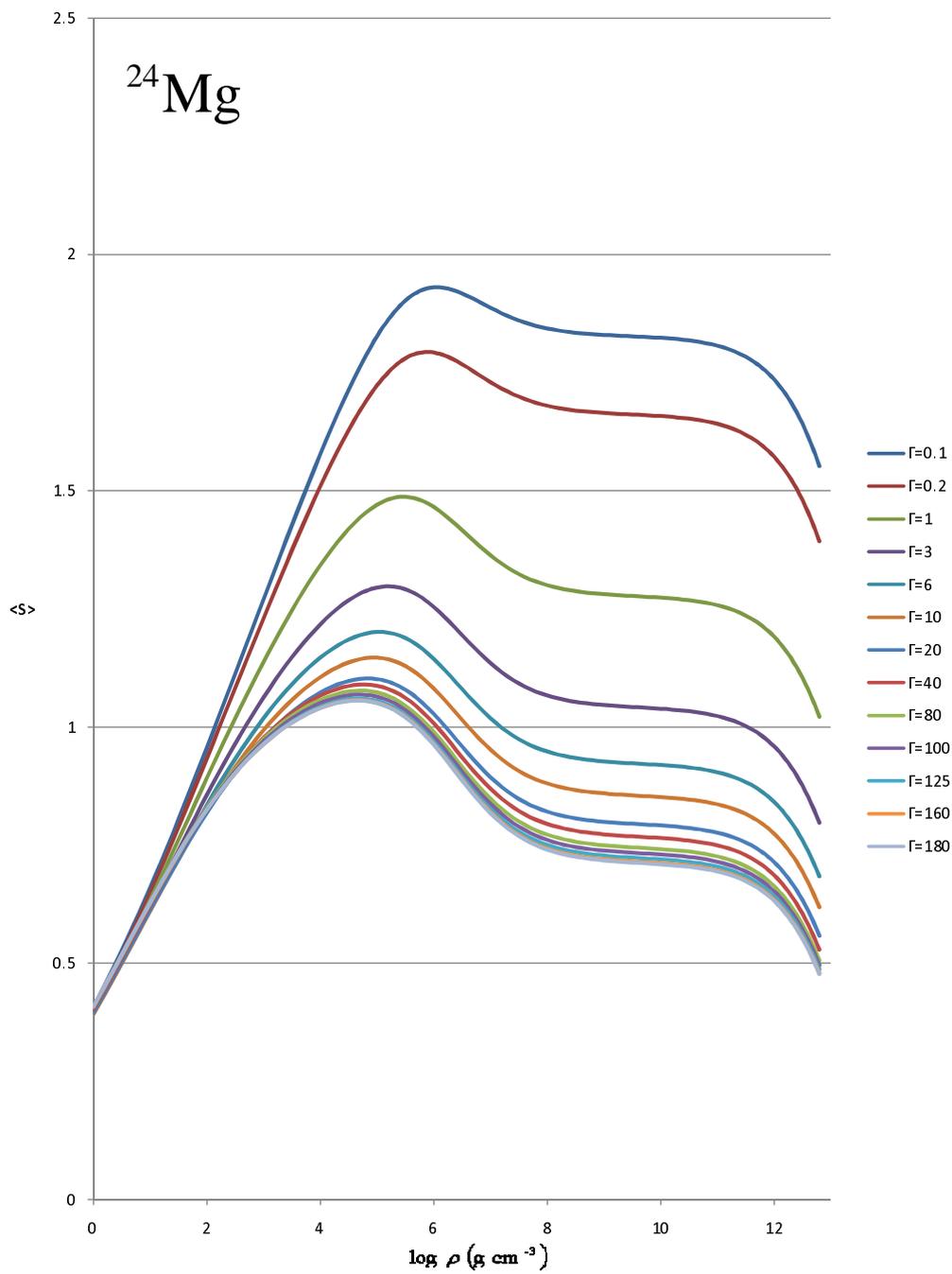


図 28 $\langle S \rangle$ の値 ^{24}Mg

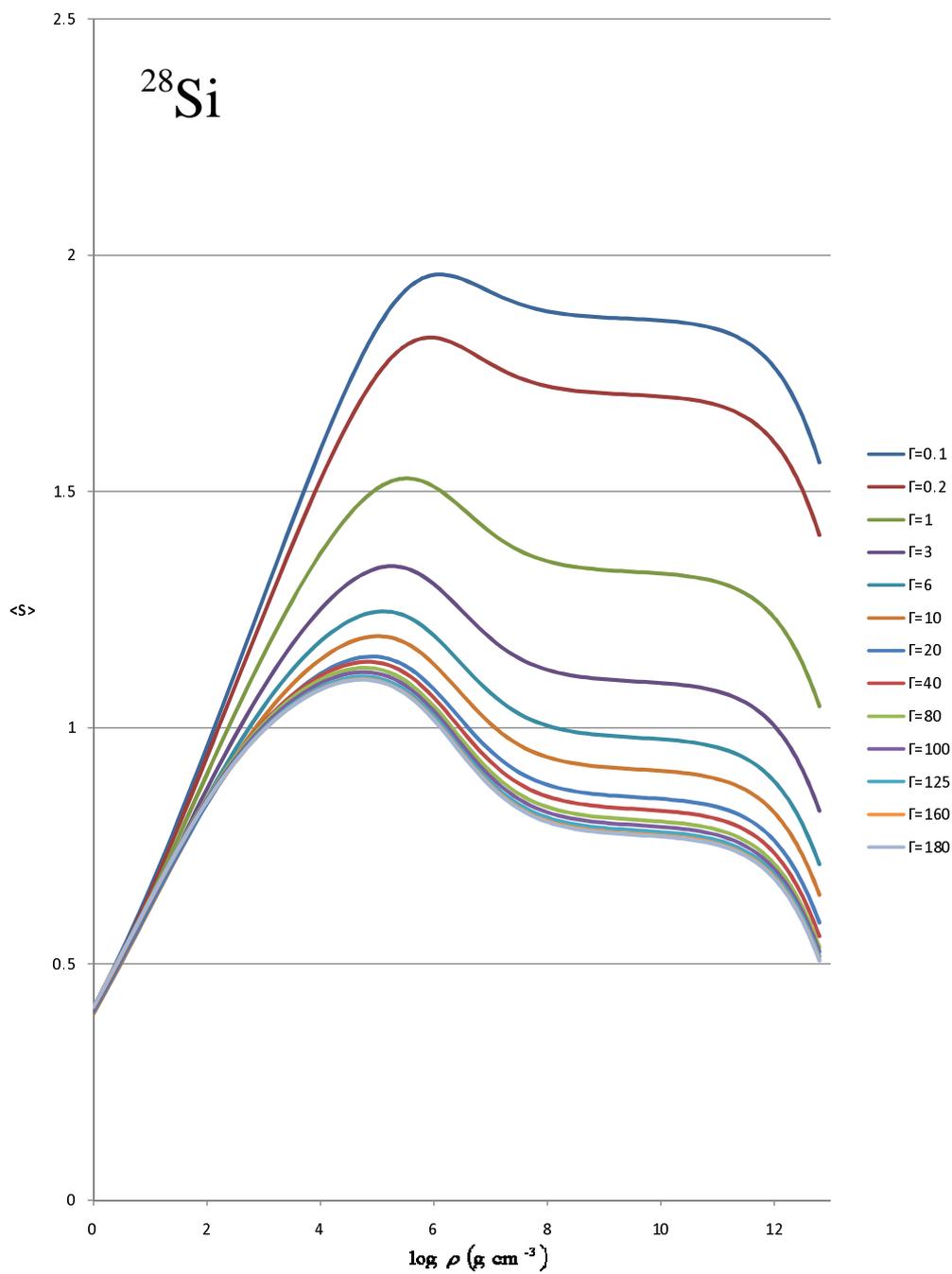


図 29 $\langle S \rangle$ の値 ^{28}Si

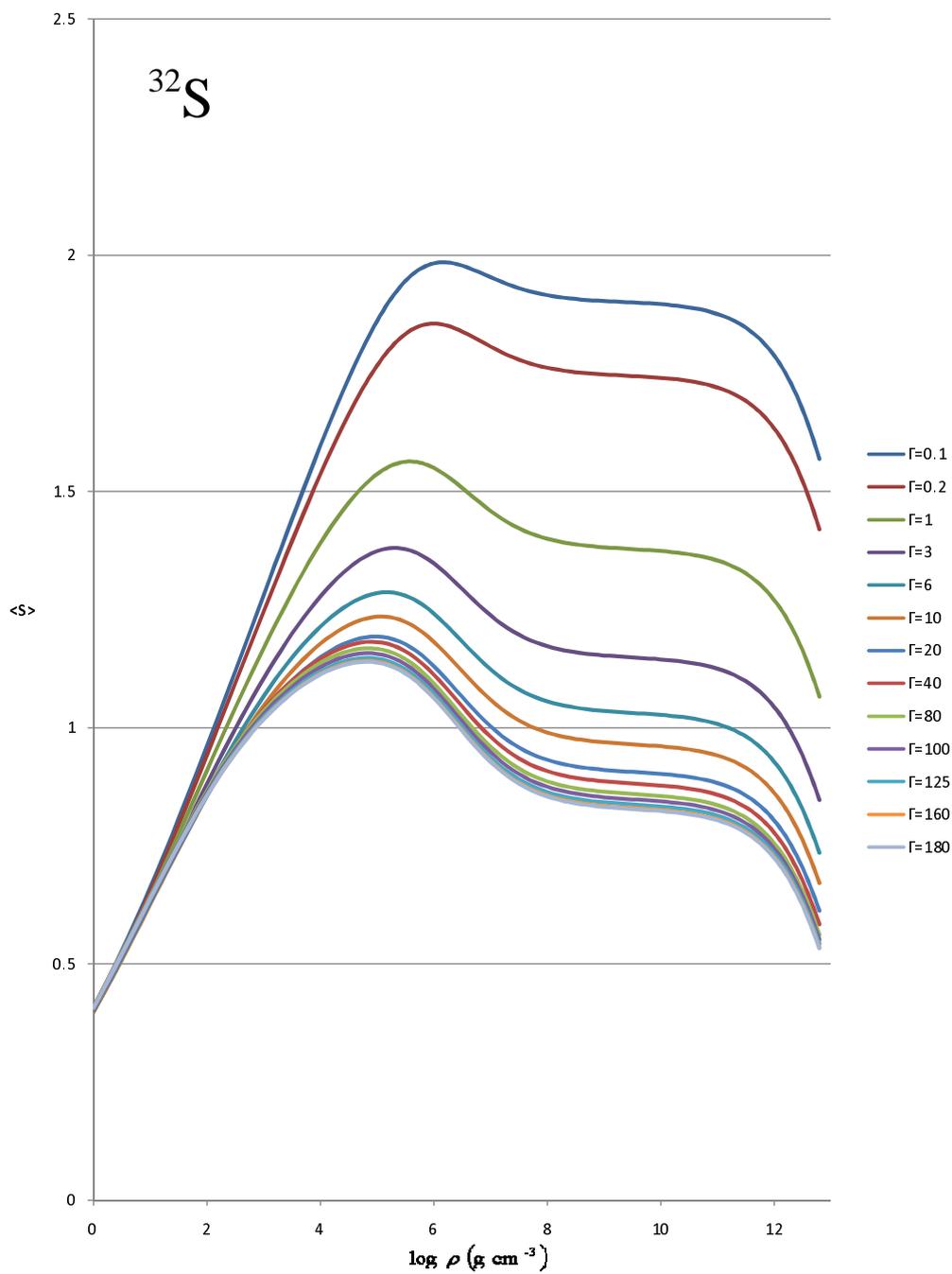


図 30 $\langle S \rangle$ の値 ^{32}S

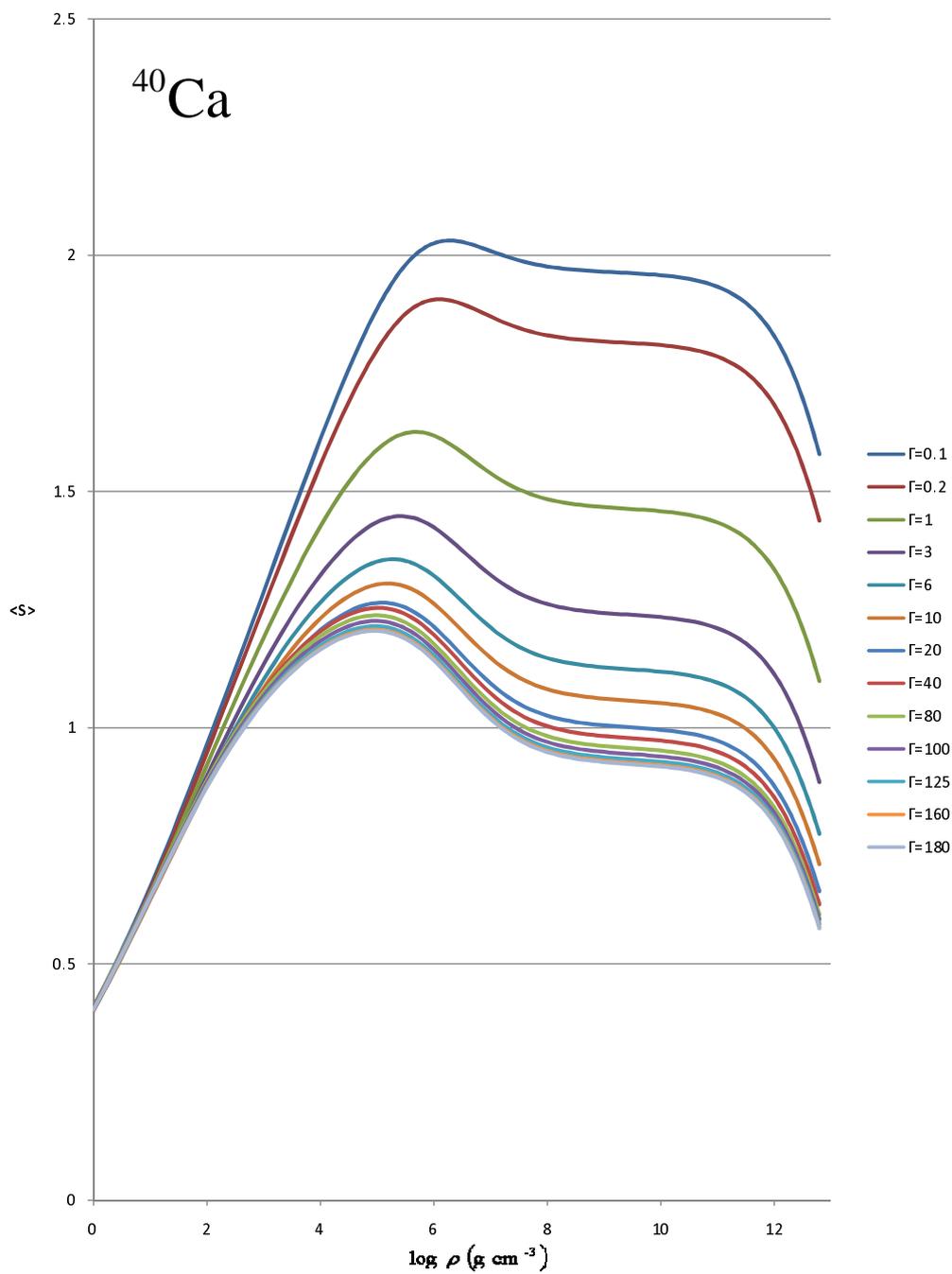


図 31 $\langle S \rangle$ の値 ^{40}Ca

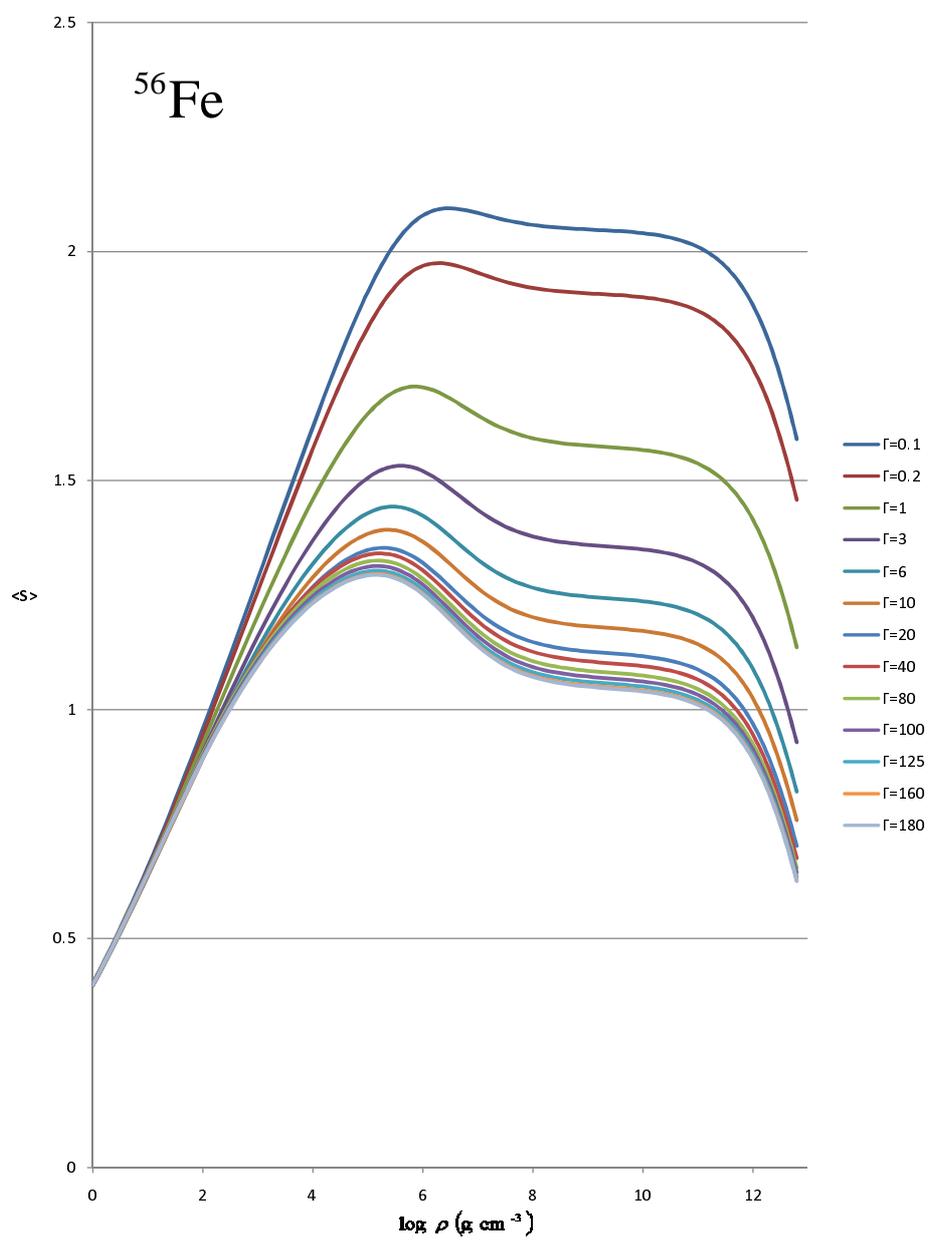


図 32 $\langle S \rangle$ の値 ^{56}Fe

2.6 解析的フィッティング式

実用性を考え、計算の数値結果を解析式によってフィットした。ここで、次のような変数を導入する。

$$u = 2\pi(\log_{10}\rho)/25.6 \quad (109)$$

フィッティングは $10^{0.0} \leq \rho \leq 10^{12.8}$ と、 $0.1 \leq \Gamma \leq 180$ の範囲で行った。

フィッティング式は以下の通りである。

$$\langle S_{-1} \rangle(u, \Gamma) = v \langle S_{-1} \rangle(u, 0.1) + (1 - v) \langle S_{-1} \rangle(u, 180) \quad (110)$$

$$\langle S_0 \rangle(u, \Gamma) = w \langle S_0 \rangle(u, 0.1) + (1 - w) \langle S_0 \rangle(u, 180) \quad (111)$$

$$\langle S_{+1} \rangle(u, \Gamma) = z \langle S_{+1} \rangle(u, 0.1) + (1 - z) \langle S_{+1} \rangle(u, 180) \quad (112)$$

$$\langle S_{-1} \rangle(u, 0.1) = \sum_{m=1}^5 a_m \sin(mu) + \frac{12.8}{\pi} bu + c \quad (113)$$

$$\langle S_{-1} \rangle(u, 180) = \sum_{m=1}^5 d_m \sin(mu) + \frac{12.8}{\pi} eu + f \quad (114)$$

$$\langle S_0 \rangle(u, 0.1) = \sum_{m=1}^5 g_m \sin(mu) + \frac{12.8}{\pi} hu + i \quad (115)$$

$$\langle S_0 \rangle(u, 180) = \sum_{m=1}^5 j_m \sin(mu) + \frac{12.8}{\pi} ku + l \quad (116)$$

$$\langle S_{+1} \rangle(u, 0.1) = \sum_{m=1}^5 p_m \sin(mu) + \frac{12.8}{\pi} qu + r \quad (117)$$

$$\langle S_{+1} \rangle(u, 180) = \sum_{m=1}^5 s_m \sin(mu) + \frac{12.8}{\pi} tu + y \quad (118)$$

$$v = \sum_{m=0}^3 \alpha_m x^m \quad (119)$$

Coefficient	¹ H	⁴ He	¹² C	¹⁴ N	¹⁶ O	²⁰ Ne	²⁴ Mg	²⁸ Si	³² S	⁴⁰ Ca	⁵⁶ Fe
<i>a</i> ₁	0.6496	0.7407	0.8981	0.9232	0.9457	0.9848	1.0181	1.0471	1.0729	1.1171	1.169
<i>a</i> ₂	0.0471	-0.0007	-0.0666	-0.0781	-0.0884	-0.1065	-0.1221	-0.1357	-0.1477	-0.1684	-0.197
<i>a</i> ₃	-0.0056	-0.0165	-0.0071	-0.0045	-0.0019	0.0031	0.0076	0.0117	0.0155	0.0222	0.0297
<i>a</i> ₄	-0.0284	-0.0376	-0.0558	-0.0588	-0.0615	-0.0663	-0.0703	-0.0737	-0.0767	-0.0818	-0.0869
<i>a</i> ₅	0.0054	0.0114	0.0247	0.027	0.0291	0.0326	0.0356	0.0382	0.0404	0.044	0.0481
<i>b</i>	0.0921	0.1037	0.1068	0.1064	0.1059	0.1046	0.1032	0.1018	0.1004	0.0977	0.0946
<i>c</i>	0.4531	0.3959	0.404	0.4047	0.4053	0.4063	0.4069	0.4074	0.4078	0.4084	0.4017
<i>d</i> ₁	0.0336	0.2181	0.4396	0.4803	0.5203	0.5924	0.6516	0.6991	0.7383	0.8032	0.8871
<i>d</i> ₂	0.0017	0.0019	0.008	0.0048	0.0005	-0.0087	-0.0172	-0.0245	-0.0309	-0.043	-0.0617
<i>d</i> ₃	0.0064	0.0431	0.0744	0.0799	0.0854	0.0951	0.1024	0.1076	0.1112	0.1165	0.1218
<i>d</i> ₄	-0.0008	-0.0078	-0.0194	-0.0229	-0.0267	-0.0338	-0.04	-0.0452	-0.0497	-0.0575	-0.0682
<i>d</i> ₅	0.0022	0.015	0.0228	0.0242	0.0257	0.0283	0.0302	0.0314	0.0322	0.0333	0.0344
<i>e</i>	0.0014	0.0061	0.0176	0.0187	0.0193	0.02	0.0206	0.0212	0.0217	0.0226	0.0234
<i>f</i>	0.077	0.3548	0.3638	0.3704	0.38	0.3971	0.4066	0.4092	0.4081	0.4047	0.3984

表2 $\langle S_{-1} \rangle(u, 0.1)$ と $\langle S_{-1} \rangle(u, 180)$ におけるフィッティング式の係数

$$w = \sum_{m=0}^3 \beta_m x^m \quad (120)$$

$$z = \sum_{m=0}^3 \gamma_m x^m \quad (121)$$

係数は表2から表5に与えている。フィッティングの精度は、ほとんどの点で3%よりも良い結果となった。

Coefficient	¹ H	⁴ He	¹² C	¹⁴ N	¹⁶ O	²⁰ Ne	²⁴ Mg	²⁸ Si	³² S	⁴⁰ Ca	⁵⁶ Fe
<i>g</i> ₁	0.2781	0.3281	0.4042	0.417	0.4286	0.4489	0.4662	0.4813	0.4946	0.5173	0.5452
<i>g</i> ₂	0.0357	0.0222	-0.0077	-0.0131	-0.018	-0.0266	-0.0339	-0.0404	-0.046	-0.0556	-0.0672
<i>g</i> ₃	0.0224	0.0249	0.0396	0.0423	0.0448	0.0491	0.0528	0.056	0.0588	0.0635	0.0684
<i>g</i> ₄	-0.0072	-0.0134	-0.0245	-0.0264	-0.028	-0.0309	-0.0333	-0.0353	-0.037	-0.0397	-0.0426
<i>g</i> ₅	0.0059	0.0082	0.0152	0.0163	0.0174	0.0191	0.0205	0.0217	0.0227	0.0241	0.0254
<i>h</i>	0.0303	0.0323	0.0269	0.0258	0.0247	0.0227	0.0209	0.0193	0.0179	0.0154	0.0127
<i>i</i>	0.3087	0.2749	0.279	0.2794	0.2797	0.2802	0.2805	0.2808	0.281	0.2813	0.2773
<i>j</i> ₁	0.028	0.1847	0.2943	0.3151	0.3369	0.3761	0.4063	0.4282	0.4445	0.4699	0.5053
<i>j</i> ₂	0.001	0	0.0006	-0.003	-0.0073	-0.0158	-0.0228	-0.0282	-0.0325	-0.0399	-0.0505
<i>j</i> ₃	0.0056	0.0374	0.0523	0.0555	0.0591	0.0656	0.0703	0.0734	0.0754	0.0782	0.0818
<i>j</i> ₄	-0.0007	-0.0069	-0.0136	-0.0159	-0.0183	-0.0227	-0.0262	-0.0288	-0.0308	-0.0341	-0.0383
<i>j</i> ₅	0.002	0.0132	0.0165	0.0174	0.0185	0.0205	0.0219	0.0227	0.0232	0.0237	0.0243
<i>k</i>	0.001	0.0044	0.0095	0.0093	0.0088	0.0077	0.0068	0.0061	0.0056	0.0047	0.0033
<i>l</i>	0.0688	0.3101	0.2606	0.2636	0.2705	0.2832	0.2893	0.2894	0.2866	0.2811	0.2762

表3 $\langle S_0 \rangle(u, 0.1)$ と $\langle S_0 \rangle(u, 180)$ におけるフィッティング式の係数

Coefficient	¹ H	⁴ He	¹² C	¹⁴ N	¹⁶ O	²⁰ Ne	²⁴ Mg	²⁸ Si	³² S	⁴⁰ Ca	⁵⁶ Fe
<i>p</i> ₁	0.1543	0.1881	0.238	0.2466	0.2544	0.2679	0.2794	0.2893	0.298	0.3126	0.3306
<i>p</i> ₂	0.0202	0.0137	-0.0068	-0.0105	-0.0138	-0.0196	-0.0244	-0.0287	-0.0323	-0.0384	-0.0451
<i>p</i> ₃	0.0205	0.0248	0.0367	0.0388	0.0406	0.0438	0.0465	0.0487	0.0506	0.0537	0.0569
<i>p</i> ₄	-0.0024	-0.0063	-0.014	-0.0152	-0.0164	-0.0183	-0.0198	-0.0211	-0.0222	-0.0238	-0.0254
<i>p</i> ₅	0.0057	0.0074	0.0123	0.0131	0.0137	0.0149	0.0158	0.0165	0.017	0.0178	0.0183
<i>q</i>	0.0133	0.0135	0.0084	0.0074	0.0065	0.0049	0.0036	0.0024	0.0013	-0.0005	-0.0024
<i>r</i>	0.2293	0.2069	0.2095	0.2097	0.2099	0.2102	0.2104	0.2105	0.2106	0.2108	0.2082
<i>s</i> ₁	0.0244	0.1594	0.2052	0.2172	0.2311	0.2566	0.2751	0.2869	0.2946	0.3059	0.3246
<i>s</i> ₂	0.0005	-0.0012	-0.0033	-0.0069	-0.0109	-0.0183	-0.0239	-0.0279	-0.0308	-0.0355	-0.0422
<i>s</i> ₃	0.005	0.0328	0.038	0.0402	0.0429	0.048	0.0515	0.0535	0.0547	0.0563	0.0588
<i>s</i> ₄	-0.0007	-0.0062	-0.0101	-0.0117	-0.0135	-0.0165	-0.0188	-0.0202	-0.0212	-0.0227	-0.0246
<i>s</i> ₅	0.0018	0.0116	0.0123	0.0131	0.014	0.0157	0.0168	0.0173	0.0176	0.0178	0.0181
<i>t</i>	0.0007	0.0033	0.005	0.0043	0.0035	0.0019	0.0007	-0.0002	-0.0008	-0.002	-0.0035
<i>y</i>	0.0624	0.2736	0.1937	0.1964	0.2029	0.2147	0.2198	0.219	0.2158	0.21	0.2066

表4 $\langle S_{+1} \rangle(u, 0.1)$ と $\langle S_{+1} \rangle(u, 180)$ におけるフィッティング式の係数

Coefficient	^1H	^4He	^{12}C	^{14}N	^{16}O	^{20}Ne	^{24}Mg	^{28}Si	^{32}S	^{40}Ca	^{56}Fe
α_0	0.4288	0.1778	0.2634	0.2661	0.2619	0.2489	0.2461	0.2513	0.2583	0.27	0.276
α_1	-0.5654	-0.5446	-0.5073	-0.5144	-0.5252	-0.5454	-0.5525	-0.5518	-0.5496	-0.548	-0.5561
α_2	0.0769	0.3337	0.2504	0.2474	0.2512	0.2638	0.2674	0.2632	0.2568	0.2454	0.2389
α_3	0.0662	0.0467	0.0083	0.0155	0.0264	0.0472	0.0549	0.0547	0.0527	0.0513	0.0594
β_0	0.5283	0.009	0.3358	0.3352	0.3055	0.2147	0.1748	0.1905	0.2221	0.2725	0.2749
β_1	-0.5546	-0.7314	-0.4548	-0.4724	-0.509	-0.5917	-0.6101	-0.5803	-0.5438	-0.5002	-0.5122
β_2	-0.0256	0.5152	0.1868	0.185	0.2121	0.3007	0.3446	0.3334	0.3045	0.2539	0.2464
β_3	0.0559	0.2429	-0.0421	-0.0245	0.0124	0.0973	0.1193	0.0915	0.0556	0.0107	0.0208
β_0	0.6073	-4.1969	0.474	0.4662	0.3641	-0.2351	-0.9551	-0.6419	-0.1657	0.2634	0.2677
γ_1	-0.5135	-2.82	-0.1732	-0.2319	-0.3358	-0.7498	-1.0234	-0.6405	-0.3169	-0.1219	-0.1927
γ_2	-0.1064	4.9321	0.0621	0.0612	0.1539	0.7369	1.4926	1.2221	0.7513	0.2993	0.2586
γ_3	0.0143	2.461	-0.3263	-0.2675	-0.1632	0.2631	0.5803	0.2096	-0.1263	-0.3459	-0.2894

表 5 v, w, z におけるフィッティング式の係数

2.7 核種の混合

これまで、一種類の原子核のみで構成されている場合を扱ってきた。しかし実際には、様々な核種が混合している。ここでは、これまでの計算を核種が混合した場合に拡張する。この場合の計算は、Potekhin et al.(1999)や Brown et al.(2002)、Cassisi et al.(2007)によって行われてきた。彼らの式は、線形混合規則に則っている。ここで、我々の記述によった表現を与える。

核種 (Z_j, A_j) の質量分率が X_j であるときを考えよう。核種 (Z_j, A_j) で散乱されるため、電気抵抗率 R_j は、

$$R_j = \frac{1 + b^2}{8.693 \times 10^{21} \rho_6} \frac{X_j (Z_j^2 / A_j) \langle S \rangle_j}{[\sum_i X_i (Z_i / A_i)]^2} \text{ s} \quad (122)$$

$$\langle S \rangle_j = \langle S \rangle_j^{1B} + \langle S \rangle_j^{2B} \quad (123)$$

$$\langle S \rangle_j^{1B} = \langle S_{-1} \rangle_j - \frac{b^2}{1 + b^2} \langle S_{+1} \rangle_j \quad (124)$$

$$\langle S \rangle_j^{2B} = \pi Z \alpha \frac{b}{(1 + b^2)^{\frac{1}{2}}} (\langle S_0 \rangle_j - \langle S_{+1} \rangle_j) \quad (125)$$

ここで、混合した場合式のパラメータ r_s は、

$$r_s = 1.388 \times 10^{-2} \left(\sum_i X_i \frac{Z_i}{A_i} \rho_6 \right)^{-\frac{1}{3}} \quad (126)$$

合計の電子抵抗率 R は、

$$R = \sum_j R_j \quad (127)$$

それゆえに、電気伝導度 σ は、

$$\sigma = \frac{1}{R} = \frac{8.693 \times 10^{21} \rho_6}{1 + b^2} \frac{[\sum_i X_i (Z_i / A_i)]^2}{\sum_j X_j (Z_j^2 / A_j) \langle S \rangle_j} \text{ s}^{-1} \quad (128)$$

同様に、熱伝導率 κ は、

$$\kappa = \frac{2.363 \times 10^{17} \rho_6 T_8}{1 + b^2} \frac{[\sum_i X_i (Z_i/A_i)]^2}{\sum_j X_j (Z_j^2/A_j) \langle S \rangle_j} \text{ergscm}^{-1} \text{s}^{-1} \text{K}^{-1} \quad (129)$$

上において、核種 (Z_j, A_j) に一致する散乱積分 $\langle S \rangle_j$ はクーロン結合パラメータを用いて計算されるべきである。(Itoh, et al. 1979; Potekhin et al. 1999; Brown et al. 2002; Itoh et al. 2004)

$$\Gamma_j = \frac{Z_j^{\frac{5}{3}} e^2}{a_e k_B T} = 0.2275 \frac{Z_j^{\frac{5}{3}}}{T_8} \left(\sum_i X_i \frac{Z_i}{A_i} \rho_6 \right)^{\frac{1}{3}} \quad (130)$$

$$a_e = \left(\frac{3}{4\pi n_e} \right)^{\frac{1}{3}} = \left(\frac{3}{4\pi \sum_i n_i Z_i} \right)^{\frac{1}{3}} \quad (131)$$

ここで、 a_e は電子球半径、 n_e と n_i はそれぞれ、電子と i の核種 (Z_i, A_i) の数密度である。

2.8 第二ボルン近似の精度の評価

ここで、第二ボルン近似の精度を、Doggett and Spencer (1956) によって得られた正確な値と比較することで評価する。前でも述べているが、第二ボルン近似は、ラザフォード散乱断面積への補正項を与えている (McKinley and Feshbach 1948; Feshbach 1952)。

具体的には、まず Mott は微分散乱断面積として結果を以下のように与えている。

$$\sigma = q^2(1 - \beta^2)F^*F \csc^2\left(\frac{\theta}{2}\right) + G^*G \sec^2\left(\frac{\theta}{2}\right) \quad (132)$$

ここで、

$$q = \frac{\alpha}{\beta} \quad (133)$$

$$\alpha = \frac{Ze^2}{\hbar c} \quad (134)$$

$$\beta = \frac{v}{c} \quad (135)$$

であり、また $\alpha/\beta \ll 1$ である。関数 F, G は以下のように与えられる。

$$F = F_0 + F_1$$

$$G = G_0 + G_1$$

$$F_0 = i/2 \exp(iq \ln \sin^2 \frac{\theta}{2})$$

$$G_0 = -iq \cot^2 \theta / 2F_0$$

$$F_1 = i/2 \sum_{k=0}^{\infty} [kD_k + (k+1)D_{k+1}] (-)^k P_k(\cos \theta)$$

$$G_1 = i/2 \sum_{k=0}^{\infty} [k^2 D_k + (k+1)^2 D_{k+1}] (-)^k P_k(\cos \theta) \quad (136)$$

ここでの Γ は Γ 関数で、 P_k は k のオーダーのルジャンドル多項式である。最終的に、

$$D_k = \frac{e^{-\pi i k} \Gamma(k - iq)}{k + iq \Gamma(k + iq)} - \frac{e^{-i\pi \rho_k} \Gamma(\rho_k - iq)}{\rho_k + iq \Gamma(\rho_k + iq)} \quad (137)$$

$$\rho_k = (k^2 - \alpha^2)^{\frac{1}{2}} \quad (138)$$

ここで用いられる順序は、 F_1 と G_1 の α と α/β におけるべき級数展開を含んでいる。この展開は、それゆえに相対論的な電子 $\beta \sim 1$ においてのみ有効である。最初の項は、 α 近似が補正された Mott formula をに帰着する。係数 D_k の展開は、

$$D_k = (-)^{k+1} [\alpha^2 (\frac{i\pi}{2k^2} + \frac{1}{2k^3}) + \alpha^3 (\frac{1\psi_2}{\beta k^2} + \frac{\pi\psi_1}{\beta k^2} + \frac{\pi}{2\beta k^3} - \frac{i\psi_1}{\beta k^3} - \frac{i}{\beta k^4}) + \alpha^4 (\frac{2\psi_1\psi_2}{\beta^2 k^2} - \frac{i\pi\psi_1^2}{\beta^2 k^2} - \frac{\pi^2}{8k^3} + \frac{\psi_2}{\beta^2 k^3} - \frac{i\pi\psi_1}{\beta^2 k^3} - \frac{\psi_1^2}{\beta^2 k^3} + \frac{3}{8} \frac{i\pi}{k^4} - \frac{i\pi}{2\beta^2 k^4} - \frac{2\psi_1}{\beta^2 k^4} + \frac{3}{8k^5} - \frac{3}{2\beta^2 k^5})] + 0(\alpha^5) \quad (139)$$

ここで、 $\psi_n(k)$ は多項 Γ 関数である。関数 ψ_1 は、

$$\psi_1 = (d/dk) \ln(\Gamma)(k) \quad (140)$$

また、

$$\psi_n = (d/dk) \psi_{n-1}(k) \quad (141)$$

この D_k の展開は今、136 式において、 F_1 と G_1 を得るために、代わりに用いなければならぬ。 α^2 の項を含む k にわたる総和のみ正確に計算が行われ、他の和は数値的に計算される。

α^2 の項について話そう。これは Mott and Urban が得た対立する解のために、議論の題目となる Mott の式を導くべきである。

$$D_k \simeq \frac{(-)^{k+1} \alpha^2}{2} (\frac{i\pi}{k^2} + \frac{1}{k^3}) \quad (142)$$

それから、

$$G_1 \simeq \alpha^2 / 4 \sum_{k=1}^{\infty} (\pi - i/k)(P_k + P_{k-1})$$

$$G_0 \simeq \frac{1}{2} q \cot^2 \frac{\theta}{2} + 0(\alpha^2)$$

$$F_0 \simeq i/2 + 0(\alpha^2) \quad (143)$$

G_1 を得るために、Mott によって与えられる和の式を用いる。

$$\sum_{k=1}^{\infty} (P_k + P_{k-1}) = \csc \frac{\theta}{2} - 1 \quad (144)$$

$$\sum_{k=1}^{\infty} -(P_k + P_{k-1}) = \ln \csc \frac{\theta}{2} \quad (145)$$

式 143 を式の 136 の中に導入し、式 136 を式 132 に代入すると、ラザフォード散乱からの散乱の割合 R が得られる。

$$R^{1B+2B} = 1 - \beta^2 \sin \frac{\theta}{2} + \pi Z \alpha \beta \sin \frac{\theta}{2} \left(1 - \frac{\theta}{2}\right) \quad (146)$$

ここで、

$$\beta = \frac{[(E_{kin}/0.5110\text{MeV})^2 + 2(E_{kin}/0.5110\text{MeV})]^{\frac{1}{2}}}{1 + (E_{kin}/0.5110\text{MeV})} \quad (147)$$

E_{kin} は電子の運動エネルギー、 θ は散乱角である。 $\langle S \rangle$ は、以下のように定義される Doggett and Spencer (1956) による結果と一致する。

$$\langle S \rangle^{DS} \equiv \int_0^1 d\left(\frac{k}{2k_F}\right) \left(\frac{k}{2k_F}\right)^3 \frac{S(k/2k_F) |f(k/2k_F)|^2}{[(k/2k_F)^2 \epsilon(k/2k_F)]^2} R^{DS} \left(E_{kin}, \frac{k}{2k_F}\right) \quad (148)$$

ここで、 k は θ は以下のように関係付けられる。

$$\frac{k}{2k_F} = \sin \frac{\theta}{2} \quad (149)$$

比較の辻褄が合うように、ここでは以下の定義をする。

$$\langle S \rangle^{1B+2B} \equiv \int_0^1 d\left(\frac{k}{2k_F}\right) \left(\frac{k}{2k_F}\right)^3 \frac{S(k/2k_F) |f(k/2k_F)|^2}{[(k/2k_F)^2 \epsilon(k/2k_F)]^2} R^{1B+2B} = \langle S \rangle^{1B} + \langle S \rangle^{2B} \quad (150)$$

当然だが、これは既出の式と適合している。ここで、次のような関係を用いている。

$$E_{kin} = 0.5110\text{MeV} [1 + 1.018(Z/A)^{\frac{2}{3}} \rho_6^{\frac{2}{3}} - 1] \quad (151)$$

表 6 において、 $\Gamma = 10; Z = 6, 13, \text{and } 29; \text{and } E_{kin} = 0.05, 0.1, 0.2, 0.4, 0.7, 1, 2, 4, 10\text{MeV}$ の場合における第二ボルン近似の結果と Doggett and Spencer (1956) の結果の比較を行っている。これを見ると、第二ボルン近似の精度は、 $Z = 6$ において 0.4 % 以上、 $Z = 13$ において 1.4 % 以上、 $Z = 29$ において 6.0 % 以上であることが分かる。

Z	$E_{kin}(\text{MeV})$	$\langle S \rangle^{DS}$	$\langle S \rangle^{1B+2B}$	$\langle S \rangle^{1B+2B} / \langle S \rangle^{DS}$
6	0.05	0.9322	0.9299	0.9975
	0.1	0.8923	0.8897	0.9971
	0.2	0.8253	0.8239	0.9983
	0.4	0.7488	0.7465	0.9969
	0.7	0.6949	0.6929	0.9972
	1	0.67	0.6677	0.9964
	2	0.6409	0.6386	0.9964
	4	0.6293	0.6268	0.9961
	10	0.622	0.6202	0.9972
	13	0.05	1.1804	1.1668
0.1		1.1508	1.1365	0.9876
0.2		1.091	1.0778	0.988
0.4		1.0179	1.0048	0.9871
0.7		0.9658	0.9529	0.9866
1		0.941	0.9283	0.9866
2		0.9126	0.8998	0.9859
4		0.9005	0.8879	0.9859
10		0.8907	0.8788	0.9867
29		0.05	1.5002	1.4295
	0.1	1.4652	1.4239	0.9718
	0.2	1.4666	1.3875	0.946
	0.4	1.4605	1.3321	0.9121
	0.7	1.3692	1.29	0.9422
	1	1.3487	1.2695	0.9413
	2	1.3243	1.2453	0.9404
	4	1.3127	1.2343	0.9403
	10	1.2987	1.2204	0.9397

表 6 第二ボルン近似の結果と Doggett and Spencer (1956) の結果の比較

3 結論

3.1 結果

3.1.1 有限の原子核サイズ効果の寄与

有限の原子核サイズ効果の寄与があるものと、ないものとの比較を ^{12}C と ^{56}Fe の場合において $\Gamma = 10, \Gamma = 40$ の時についてそれぞれ図で示した。密度依存を示したものと、波長よっての寄与を示したグラフを載せる。

3.1.2 第二ボルン近似項の寄与

第二ボルン近似項の寄与があるものと、ないものとの比較を ^{12}C と ^{56}Fe の場合において、 $\Gamma = 10, \Gamma = 40$ の時についてそれぞれ図で示した。

3.1.3 電気伝導度と熱伝導度

電気伝導度と熱伝導度の値を $\Gamma = 0.1, \Gamma = 1, \Gamma = 10, \Gamma = 100$ の時についてそれぞれ、 ^{12}C と ^{56}Fe に加え、地球上での種々の金属における電気伝導度や熱伝導度と比較するために ^{26}Al と ^{63}Cu の場合においても図で示した。

3.1.4 フィッティング式の精度

フィッティング式の精度を、 $\Gamma = 0.1, \Gamma = 1, \Gamma = 10, \Gamma = 100$ の時についてそれぞれ、 ^{12}C と ^{56}Fe の場合について誤差表と図で示す。

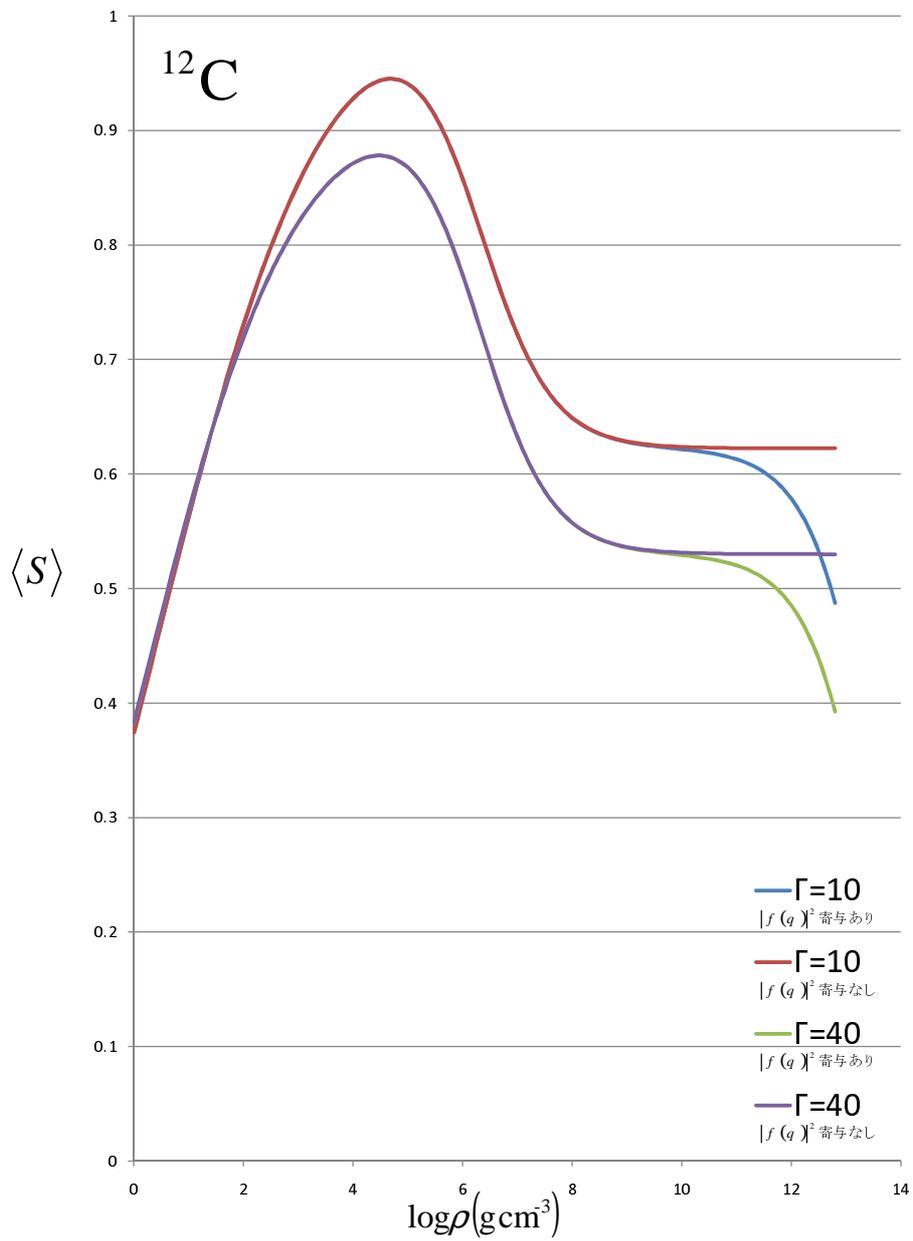


図 33 有限の原子核サイズ効果の寄与 ^{12}C

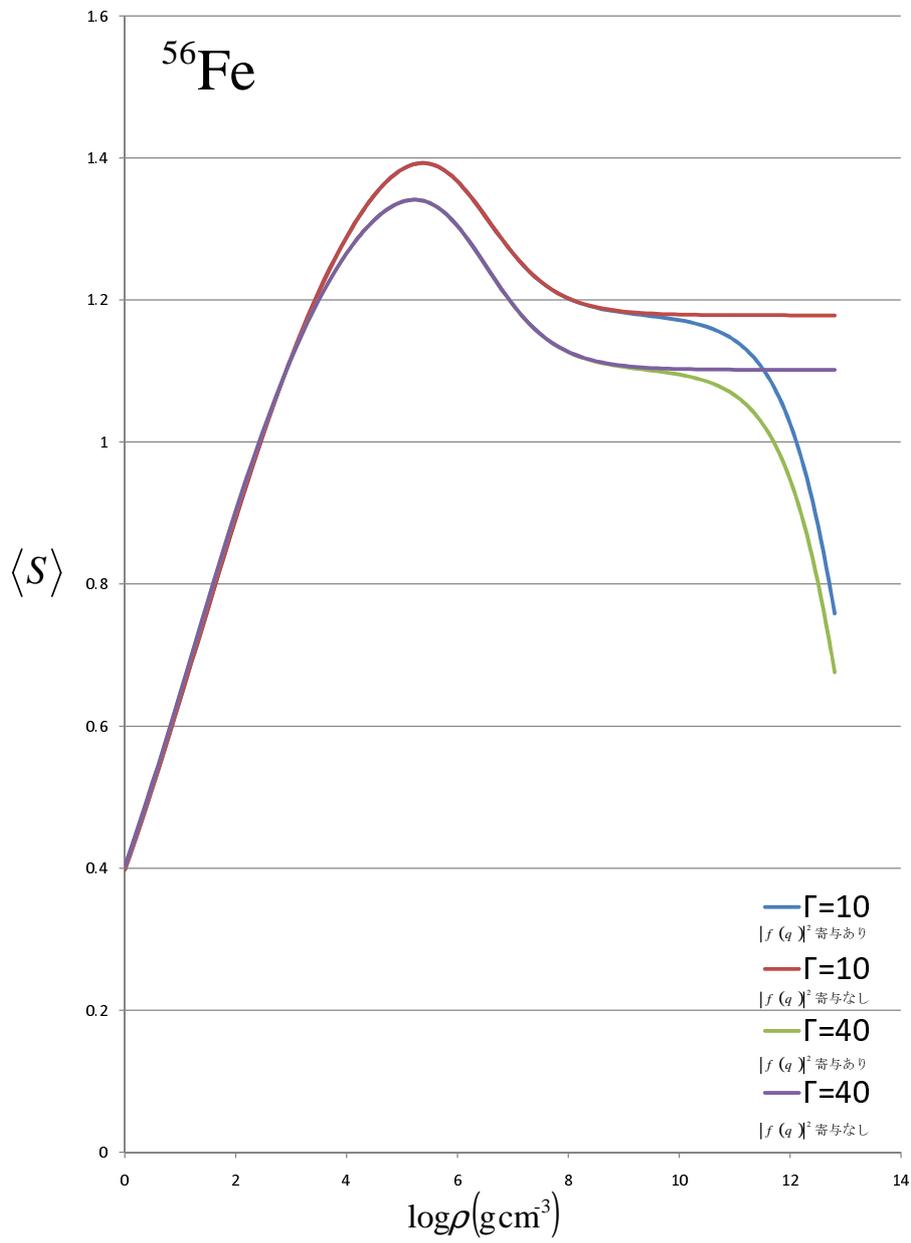


図 34 有限の原子核サイズ効果の寄与 ^{56}Fe

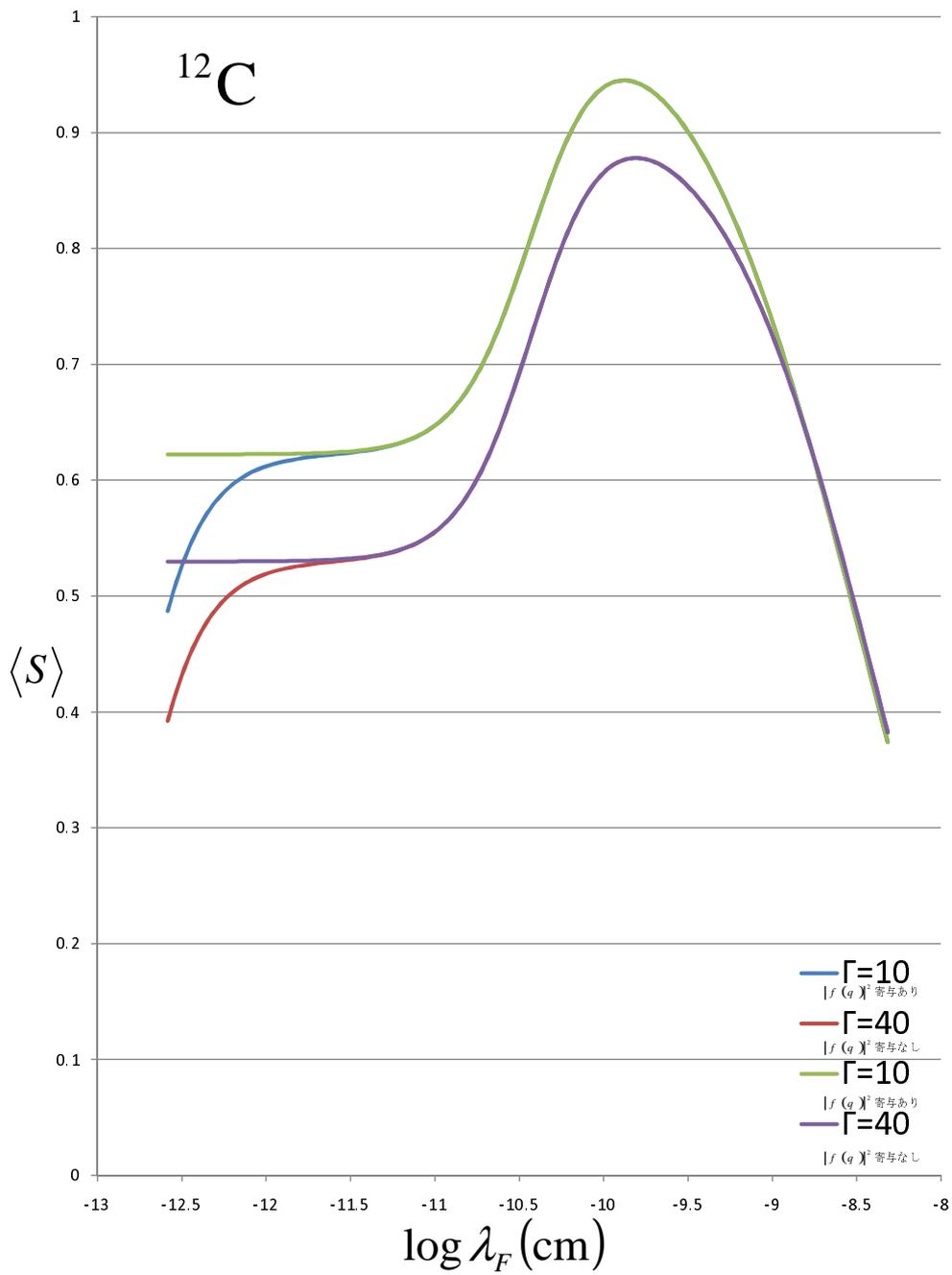


図 35 有限の原子核サイズ効果の寄与 ^{12}C

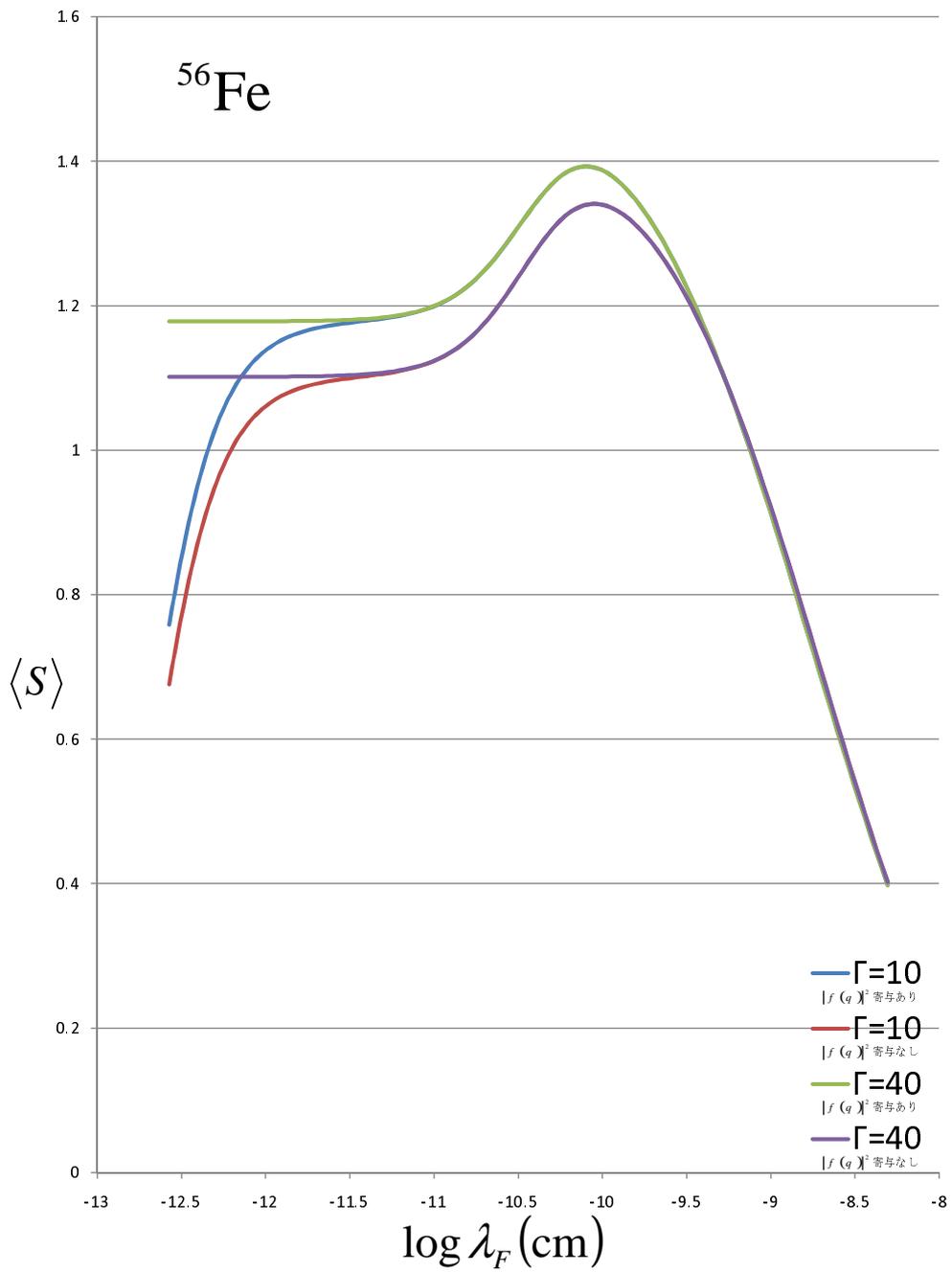


図 36 有限の原子核サイズ効果の寄与 ^{56}Fe

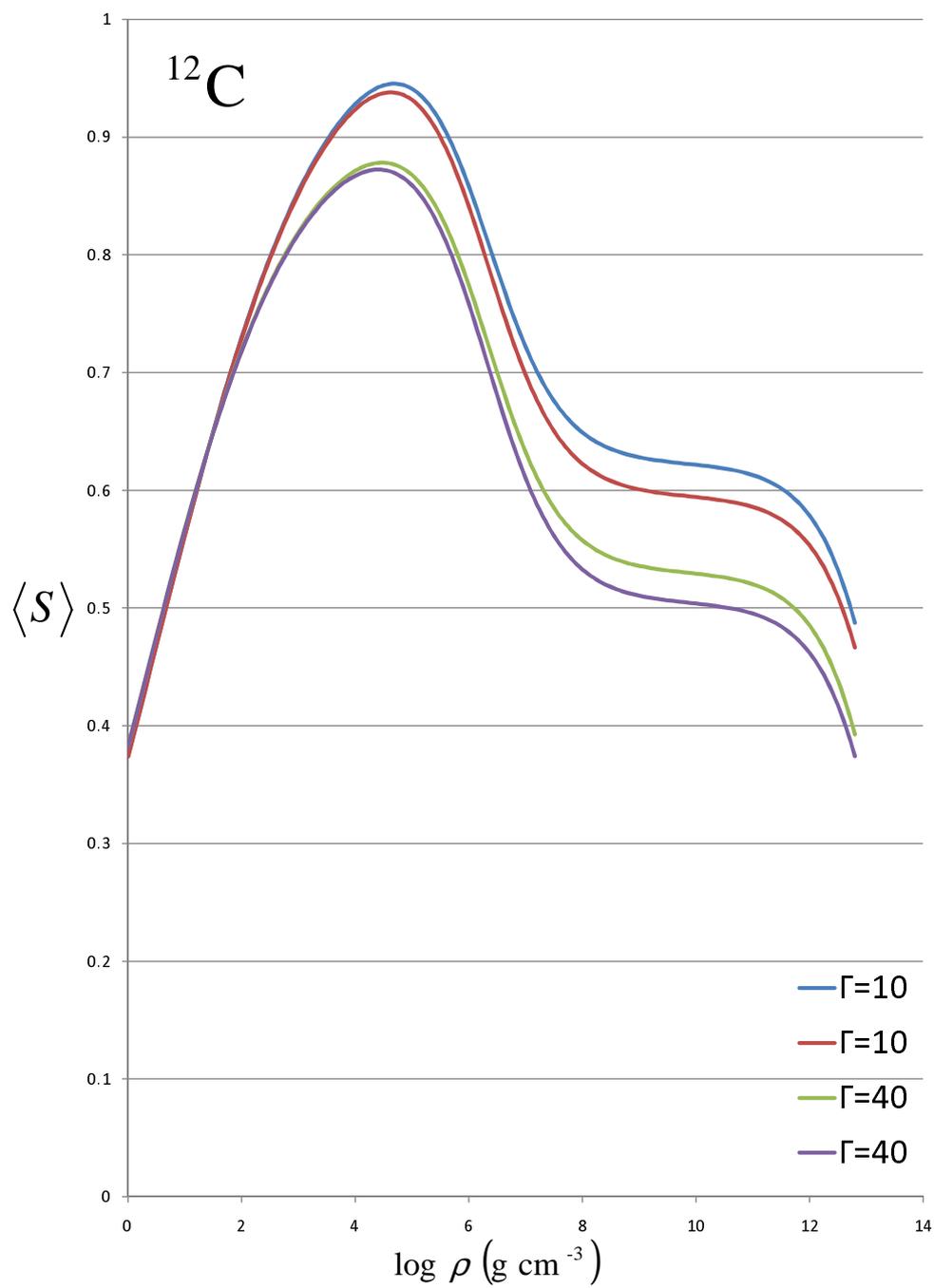


图 37 第二ボルン近似項の寄与 ^{12}C

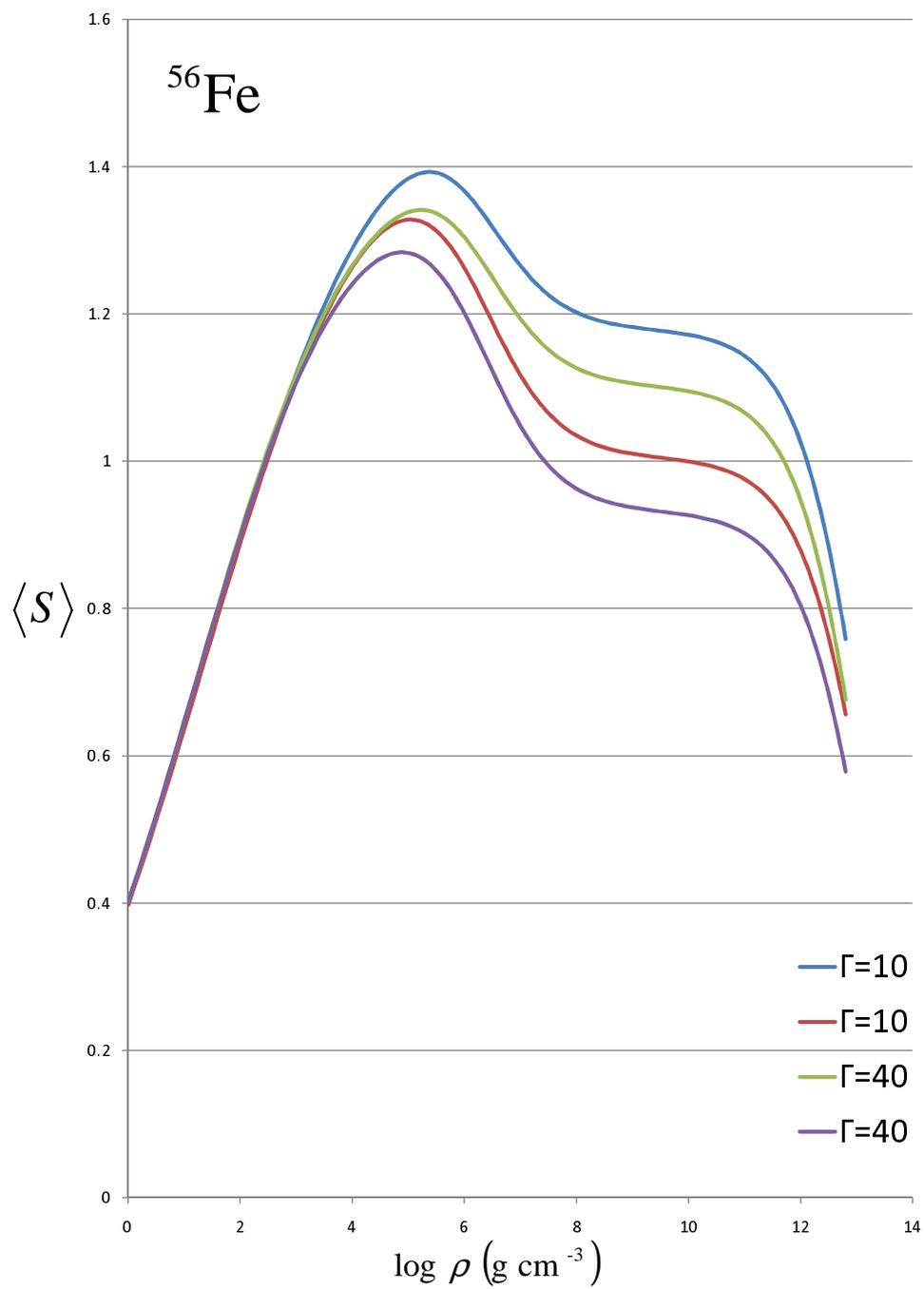


図 38 第二ボルン近似項の寄与 ^{56}Fe

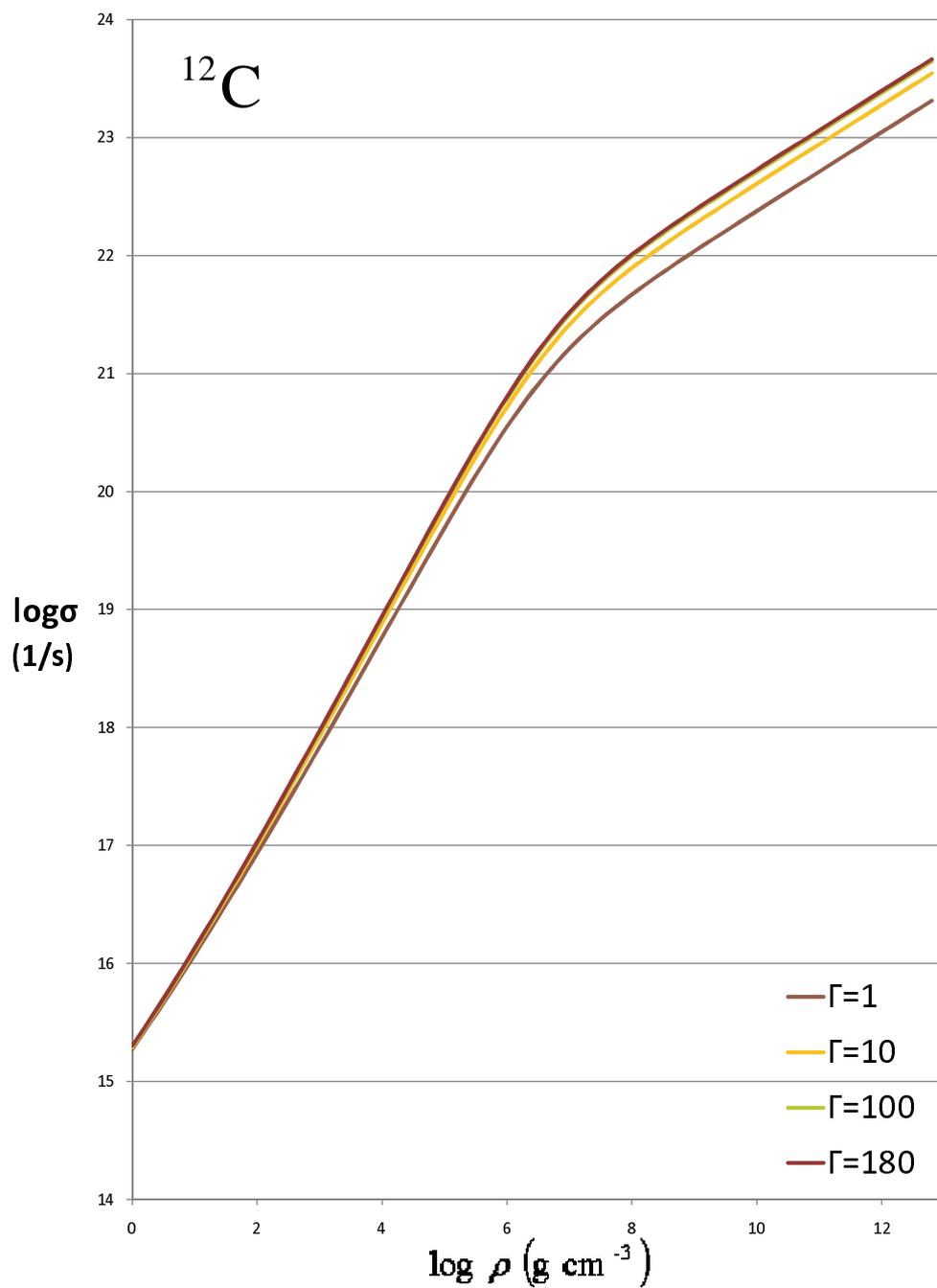


图 39 電気伝導度 ^{12}C

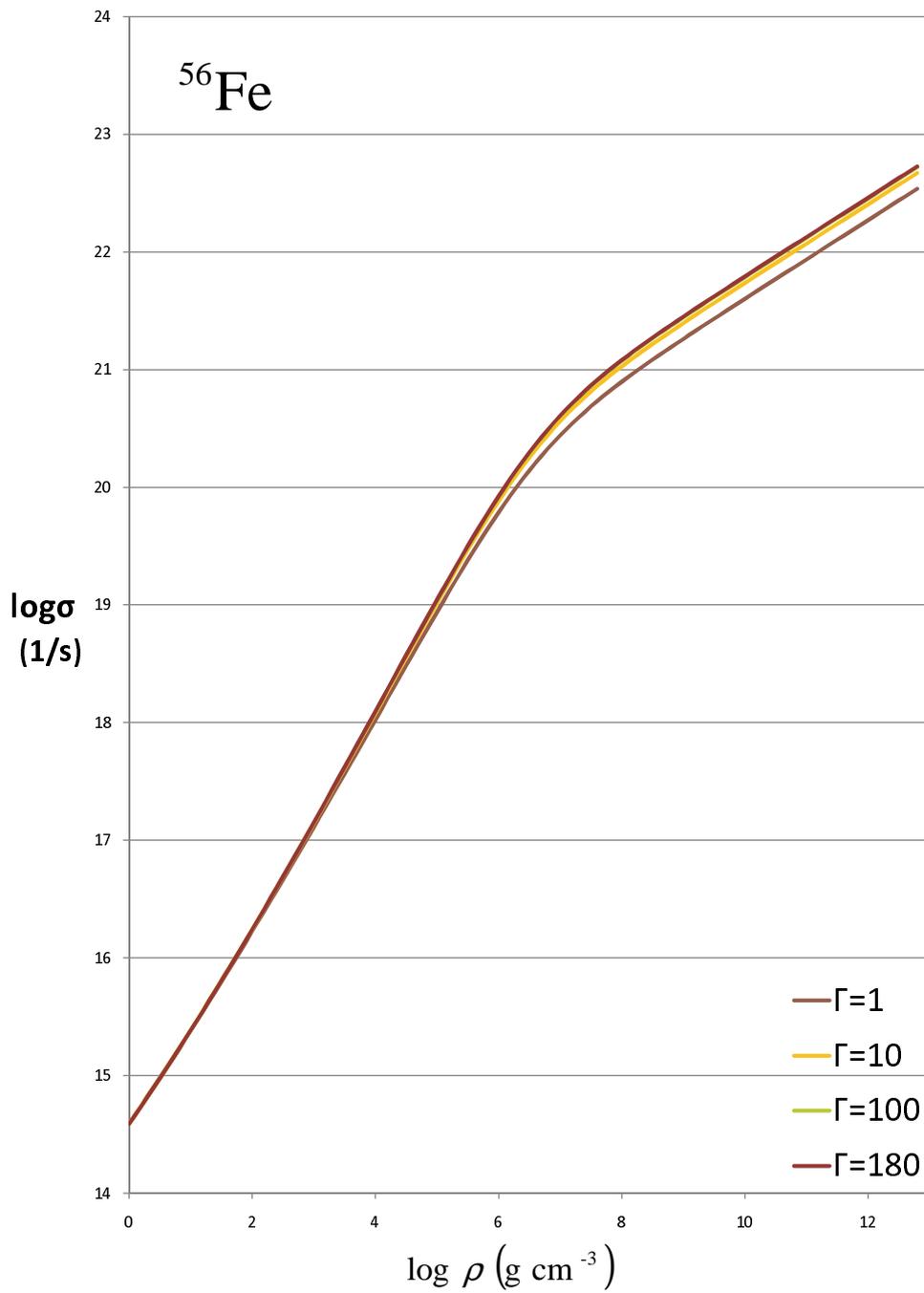


図 40 電気伝導度 ^{56}Fe

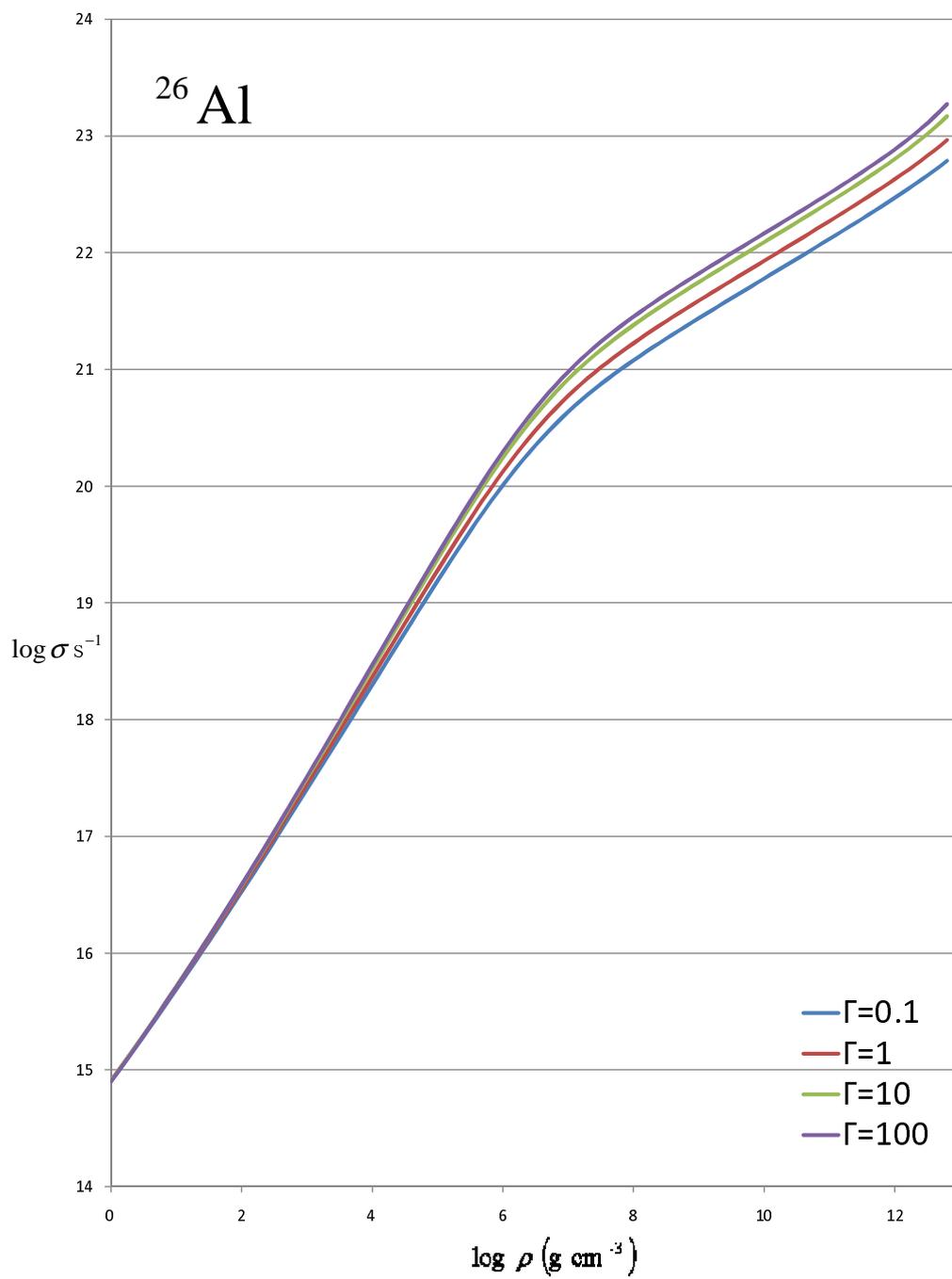


图 41 電気伝導度 ^{26}Al

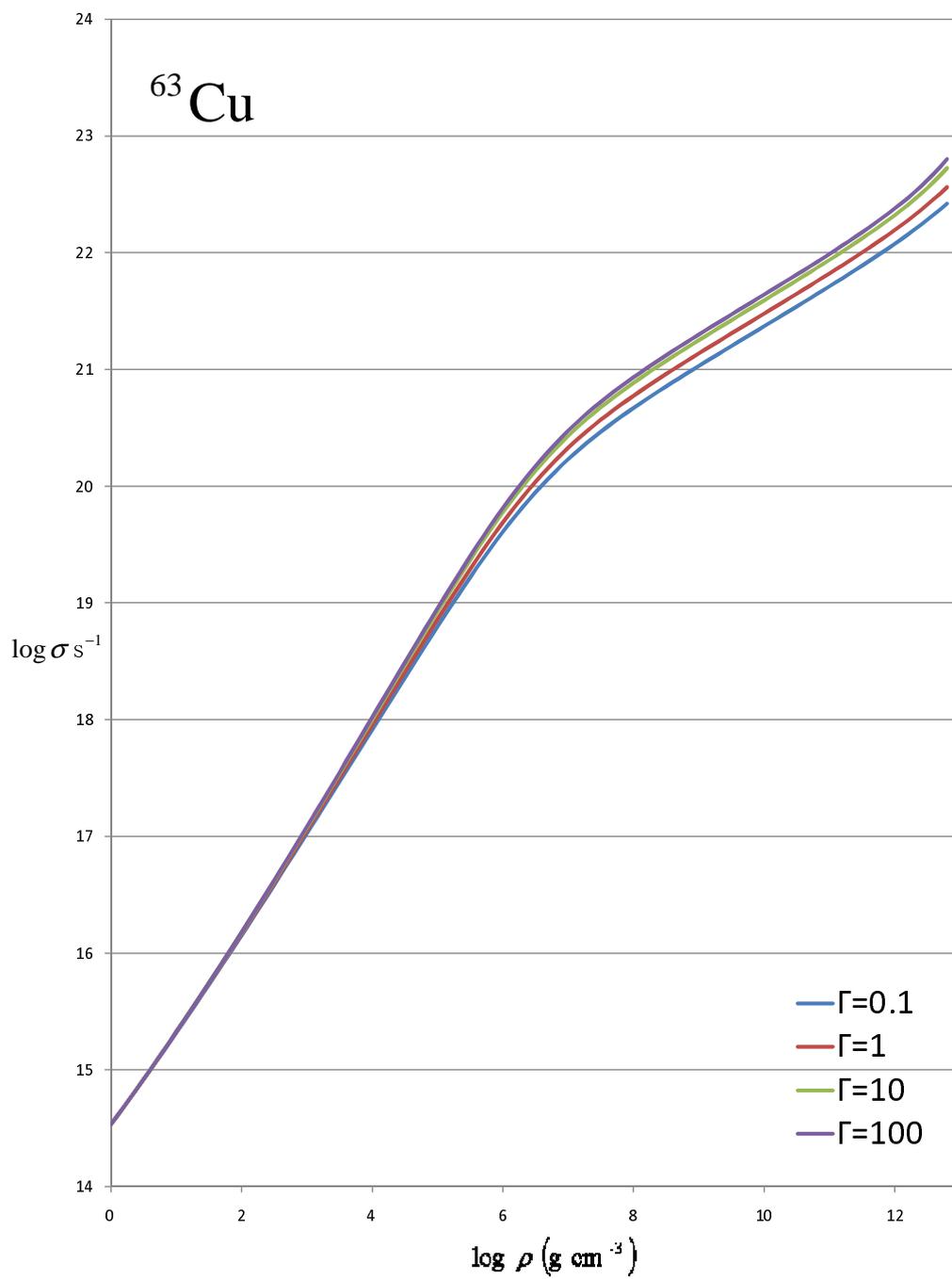


图 42 電気伝導度 ^{63}Cu

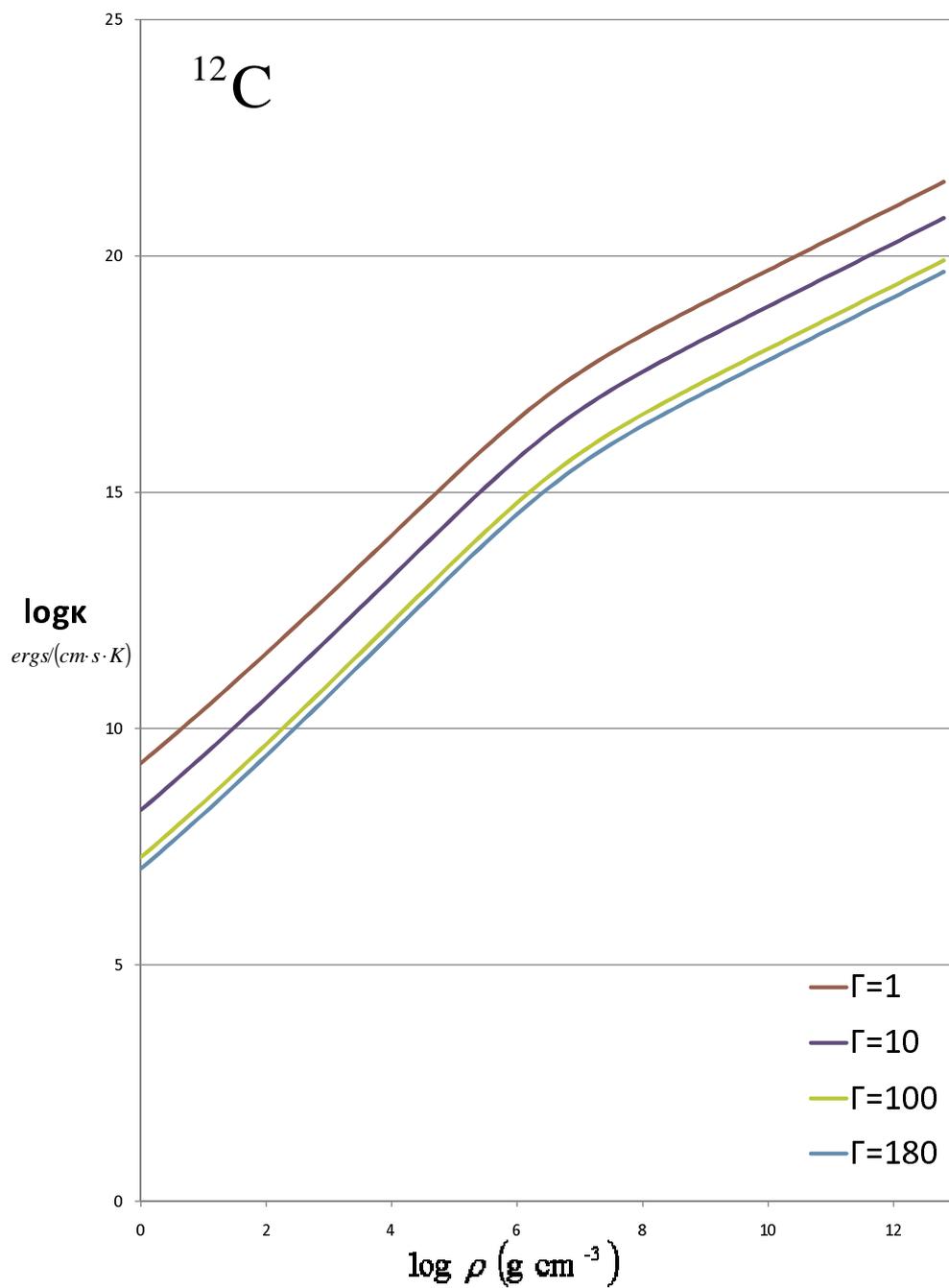


图 43 熱伝導度 ^{12}C

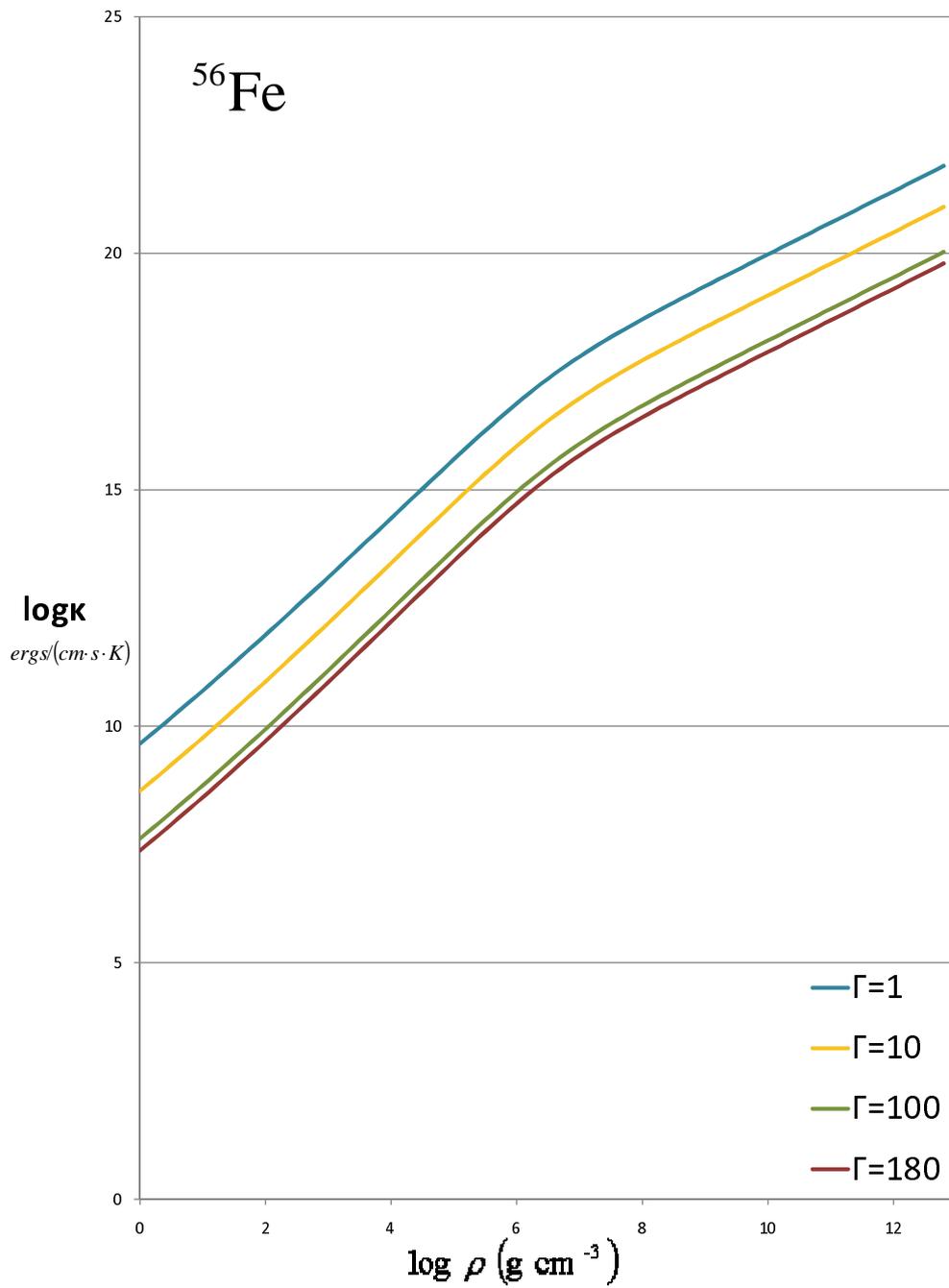


图 44 熱伝導度 ^{56}Fe

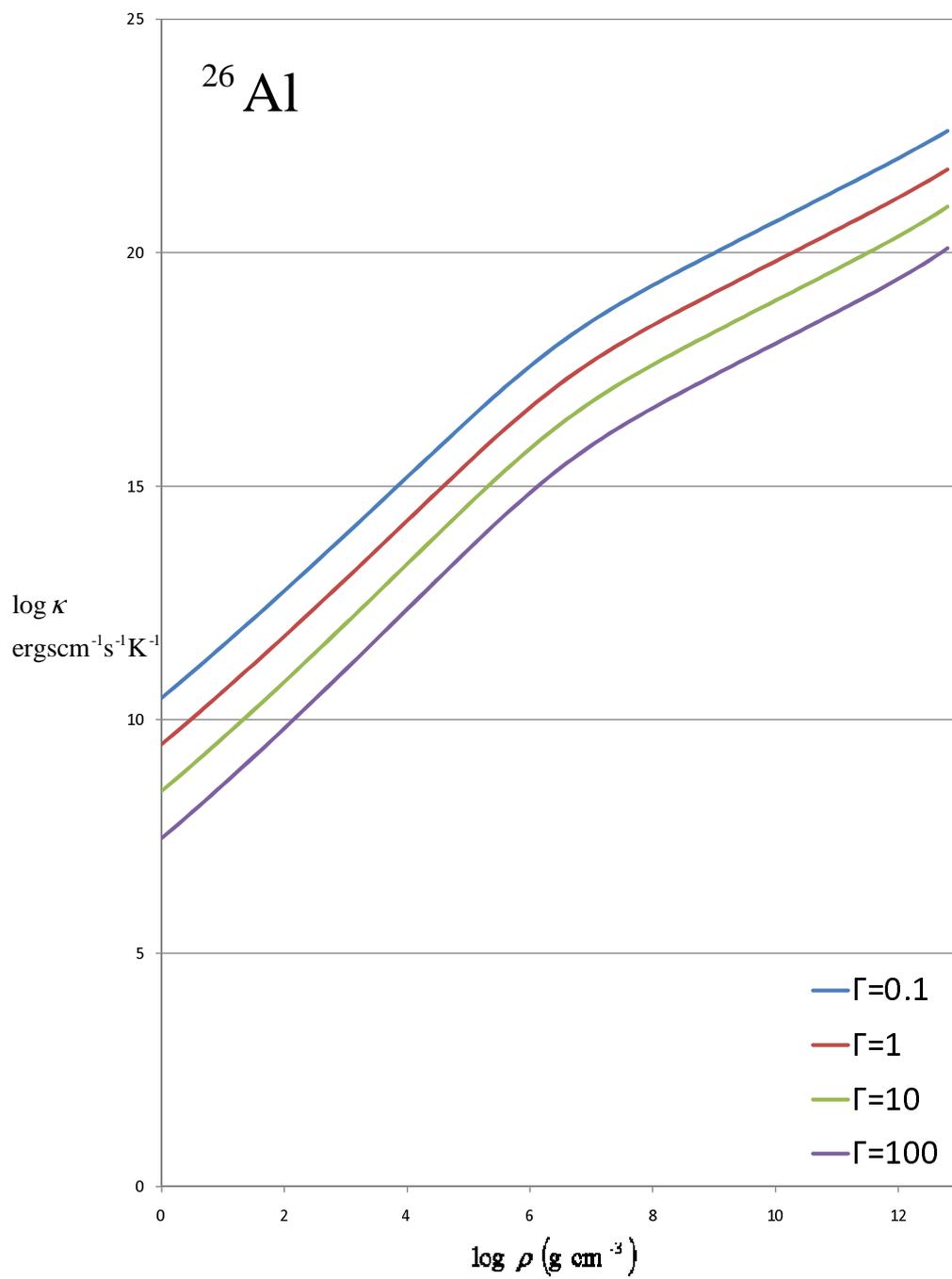


图 45 熱伝導度 ^{26}Al

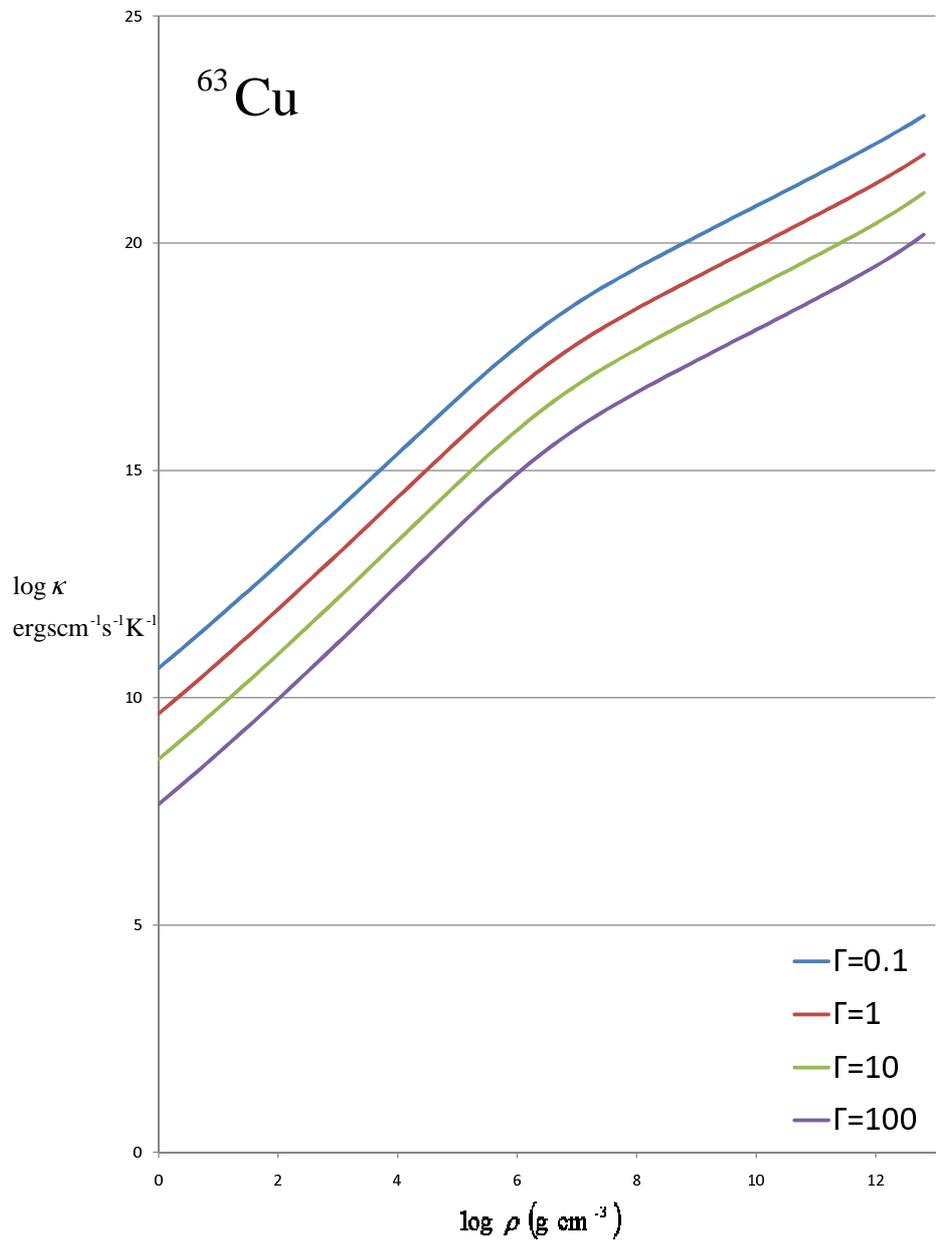


图 46 熱伝導度 ⁶³Cu

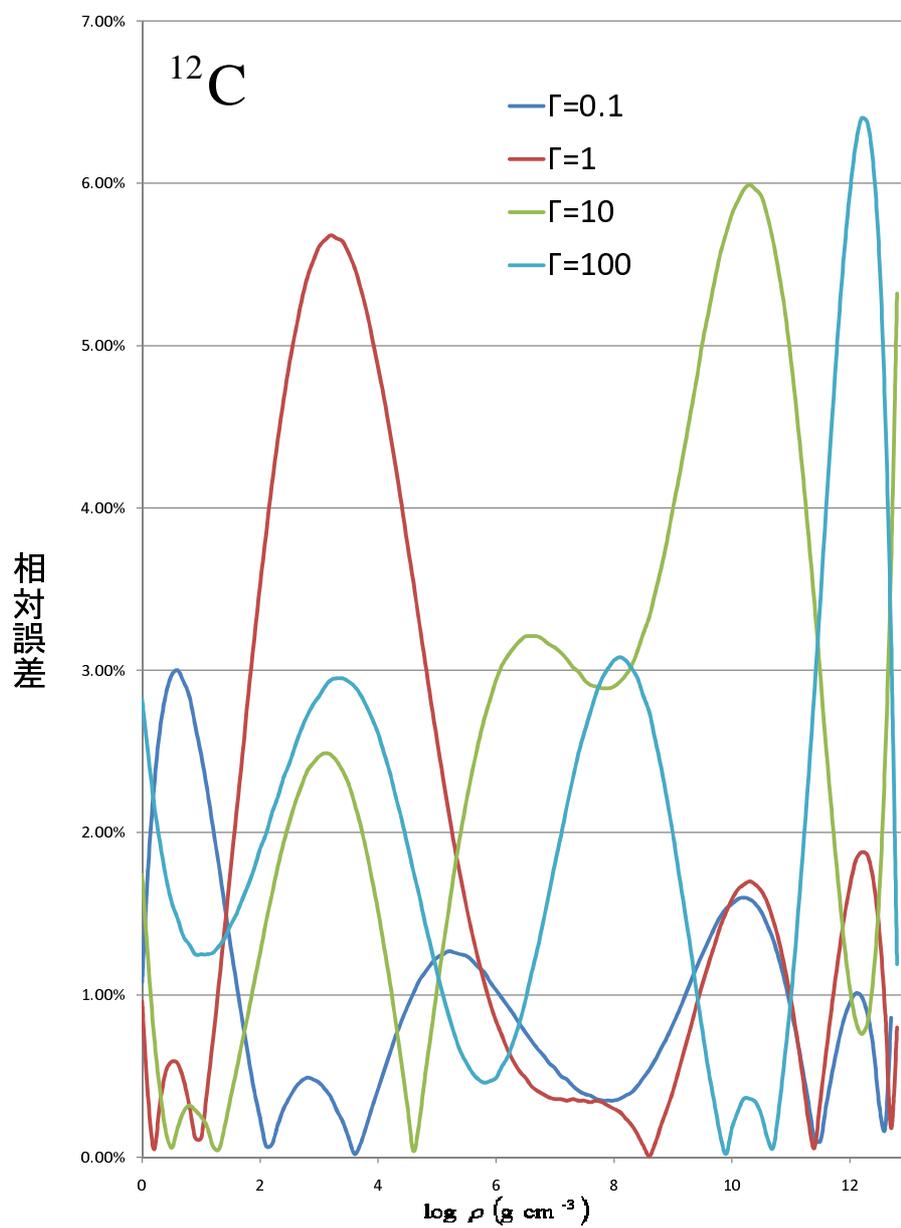


図 47 フィッティング式の相対誤差 ^{12}C

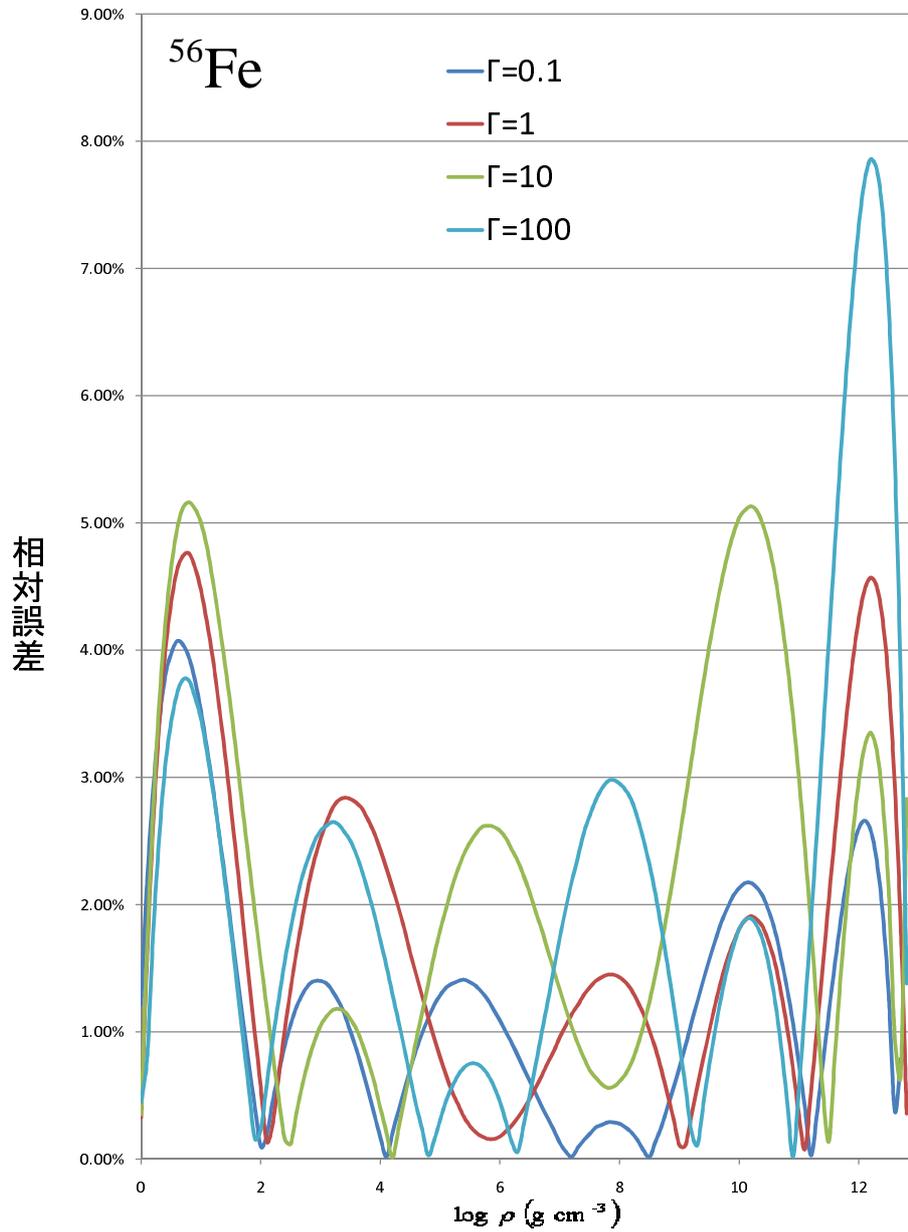


図 48 フィッティング式の相対誤差 ^{56}Fe

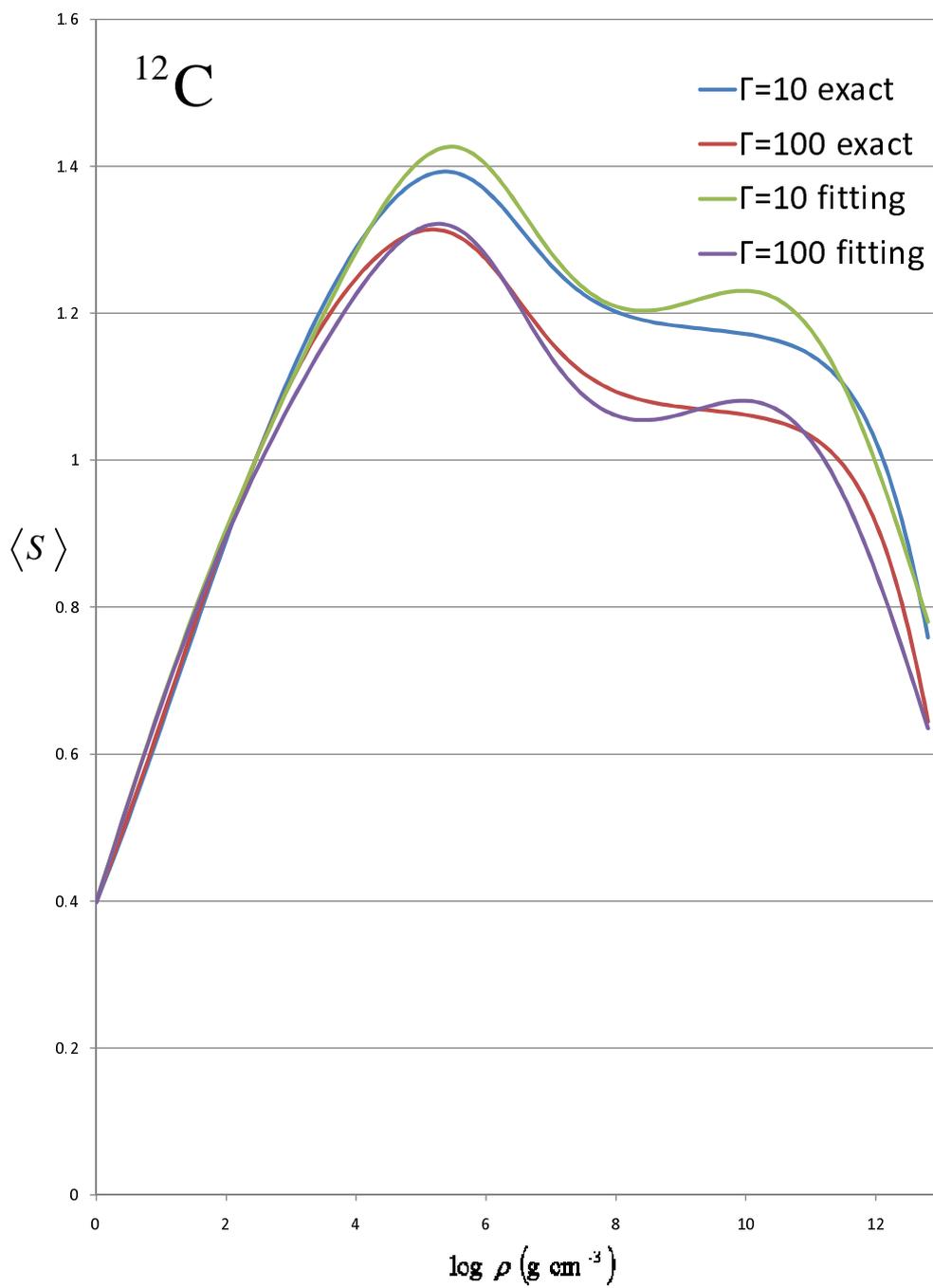


図 49 フィットング式と数値計算の比較 ^{12}C

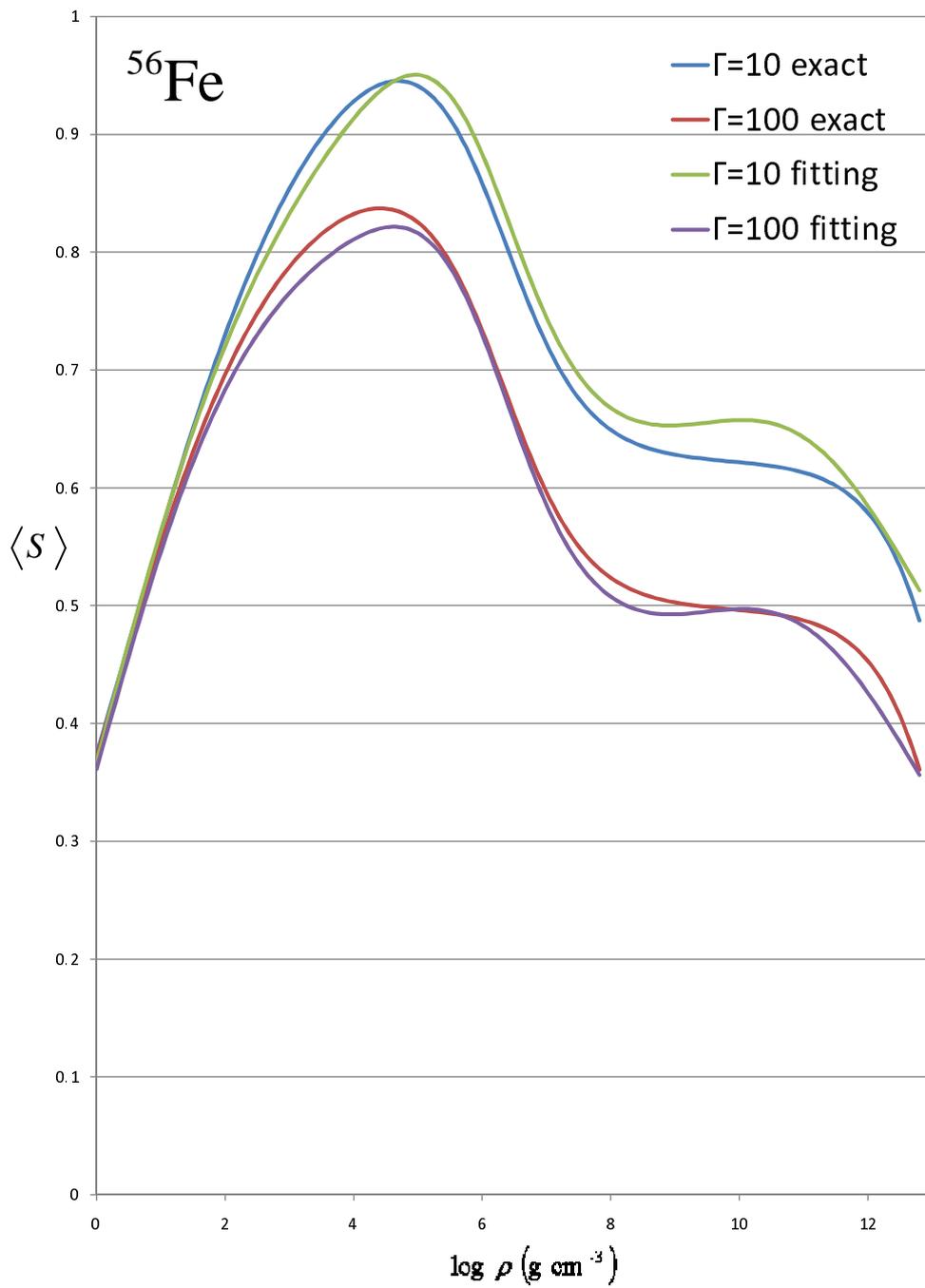


図 50 フィッティング式と数値計算の比較 ^{56}Fe

まとめ

様々な元素組成において、液体金属相における高密度天体の電気伝導度と熱伝導度の第二ボルン近似の計算を行った。その際に、有限の原子核サイズ効果の寄与を考慮し、また以前の研究とは異なる構造因子を導入している。更に、核種が混合している場合や実用性を考慮して解析的なフィッティング式を考えている。

まず有限の原子核サイズ効果の寄与についてであるが、図 33 を見てみる。低密度領域においては、値にほとんど違いはない。しかし、高密度領域では値に違いが出てくる。 ^{12}C では、 $\Gamma = 10$ の場合と $\Gamma = 40$ の場合に関わらず $\rho = 10^{10}\text{gcm}^{-3}$ 辺りから値に差が出て来て、急激に $\langle S \rangle$ の値が低くなっている。計算結果は $\rho = 10^{12.8}\text{gcm}^{-3}$ だが、その時には無視できないほどの差があることが分かる。

次に、 ^{56}Fe の場合は図 34 を見ると、同様に低密度領域においては値にほとんど違いはない。そして高密度領域では、ほとんど ^{12}C の場合と同様に $\Gamma = 10$ の場合と $\Gamma = 40$ の場合に関わらず $\rho = 10^{10}\text{gcm}^{-3}$ 辺りから値に差が出て来て、急激に $\langle S \rangle$ の値が低くなっている。厳密に言えば、 ^{12}C の場合よりもすこしだけ低密度側から値に差が出て来ている。 $\rho = 10^{12.8}\text{gcm}^{-3}$ の時には、 ^{12}C の場合よりも非常に大きな差があることが分かる。これは、電子のド・ブロイ波長が原子核に比べて十分に小さい場合（すなわち電子の運動量移行が大きい場合）、イオンの大きさが無視できなくなっているからである。グラフを見れば分かるように、有限の原子核サイズ効果を考慮することは重要である。

次に第二ボルン近似項の正確さについてであるが、 $\langle S \rangle^{1B}$ と $\langle S \rangle^{1B+2B}$ の差は、 ^{12}C では、 $\rho = 10^6\text{gcm}^{-3}$ において 2 %、 $\rho = 10^{10}\text{gcm}^{-3}$ において 5 % である。また、 ^{56}Fe では $\rho = 10^6\text{gcm}^{-3}$ において 8 %、 $\rho = 10^{10}\text{gcm}^{-3}$ において 17 % である。これらの結果から分かることは、炭素などで構成される白色矮星において第二ボルン近似はそれほど効いてこないが、鉄などで構成される中性子星の外殻では第二ボルン近似が効いてくることが分かった。これは非常に有意義な結果である。

そして、最終的な電気伝導度と熱伝導度の結果について述べる。前に示した図 46 を見て頂ければ分かるように、地球上の ^{63}Cu は 20 で、 $\frac{1}{\sigma} = 1.9 \times 10^{-12}\text{s}$ であり、 0 で、 $\frac{1}{\kappa} = 2.5 \times 10^{-8}\text{erg}^{-1}\text{cms}$ であることを考えると、白色矮星や中性子星などの高密度天体を構成する物質が、いかに電気や熱を伝えやすいものであるかが分かる。

また、今回の電気伝導度と熱伝導度の結果を基に、序論において話した、高密度天体の温度低下の際に中心部がより冷却される場合に外殻へ熱が伝わる時に重要な熱伝導度について正しく評価できる。また、光の吸収係数が、電気伝導度の正確な値を求めることで正確な値が得られる。このように、イオンが液体状態にある時の輸送係数を正確に求めることは重要である。今回の研究の成果が有用なものであったと評価することができると言えよう。

解析的フィッティング式については、全体的に平均した誤差は3%程度である。全体的には ^{12}C も、 ^{56}Fe も大きな差がないが、部分的には ^{56}Fe のほうが誤差が大きくなっているという結果が見て取れる。しかし、簡便さのために求めた解析的なフィッティング式の精度として評価できる値であると言える。

この他にも核種の混合した場合考えることで、実際のケースに当てはまる計算が実行できるように考慮している。

また、Young et al. によって計算された構造因子のフィッティング式も、実用的で良い式であった。

最後になるが、様々な元素組成において、液体金属相における高密度天体の電気伝導度と熱伝導度の第二ボルン近似の計算を行った。ここでは、得られた結果が、一般的にPotekhin et al. (1997)の結果と一致することが分かった。私たちの第二ボルン近似は、他の著者の $\Gamma = 10, \rho = 10^{10}$ での ^{56}Fe での、ボルン近似がないものの結果と比較すると、有意義に小さい。この相違の重要な点は、第二ボルン近似項よりも大きい項のために現れる。

結果において見たように、有限の原子核サイズ効果の寄与が高密度領域において必要になってくるといっても、有意義な結果であった。またフィッティング式もその精度から実用的なものが得られた。第二ボルン近似の正確さも、評価できる結果だったと結論づけることができる。この論文の基となったItoh, Uchida, Sakamoto, Kohyama, and Nozawa (2008)の論文は既に、他の論文で参照され宇宙物理学の発展に貢献している。この分野における更なる発展に重要な役割を演じることができれば幸いである。

謝辞

本研究を行うにあたり、多くの方にご指導いただきました。ここに、心より感謝の意を表します。

伊藤直紀教授に感謝致します。厳しいながらも優しく、学部生時代から三年に渡ってご指導頂きました。研究における道筋を示して頂き、また的確なアドバイスを頂きました。物理学の理解が足りない点が多々あり、非常に手のかかる教え子でしたので御迷惑をおかけしたと思います。いくら感謝しても足りません。また、研究以外の面でも精神的に成長することができたのは、先生の数々のお言葉による所が大きいと思います。第二の両親のようにお慕い申し上げております。

野澤智教授に感謝致します。理論やプログラムなど、多岐に渡って助言を頂きました。お仕事が多忙な中、毎週のゼミに来て頂きました。特にプログラムに関しては、多大な時間を割きより良いプログラムを作成するためにお力を貸して頂きました。先生と連名で論文を書くことができたことは、私の誇りです。

神山泰治先生に感謝致します。数値計算におけるプログラムについて助言をいただきました。日々を同じ研究室で過ごしていたこともあり、自然と頼ってしまう回数が多かったと思います。しかし、どんな時にでも私たち学生のことを第一に考えていて頂いたことには、筆舌に尽くしがたい思いでいっぱいです。

研究室の先輩方に感謝致します。取るに足らない質問でも、丁寧に教えて頂きました。時間があれば、研究をより良いものにしようとする姿勢に感銘を受けたことを覚えています。

後輩達に感謝致します。先輩でありながら教わることも多く、共に成長することができました。研究というものが、一人で行うではなく、連綿と続いていくものだということを教えてもらいました。年齢に関係なく、尊敬できる人に出会えるということは幸せなことです。

同学年の内田慎介君と高橋啓吾君に感謝します。共に物理を通して切磋琢磨した日々を忘れません。内田君は共同研究者として多くの場面で助けてもらいました。二人とは研究室に所属する以前から、物理を共に学び、苦楽をともにしてきました。これからも多くの場面で助けあいながら生きて行ければと思います。

最後に両親に感謝します。私が物理学を学びたいと言った時から私のわがママを聞いてくれ、援助してくれました。二年間の研究生生活を楽しく過ごすことができました。貴方達のような両親を持てたことが一番の幸せです。

参考文献

- [1] Canuto, V., *Electrical conductivity and conductive opacity of a relativistic electron gas* 1970, Ap. J., 159, 641
- [2] David A. Young, Ellen M. Corey, and Hugh E. DeWitt, *Analytic fit to the one-component-plasma structure factor*. 1991, Phys. Rev. A, 44, 10.
- [3] Doggett, J. A., and Spencer, L. V., *Elastic Scattering of Electrons and Positrons by Point Nuclei* 1956, Phys Rev., 103,1597
- [4] D. G. Yakovlev and V. A. Urpin, *Thermal and electricl conductivity in white dwarfs and neutron stars* 1980, Soviet Astr., 24, 303.
- [5] Elliott Flowers, and N. Itoh, *Transport properties of dense matter*, 1976, ApJ, 206, 218.
- [6] Galam, G., and Hansen, J. P. *Statistical mechanics of dense ionized matter. VI. Electron screening corrections to the thermodynamic properties of the one-component plasma* 1976, Phys, Rev. A, 14, 816
- [7] Herman Feshbach, *The Coulomb Scattering of Relativistic Electrons and Positrons by Nuclei* 1952, Phys. Rev, 88, 2.
- [8] Hubbard, W. B., and Lampe, M., *Thermal Conduction by Electrons in Stellar Matter* 1969, ApJ. Suppl., 18, 297
- [9] Iyetomi and Ichimaru *Improvement on the hypernetted-chain equations for dense plasmas* 1982, Phys. Rev. A, 25, 2434.
- [10] James D. Bjorken and Sidney D. Drell, *Relativistic quantum mechanics* 1964, New York : McGraw-Hill Book Company.
- [11] Jancovici, B. 1962, Nuovo Cimento, 25, 428.
- [12] J. A. Doggett and L. V. Spencer, *Elastic Scattering of Electrons and Positrons by Point Nuclei* 1956, Phys. Rev, 103, 6.
- [13] N. Itoh, *Hydrostatic Equilibrium of Hypothetical Quark Stars* 1970, Prog. Theor. Phys. 44, 1
- [14] N. Itoh, N. Tomizawa, M. Tamamura, S. Wanajo, and S. Nozawa *Screening corrections to the electron capture rates in dense stars by the relativistically degenerate electron*

- liquid* 2002, ApJ, 579, 380
- [15] N. Itoh., S. Mitake., H. Iyetomi., and S. Ichimaru., *Electrical and thermal conductivities of dense matter in the liquid metal phase. I. High-temperature results*, 1983, ApJ, 273, 774.
- [16] N. Itoh, S. Uchida, Y. Sakamoto, Y. Kohyama, and S. Nozawa, *The second Born corrections to the electrical and thermal conductivities of dense matter in the liquid metal phase*, 2008, ApJ, 677, 495.
- [17] Potekhin, A. M., Chabrier, G., and Yakovlev, D. G., 1997, A and A, 323, 415
- [18] William A. McKinley, jr., and Herman Feshbach, *The Coulomb Scattering of Relativistic Electrons by Nuclei* 1948, Phys. Rev, 74, 12.
- [19] Ziman, J. M., *Electrons and Phonons*, 1960, Oxford:Oxford University Press.
- [20] Ziman, J. M., *Principles of the theory of solids, 2nd ed*, 1972, Cambridge : Cambridge University Press.

付録 A プログラムリスト

付録として、以下に FORTRAN で書かれた $\langle S \rangle$ のフィッティング式, $\langle S \rangle$ の数値計算, Young et al. の構造因子のプログラムを載せる。

A.1 $\langle S \rangle$ のフィッティング式

```
* S fitting.f *****
*
* Z:atomic number
* A:mass number
* Gam:gamma
* rho:mass density
* alp:fine structure constant
*
* input  NZ,Gam
* output FS
*
*****

      implicit none

      real*8 Z,A,Gam
      real*8 pi,alp,C1
      real*8 x,rho,u
      real*8 vv,ww,zz,xGam
      real*8 Smin1,Smin2
      real*8 Szero1,Szero2
      real*8 Splu1,Splu2
```

```

real*8 T1(100,100),T2(100,100),T3(100,100),T4(100,100)

      real*8 FSmin,FSplu,FSzero
real*8 FS

integer*4 NZ,ic

OPEN (unit=10, file='S fitting.csv')

* input *****

* NZ=1(1H),NZ=2(4He),NZ=3(12C),NZ=4(14N),NZ=5(16O),NZ=6(20Ne)
* NZ=7(24Mg),NZ=8(28Si),NZ=9(32S),NZ=10(40Ca),NZ=11(56Fe)
NZ=1

Gam=0.1d0

*****

if(NZ.eq.1)then
  Z=1.d0
  A=1.d0
elseif(NZ.eq.2)then
  Z=2.d0
  A=4.d0
elseif(NZ.eq.3)then
  Z=6.d0
  A=12.d0

```

```
elseif(NZ.eq.4)then
```

```
  Z=7.d0
```

```
  A=14.d0
```

```
elseif(NZ.eq.5)then
```

```
  Z=8.d0
```

```
  A=16.d0
```

```
elseif(NZ.eq.6)then
```

```
  Z=10.d0
```

```
  A=20.d0
```

```
elseif(NZ.eq.7)then
```

```
  Z=12.d0
```

```
  A=24.d0
```

```
elseif(NZ.eq.8)then
```

```
  Z=14.d0
```

```
  A=28.d0
```

```
elseif(NZ.eq.9)then
```

```
  Z=16.d0
```

```
  A=32.d0
```

```
elseif(NZ.eq.10)then
```

```
  Z=20.d0
```

```
  A=40.d0
```

```
elseif(NZ.eq.11)then
```

```
  Z=26.d0
```

```
  A=56.d0
```

```
endif
```

```
data T1(1,1),T1(1,2),T1(1,3),T1(1,4),T1(1,5),T1(1,6),T1(1,7),
```

```
  * T1(1,8),T1(1,9),T1(1,10),T1(1,11),T1(1,12),T1(1,13),T1(1,14),
```

```
  * T1(2,1),T1(2,2),T1(2,3),T1(2,4),T1(2,5),T1(2,6),T1(2,7),
```

* T1(2, 8), T1(2, 9), T1(2, 10), T1(2, 11), T1(2, 12), T1(2, 13), T1(2, 14),
 * T1(3, 1), T1(3, 2), T1(3, 3), T1(3, 4), T1(3, 5), T1(3, 6), T1(3, 7),
 * T1(3, 8), T1(3, 9), T1(3, 10), T1(3, 11), T1(3, 12), T1(3, 13), T1(3, 14),
 * T1(4, 1), T1(4, 2), T1(4, 3), T1(4, 4), T1(4, 5), T1(4, 6), T1(4, 7),
 * T1(4, 8), T1(4, 9), T1(4, 10), T1(4, 11), T1(4, 12), T1(4, 13), T1(4, 14),
 * T1(5, 1), T1(5, 2), T1(5, 3), T1(5, 4), T1(5, 5), T1(5, 6), T1(5, 7),
 * T1(5, 8), T1(5, 9), T1(5, 10), T1(5, 11), T1(5, 12), T1(5, 13), T1(5, 14),
 * T1(6, 1), T1(6, 2), T1(6, 3), T1(6, 4), T1(6, 5), T1(6, 6), T1(6, 7),
 * T1(6, 8), T1(6, 9), T1(6, 10), T1(6, 11), T1(6, 12), T1(6, 13), T1(6, 14),
 * T1(7, 1), T1(7, 2), T1(7, 3), T1(7, 4), T1(7, 5), T1(7, 6), T1(7, 7),
 * T1(7, 8), T1(7, 9), T1(7, 10), T1(7, 11), T1(7, 12), T1(7, 13), T1(7, 14),
 * T1(8, 1), T1(8, 2), T1(8, 3), T1(8, 4), T1(8, 5), T1(8, 6), T1(8, 7),
 * T1(8, 8), T1(8, 9), T1(8, 10), T1(8, 11), T1(8, 12), T1(8, 13), T1(8, 14),
 * T1(9, 1), T1(9, 2), T1(9, 3), T1(9, 4), T1(9, 5), T1(9, 6), T1(9, 7),
 * T1(9, 8), T1(9, 9), T1(9, 10), T1(9, 11), T1(9, 12), T1(9, 13), T1(9, 14),
 * T1(10, 1), T1(10, 2), T1(10, 3), T1(10, 4), T1(10, 5), T1(10, 6),
 * T1(10, 7), T1(10, 8), T1(10, 9), T1(10, 10), T1(10, 11), T1(10, 12),
 * T1(10, 13), T1(10, 14),
 * T1(11, 1), T1(11, 2), T1(11, 3), T1(11, 4), T1(11, 5), T1(11, 6),
 * T1(11, 7), T1(11, 8), T1(11, 9), T1(11, 10), T1(11, 11), T1(11, 12),
 * T1(11, 13), T1(11, 14)/
 * 0.6496d0, 0.0471d0, -0.0056d0, -0.0284d0, 0.0054d0, 0.0921d0,
 * 0.4531d0, 0.0268d0, 0.0012d0, 0.0051d0, -0.0007d0, 0.0018d0,
 * 0.0011d0, 0.0621d0, 0.7407d0, -0.0007d0, -0.0165d0, -0.0376d0,
 * 0.0114d0, 0.1037d0, 0.3959d0, 0.2196d0, 0.0006d0, 0.044d0,
 * -0.0081d0, 0.0155d0, 0.0056d0, 0.3641d0, 0.8981d0, -0.0666d0,
 * -0.0071d0, -0.0558d0, 0.0247d0, 0.1068d0, 0.404d0, 0.4347d0,
 * 0.0084d0, 0.0741d0, -0.0189d0, 0.0228d0, 0.0174d0, 0.3604d0,
 * 0.9232d0, -0.0781d0, -0.0045d0, -0.0588d0, 0.027d0, 0.1064d0,
 * 0.4047d0, 0.4753d0, 0.0052d0, 0.0796d0, -0.0224d0, 0.0241d0,

```

*      0.0184d0,0.367d0,0.9457d0,-0.0884d0,-0.0019d0,-0.0615d0,
*      0.0291d0,0.1059d0,0.4053d0,0.5166d0,0.0006d0,0.0854d0,
*      -0.0263d0,0.0257d0,0.0189d0,0.3787d0,0.9848d0,-0.1065d0,
*      0.0031d0,-0.0663d0,0.0326d0,0.1046d0,0.4063d0,0.593d0,
*      -0.0094d0,0.0962d0,-0.0338d0,0.0287d0,0.0194d0,0.4011d0,
*      1.0181d0,-0.1221d0,0.0076d0,-0.0703d0,0.0356d0,0.1032d0,
*      0.4069d0,0.652d0,-0.0176d0,0.1035d0,-0.0399d0,0.0305d0,
*      0.02d0,0.4097d0,1.0471d0,-0.1357d0,0.0117d0,-0.0737d0,
*      0.0382d0,0.1018d0,0.4074d0,0.6976d0,-0.0243d0,0.1082d0,
*      -0.0449d0,0.0316d0,0.0208d0,0.4097d0,1.0729d0,-0.1477d0,
*      0.0155d0,-0.0767d0,0.0404d0,0.1004d0,0.4078d0,0.7358d0,
*      -0.0304d0,0.1116d0,-0.0494d0,0.0323d0,0.0214d0,0.4074d0,
*      1.1171d0,-0.1684d0,0.0222d0,-0.0818d0,0.044d0,0.0977d0,
*      0.4084d0,0.8004d0,-0.0423d0,0.1169d0,-0.0571d0,0.0333d0,
*      0.0223d0,0.4036d0,1.169d0,-0.197d0,0.0297d0,-0.0869d0,
*      0.0481d0,0.0946d0,0.4017d0,0.8856d0,-0.0612d0,0.1224d0,
*      -0.0679d0,0.0344d0,0.023d0,0.3986d0/

```

```

data T2(1,1),T2(1,2),T2(1,3),T2(1,4),T2(1,5),T2(1,6),T2(1,7),
* T2(1,8),T2(1,9),T2(1,10),T2(1,11),T2(1,12),T2(1,13),T2(1,14),
* T2(2,1),T2(2,2),T2(2,3),T2(2,4),T2(2,5),T2(2,6),T2(2,7),
* T2(2,8),T2(2,9),T2(2,10),T2(2,11),T2(2,12),T2(2,13),T2(2,14),
* T2(3,1),T2(3,2),T2(3,3),T2(3,4),T2(3,5),T2(3,6),T2(3,7),
* T2(3,8),T2(3,9),T2(3,10),T2(3,11),T2(3,12),T2(3,13),T2(3,14),
* T2(4,1),T2(4,2),T2(4,3),T2(4,4),T2(4,5),T2(4,6),T2(4,7),
* T2(4,8),T2(4,9),T2(4,10),T2(4,11),T2(4,12),T2(4,13),T2(4,14),
* T2(5,1),T2(5,2),T2(5,3),T2(5,4),T2(5,5),T2(5,6),T2(5,7),
* T2(5,8),T2(5,9),T2(5,10),T2(5,11),T2(5,12),T2(5,13),T2(5,14),
* T2(6,1),T2(6,2),T2(6,3),T2(6,4),T2(6,5),T2(6,6),T2(6,7),

```

* T2(6, 8), T2(6, 9), T2(6, 10), T2(6, 11), T2(6, 12), T2(6, 13), T2(6, 14),
 * T2(7, 1), T2(7, 2), T2(7, 3), T2(7, 4), T2(7, 5), T2(7, 6), T2(7, 7),
 * T2(7, 8), T2(7, 9), T2(7, 10), T2(7, 11), T2(7, 12), T2(7, 13), T2(7, 14),
 * T2(8, 1), T2(8, 2), T2(8, 3), T2(8, 4), T2(8, 5), T2(8, 6), T2(8, 7),
 * T2(8, 8), T2(8, 9), T2(8, 10), T2(8, 11), T2(8, 12), T2(8, 13), T2(8, 14),
 * T2(9, 1), T2(9, 2), T2(9, 3), T2(9, 4), T2(9, 5), T2(9, 6), T2(9, 7),
 * T2(9, 8), T2(9, 9), T2(9, 10), T2(9, 11), T2(9, 12), T2(9, 13), T2(9, 14),
 * T2(10, 1), T2(10, 2), T2(10, 3), T2(10, 4), T2(10, 5), T2(10, 6),
 * T2(10, 7), T2(10, 8), T2(10, 9), T2(10, 10), T2(10, 11), T2(10, 12),
 * T2(10, 13), T2(10, 14),
 * T2(11, 1), T2(11, 2), T2(11, 3), T2(11, 4), T2(11, 5), T2(11, 6),
 * T2(11, 7), T2(11, 8), T2(11, 9), T2(11, 10), T2(11, 11), T2(11, 12),
 * T2(11, 13), T2(11, 14)/
 * 0.2781d0, 0.0357d0, 0.0224d0, -0.0072d0, 0.0059d0, 0.0303d0,
 * 0.3087d0, 0.0225d0, 0.0007d0, 0.0045d0, -0.0006d0, 0.0016d0,
 * 0.0007d0, 0.0557d0, 0.3281d0, 0.0222d0, 0.0249d0, -0.0134d0,
 * 0.0082d0, 0.0323d0, 0.2749d0, 0.1881d0, -0.0008d0, 0.0385d0,
 * -0.0071d0, 0.0136d0, 0.0041d0, 0.32d0, 0.4042d0, -0.0077d0,
 * 0.0396d0, -0.0245d0, 0.0152d0, 0.0269d0, 0.279d0, 0.2913d0,
 * 0.0011d0, 0.0519d0, -0.0133d0, 0.0164d0, 0.0095d0, 0.2571d0,
 * 0.417d0, -0.0131d0, 0.0423d0, -0.0264d0, 0.0163d0, 0.0258d0,
 * 0.2794d0, 0.3121d0, -0.0026d0, 0.0551d0, -0.0156d0, 0.0173d0,
 * 0.0093d0, 0.2604d0, 0.4286d0, -0.018d0, 0.0448d0, -0.028d0,
 * 0.0174d0, 0.0247d0, 0.2797d0, 0.3353d0, -0.0072d0, 0.059d0,
 * -0.0182d0, 0.0185d0, 0.0087d0, 0.2694d0, 0.4489d0, -0.0266d0,
 * 0.0491d0, -0.0309d0, 0.0191d0, 0.0227d0, 0.2802d0, 0.3787d0,
 * -0.0166d0, 0.0664d0, -0.0229d0, 0.0208d0, 0.0074d0, 0.2873d0,
 * 0.4662d0, -0.0339d0, 0.0528d0, -0.0333d0, 0.0205d0, 0.0209d0,
 * 0.2805d0, 0.4085d0, -0.0233d0, 0.0711d0, -0.0263d0, 0.0221d0,
 * 0.0066d0, 0.2923d0, 0.4813d0, -0.0404d0, 0.056d0, -0.0353d0,

```

*      0.0217d0,0.0193d0,0.2808d0,0.4283d0,-0.0281d0,0.0736d0,
*      -0.0288d0,0.0228d0,0.0061d0,0.2897d0,0.4946d0,-0.046d0,
*      0.0588d0,-0.037d0,0.0227d0,0.0179d0,0.281d0,0.4436d0,
*      -0.0321d0,0.0754d0,-0.0307d0,0.0231d0,0.0056d0,0.2856d0,
*      0.5173d0,-0.0556d0,0.0635d0,-0.0397d0,0.0241d0,0.0154d0,
*      0.2813d0,0.4687d0,-0.0395d0,0.0781d0,-0.0339d0,0.0236d0,
*      0.0047d0,0.2799d0,0.5452d0,-0.0672d0,0.0684d0,-0.0426d0,
*      0.0254d0,0.0127d0,0.2773d0,0.5053d0,-0.0505d0,0.0819d0,
*      -0.0383d0,0.0243d0,0.0033d0,0.2763d0/

```

```

data T3(1,1),T3(1,2),T3(1,3),T3(1,4),T3(1,5),T3(1,6),T3(1,7),
* T3(1,8),T3(1,9),T3(1,10),T3(1,11),T3(1,12),T3(1,13),T3(1,14),
* T3(2,1),T3(2,2),T3(2,3),T3(2,4),T3(2,5),T3(2,6),T3(2,7),
* T3(2,8),T3(2,9),T3(2,10),T3(2,11),T3(2,12),T3(2,13),T3(2,14),
* T3(3,1),T3(3,2),T3(3,3),T3(3,4),T3(3,5),T3(3,6),T3(3,7),
* T3(3,8),T3(3,9),T3(3,10),T3(3,11),T3(3,12),T3(3,13),T3(3,14),
* T3(4,1),T3(4,2),T3(4,3),T3(4,4),T3(4,5),T3(4,6),T3(4,7),
* T3(4,8),T3(4,9),T3(4,10),T3(4,11),T3(4,12),T3(4,13),T3(4,14),
* T3(5,1),T3(5,2),T3(5,3),T3(5,4),T3(5,5),T3(5,6),T3(5,7),
* T3(5,8),T3(5,9),T3(5,10),T3(5,11),T3(5,12),T3(5,13),T3(5,14),
* T3(6,1),T3(6,2),T3(6,3),T3(6,4),T3(6,5),T3(6,6),T3(6,7),
* T3(6,8),T3(6,9),T3(6,10),T3(6,11),T3(6,12),T3(6,13),T3(6,14),
* T3(7,1),T3(7,2),T3(7,3),T3(7,4),T3(7,5),T3(7,6),T3(7,7),
* T3(7,8),T3(7,9),T3(7,10),T3(7,11),T3(7,12),T3(7,13),T3(7,14),
* T3(8,1),T3(8,2),T3(8,3),T3(8,4),T3(8,5),T3(8,6),T3(8,7),
* T3(8,8),T3(8,9),T3(8,10),T3(8,11),T3(8,12),T3(8,13),T3(8,14),
* T3(9,1),T3(9,2),T3(9,3),T3(9,4),T3(9,5),T3(9,6),T3(9,7),
* T3(9,8),T3(9,9),T3(9,10),T3(9,11),T3(9,12),T3(9,13),T3(9,14),
* T3(10,1),T3(10,2),T3(10,3),T3(10,4),T3(10,5),T3(10,6),

```

* T3(10, 7), T3(10, 8), T3(10, 9), T3(10, 10), T3(10, 11), T3(10, 12),
 * T3(10, 13), T3(10, 14),
 * T3(11, 1), T3(11, 2), T3(11, 3), T3(11, 4), T3(11, 5), T3(11, 6),
 * T3(11, 7), T3(11, 8), T3(11, 9), T3(11, 10), T3(11, 11), T3(11, 12),
 * T3(11, 13), T3(11, 14)/
 * 0.1543d0, 0.0202d0, 0.0205d0, -0.0024d0, 0.0057d0, 0.0133d0,
 * 0.2293d0, 0.0196d0, 0.0004d0, 0.0041d0, -0.0006d0, 0.0015d0,
 * 0.0005d0, 0.0507d0, 0.1881d0, 0.0137d0, 0.0248d0, -0.0063d0,
 * 0.0074d0, 0.0135d0, 0.2069d0, 0.1636d0, -0.0017d0, 0.0339d0,
 * -0.0064d0, 0.0121d0, 0.0032d0, 0.2834d0, 0.238d0, -0.0068d0,
 * 0.0367d0, -0.014d0, 0.0123d0, 0.0084d0, 0.2095d0, 0.2027d0,
 * -0.0028d0, 0.0375d0, -0.0099d0, 0.0121d0, 0.0051d0, 0.1902d0,
 * 0.2466d0, -0.0105d0, 0.0388d0, -0.0152d0, 0.0131d0, 0.0074d0,
 * 0.2097d0, 0.2148d0, -0.0064d0, 0.0397d0, -0.0115d0, 0.0129d0,
 * 0.0044d0, 0.1933d0, 0.2544d0, -0.0138d0, 0.0406d0, -0.0164d0,
 * 0.0137d0, 0.0065d0, 0.2099d0, 0.2302d0, -0.0108d0, 0.0428d0,
 * -0.0134d0, 0.0139d0, 0.0035d0, 0.2021d0, 0.2679d0, -0.0196d0,
 * 0.0438d0, -0.0183d0, 0.0149d0, 0.0049d0, 0.2102d0, 0.2597d0,
 * -0.0191d0, 0.0487d0, -0.0168d0, 0.0159d0, 0.0017d0, 0.2188d0,
 * 0.2794d0, -0.0244d0, 0.0465d0, -0.0198d0, 0.0158d0, 0.0036d0,
 * 0.2104d0, 0.2776d0, -0.0245d0, 0.0521d0, -0.019d0, 0.017d0,
 * 0.0005d0, 0.2226d0, 0.2893d0, -0.0287d0, 0.0487d0, -0.0211d0,
 * 0.0165d0, 0.0024d0, 0.2105d0, 0.2872d0, -0.0279d0, 0.0536d0,
 * -0.0202d0, 0.0174d0, -0.0002d0, 0.2192d0, 0.298d0, -0.0323d0,
 * 0.0506d0, -0.0222d0, 0.017d0, 0.0013d0, 0.2106d0, 0.2938d0,
 * -0.0305d0, 0.0545d0, -0.0211d0, 0.0175d0, -0.0008d0, 0.2147d0,
 * 0.3126d0, -0.0384d0, 0.0537d0, -0.0238d0, 0.0178d0, -0.0005d0,
 * 0.2108d0, 0.3049d0, -0.0352d0, 0.0561d0, -0.0226d0, 0.0177d0,
 * -0.0019d0, 0.2089d0, 0.3306d0, -0.0451d0, 0.0569d0, -0.0254d0,
 * 0.0183d0, -0.0024d0, 0.2082d0, 0.3248d0, -0.0422d0, 0.0589d0,

```

*      -0.0246d0,0.0181d0,-0.0035d0,0.2068d0/

data T4(1,1),T4(1,2),T4(1,3),T4(1,4),T4(1,5),T4(1,6),T4(1,7),
*   T4(1,8),T4(1,9),T4(1,10),T4(1,11),T4(1,12),
*     T4(2,1),T4(2,2),T4(2,3),T4(2,4),T4(2,5),T4(2,6),T4(2,7),
*   T4(2,8),T4(2,9),T4(2,10),T4(2,11),T4(2,12),
*   T4(3,1),T4(3,2),T4(3,3),T4(3,4),T4(3,5),T4(3,6),T4(3,7),
*   T4(3,8),T4(3,9),T4(3,10),T4(3,11),T4(3,12),
*   T4(4,1),T4(4,2),T4(4,3),T4(4,4),T4(4,5),T4(4,6),T4(4,7),
*   T4(4,8),T4(4,9),T4(4,10),T4(4,11),T4(4,12),
*   T4(5,1),T4(5,2),T4(5,3),T4(5,4),T4(5,5),T4(5,6),T4(5,7),
*   T4(5,8),T4(5,9),T4(5,10),T4(5,11),T4(5,12),
*   T4(6,1),T4(6,2),T4(6,3),T4(6,4),T4(6,5),T4(6,6),T4(6,7),
*   T4(6,8),T4(6,9),T4(6,10),T4(6,11),T4(6,12),
*   T4(7,1),T4(7,2),T4(7,3),T4(7,4),T4(7,5),T4(7,6),T4(7,7),
*   T4(7,8),T4(7,9),T4(7,10),T4(7,11),T4(7,12),
*   T4(8,1),T4(8,2),T4(8,3),T4(8,4),T4(8,5),T4(8,6),T4(8,7),
*   T4(8,8),T4(8,9),T4(8,10),T4(8,11),T4(8,12),
*   T4(9,1),T4(9,2),T4(9,3),T4(9,4),T4(9,5),T4(9,6),T4(9,7),
*   T4(9,8),T4(9,9),T4(9,10),T4(9,11),T4(9,12),
*   T4(10,1),T4(10,2),T4(10,3),T4(10,4),T4(10,5),T4(10,6),
*     T4(10,7),T4(10,8),T4(10,9),T4(10,10),T4(10,11),T4(10,12),
*   T4(11,1),T4(11,2),T4(11,3),T4(11,4),T4(11,5),T4(11,6),
*     T4(11,7),T4(11,8),T4(11,9),T4(11,10),T4(11,11),T4(11,12)/
*   0.4288d0,-0.5654d0,0.0769d0,0.0662d0,0.5283d0,-0.5546d0,
*   -0.0256d0,0.0559d0,0.6073d0,-0.5135d0,-0.1064d0,0.0143d0,
*   0.1778d0,-0.5446d0,0.3337d0,0.0467d0,0.009d0,-0.7314d0,
*   0.5152d0,0.2429d0,-4.1969d0,-2.82d0,4.9321d0,2.461d0,
*   0.2634d0,-0.5073d0,0.2504d0,0.0083d0,0.3358d0,-0.4548d0,

```

```

*      0.1868d0,-0.0421d0,0.474d0,-0.1732d0,0.0621d0,-0.3263d0,
*      0.2661d0,-0.5144d0,0.2474d0,0.0155d0,0.3352d0,-0.4724d0,
*      0.185d0,-0.0245d0,0.4662d0,-0.2319d0,0.0612d0,-0.2675d0,
*      0.2619d0,-0.5252d0,0.2512d0,0.0264d0,0.3055d0,-0.509d0,
*      0.2121d0,0.0124d0,0.3641d0,-0.3358d0,0.1539d0,-0.1632d0,
*      0.2489d0,-0.5454d0,0.2638d0,0.0472d0,0.2147d0,-0.5917d0,
*      0.3007d0,0.0973d0,-0.2351d0,-0.7498d0,0.7369d0,0.2631d0,
*      0.2461d0,-0.5525d0,0.2674d0,0.0549d0,0.1748d0,-0.6101d0,
*      0.3446d0,0.1193d0,-0.9551d0,-1.0234d0,1.4926d0,0.5803d0,
*      0.2513d0,-0.5518d0,0.2632d0,0.0547d0,0.1905d0,-0.5803d0,
*      0.3334d0,0.0915d0,-0.6419d0,-0.6405d0,1.2221d0,0.2096d0,
*      0.2583d0,-0.5496d0,0.2568d0,0.0527d0,0.2221d0,-0.5438d0,
*      0.3045d0,0.0556d0,-0.1657d0,-0.3169d0,0.7513d0,-0.1263d0,
*      0.27d0,-0.548d0,0.2454d0,0.0513d0,0.2725d0,-0.5002d0,
*      0.2539d0,0.0107d0,0.2634d0,-0.1219d0,0.2993d0,-0.3459d0,
*      0.276d0,-0.5561d0,0.2389d0,0.0594d0,0.2749d0,-0.5122d0,
*      0.2464d0,0.0208d0,0.2677d0,-0.1927d0,0.2586d0,-0.2894d0/

```

```
pi=4.d0*datan(1.d0)
```

```
alp=1.d0/137.036d0
```

```
      if(Gam.eq.0.1d0)then
```

```
      xGam=-1.d0
```

```
      elseif(Gam.eq.180.d0)then
```

```
      xGam=1.d0
```

```
      else
```

```
      xGam=0.61439d0*dlog10(Gam)-0.38561d0
```

```
      endif
```

```

vv=T4(NZ,1)+T4(NZ,2)*xGam+T4(NZ,3)*xGam**2+T4(NZ,4)*xGam**3
ww=T4(NZ,5)+T4(NZ,6)*xGam+T4(NZ,7)*xGam**2+T4(NZ,8)*xGam**3
zz=T4(NZ,9)+T4(NZ,10)*xGam+T4(NZ,11)*xGam**2+T4(NZ,12)*xGam**3

```

```

do ic=0,128
x=0.1d0*double(ic)
rho=10.d0**x
u=2.d0*pi*x/25.6d0

```

```

C1=(1.018d0*(Z/A)**(2.d0/3.d0)*(rho*1.d-6)**(2.d0/3.d0))/
* (1.d0+1.018d0*(Z/A)**(2.d0/3.d0)*(rho*1.d-6)**(2.d0/3.d0))

```

```

Smin1=T1(NZ,1)*dsin(u)+T1(NZ,2)*dsin(2.d0*u)
* +T1(NZ,3)*dsin(3.d0*u)+T1(NZ,4)*dsin(4.d0*u)
* +T1(NZ,5)*dsin(5.d0*u)+12.8d0/pi*T1(NZ,6)*u+T1(NZ,7)

```

```

Smin2=T1(NZ,8)*dsin(u)+T1(NZ,9)*dsin(2.d0*u)
* +T1(NZ,10)*dsin(3.d0*u)+T1(NZ,11)*dsin(4.d0*u)
* +T1(NZ,12)*dsin(5.d0*u)+12.8d0/pi*T1(NZ,13)*u+T1(NZ,14)

```

```

Szero1=T2(NZ,1)*dsin(u)+T2(NZ,2)*dsin(2.d0*u)
* +T2(NZ,3)*dsin(3.d0*u)+T2(NZ,4)*dsin(4.d0*u)
* +T2(NZ,5)*dsin(5.d0*u)+12.8d0/pi*T2(NZ,6)*u+T2(NZ,7)

```

```

Szero2=T2(NZ,8)*dsin(u)+T2(NZ,9)*dsin(2.d0*u)

```

```

*      +T2(NZ,10)*dsin(3.d0*u)+T2(NZ,11)*dsin(4.d0*u)
*      +T2(NZ,12)*dsin(5.d0*u)+12.8d0/pi*T2(NZ,13)*u+T2(NZ,14)

Splu1=T3(NZ,1)*dsin(u)+T3(NZ,2)*dsin(2.d0*u)
*      +T3(NZ,3)*dsin(3.d0*u)+T3(NZ,4)*dsin(4.d0*u)
*      +T3(NZ,5)*dsin(5.d0*u)+12.8d0/pi*T3(NZ,6)*u+T3(NZ,7)

Splu2=T3(NZ,8)*dsin(u)+T3(NZ,9)*dsin(2.d0*u)
*      +T3(NZ,10)*dsin(3.d0*u)+T3(NZ,11)*dsin(4.d0*u)
*      +T3(NZ,12)*dsin(5.d0*u)+12.8d0/pi*T3(NZ,13)*u+T3(NZ,14)

FSmin=vv*Smin1+(1.d0-vv)*Smin2
FSzero=ww*Szero1+(1.d0-ww)*Szero2
FSplu=zz*Splu1+(1.d0-zz)*Splu2

FS=FSmin-C1*FSplu+pi*Z*alp*dsqrt(C1)*(FSzero-FSplu)

* output *****

* fitting formula for <S>
write(10,*) x,',',FS

*****

enddo

```

end

A.2 〈S〉の数値計算

```
c-----<S>exact-----  
    implicit none  
  
    real*8 Z,A,Gam  
real*8 pi,x,rho,alp,kf,ai,rs,xx,C1,rc  
real*8 U1,U2,q,q2eps,f,y,Sy  
real*8 x1,x2,x3,x4,y1,y2,y3,y4  
real*8 Fmin,Fzero,Fplu  
    real*8 Smin,Szero,Splu,Sexact  
real*8 aa(10),b(10,10,10),qq(10)  
real*8 c,cc,d,dd  
real*8 B0,f0,cs  
    real*8 XU(100),WU(100)  
real*8 UU(100)  
    real*8 FSmin(150,100),FSzero(150,100),FSplu(150,100),FS(150,100)  
  
integer*4 NG,NDU,ic,NN,ix,ig,i,j,k,l,m,n,is  
  
OPEN (unit=10, file='56Fe.xls')  
  
Z=26.d0  
  
A=56.d0
```

```

data b(1,1,1),b(1,1,2),b(1,1,3),
* b(1,2,1),b(1,2,2),b(1,2,3),
* b(1,3,1),b(1,3,2),b(1,3,3),
* b(1,4,1),b(1,4,2),b(1,4,3),
* b(2,1,1),b(2,1,2),b(2,1,3),b(2,1,4),b(2,1,5),b(2,1,6),b(2,1,7),
* b(2,2,1),b(2,2,2),b(2,2,3),b(2,2,4),b(2,2,5),b(2,2,6),b(2,2,7),
* b(2,3,1),b(2,3,2),b(2,3,3),b(2,3,4),b(2,3,5),b(2,3,6),b(2,3,7),
* b(2,4,1),b(2,4,2),b(2,4,3),b(2,4,4),b(2,4,5),b(2,4,6),b(2,4,7),
* b(2,5,1),b(2,5,2),b(2,5,3),b(2,5,4),b(2,5,5),b(2,5,6),b(2,5,7),
* b(2,6,1),b(2,6,2),b(2,6,3),b(2,6,4),b(2,6,5),b(2,6,6),b(2,6,7),
* b(2,7,1),b(2,7,2),b(2,7,3),b(2,7,4),b(2,7,5),b(2,7,6),b(2,7,7),
* b(3,1,1),b(3,1,2),b(3,1,3),b(3,1,4),b(3,1,5),b(3,1,6),b(3,1,7),
* b(3,2,1),b(3,2,2),b(3,2,3),b(3,2,4),b(3,2,5),b(3,2,6),b(3,2,7),
* b(3,3,1),b(3,3,2),b(3,3,3),b(3,3,4),b(3,3,5),b(3,3,6),b(3,3,7),
* b(3,4,1),b(3,4,2),b(3,4,3),b(3,4,4),b(3,4,5),b(3,4,6),b(3,4,7),
* b(3,5,1),b(3,5,2),b(3,5,3),b(3,5,4),b(3,5,5),b(3,5,6),b(3,5,7),
* b(3,6,1),b(3,6,2),b(3,6,3),b(3,6,4),b(3,6,5),b(3,6,6),b(3,6,7),
* b(3,7,1),b(3,7,2),b(3,7,3),b(3,7,4),b(3,7,5),b(3,7,6),b(3,7,7),
* b(4,1,1),b(4,1,2),b(4,1,3),b(4,1,4),b(4,1,5),b(4,1,6),b(4,1,7),
* b(4,2,1),b(4,2,2),b(4,2,3),b(4,2,4),b(4,2,5),b(4,2,6),b(4,2,7),
* b(4,3,1),b(4,3,2),b(4,3,3),b(4,3,4),b(4,3,5),b(4,3,6),b(4,3,7),
* b(4,4,1),b(4,4,2),b(4,4,3),b(4,4,4),b(4,4,5),b(4,4,6),b(4,4,7),
* b(4,5,1),b(4,5,2),b(4,5,3),b(4,5,4),b(4,5,5),b(4,5,6),b(4,5,7),
* b(5,1,1),b(5,1,2),b(5,1,3),b(5,1,4),b(5,1,5),b(5,1,6),
* b(5,2,1),b(5,2,2),b(5,2,3),b(5,2,4),b(5,2,5),b(5,2,6),
* b(5,3,1),b(5,3,2),b(5,3,3),b(5,3,4),b(5,3,5),b(5,3,6),
* b(5,4,1),b(5,4,2),b(5,4,3),b(5,4,4),b(5,4,5),b(5,4,6),
* b(5,5,1),b(5,5,2),b(5,5,3),b(5,5,4),b(5,5,5),b(5,5,6),
* b(6,1,1),b(6,1,2),b(6,1,3),

```

* $b(6, 2, 1), b(6, 2, 2), b(6, 2, 3),$
 * $b(6, 3, 1), b(6, 3, 2), b(6, 3, 3),$
 * $b(6, 4, 1), b(6, 4, 2), b(6, 4, 3)/$
 * $0.d0, 0.d0, 0.d0,$
 * $-7.37159d-3, -3.093941d-2, 5.775133d-6,$
 * $-1.785965d-3, -9.156094d-3, -5.215690d-6,$
 * $1.551919d-3, 1.000275d-2, 3.407914d-6,$
 * $-2.211480d-2, -9.281645d-2, 2.105917d-5, 1.527865d-7,$
 * $-2.511623d-9, 7.838556d-12, 0.d0,$
 * $2.970690d-3, 2.794343d-2, -8.758671d-7, -2.009939d-7, 1.878432d-9,$
 * $-4.990626d-12, 0.d0,$
 * $1.428655d-3, 4.165185d-3, -1.643889d-5, 1.826357d-7, -1.031887d-9,$
 * $2.195364d-12, 0.d0,$
 * $-5.537246d-4, -5.848738d-3, -8.728617d-6, 1.076314d-7,$
 * $-6.819082d-10, 1.557185d-12, 0.d0,$
 * $5.617672d-5, -2.848769d-4, -6.427415d-7, 6.133415d-8,$
 * $-6.343027d-10, 3.021813d-12, -5.585550d-15,$
 * $8.484234d-6, 6.353313d-4, 2.422957d-6, -3.388935d-8,$
 * $1.718468d-10, -3.109722d-13, 0.d0,$
 * $-2.084635d-6, -9.537685d-5, -4.578476d-7, 4.459593d-9,$
 * $-1.674969d-11, 2.099074d-14, 0.d0,$
 * $-1.349980d-2, -1.178214d-2, 3.414967d-5, -1.235405d-6,$
 * $1.525965d-8, -8.094505d-11, 1.550263d-13,$
 * $2.555060d-3, 2.664933d-3, -6.691853d-6, 2.919678d-7, -3.857775d-9,$
 * $2.114887d-11, -4.127568d-14,$
 * $-3.764923d-4, -1.703133d-3, 1.295266d-5, -2.014016d-7,$
 * $1.623818d-9, -6.486351d-12, 1.009608d-14,$
 * $-3.254136d-5, 1.416699d-3, 1.207188d-6, -7.290296d-8, 1.198781d-9,$
 * $-7.296064d-12, 1.506339d-14,$
 * $1.485941d-5, 1.703860d-5, -7.305411d-7, -6.153975d-8,$

* 5.619353d-10,-2.048821d-12,2.735942d-15,
 * -1.211017d-6,-2.288448d-4,-6.681539d-7,5.033742d-8,
 * -4.847156d-10,2.050713d-12,-3.298829d-15,
 * 6.279524d-9,3.944934d-5,1.525661d-7,-7.424258d-9,
 * 6.856207d-11,-2.849071d-13,4.540122d-16,
 * -3.662810d-3,-1.521862d-3,8.409706d-6,-1.124811d-7,
 * 4.251699d-10,3.730156d-13,-3.686204d-15,
 * 6.535520d-4,2.852788d-4,-1.894213d-6,3.625697d-8,
 * -2.316304d-10,4.991858d-13,0.d0,
 * -1.414461d-4,-6.637037d-5,-4.604689d-7,1.057214d-7,
 * -1.346978d-9,6.856586d-12,-1.258136d-14,
 * 2.153694d-5,2.584947d-4,2.080372d-6,-6.118364d-8,
 * 3.932223d-10,-8.330949d-13,0.d0,
 * -2.009718d-6,-7.529755d-5,-6.008686d-7,1.111813d-8,
 * -5.850549d-11,1.061405d-13,0.d0,
 * -1.113950d-3,-4.092842d-4,1.302525d-6,1.389474d-8,
 * -2.263515d-10,6.695408d-13,
 * 1.804680d-4,5.967425d-5,-3.030219d-7,-7.034325d-10,
 * 3.162043d-11,-1.105659d-13,
 * -3.367708d-5,3.119216d-5,-2.722031d-7,2.325234d-8,
 * -1.388141d-10,2.497008d-13,
 * 4.610403d-6,3.458116d-5,5.693294d-7,-1.206499d-8,
 * 3.339377d-11,0.d0,
 * -4.014775d-7,-1.360860d-5,-1.034757d-7,1.002049d-9,
 * 0.d0,0.d0,
 * -3.920810d-4,-1.705876d-4,3.559208d-7,
 * 5.697300d-5,2.052896d-5,-6.280051d-8,
 * -8.841226d-6,2.420697d-5,2.614085d-7,
 * 7.427372d-7,-7.164052d-6,-8.440139d-8/

```

data qq(1),qq(2),qq(3),qq(4),qq(5),qq(6),qq(7)/
*      0.d0,3.d0,5.9d0,9.75d0,13.65d0,17.65d0,21.75d0/

do NG=1,13

    if(NG.eq.1)then
Gam=0.1d0
elseif(NG.eq.2)then
Gam=0.2d0
elseif(NG.eq.3)then
    Gam=1.d0
    elseif(NG.eq.4)then
Gam=3.d0
elseif(NG.eq.5)then
Gam=6.d0
elseif(NG.eq.6)then
Gam=10.d0
elseif(NG.eq.7)then
Gam=20.d0
elseif(NG.eq.8)then
Gam=40.d0
elseif(NG.eq.9)then
Gam=80.d0
elseif(NG.eq.10)then
Gam=100.d0
    elseif(NG.eq.11)then
Gam=125.d0
elseif(NG.eq.12)then
Gam=160.d0
elseif(NG.eq.13)then

```

```

Gam=180.d0
    endif

    NDU = 98
    pi=4.d0*atan(1.d0)

B0=0.399925d0*Gam-0.20001d0*Gam**0.357069d0+0.0692063d0

    ic=0

    do x=0.d0,12.8d0,0.1d0
rho=10.d0**x

ic=ic+1

    alp=1.d0/137.036d0
    kf=2.613d10*(Z/A*(rho*1.d0/(10**6)))**(1.d0/3.d0)
ai=0.7346d-10*((rho*1.d0/(10**6)/A))**(-1.d0/3.d0)
rs=1.388d-2*(A/(Z*rho*1.d0/(10**6)))**(1.d0/3.d0)
xx=1.d0/137.036d0*(9.d0*pi/4.d0)**(1.d0/3.d0)*1.d0/rs
    C1=(1.018d0*(Z/A)**(2.d0/3.d0)*(rho*1.d0/(10**6))**(2.d0/3.d0))/
*   (1.d0+1.018d0*(Z/A)**(2.d0/3.d0)*(rho*1.d0/(10**6))
*   *(2.d0/3.d0))
rc=1.15d-13*A**(1.d0/3.d0)

NN=20

```

```

do i=1,NN+1
uu(i)=1.d0/NN*i-1.d0/NN
enddo

do i=1,NN
U1=uu(i)
U2=uu(i+1)

CALL GAUSAB(XU,WU,U1,U2,NDU)

do ix=1,NDU

q=XU(ix)

if(q.lt.1.d-4)then
q2eps=q**2+(2.d0/(3.d0*(pi**2)))** (2.d0/3.d0)*rs
*      *(2.d0/3.d0*(1.d0+xx**2)** (1.d0/2.d0)-2.d0*q**2*xx/3.d0
*      *(dlog(xx+dsqrt(1+xx**2)))
*      +(1.d0+xx**2)** (1.d0/2.d0)*(xx**2+1.d0-3.d0*q**2*xx**2)
*      /(6.d0*xx**2)*(2.d0+2.d0/3.d0*q**2+2.d0/5.d0*q**4)
*      +(2.d0*q**2*xx**2-1.d0)/(6.d0*xx**2)
*      *(1.d0+q**2*xx**2)** (1.d0/2.d0)
*      *(2.d0*(1.d0+xx**2)** (1.d0/2.d0)-q*(1.d0+xx**2)
*      -1.d0/2.d0*q**3*xx**4+1.d0/12.d0*q**5*xx**6
*      +q**3*xx**2*(1.d0+xx**2)-1.d0/32.d0*q**7*xx**8
*      -3.d0/4.d0*q**5*xx**4*(1.d0+xx**2)
*      -1.d0/2.d0*q**3*(1.d0+xx**2)**2))

```

```

else
q2eps=q**2+(2.d0/(3.d0*(pi**2)))**(2.d0/3.d0)*rs
* *(2.d0/3.d0*(1.d0+xx**2)**(1.d0/2.d0)-2.d0*q**2*xx/3.d0
* *(dlog(xx+dsqrt(1+xx**2)))
* +(1.d0+xx**2)**(1.d0/2.d0)*(xx**2+1.d0-3.d0*q**2*xx**2)
* /(6.d0*q*xx**2)*dlog(dabs((1.d0+q)/(1.d0-q)))
* +(2.d0*q**2*xx**2-1.d0)/(6.d0*q*xx**2)
* *(1.d0+q**2.d0*xx**2)**(1.d0/2.d0)
* *dlog(dabs((q*(1.d0+xx**2)**(1.d0/2.d0)
* +(1.d0+q**2.d0*xx**2)**(1.d0/2.d0))
* /(q*(1.d0+xx**2)**(1.d0/2.d0)
* -(1.d0+q**2*xx**2)**(1.d0/2.d0))))))
endif

if(2.d0*kf*rc*q.lt.1.d-4)then
f=1.d0-1.d0/10.d0*(2.d0*kf*rc*q)**2+1.d0/280.d0*(2.d0*kf*rc*q)**2
else
f=-3.d0*((2.d0*kf*rc*q)*dcos(2.d0*kf*rc*q)-dsin(2.d0*kf*rc*q))
* /((2.d0*kf*rc*q)**3)
endif

y=(18.d0*pi*Z)**(1.d0/3.d0)*q

if(Gam.lt.1.d0)then
Sy=1.d0/(1.d0+3.d0*Gam/(y**2))
goto 3333
endif

if(y.ge.0.d0.and.y.le.3.01d0)then

```

```

is=1
l=4
n=2
      do k=1,l
c=b(is,k,3)*(gam-1.d0)*(gam-225.d0)
aa(k)=b(is,k,1)+b(is,k,2)*(gam-1.d0)+c
      enddo

elseif(y.gt.3.d0.and.y.le.5.9d0)then
is=2
l=7
n=5
      do k=1,l
cc=0.d0
      do m=3,7
c=b(is,k,m)*(gam-1.d0)**(m-2)*(gam-225.d0)
cc=cc+c
      enddo
aa(k)=b(is,k,1)+b(is,k,2)*(gam-1.d0)+cc
      enddo

elseif(y.gt.5.9d0.and.y.le.9.75d0)then
      is=3
l=7
n=5
      do k=1,l
cc=0.d0
      do m=3,7
c=b(is,k,m)*(gam-1.d0)**(m-2)*(gam-225.d0)
cc=cc+c

```

```

    enddo
    aa(k)=b(is,k,1)+b(is,k,2)*(gam-1.d0)+cc
enddo

elseif(y.gt.9.75d0.and.y.le.13.65d0)then
is=4
l=5
n=3
do k=1,l
cc=0.d0
do m=3,7
c=b(is,k,m)*(gam-1.d0)**(m-2)*(gam-225.d0)
cc=cc+c
enddo
aa(k)=b(is,k,1)+b(is,k,2)*(gam-1.d0)+cc
enddo

elseif(y.gt.13.65d0.and.y.le.17.65d0)then
is=5
l=5
n=3
do k=1,l
cc=0.d0
do m=3,6
c=b(is,k,m)*(gam-1.d0)**(m-2)*(gam-225.d0)
cc=cc+c
enddo
aa(k)=b(is,k,1)+b(is,k,2)*(gam-1.d0)+cc
enddo

```

```

elseif(y.gt.17.65d0.and.y.le.21.75d0)then
    is=6
l=4
n=2
do k=1,l
    c=b(is,k,3)*(gam-1.d0)*(gam-225.d0)
    aa(k)=b(is,k,1)+b(is,k,2)*(gam-1.d0)+c
enddo

endif

f0=-3*gam/(y**2+3.d0*gam/B0)

    dd=0.d0
    do j=1,n
d=aa(j+2)*(y-qq(is))**j*(y-qq(is+1))
dd=dd+d
    enddo
cs=-f0-aa(1)-aa(2)*(y-qq(is))-dd

    Sy=1.d0/(1.d0+3.d0*Gam/y**2-cs)

3333 Fmin=q**3*(Sy*(dabs(f))**2/((q2eps)**2))

    Fplu=q**5*(Sy*(dabs(f))**2/((q2eps)**2))

    Fzero=q**4*(Sy*(dabs(f))**2/((q2eps)**2))

    Smin=Smin+Fmin*WU(ix)

```

```

Splu=Splu+Fplu*WU(ix)
  Szero=Szero+Fzero*WU(ix)

  enddo

enddo

Sexact=Smin-C1*Splu+pi*Z*alp*dsqrt(C1)*(Szero-Splu)

FSmin(ic,NG)=Smin
  FSzero(ic,NG)=Szero
FSplu(ic,NG)=Splu

  FS(ic,NG)=Sexact

  Smin=0.d0
  Szero=0.d0
  Splu=0.d0

  enddo

enddo

  ic=0
  do x=0.d0,12.8d0,0.1d0
rho=10.d0**x
ic=ic+1
c write(10,7000) dlog10(rho), (FSmin(ic,ig), ig = 1, 13)
c   write(10,7000) dlog10(rho), (FSzero(ic,ig), ig = 1, 13)
c   write(10,7000) dlog10(rho), (FSplu(ic,ig), ig = 1, 13)

```

```

        write(10,7000) dlog10(rho), (FS(ic,ig), ig = 1, 13)
7000 format(f7.4,13(' ','f7.4))
enddo
        END

```

```

C=====

```

```

        SUBROUTINE GAUSAB( X, W, A, B, NPT )

```

```

C=====

```

```

C                                /b
C    Gaussian quadratures for  $\int_a^b f(x)dx$ .  NPT must be even & <100.
C                                /a
C

```

```

C=====

```

```

        IMPLICIT REAL*8 (A-H,O-Z)

```

```

        REAL*8 X(1), W(1)

```

```

        REAL*8 XX, WW, C1, C2

```

```

        COMMON / GAUSCM / XX(100), WW(100)

```

```

C-----

```

```

        NPT2 = NPT/2

```

```

        IF( A .EQ. 0. .AND. B .GT. .5E20 ) THEN

```

```

            CALL GAUS(NPT,1)

```

```

            DO 5 N = 1, NPT

```

```

                X(N) = XX(N)

```

```

                W(N) = WW(N)

```

```

5            CONTINUE

```

```

RETURN
END IF

CALL GAUS(NPT,0)

C1 = (B-A)/2.
C2 = (B+A)/2.

DO 10 N = 1, NPT2
M = NPT2 + 1 - N
X(N) = - XX(M)*C1 + C2
W(N) = WW(M)*C1
10 CONTINUE

DO 20 N = NPT2+1, NPT
M = N - NPT2
X(N) = XX(M)*C1 + C2
W(N) = WW(M)*C1
20 CONTINUE

RETURN

END

```

C=====

```

SUBROUTINE GAUS(NN, ITYPE)
C
C STANDARD SETTINGS ARE: IALF=IBTA=0, 0<NN<100,
C ITYPE=0 : -1 TO +1 POINTS
C ITYPE=1 : 0 TO INFINITY
C

```

IMPLICIT REAL*8 (A-H,O-Z)

DATA IALF, IBTA / 0, 0 /

C*****

C

C GAUJAC COMPUTES GAUSS - JACOBI INTEGRATION WEIGHTS AND NODES

C

C*****

C

DIMENSION X(100),A(100),B(100),C(100)

DIMENSION XX(100), WW(100)

DIMENSION G(100)

C

COMMON/GAUSCM/XX,WW

C

PI=3.141592653589793238D0

C

ISUM=IALF+IBTA

IDIF=IBTA-IALF

FNUM=ISUM*IDIF

ALF=IALF

BTA=IBTA

C

C CALCULATE COEFFICIENTS REQUIRED BY JACOBI

C

DO 20 I=1,100

I2=I+I

IM=I-1

DEN=(ISUM+I2)*(ISUM+I2-2)

IF(ISUM.EQ.0) GO TO 67

```

        B(I)=FNUM/DEN
        GO TO 68
67      B(I)=0.D0
68      FNUMP=4*IM*(IALF+IM)*(IBTA+IM)*(ISUM+IM)
        DENP=(ISUM+I2-1)*(ISUM+I2-2)**2*(ISUM+I2-3)
        IF(((ISUM.EQ.0).OR.(ISUM.EQ.1)).AND.(I.EQ.1)) GO TO 69
        C(I)=FNUMP/DENP
        GO TO 20
69      C(I)=0.D0
20     CONTINUE

```

C-----

C For outputting quadratures

C-----

C TYPE 34

C34 FORMAT(1X,'FILENAME FOR INTERMEDIATE RESULTS =? (A10)')

C ACCEPT 35,FNAMX

C35 FORMAT(A10)

C OPEN(UNIT=3,FILE=FNAMX,STATUS='NEW')

C-----

CALL JACOBI(NN,X,G,ALF,BTA,B,C,EPS,CSX,CSA,TSX,TSA)

C-----

C For outputting quadratures

C-----

C TYPE 70

C70 FORMAT(1X,'OUTPUT FILENAME ? (A10)')

C ACCEPT 71,FNAM

C71 FORMAT(A10)

```

C      OPEN(UNIT=7,FILE=FNAM,STATUS='NEW')
C-----

C      OUTPUT DATA STATEMENT OF WEIGHTS AND NODES
C
      IF(ITYPE.EQ.0) GO TO 130
      DO 100 I=1,NN
      II=NN+1-I
C      XX(I)=(1.0D+00+X(II))/(1.0D+00-X(II))
C      WW(I)=2.0D+00*G(II)/((1.0D+00-X(II))**(IALF+2))*
C 1      (1.0D+00+X(II))**IBTA)
      ZZ=PI*(1.0D+00+X(II))/4.0D+00
      XX(I)=SIN(ZZ)/COS(ZZ)
      WW(I)=G(II)*PI*0.25D+00/(COS(0.25D+00*PI*(1.0D+00
1      +X(II)))**2)

C-----

C      WRITE(7,120)I,I,XX(I),WW(I)
120    FORMAT(6X,6HDATA(,I2,6H,M),W(,I2,4H,M)/,D22.15,1H,,
1      D22.15,1H/)
C-----

100    CONTINUE
      RETURN
130    CONTINUE
      NI=NN/2
      DO 140 I=1,NI
      II=NI+1-I
      XX(I)=X(II)
      WW(I)=G(II)

```

```

C-----
C      WRITE(7,120)I,I,XX(I),WW(I)
C-----

140  CONTINUE
      RETURN
      END
      SUBROUTINE JACOBI(NN,X,A,ALF,BTA,B,C,EPS,CSX,CSA,TSX,TSA)
      IMPLICIT REAL*8 (A-H,O-Z)

C
C*****
C
C      CALCULATES THE ZEROS X(I) OF THE NN-TH ORDER JACOBI POLYNOMIAL
C      PN(ALF,BTA) FOR THE SEGMENT (-1,1)
C      THE LARGEST ZERO WILL BE STORED IN X(1).
C      ALSO CALCULATES THE CORRESPONDING COEFFICIENTS A(I) OF THE
C      NN-TH ORDER GAUSS-JACOBI QUADRATURE FORMULA OF DEGREE 2*NN-1.
C      THIS SUBROUTINE MUST BE GIVEN THE COEFFICIENTS:
C
C
C              (ALF+BTA)(BTA-ALF)
C      B(N) = -----
C              (ALF+BTA+2N)(ALF+BTA+2N-2)
C
C              4(N-1)(ALF+N-1)(BTA+N-1)(ALF+BTA+N-1)
C      C(N) = -----
C              (ALF+BTA+2N-1)(ALF+BTA+2N-2)**2(ALF+BTA+2N-3)
C
C
C      IN THE RECURSION RELATION

```

```

C
C      P(N) = (X-B(N))*P(N-1)-C(N)*P(N-2)
C
C      FOR ALL N LESS THAN OR EQUAL TO THE HIGHEST DEGREE NN.
C
C      CSX = CALC SUM X(I)      TSX = TRUE SUM X(I)
C      CSA = CALC SUM A(I)      TSA = TRUE SUM A(I)
C
C*****
C
      DIMENSION X(100),A(100),B(100),C(100)
      FN=NN
      CSX=0.D0
      CSA=0.D0
      BETA=EXP(FLGAMA(ALF+1.D0)+FLGAMA(BTA+1.D0)-FLGAMA(ALF+BTA+2.D0))
      CC=2.**(ALF+BTA+1.)*BETA
      TSX=FN*(BTA-ALF)/(ALF+BTA+2.*FN)
      TSA=CC
      DO 1 J=2,NN
1      CC=CC*C(J)
      DO 12 I=1,NN
      IF(I-1)12,2,3
C      LARGEST ZERO
2      AN=ALF/FN
      BN=BTA/FN
      R1=(1.D0+ALF)*(2.78/(4.+FN*FN)+.768*AN/FN)
      R2=1.D0+1.48*AN+.96*BN+.452*AN*AN+.83*AN*BN
      XT=1.D0-R1/R2
      GO TO 11
3      IF(I-2)12,4,5

```

```

C      SECOND ZERO
4      R1=(4.1+ALF)/((1.+ALF)*(1.+156*ALF))
      R2=1.D0+.06*(FN-8.)*(1.D0+.12*ALF)/FN
      R3=1.D0+.012*BTA*(1.D0+.25*ABS(ALF))/FN
      RATIO=R1*R2*R3
      XT=XT-RATIO*(1.D0-XT)
      GO TO 11
5      IF(I-3) 12,6,7
C      THIRD ZERO
6      R1=(1.67+.28*ALF)/(1.D0+.37*ALF)
      R2=1.D0+.22*(FN-8.D0)/FN
      R3=1.D0+8.*BTA/((6.28D0+BTA)*FN*FN)
      RATIO=R1*R2*R3
      XT=XT-RATIO*(X(1)-XT)
      GO TO 11
7      IF(NN-I-1)10,9,8
C      MIDDLE ZEROS
8      XT=3.*X(I-1)-3.*X(I-2)+X(I-3)
      GO TO 11
C      SECOND LAST ZERO
9      R1=(1.D0+.235*BTA)/(.766D0+.119*BTA)
      R2=1./(1.D0+.639*(FN-4.D0)/(1.D0+.71*(FN-4.D0)))
      R3=1./(1.D0+20.*ALF/((7.5D0+ALF)*FN*FN))
      RATIO=R1*R2*R3
      XT=XT+RATIO*(XT-X(I-2))
      GO TO 11
C      LAST ZERO
10     R1=(1.D0+.37*BTA)/(1.67D0+.28*BTA)
      R2=1./(1.D0+.22*(FN-8.D0)/FN)
      R3=1./(1.D0+8.*ALF/((6.28D0+ALF)*FN*FN))

```

```

RATIO=R1*R2*R3
XT=XT+RATIO*(XT-X(I-2))
C
11 CALL GSROOT(XT, NN, ALF, BTA, DPN, PN1, B, C, EPS)
X(I)=XT
A(I)=CC/(DPN*PN1)
C-----
C WRITE(3,20)ALF, BTA, NN, I, XT, A(I)
C-----

CSX=CSX+XT
CSA=CSA+A(I)
12 CONTINUE
C-----
C WRITE(3,22)CSX, CSA, TSX, TSA
20 FORMAT(1X,2F6.2,2I3,2(1X,D26.18),1X,(1X,D26.18))
22 FORMAT(1H0,/,5X,'CSX =',D25.18,5X,'CSA =',D25.18,/,
1 5X,'TSX =',D25.18,5X,'TSA =',D25.18)
C-----

RETURN
END
SUBROUTINE GSROOT(X, NN, ALF, BTA, DPN, PN1, B, C, EPS)
IMPLICIT REAL*8 (A-H, O-Z)
C
C*****
C
C IMPROVES THE APPROXIMATE ROOT X
C IN ADDITION WE ALSO OBTAIN:

```

```

C      DPN = DERIVATIVE OF P(N) AT X
C      PN1 = VALUE OF P(N-1) AT X
C
C*****
C
      DIMENSION B(100),C(100)
      ITER=0
1     ITER=ITER+1
      CALL RECR(P,DP,PN1,X,NN,ALF,BTA,B,C)
      D=P/DP
      X=X-D
      IF (ABS(D)-EPS)3,3,2
2     IF (ITER-10)1,3,3
3     DPN=DP
      RETURN
      END
      SUBROUTINE RECR(PN,DPN,PN1,X,NN,ALF,BTA,B,C)
      IMPLICIT REAL*8 (A-H,O-Z)
C
      DIMENSION B(100),C(100)
      P1=1.D0
      P=X+(ALF-BTA)/(ALF+BTA+2.D0)
      DP1=0.D0
      DP=1.D0
      DO 1 J=2,NN
      Q=(X-B(J))*P-C(J)*P1
      DQ=(X-B(J))*DP+P-C(J)*DP1
      P1=P
      P=Q
      DP1=DP

```

```

        DP=DQ
1      CONTINUE
        PN=P
        DPN=DP
        PN1=P1
        RETURN
        END

        FUNCTION FLGAMA(W)
        IMPLICIT REAL*8 (A-H,O-Z)

C
C*****
C
C      CALCULATES LOG(BASE E)GAMMA(W) FOR W REAL AND GAMMA(W) POSITIVE.
C      USES STIRLING'S APPROXIMATION
C      ACCURATE TO ABOUT 12 SIGNIFICANT PLACES
C
C*****
C
        PI=3.141592653589793238D0
        X=W
        M=0
        FK=-1.D0
        IF(X-.5D0)1,1,2
C      W LESS EQ .5
1      M=1
        XPI=X*PI
        X=1.D0-X
2      FK=FK+1.D0
        IF(X+FK-6.D0)2,2,3
3      Z=X+FK

```

```

ZZ=Z*Z
C      LOG GAMMA(Z), Z GREATER 6.
      Y=(Z-.5)*LOG(Z)-Z+.9189385332047+((((((-10861851./ZZ
1 +2356200.)/ZZ-704820.)/ZZ+309400.)/ZZ-218790.)/ZZ
2 +291720.)/ZZ-1021020.)/ZZ+30630600.)/Z/367567200.
      IF(FK)6,6,4
4      IK=FK
      DO 5 I=1,IK
      FK=FK-1.
5      Y=Y-LOG(X+FK)
6      IF(M)7,11,7
7      P=PI/SIN(XPI)
      IF(P)8,8,10
8      WRITE(6,9)W
9      FORMAT(2X,6HGAMMA(D11.4,13H) IS NEGATIVE)
      Y=0.
      GO TO 11
10     Y=LOG(P)-Y
11     FLGAMA=Y
      RETURN
      END

```

A.3 Young et al. の構造因子

```
c-----STRUCTURE FACTOR-----
      implicit none

      real*8 gam
real*8 a(10),b(10,10,10),qq(10)
real*8 c,cc,d,dd
real*8 B0,f0,cs,q
real*8 S(500,500)

integer*4 i,j,k,l,m,n,ng,ic

OPEN (unit=10, file='S(q)young.csv')

      data b(1,1,1),b(1,1,2),b(1,1,3),
*   b(1,2,1),b(1,2,2),b(1,2,3),
*   b(1,3,1),b(1,3,2),b(1,3,3),
*   b(1,4,1),b(1,4,2),b(1,4,3),
*   b(2,1,1),b(2,1,2),b(2,1,3),b(2,1,4),b(2,1,5),b(2,1,6),b(2,1,7),
*   b(2,2,1),b(2,2,2),b(2,2,3),b(2,2,4),b(2,2,5),b(2,2,6),b(2,2,7),
*   b(2,3,1),b(2,3,2),b(2,3,3),b(2,3,4),b(2,3,5),b(2,3,6),b(2,3,7),
*   b(2,4,1),b(2,4,2),b(2,4,3),b(2,4,4),b(2,4,5),b(2,4,6),b(2,4,7),
*   b(2,5,1),b(2,5,2),b(2,5,3),b(2,5,4),b(2,5,5),b(2,5,6),b(2,5,7),
*   b(2,6,1),b(2,6,2),b(2,6,3),b(2,6,4),b(2,6,5),b(2,6,6),b(2,6,7),
*   b(2,7,1),b(2,7,2),b(2,7,3),b(2,7,4),b(2,7,5),b(2,7,6),b(2,7,7),
*   b(3,1,1),b(3,1,2),b(3,1,3),b(3,1,4),b(3,1,5),b(3,1,6),b(3,1,7),
*   b(3,2,1),b(3,2,2),b(3,2,3),b(3,2,4),b(3,2,5),b(3,2,6),b(3,2,7),
*   b(3,3,1),b(3,3,2),b(3,3,3),b(3,3,4),b(3,3,5),b(3,3,6),b(3,3,7),
```

* $b(3, 4, 1), b(3, 4, 2), b(3, 4, 3), b(3, 4, 4), b(3, 4, 5), b(3, 4, 6), b(3, 4, 7),$
 * $b(3, 5, 1), b(3, 5, 2), b(3, 5, 3), b(3, 5, 4), b(3, 5, 5), b(3, 5, 6), b(3, 5, 7),$
 * $b(3, 6, 1), b(3, 6, 2), b(3, 6, 3), b(3, 6, 4), b(3, 6, 5), b(3, 6, 6), b(3, 6, 7),$
 * $b(3, 7, 1), b(3, 7, 2), b(3, 7, 3), b(3, 7, 4), b(3, 7, 5), b(3, 7, 6), b(3, 7, 7),$
 * $b(4, 1, 1), b(4, 1, 2), b(4, 1, 3), b(4, 1, 4), b(4, 1, 5), b(4, 1, 6), b(4, 1, 7),$
 * $b(4, 2, 1), b(4, 2, 2), b(4, 2, 3), b(4, 2, 4), b(4, 2, 5), b(4, 2, 6), b(4, 2, 7),$
 * $b(4, 3, 1), b(4, 3, 2), b(4, 3, 3), b(4, 3, 4), b(4, 3, 5), b(4, 3, 6), b(4, 3, 7),$
 * $b(4, 4, 1), b(4, 4, 2), b(4, 4, 3), b(4, 4, 4), b(4, 4, 5), b(4, 4, 6), b(4, 4, 7),$
 * $b(4, 5, 1), b(4, 5, 2), b(4, 5, 3), b(4, 5, 4), b(4, 5, 5), b(4, 5, 6), b(4, 5, 7),$
 * $b(5, 1, 1), b(5, 1, 2), b(5, 1, 3), b(5, 1, 4), b(5, 1, 5), b(5, 1, 6),$
 * $b(5, 2, 1), b(5, 2, 2), b(5, 2, 3), b(5, 2, 4), b(5, 2, 5), b(5, 2, 6),$
 * $b(5, 3, 1), b(5, 3, 2), b(5, 3, 3), b(5, 3, 4), b(5, 3, 5), b(5, 3, 6),$
 * $b(5, 4, 1), b(5, 4, 2), b(5, 4, 3), b(5, 4, 4), b(5, 4, 5), b(5, 4, 6),$
 * $b(5, 5, 1), b(5, 5, 2), b(5, 5, 3), b(5, 5, 4), b(5, 5, 5), b(5, 5, 6),$
 * $b(6, 1, 1), b(6, 1, 2), b(6, 1, 3),$
 * $b(6, 2, 1), b(6, 2, 2), b(6, 2, 3),$
 * $b(6, 3, 1), b(6, 3, 2), b(6, 3, 3),$
 * $b(6, 4, 1), b(6, 4, 2), b(6, 4, 3)/$
 * $0.d0, 0.d0, 0.d0,$
 * $-7.37159d-3, -3.093941d-2, 5.775133d-6,$
 * $-1.785965d-3, -9.156094d-3, -5.215690d-6,$
 * $1.551919d-3, 1.000275d-2, 3.407914d-6,$
 * $-2.211480d-2, -9.281645d-2, 2.105917d-5, 1.527865d-7,$
 * $-2.511623d-9, 7.838556d-12, 0.d0,$
 * $2.970690d-3, 2.794343d-2, -8.758671d-7, -2.009939d-7, 1.878432d-9,$
 * $-4.990626d-12, 0.d0,$
 * $1.428655d-3, 4.165185d-3, -1.643889d-5, 1.826357d-7, -1.031887d-9,$
 * $2.195364d-12, 0.d0,$
 * $-5.537246d-4, -5.848738d-3, -8.728617d-6, 1.076314d-7,$
 * $-6.819082d-10, 1.557185d-12, 0.d0,$

* 5.617672d-5,-2.848769d-4,-6.427415d-7,6.133415d-8,
 * -6.343027d-10,3.021813d-12,-5.585550d-15,
 * 8.484234d-6,6.353313d-4,2.422957d-6,-3.388935d-8,
 * 1.718468d-10,-3.109722d-13,0.d0,
 * -2.084635d-6,-9.537685d-5,-4.578476d-7,4.459593d-9,
 * -1.674969d-11,2.099074d-14,0.d0,
 * -1.349980d-2,-1.178214d-2,3.414967d-5,-1.235405d-6,
 * 1.525965d-8,-8.094505d-11,1.550263d-13,
 * 2.555060d-3,2.664933d-3,-6.691853d-6,2.919678d-7,-3.857775d-9,
 * 2.114887d-11,-4.127568d-14,
 * -3.764923d-4,-1.703133d-3,1.295266d-5,-2.014016d-7,
 * 1.623818d-9,-6.486351d-12,1.009608d-14,
 * -3.254136d-5,1.416699d-3,1.207188d-6,-7.290296d-8,1.198781d-9,
 * -7.296064d-12,1.506339d-14,
 * 1.485941d-5,1.703860d-5,-7.305411d-7,-6.153975d-8,
 * 5.619353d-10,-2.048821d-12,2.735942d-15,
 * -1.211017d-6,-2.288448d-4,-6.681539d-7,5.033742d-8,
 * -4.847156d-10,2.050713d-12,-3.298829d-15,
 * 6.279524d-9,3.944934d-5,1.525661d-7,-7.424258d-9,
 * 6.856207d-11,-2.849071d-13,4.540122d-16,
 * -3.662810d-3,-1.521862d-3,8.409706d-6,-1.124811d-7,
 * 4.251699d-10,3.730156d-13,-3.686204d-15,
 * 6.535520d-4,2.852788d-4,-1.894213d-6,3.625697d-8,
 * -2.316304d-10,4.991858d-13,0.d0,
 * -1.414461d-4,-6.637037d-5,-4.604689d-7,1.057214d-7,
 * -1.346978d-9,6.856586d-12,-1.258136d-14,
 * 2.153694d-5,2.584947d-4,2.080372d-6,-6.118364d-8,
 * 3.932223d-10,-8.330949d-13,0.d0,
 * -2.009718d-6,-7.529755d-5,-6.008686d-7,1.111813d-8,
 * -5.850549d-11,1.061405d-13,0.d0,

```

* -1.113950d-3,-4.092842d-4,1.302525d-6,1.389474d-8,
* -2.263515d-10,6.695408d-13,
* 1.804680d-4,5.967425d-5,-3.030219d-7,-7.034325d-10,
* 3.162043d-11,-1.105659d-13,
* -3.367708d-5,3.119216d-5,-2.722031d-7,2.325234d-8,
* -1.388141d-10,2.497008d-13,
* 4.610403d-6,3.458116d-5,5.693294d-7,-1.206499d-8,
* 3.339377d-11,0.d0,
* -4.014775d-7,-1.360860d-5,-1.034757d-7,1.002049d-9,
* 0.d0,0.d0,
* -3.920810d-4,-1.705876d-4,3.559208d-7,
* 5.697300d-5,2.052896d-5,-6.280051d-8,
* -8.841226d-6,2.420697d-5,2.614085d-7,
* 7.427372d-7,-7.164052d-6,-8.440139d-8/

data qq(1),qq(2),qq(3),qq(4),qq(5),qq(6),qq(7)/
* 0.d0,3.d0,5.9d0,9.75d0,13.65d0,17.65d0,21.75d0/

write(6,*)qq(1),qq(2),qq(3),qq(4),qq(5),qq(6),qq(7)

do ng=1,11

    if(ng.eq.1)then
gam=1.d0
elseif(ng.eq.2)then
gam=3.d0
elseif(ng.eq.3)then
    gam=6.d0
    elseif(ng.eq.4)then
gam=10.d0

```

```

elseif(ng.eq.5)then
gam=20.d0
elseif(ng.eq.6)then
gam=40.d0
elseif(ng.eq.7)then
gam=80.d0
elseif(ng.eq.8)then
gam=100.d0
elseif(ng.eq.9)then
gam=125.d0
elseif(ng.eq.10)then
gam=160.d0
        elseif(ng.eq.11)then
gam=180.d0
        endif

        ic=0

do q=0.d0,20.20d0,0.2d0
        ic=ic+1

        if(q.ge.0.d0.and.q.le.3.01d0)then
i=1
l=4
n=2

        do k=1,l
c=b(i,k,3)*(gam-1.d0)*(gam-225.d0)
a(k)=b(i,k,1)+b(i,k,2)*(gam-1.d0)+c
        enddo

```

```

elseif(q.gt.3.d0.and.q.le.5.9d0)then
i=2
l=7
n=5
do k=1,l
cc=0.d0
do m=3,7
c=b(i,k,m)*(gam-1.d0)**(m-2)*(gam-225.d0)
cc=cc+c
enddo
a(k)=b(i,k,1)+b(i,k,2)*(gam-1.d0)+cc
enddo

```

```

elseif(q.gt.5.9d0.and.q.le.9.75d0)then
i=3
l=7
n=5
do k=1,l
cc=0.d0
do m=3,7
c=b(i,k,m)*(gam-1.d0)**(m-2)*(gam-225.d0)
cc=cc+c
enddo
a(k)=b(i,k,1)+b(i,k,2)*(gam-1.d0)+cc
enddo

```

```

elseif(q.gt.9.75d0.and.q.le.13.65d0)then
i=4
l=5
n=3

```

```

do k=1,1
cc=0.d0
do m=3,7
c=b(i,k,m)*(gam-1.d0)**(m-2)*(gam-225.d0)
cc=cc+c
enddo
a(k)=b(i,k,1)+b(i,k,2)*(gam-1.d0)+cc
enddo

```

```

elseif(q.gt.13.65d0.and.q.le.17.65d0)then

```

```

i=5

```

```

l=5

```

```

n=3

```

```

do k=1,1
cc=0.d0
do m=3,6
c=b(i,k,m)*(gam-1.d0)**(m-2)*(gam-225.d0)
cc=cc+c
enddo
a(k)=b(i,k,1)+b(i,k,2)*(gam-1.d0)+cc
enddo

```

```

elseif(q.gt.17.65d0.and.q.le.21.75d0)then

```

```

i=6

```

```

l=4

```

```

n=2

```

```

do k=1,1
c=b(i,k,3)*(gam-1.d0)*(gam-225.d0)
a(k)=b(i,k,1)+b(i,k,2)*(gam-1.d0)+c
enddo

```

```
endif
```

```
B0=0.399925d0*gam-0.20001d0*gam**0.357069d0+0.0692063d0
```

```
f0=-3*gam/(q**2+3.d0*gam/B0)
```

```
dd=0.d0
```

```
do j=1,n
```

```
d=a(j+2)*(q-qq(i))**j*(q-qq(i+1))
```

```
dd=dd+d
```

```
enddo
```

```
cs=-f0-a(1)-a(2)*(q-qq(i))-dd
```

```
S(ic,ng)=1.d0/(1.d0+3.d0*gam/q**2-cs)
```

```
enddo
```

```
enddo
```

```
ic=0
```

```
do q=0.d0,20.20d0,0.2d0
```

```
ic=ic+1
```

```
write(10,7000) q, (S(ic,ng), ng = 1, 11)
```

```
7000 format(f7.4,12(' ',f7.4))
```

```
enddo
```

```
END
```

A.4 $\langle S \rangle^{DS}$ と $\langle S \rangle^{1B+2B}$ の比較

```
c-----<S>Doggett and Spencer-----  
      implicit none  
  
      real*8 Z,A,Gam,Ekin  
real*8 pi,x,rho(100),alp,kf,ai,rs,xx,C1,rc  
real*8 U1,U2,q,q2eps,f,y,Sy,T  
real*8 x1,x2,x3,x4,y1,y2,y3,y4  
real*8 Fmin,Fzero,Fplu,Fcorr  
      real*8 Smin,Szero,Splu,Sexact,Scorr  
real*8 aa(10),b(10,10,10),qq(10)  
real*8 c,cc,d,dd  
real*8 B0,f0,cs  
      real*8 XQ(100),WQ(100)  
real*8 UU(100)  
      real*8 FSmin(100),FSzero(100),FSplu(100),FS(100)  
real*8 FScorr(100),Fds(100)  
  
integer*4 iE,NDU,NN,iq,i,j,k,l,m,n,is  
  
OPEN (unit=10, file='DOGGETT AND SPENCER.csv')  
  
      data b(1,1,1),b(1,1,2),b(1,1,3),  
      * b(1,2,1),b(1,2,2),b(1,2,3),  
      * b(1,3,1),b(1,3,2),b(1,3,3),  
      * b(1,4,1),b(1,4,2),b(1,4,3),  
      * b(2,1,1),b(2,1,2),b(2,1,3),b(2,1,4),b(2,1,5),b(2,1,6),b(2,1,7),
```

* $b(2, 2, 1), b(2, 2, 2), b(2, 2, 3), b(2, 2, 4), b(2, 2, 5), b(2, 2, 6), b(2, 2, 7),$
 * $b(2, 3, 1), b(2, 3, 2), b(2, 3, 3), b(2, 3, 4), b(2, 3, 5), b(2, 3, 6), b(2, 3, 7),$
 * $b(2, 4, 1), b(2, 4, 2), b(2, 4, 3), b(2, 4, 4), b(2, 4, 5), b(2, 4, 6), b(2, 4, 7),$
 * $b(2, 5, 1), b(2, 5, 2), b(2, 5, 3), b(2, 5, 4), b(2, 5, 5), b(2, 5, 6), b(2, 5, 7),$
 * $b(2, 6, 1), b(2, 6, 2), b(2, 6, 3), b(2, 6, 4), b(2, 6, 5), b(2, 6, 6), b(2, 6, 7),$
 * $b(2, 7, 1), b(2, 7, 2), b(2, 7, 3), b(2, 7, 4), b(2, 7, 5), b(2, 7, 6), b(2, 7, 7),$
 * $b(3, 1, 1), b(3, 1, 2), b(3, 1, 3), b(3, 1, 4), b(3, 1, 5), b(3, 1, 6), b(3, 1, 7),$
 * $b(3, 2, 1), b(3, 2, 2), b(3, 2, 3), b(3, 2, 4), b(3, 2, 5), b(3, 2, 6), b(3, 2, 7),$
 * $b(3, 3, 1), b(3, 3, 2), b(3, 3, 3), b(3, 3, 4), b(3, 3, 5), b(3, 3, 6), b(3, 3, 7),$
 * $b(3, 4, 1), b(3, 4, 2), b(3, 4, 3), b(3, 4, 4), b(3, 4, 5), b(3, 4, 6), b(3, 4, 7),$
 * $b(3, 5, 1), b(3, 5, 2), b(3, 5, 3), b(3, 5, 4), b(3, 5, 5), b(3, 5, 6), b(3, 5, 7),$
 * $b(3, 6, 1), b(3, 6, 2), b(3, 6, 3), b(3, 6, 4), b(3, 6, 5), b(3, 6, 6), b(3, 6, 7),$
 * $b(3, 7, 1), b(3, 7, 2), b(3, 7, 3), b(3, 7, 4), b(3, 7, 5), b(3, 7, 6), b(3, 7, 7),$
 * $b(4, 1, 1), b(4, 1, 2), b(4, 1, 3), b(4, 1, 4), b(4, 1, 5), b(4, 1, 6), b(4, 1, 7),$
 * $b(4, 2, 1), b(4, 2, 2), b(4, 2, 3), b(4, 2, 4), b(4, 2, 5), b(4, 2, 6), b(4, 2, 7),$
 * $b(4, 3, 1), b(4, 3, 2), b(4, 3, 3), b(4, 3, 4), b(4, 3, 5), b(4, 3, 6), b(4, 3, 7),$
 * $b(4, 4, 1), b(4, 4, 2), b(4, 4, 3), b(4, 4, 4), b(4, 4, 5), b(4, 4, 6), b(4, 4, 7),$
 * $b(4, 5, 1), b(4, 5, 2), b(4, 5, 3), b(4, 5, 4), b(4, 5, 5), b(4, 5, 6), b(4, 5, 7),$
 * $b(5, 1, 1), b(5, 1, 2), b(5, 1, 3), b(5, 1, 4), b(5, 1, 5), b(5, 1, 6),$
 * $b(5, 2, 1), b(5, 2, 2), b(5, 2, 3), b(5, 2, 4), b(5, 2, 5), b(5, 2, 6),$
 * $b(5, 3, 1), b(5, 3, 2), b(5, 3, 3), b(5, 3, 4), b(5, 3, 5), b(5, 3, 6),$
 * $b(5, 4, 1), b(5, 4, 2), b(5, 4, 3), b(5, 4, 4), b(5, 4, 5), b(5, 4, 6),$
 * $b(5, 5, 1), b(5, 5, 2), b(5, 5, 3), b(5, 5, 4), b(5, 5, 5), b(5, 5, 6),$
 * $b(6, 1, 1), b(6, 1, 2), b(6, 1, 3),$
 * $b(6, 2, 1), b(6, 2, 2), b(6, 2, 3),$
 * $b(6, 3, 1), b(6, 3, 2), b(6, 3, 3),$
 * $b(6, 4, 1), b(6, 4, 2), b(6, 4, 3)/$
 * $0.d0, 0.d0, 0.d0,$
 * $-7.37159d-3, -3.093941d-2, 5.775133d-6,$
 * $-1.785965d-3, -9.156094d-3, -5.215690d-6,$

* 1.551919d-3,1.000275d-2,3.407914d-6,
 * -2.211480d-2,-9.281645d-2,2.105917d-5,1.527865d-7,
 * -2.511623d-9,7.838556d-12,0.d0,
 * 2.970690d-3,2.794343d-2,-8.758671d-7,-2.009939d-7,1.878432d-9,
 * -4.990626d-12,0.d0,
 * 1.428655d-3,4.165185d-3,-1.643889d-5,1.826357d-7,-1.031887d-9,
 * 2.195364d-12,0.d0,
 * -5.537246d-4,-5.848738d-3,-8.728617d-6,1.076314d-7,
 * -6.819082d-10,1.557185d-12,0.d0,
 * 5.617672d-5,-2.848769d-4,-6.427415d-7,6.133415d-8,
 * -6.343027d-10,3.021813d-12,-5.585550d-15,
 * 8.484234d-6,6.353313d-4,2.422957d-6,-3.388935d-8,
 * 1.718468d-10,-3.109722d-13,0.d0,
 * -2.084635d-6,-9.537685d-5,-4.578476d-7,4.459593d-9,
 * -1.674969d-11,2.099074d-14,0.d0,
 * -1.349980d-2,-1.178214d-2,3.414967d-5,-1.235405d-6,
 * 1.525965d-8,-8.094505d-11,1.550263d-13,
 * 2.555060d-3,2.664933d-3,-6.691853d-6,2.919678d-7,-3.857775d-9,
 * 2.114887d-11,-4.127568d-14,
 * -3.764923d-4,-1.703133d-3,1.295266d-5,-2.014016d-7,
 * 1.623818d-9,-6.486351d-12,1.009608d-14,
 * -3.254136d-5,1.416699d-3,1.207188d-6,-7.290296d-8,1.198781d-9,
 * -7.296064d-12,1.506339d-14,
 * 1.485941d-5,1.703860d-5,-7.305411d-7,-6.153975d-8,
 * 5.619353d-10,-2.048821d-12,2.735942d-15,
 * -1.211017d-6,-2.288448d-4,-6.681539d-7,5.033742d-8,
 * -4.847156d-10,2.050713d-12,-3.298829d-15,
 * 6.279524d-9,3.944934d-5,1.525661d-7,-7.424258d-9,
 * 6.856207d-11,-2.849071d-13,4.540122d-16,
 * -3.662810d-3,-1.521862d-3,8.409706d-6,-1.124811d-7,

```

* 4.251699d-10,3.730156d-13,-3.686204d-15,
* 6.535520d-4,2.852788d-4,-1.894213d-6,3.625697d-8,
* -2.316304d-10,4.991858d-13,0.d0,
* -1.414461d-4,-6.637037d-5,-4.604689d-7,1.057214d-7,
* -1.346978d-9,6.856586d-12,-1.258136d-14,
* 2.153694d-5,2.584947d-4,2.080372d-6,-6.118364d-8,
* 3.932223d-10,-8.330949d-13,0.d0,
* -2.009718d-6,-7.529755d-5,-6.008686d-7,1.111813d-8,
* -5.850549d-11,1.061405d-13,0.d0,
* -1.113950d-3,-4.092842d-4,1.302525d-6,1.389474d-8,
* -2.263515d-10,6.695408d-13,
* 1.804680d-4,5.967425d-5,-3.030219d-7,-7.034325d-10,
* 3.162043d-11,-1.105659d-13,
* -3.367708d-5,3.119216d-5,-2.722031d-7,2.325234d-8,
* -1.388141d-10,2.497008d-13,
* 4.610403d-6,3.458116d-5,5.693294d-7,-1.206499d-8,
* 3.339377d-11,0.d0,
* -4.014775d-7,-1.360860d-5,-1.034757d-7,1.002049d-9,
* 0.d0,0.d0,
* -3.920810d-4,-1.705876d-4,3.559208d-7,
* 5.697300d-5,2.052896d-5,-6.280051d-8,
* -8.841226d-6,2.420697d-5,2.614085d-7,
* 7.427372d-7,-7.164052d-6,-8.440139d-8/

data qq(1),qq(2),qq(3),qq(4),qq(5),qq(6),qq(7)/
* 0.d0,3.d0,5.9d0,9.75d0,13.65d0,17.65d0,21.75d0/

```

NDU = 98

pi=4.d0*datan(1.d0)

```

Z=29.d0
A=63.d0
Gam=10.d0

B0=0.399925d0*Gam-0.20001d0*Gam**0.357069d0+0.0692063d0
alp=1.d0/137.036d0
rc=1.15d-13*A**(1.d0/3.d0)

      do iE=1,9

if(iE.eq.1)then
Ekin=0.05d0
elseif(iE.eq.2)then
Ekin=0.1d0
elseif(iE.eq.3)then
Ekin=0.2d0
elseif(iE.eq.4)then
Ekin=0.4d0
elseif(iE.eq.5)then
Ekin=0.7d0
elseif(iE.eq.6)then
Ekin=1.d0
elseif(iE.eq.7)then
Ekin=2.d0
elseif(iE.eq.8)then
Ekin=4.d0
elseif(iE.eq.9)then
Ekin=10.d0
endif

```

```
rho(iE)=(((1.d0+Ekin/0.511d0)**2-1.d0)/(1.018d0*(Z/A)**(2.d0/3.d0)))
* ** (3.d0/2.d0)*1.d6
```

```
kf=2.613d10*(Z/A*(rho(iE)*1.d0/(10**6)))** (1.d0/3.d0)
ai=0.7346d-10*((rho(iE)*1.d0/(10**6)/A))**(-1.d0/3.d0)
rs=1.388d-2*(A/(Z*rho(iE)*1.d0/(10**6)))** (1.d0/3.d0)
xx=1.d0/137.036d0*(9.d0*pi/4.d0)** (1.d0/3.d0)*1.d0/rs
C1=(1.018d0*(Z/A)**(2.d0/3.d0)*(rho(iE)*1.d0/(10**6))
* ** (2.d0/3.d0))/(1.d0+1.018d0*(Z/A)**(2.d0/3.d0)*
* (rho(iE)*1.d0/(10**6))** (2.d0/3.d0))
```

```
NN=20
```

```
do i=1,NN+1
uu(i)=1.d0/NN*i-1.d0/NN
enddo
```

```
do i=1,NN
U1=uu(i)
U2=uu(i+1)
```

```
CALL GAUSAB(XQ,WQ,U1,U2,NDU)
```

```
do iq=1,NDU
```

```
q=XQ(iq)
```

```
if(q.lt.1.d-4)then
q2eps=q**2+(2.d0/(3.d0*(pi**2)))** (2.d0/3.d0)*rs
```

```

*      *(2.d0/3.d0*(1.d0+xx**2)**(1.d0/2.d0)-2.d0*q**2*xx/3.d0
*      *(dlog(xx+dsqrt(1+xx**2)))
*      +(1.d0+xx**2)**(1.d0/2.d0)*(xx**2+1.d0-3.d0*q**2*xx**2)
*      /(6.d0*xx**2)*(2.d0+2.d0/3.d0*q**2+2.d0/5.d0*q**4)
*      +(2.d0*q**2*xx**2-1.d0)/(6.d0*xx**2)
*      *(1.d0+q**2*xx**2)**(1.d0/2.d0)
*      *(2.d0*(1.d0+xx**2)**(1.d0/2.d0)-q*(1.d0+xx**2)
*      -1.d0/2.d0*q**3*xx**4+1.d0/12.d0*q**5*xx**6
*      +q**3*xx**2*(1.d0+xx**2)-1.d0/32.d0*q**7*xx**8
*      -3.d0/4.d0*q**5*xx**4*(1.d0+xx**2)
*      -1.d0/2.d0*q**3*(1.d0+xx**2)**2))

```

else

```

q2eps=q**2+(2.d0/(3.d0*(pi**2)))**2*(2.d0/3.d0)*rs

```

```

*      *(2.d0/3.d0*(1.d0+xx**2)**(1.d0/2.d0)-2.d0*q**2*xx/3.d0
*      *(dlog(xx+dsqrt(1+xx**2)))
*      +(1.d0+xx**2)**(1.d0/2.d0)*(xx**2+1.d0-3.d0*q**2*xx**2)
*      /(6.d0*q*xx**2)*dlog(dabs((1.d0+q)/(1.d0-q)))
*      +(2.d0*q**2*xx**2-1.d0)/(6.d0*q*xx**2)
*      *(1.d0+q**2.d0*xx**2)**(1.d0/2.d0)
*      *dlog(dabs((q*(1.d0+xx**2)**(1.d0/2.d0)
*      +(1.d0+q**2.d0*xx**2)**(1.d0/2.d0))
*      /(q*(1.d0+xx**2)**(1.d0/2.d0)
*      -(1.d0+q**2*xx**2)**(1.d0/2.d0))))))

```

endif

```

if(2.d0*kf*rc*q.lt.1.d-4)then

```

```

f=1.d0-1.d0/10.d0*(2.d0*kf*rc*q)**2+1.d0/280.d0*(2.d0*kf*rc*q)**2

```

else

```

f=-3.d0*((2.d0*kf*rc*q)*dcos(2.d0*kf*rc*q)-dsin(2.d0*kf*rc*q))
* /((2.d0*kf*rc*q)**3)

```

```

endif

y=(18.d0*pi*Z)**(1.d0/3.d0)*q

if(y.ge.0.d0.and.y.le.3.01d0)then
is=1
l=4
n=2
do k=1,l
c=b(is,k,3)*(gam-1.d0)*(gam-225.d0)
aa(k)=b(is,k,1)+b(is,k,2)*(gam-1.d0)+c
enddo

elseif(y.gt.3.d0.and.y.le.5.9d0)then
is=2
l=7
n=5
do k=1,l
cc=0.d0
do m=3,7
c=b(is,k,m)*(gam-1.d0)**(m-2)*(gam-225.d0)
cc=cc+c
enddo
aa(k)=b(is,k,1)+b(is,k,2)*(gam-1.d0)+cc
enddo

elseif(y.gt.5.9d0.and.y.le.9.75d0)then
is=3
l=7
n=5

```

```

do k=1,1
cc=0.d0
do m=3,7
c=b(is,k,m)*(gam-1.d0)**(m-2)*(gam-225.d0)
cc=cc+c
enddo
aa(k)=b(is,k,1)+b(is,k,2)*(gam-1.d0)+cc
enddo

```

```

elseif(y.gt.9.75d0.and.y.le.13.65d0)then

```

```

is=4

```

```

l=5

```

```

n=3

```

```

do k=1,1
cc=0.d0
do m=3,7
c=b(is,k,m)*(gam-1.d0)**(m-2)*(gam-225.d0)
cc=cc+c
enddo
aa(k)=b(is,k,1)+b(is,k,2)*(gam-1.d0)+cc
enddo

```

```

elseif(y.gt.13.65d0.and.y.le.17.65d0)then

```

```

is=5

```

```

l=5

```

```

n=3

```

```

do k=1,1
cc=0.d0
do m=3,6
c=b(is,k,m)*(gam-1.d0)**(m-2)*(gam-225.d0)

```

```

cc=cc+c
enddo
aa(k)=b(is,k,1)+b(is,k,2)*(gam-1.d0)+cc
enddo

elseif(y.gt.17.65d0.and.y.le.21.75d0)then
    is=6
l=4
n=2
do k=1,l
c=b(is,k,3)*(gam-1.d0)*(gam-225.d0)
aa(k)=b(is,k,1)+b(is,k,2)*(gam-1.d0)+c
enddo

endif

f0=-3*gam/(y**2+3.d0*gam/B0)

dd=0.d0
do j=1,n
d=aa(j+2)*(y-qq(is))**j*(y-qq(is+1))
dd=dd+d
enddo
cs=-f0-aa(1)-aa(2)*(y-qq(is))-dd

Sy=1.d0/(1.d0+3.d0*Gam/y**2-cs)

Fmin=q**3*(Sy*(dabs(f))**2/((q2eps)**2))
Fplu=q**5*(Sy*(dabs(f))**2/((q2eps)**2))
Fzero=q**4*(Sy*(dabs(f))**2/((q2eps)**2))

```

c

```
    if (Z.eq.6.d0) then
      if(iE.eq.1)then
        Fcorr=(0.147*q**6-0.428*q**5+0.463*q**4-0.230*q**3
          *      +0.050*q**2+0.001*q-1.d-5)*Fmin
      elseif(iE.eq.2)then
        Fcorr=(0.311*q**6-0.985*q**5+1.185*q**4-0.666*q**3
          *      +0.166*q**2-0.008*q+1.d-6)*Fmin
      elseif(iE.eq.3)then
        Fcorr=(-0.152*q**6+0.413*q**5-0.387*q**4+0.124*q**3
          *      +0.001*q**2+0.000*q+1.d-5)*Fmin
      elseif(iE.eq.4)then
        Fcorr=(-0.464*q**6+1.373*q**5-1.500*q**4+0.727*q**3
          *      -0.150*q**2+0.015*q+1.d-5)*Fmin
      elseif(iE.eq.5)then
        Fcorr=(-0.219*q**6+0.734*q**5-0.922*q**4+0.527*q**3
          *      -0.136*q**2+0.017*q+4.d-6)*Fmin
      elseif(iE.eq.6)then
        Fcorr=(0.024*q**6-0.108*q**5+0.200*q**4-0.183*q**3
          *      +0.071*q**2-0.003*q+3.d-6)*Fmin
      elseif(iE.eq.7)then
        Fcorr=(-0.262*q**6+0.840*q**5-1.000*q**4+0.529*q**3
          *      -0.123*q**2+0.016*q+9.d-6)*Fmin
      elseif(iE.eq.8)then
        Fcorr=(0.293*q**6-0.998*q**5+1.299*q**4-0.801*q**3
          *      +0.223*q**2-0.015*q-5.d-6)*Fmin
      elseif(iE.eq.9)then
        Fcorr=(-0.115*q**6+0.381*q**5-0.460*q**4+0.229*q**3
          *      -0.042*q**2+0.006*q-2.d-5)*Fmin
    endif
```

c

```
elseif (Z.eq.13.d0) then
  if(iE.eq.1)then
    Fcorr=(0.228*q**6-0.709*q**5+0.881*q**4-0.573*q**3
      *      +0.191*q**2-0.003*q+2.d-5)*Fmin
  elseif(iE.eq.2)then
    Fcorr=(0.344*q**6-1.199*q**5+1.619*q**4-1.078*q**3
      *      +0.344*q**2-0.017*q-3.d-6)*Fmin
  elseif(iE.eq.3)then
    Fcorr=(-0.094*q**6+0.252*q**5-0.206*q**4-0.006*q**3
      *      +0.051*q**2+0.012*q+3.d-5)*Fmin
  elseif(iE.eq.4)then
    Fcorr=(-0.115*q**6+0.296*q**5-0.224*q**4-0.029*q**3
      *      +0.064*q**2+0.013*q-3.d-6)*Fmin
  elseif(iE.eq.5)then
    Fcorr=(0.191*q**6-0.641*q**5+0.869*q**4-0.639*q**3
      *      +0.226*q**2-0.003*q+9.d-6)*Fmin
  elseif(iE.eq.6)then
    Fcorr=(-0.365*q**6+1.128*q**5-1.286*q**4+0.605*q**3
      *      -0.113*q**2+0.032*q+4.d-6)*Fmin
  elseif(iE.eq.7)then
    Fcorr=(0.336*q**6-1.027*q**5+1.200*q**4-0.714*q**3
      *      +0.198*q**2+0.008*q+7.d-6)*Fmin
  elseif(iE.eq.8)then
    Fcorr=(0.122*q**6-0.419*q**5+0.565*q**4-0.419*q**3
      *      +0.139*q**2+0.012*q+4.d-6)*Fmin
  elseif(iE.eq.9)then
    Fcorr=(-0.310*q**6+0.878*q**5-0.875*q**4+0.299*q**3
      *      -0.014*q**2+0.021*q+2.d-5)*Fmin
endif
```

c

```
elseif (Z.eq.29.d0) then
    if(iE.eq.1)then
        Fcorr=(-0.138*q**6+0.063*q**5+0.813*q**4-1.514*q**3
            * +1.000*q**2-0.122*q-1.d-5)*Fmin
    elseif(iE.eq.2)then
        Fcorr=(0.650*q**6-2.382*q**5+3.615*q**4-2.993*q**3
            * +1.080*q**2-0.021*q-2.d-5)*Fmin
    elseif(iE.eq.3)then
        Fcorr=(0.395*q**6-1.555*q**5+2.572*q**4-2.392*q**3
            * +1.100*q**2-0.063*q-8.d-6)*Fmin
    elseif(iE.eq.4)then
        Fcorr=(0.499*q**6-1.748*q**5+2.599*q**4-2.311*q**3
            * +1.221*q**2-0.089*q-1.d-5)*Fmin
    elseif(iE.eq.5)then
        Fcorr=(0.039*q**6-0.304*q**5+0.857*q**4-1.347*q**3
            * +0.781*q**2-0.007*q+8.d-6)*Fmin
    elseif(iE.eq.6)then
        Fcorr=(0.132*q**6-0.647*q**5+1.333*q**4-1.67*q**3
            * +0.875*q**2-0.012*q+3.d-5)*Fmin
    elseif(iE.eq.7)then
        Fcorr=(0.075*q**6-0.410*q**5+0.979*q**4-1.451*q**3
            * +0.814*q**2-0.003*q+7.d-6)*Fmin
    elseif(iE.eq.8)then
        Fcorr=(0.132*q**6-0.65*q**5+1.349*q**4-1.723*q**3
            * +0.908*q**2-0.015*q-1.d-5)*Fmin
    elseif(iE.eq.9)then
        Fcorr=(0.506*q**6-1.734*q**5+2.506*q**4-2.269*q**3
            * +1.008*q**2-0.016*q-7.d-6)*Fmin
    endif
```

```

endif
Scorr=Scorr+Fcorr*WQ(iq)

    Smin=Smin+Fmin*WQ(iq)
Splu=Splu+Fplu*WQ(iq)
    Szero=Szero+Fzero*WQ(iq)

    enddo

    enddo

    Sexact=Smin-C1*Splu+pi*Z*alp*dsqrt(C1)*(Szero-Splu)

FSmin(iE)=Smin
    FSzero(iE)=Szero
FSplu(iE)=Splu

    FS(iE)=Sexact
FScorr(iE)=Scorr
Fds(iE)=FS(iE)+FScorr(iE)

    Smin=0.d0
    Szero=0.d0
    Splu=0.d0
Scorr=0.d0

    enddo

    do iE=1,9
write(10,7000) rho(iE),Fds(iE),FS(iE),FS(iE)/Fds(iE)

```

```
7000 format(f30.4,13(','f30.4))
enddo
```

```
END
```

```
C=====
```

```
      SUBROUTINE GAUSAB( X, W, A, B, NPT )
```

```
C=====
```

```
C              /b
C  Gaussian quadratures for  $\int_a^b f(x)dx$ .  NPT must be even & <100.
C              /a
C
```

```
C=====
```

```
      IMPLICIT REAL*8 (A-H,O-Z)
```

```
      REAL*8 X(1), W(1)
```

```
      REAL*8 XX, WW, C1, C2
```

```
      COMMON / GAUSCM / XX(100), WW(100)
```

```
C-----
```

```
      NPT2 = NPT/2
```

```
      IF( A .EQ. 0. .AND. B .GT. .5E20 ) THEN
```

```
        CALL GAUS(NPT,1)
```

```
        DO 5 N = 1, NPT
```

```
          X(N) = XX(N)
```

```
          W(N) = WW(N)
```

```
5      CONTINUE
```

```

RETURN
END IF

CALL GAUS(NPT,0)

C1 = (B-A)/2.
C2 = (B+A)/2.

DO 10 N = 1, NPT2
M = NPT2 + 1 - N
X(N) = - XX(M)*C1 + C2
W(N) = WW(M)*C1
10 CONTINUE

DO 20 N = NPT2+1, NPT
M = N - NPT2
X(N) = XX(M)*C1 + C2
W(N) = WW(M)*C1
20 CONTINUE

RETURN

END

```

C=====

```

SUBROUTINE GAUS(NN, ITYPE)
C
C STANDARD SETTINGS ARE: IALF=IBTA=0, 0<NN<100,
C ITYPE=0 : -1 TO +1 POINTS
C ITYPE=1 : 0 TO INFINITY
C

```

IMPLICIT REAL*8 (A-H,O-Z)

DATA IALF, IBTA / 0, 0 /

C*****

C

C GAUJAC COMPUTES GAUSS - JACOBI INTEGRATION WEIGHTS AND NODES

C

C*****

C

DIMENSION X(100),A(100),B(100),C(100)

DIMENSION XX(100), WW(100)

DIMENSION G(100)

C

COMMON/GAUSCM/XX,WW

C

PI=3.141592653589793238D0

C

ISUM=IALF+IBTA

IDIF=IBTA-IALF

FNUM=ISUM*IDIF

ALF=IALF

BTA=IBTA

C

C CALCULATE COEFFICIENTS REQUIRED BY JACOBI

C

DO 20 I=1,100

I2=I+I

IM=I-1

DEN=(ISUM+I2)*(ISUM+I2-2)

IF(ISUM.EQ.0) GO TO 67

```

        B(I)=FNUM/DEN
        GO TO 68
67      B(I)=0.D0
68      FNUMP=4*IM*(IALF+IM)*(IBTA+IM)*(ISUM+IM)
        DENP=(ISUM+I2-1)*(ISUM+I2-2)**2*(ISUM+I2-3)
        IF(((ISUM.EQ.0).OR.(ISUM.EQ.1)).AND.(I.EQ.1)) GO TO 69
        C(I)=FNUMP/DENP
        GO TO 20
69      C(I)=0.D0
20     CONTINUE

```

C-----

C For outputting quadratures

C-----

C TYPE 34

C34 FORMAT(1X,'FILENAME FOR INTERMEDIATE RESULTS =? (A10)')

C ACCEPT 35,FNAMX

C35 FORMAT(A10)

C OPEN(UNIT=3,FILE=FNAMX,STATUS='NEW')

C-----

CALL JACOBI(NN,X,G,ALF,BTA,B,C,EPS,CSX,CSA,TSX,TSA)

C-----

C For outputting quadratures

C-----

C TYPE 70

C70 FORMAT(1X,'OUTPUT FILENAME ? (A10)')

C ACCEPT 71,FNAM

C71 FORMAT(A10)

```

C      OPEN(UNIT=7,FILE=FNAM,STATUS='NEW')
C-----

C      OUTPUT DATA STATEMENT OF WEIGHTS AND NODES
C
      IF(ITYPE.EQ.0) GO TO 130
      DO 100 I=1,NN
      II=NN+1-I
C      XX(I)=(1.0D+00+X(II))/(1.0D+00-X(II))
C      WW(I)=2.0D+00*G(II)/((1.0D+00-X(II))**(IALF+2))*
C 1      (1.0D+00+X(II))**IBTA)
      ZZ=PI*(1.0D+00+X(II))/4.0D+00
      XX(I)=SIN(ZZ)/COS(ZZ)
      WW(I)=G(II)*PI*0.25D+00/(COS(0.25D+00*PI*(1.0D+00
1      +X(II)))**2)

C-----

C      WRITE(7,120)I,I,XX(I),WW(I)
120    FORMAT(6X,6HDATA(,I2,6H,M),W(,I2,4H,M)/,D22.15,1H,,
1      D22.15,1H/)

C-----

100    CONTINUE
      RETURN
130    CONTINUE
      NI=NN/2
      DO 140 I=1,NI
      II=NI+1-I
      XX(I)=X(II)
      WW(I)=G(II)

```

```

C-----
C      WRITE(7,120)I,I,XX(I),WW(I)
C-----

```

```

140  CONTINUE

```

```

      RETURN

```

```

      END

```

```

      SUBROUTINE JACOBI(NN,X,A,ALF,BTA,B,C,EPS,CSX,CSA,TSX,TSA)

```

```

      IMPLICIT REAL*8 (A-H,O-Z)

```

```

C

```

```

C*****

```

```

C

```

```

C      CALCULATES THE ZEROS X(I) OF THE NN-TH ORDER JACOBI POLYNOMIAL

```

```

C      PN(ALF,BTA) FOR THE SEGMENT (-1,1)

```

```

C      THE LARGEST ZERO WILL BE STORED IN X(1).

```

```

C      ALSO CALCULATES THE CORRESPONDING COEFFICIENTS A(I) OF THE

```

```

C      NN-TH ORDER GAUSS-JACOBI QUADRATURE FORMULA OF DEGREE 2*NN-1.

```

```

C      THIS SUBROUTINE MUST BE GIVEN THE COEFFICIENTS:

```

```

C

```

```

C      (ALF+BTA)(BTA-ALF)

```

```

C      B(N) = -----

```

```

C      (ALF+BTA+2N)(ALF+BTA+2N-2)

```

```

C

```

```

C      4(N-1)(ALF+N-1)(BTA+N-1)(ALF+BTA+N-1)

```

```

C      C(N) = -----

```

```

C      (ALF+BTA+2N-1)(ALF+BTA+2N-2)**2(ALF+BTA+2N-3)

```

```

C

```

```

C

```

```

C      IN THE RECURSION RELATION

```

```

C
C      P(N) = (X-B(N))*P(N-1)-C(N)*P(N-2)
C
C
C      FOR ALL N LESS THAN OR EQUAL TO THE HIGHEST DEGREE NN.
C
C      CSX = CALC SUM X(I)      TSX = TRUE SUM X(I)
C      CSA = CALC SUM A(I)      TSA = TRUE SUM A(I)
C
C*****
C
      DIMENSION X(100),A(100),B(100),C(100)
      FN=NN
      CSX=0.D0
      CSA=0.D0
      BETA=EXP(FLGAMA(ALF+1.D0)+FLGAMA(BTA+1.D0)-FLGAMA(ALF+BTA+2.D0))
      CC=2.**(ALF+BTA+1.)*BETA
      TSX=FN*(BTA-ALF)/(ALF+BTA+2.*FN)
      TSA=CC
      DO 1 J=2,NN
1      CC=CC*C(J)
      DO 12 I=1,NN
      IF(I-1)12,2,3
C      LARGEST ZERO
2      AN=ALF/FN
      BN=BTA/FN
      R1=(1.D0+ALF)*(2.78/(4.+FN*FN)+.768*AN/FN)
      R2=1.D0+1.48*AN+.96*BN+.452*AN*AN+.83*AN*BN
      XT=1.D0-R1/R2
      GO TO 11
3      IF(I-2)12,4,5

```

C SECOND ZERO

4 $R1=(4.1+ALF)/((1.+ALF)*(1.+156*ALF))$
 $R2=1.D0+.06*(FN-8.)*(1.D0+.12*ALF)/FN$
 $R3=1.D0+.012*BTA*(1.D0+.25*ABS(ALF))/FN$
RATIO=R1*R2*R3
XT=XT-RATIO*(1.D0-XT)
GO TO 11

5 IF(I-3) 12,6,7

C THIRD ZERO

6 $R1=(1.67+.28*ALF)/(1.D0+.37*ALF)$
 $R2=1.D0+.22*(FN-8.D0)/FN$
 $R3=1.D0+8.*BTA/((6.28D0+BTA)*FN*FN)$
RATIO=R1*R2*R3
XT=XT-RATIO*(X(1)-XT)
GO TO 11

7 IF(NN-I-1) 10,9,8

C MIDDLE ZEROS

8 $XT=3.*X(I-1)-3.*X(I-2)+X(I-3)$
GO TO 11

C SECOND LAST ZERO

9 $R1=(1.D0+.235*BTA)/(.766D0+.119*BTA)$
 $R2=1./(1.D0+.639*(FN-4.D0)/(1.D0+.71*(FN-4.D0)))$
 $R3=1./(1.D0+20.*ALF/((7.5D0+ALF)*FN*FN))$
RATIO=R1*R2*R3
XT=XT+RATIO*(XT-X(I-2))
GO TO 11

C LAST ZERO

10 $R1=(1.D0+.37*BTA)/(1.67D0+.28*BTA)$
 $R2=1./(1.D0+.22*(FN-8.D0)/FN)$
 $R3=1./(1.D0+8.*ALF/((6.28D0+ALF)*FN*FN))$

```

RATIO=R1*R2*R3
XT=XT+RATIO*(XT-X(I-2))
C
11 CALL GSROOT(XT, NN, ALF, BTA, DPN, PN1, B, C, EPS)
X(I)=XT
A(I)=CC/(DPN*PN1)
C-----
C WRITE(3,20)ALF, BTA, NN, I, XT, A(I)
C-----

CSX=CSX+XT
CSA=CSA+A(I)
12 CONTINUE
C-----
C WRITE(3,22)CSX, CSA, TSX, TSA
20 FORMAT(1X,2F6.2,2I3,2(1X,D26.18),1X,(1X,D26.18))
22 FORMAT(1H0,/,5X,'CSX =',D25.18,5X,'CSA =',D25.18,/,
1 5X,'TSX =',D25.18,5X,'TSA =',D25.18)
C-----

RETURN
END
SUBROUTINE GSROOT(X, NN, ALF, BTA, DPN, PN1, B, C, EPS)
IMPLICIT REAL*8 (A-H, O-Z)
C
C*****
C
C IMPROVES THE APPROXIMATE ROOT X
C IN ADDITION WE ALSO OBTAIN:

```

```

C      DPN = DERIVATIVE OF P(N) AT X
C      PN1 = VALUE OF P(N-1) AT X
C
C*****
C
      DIMENSION B(100),C(100)
      ITER=0
1     ITER=ITER+1
      CALL RECR(P,DP,PN1,X,NN,ALF,BTA,B,C)
      D=P/DP
      X=X-D
      IF (ABS(D)-EPS)3,3,2
2     IF (ITER-10)1,3,3
3     DPN=DP
      RETURN
      END
      SUBROUTINE RECR(PN,DPN,PN1,X,NN,ALF,BTA,B,C)
      IMPLICIT REAL*8 (A-H,O-Z)
C
      DIMENSION B(100),C(100)
      P1=1.D0
      P=X+(ALF-BTA)/(ALF+BTA+2.D0)
      DP1=0.D0
      DP=1.D0
      DO 1 J=2,NN
      Q=(X-B(J))*P-C(J)*P1
      DQ=(X-B(J))*DP+P-C(J)*DP1
      P1=P
      P=Q
      DP1=DP

```

```

        DP=DQ
1      CONTINUE
        PN=P
        DPN=DP
        PN1=P1
        RETURN
        END

        FUNCTION FLGAMA(W)
        IMPLICIT REAL*8 (A-H,O-Z)

C
C*****
C
C      CALCULATES LOG(BASE E)GAMMA(W) FOR W REAL AND GAMMA(W) POSITIVE.
C      USES STIRLING'S APPROXIMATION
C      ACCURATE TO ABOUT 12 SIGNIFICANT PLACES
C
C*****
C
        PI=3.141592653589793238D0
        X=W
        M=0
        FK=-1.D0
        IF(X-.5D0)1,1,2
C      W LESS EQ .5
1      M=1
        XPI=X*PI
        X=1.D0-X
2      FK=FK+1.D0
        IF(X+FK-6.D0)2,2,3
3      Z=X+FK

```

```

ZZ=Z*Z
C      LOG GAMMA(Z), Z GREATER 6.
      Y=(Z-.5)*LOG(Z)-Z+.9189385332047+((((((-10861851./ZZ
1 +2356200.)/ZZ-704820.)/ZZ+309400.)/ZZ-218790.)/ZZ
2 +291720.)/ZZ-1021020.)/ZZ+30630600.)/Z/367567200.
      IF(FK)6,6,4
4      IK=FK
      DO 5 I=1,IK
      FK=FK-1.
5      Y=Y-LOG(X+FK)
6      IF(M)7,11,7
7      P=PI/SIN(XPI)
      IF(P)8,8,10
8      WRITE(6,9)W
9      FORMAT(2X,6HGAMMA(D11.4,13H) IS NEGATIVE)
      Y=0.
      GO TO 11
10     Y=LOG(P)-Y
11     FLGAMA=Y
      RETURN
      END

```