

図8 2準位間の遷移による光の放射・吸収

許される。

ガス雲の密度が薄く、背景放射が弱い場合、 i 番目の準位から j 番目の準位に遷移するときの放射エネルギーの放射率は、これらの準位間のエネルギー差を E_{ij} とし、これらの準位間の自然遷移確率を A_{ij} として

$$j_{ij} = A_{ij} n_i E_{ij} \quad (2.27)$$

である。ここで n_i は準位 i に存在する分子の数密度（レベルポピュレーション）である。この n_j は以下のようにして求まる。

遷移確率として3つの確率を考えなければならない。自然放射による遷移確率 A_{ij} 、誘導放射、吸収による遷移確率 B_{ij} 、 B_{ji} 、原子・分子との衝突遷移確率 C_{ij} 、 C_{ji} （図8）である。水素分子の回転の場合、確率の大きさから隣どおしの準位だけ考慮すれば、 n_i の時間変化率は次のようにかくことができる。（Hutcons 1975）

$$\begin{aligned} \frac{dn_j}{dt} = & n_{j+2} [A(j+2, j) + J_{\nu(j)} B(j+2, j) + C(j+2, j)] \\ & - n_j [A(j, j-2) + J_{\nu(j-2)} B(j, j-2) + C(j, j-2) + J_{\nu(j)} B(j, j+2) + C(j, j+2)] \\ & + n_{j-2} [J_{\nu(j-2)} B(j-2, j) + C(j-2, j)] \end{aligned} \quad (2.28)$$

ここで、 $J_{\nu(j)}$ は振動数 $\nu(j) = \varepsilon(j)/h = hc/\lambda(j)$ での放射場のエネルギー強度、ただし、 $\varepsilon(j)$ は j 番目と $j+2$ 番目の準位間のエネルギー差である。A、Bは次のアインシュタインの関係式を、

$$J_{\nu(j)} B(j, j+2) = G(j) J_{\nu(j)} B(j+2, j) = G(j) J'(j) A(j+2, j) \quad (2.29)$$

また、Cは次の詳細釣り合いの関係を満たす。

$$C(j, j+2) = G(j) C(j+2, j) \exp(-\varepsilon(j)/k_B T_k) \quad (2.30)$$

ここで $G(j) = (2j+5)/(2j+1)$ は $j+2$ 番目の準位と j 番目の縮退数の比である。また、

T_k はガスの温度である。

これ以後， $A(j+2, j)$ と $C(j+2, j)$ の逆励起の係数をそれぞれ $A(j), C(j)$ と表す。励起，逆励起は平衡状態にあると考え，(2.28)の左辺を 0 として

$$\begin{aligned} & n_{j+2} \{ [1 + J'(j-2)A(j)] + C(j) \} \\ & - n_j \{ [1 + J'(j-2)]A(j-2) + C(j-2) + G(j)J'(j)A(j) + G(j)C(j) \exp(-\varepsilon(j)/k_B T_k) \} \\ & + n_{j-2} \{ G(j-2)J'(j-2)A(j-2) + G(j-1)C(j-2) \exp(-\varepsilon(j-2)/k_B T_k) \} \end{aligned} \quad (2.31)$$

この式から，

$$n_{j+2} = G(j) \left\{ \frac{A(j)J'(j) + C(j) \exp(-\varepsilon(j)/k_B T_k)}{A(j) + A(j)J'(j) + C(j)} \right\} n_j \quad (2.32)$$

これは j 番目と $j+2$ 番目との 2 準位間のつりあいに他ならない。(2.29)，(2.30)を用いて

$$(A(j+2, j) + B(j+2, j)J_{v(j)} + C(j+2, j))n_{j+2} = (B(j, j+2)J_{v(j)} + C(j, j+2))n_j \quad (2.33)$$

となる。右辺の第一項は誘導放射による励起，第二項は衝突による励起を表し，左辺の第一項は自然放射による逆励起，第二項は誘導放射による逆励起，第三項は衝突による逆励起を表す。(2.32)より， n_{2j} は全て n_0 によって， n_{2j+1} は全て n_1 によって表すことができる。

水素分子においては核スピン波動関数が対称で回転波動関数が反対称 ($j=1,3,5,\dots$) であるパラの原子が全体の $3/4$ ，核スピン波動関数が反対称で回転波動関数が対称 ($j=2,4,6,\dots$) であるオルトの原子が全体の $1/4$ を占める。よって水素分子の数密度を n_{H_2} とすると

$$\sum_{odd} n_j = \frac{3}{4} n_{H_2}, \quad \sum_{even} n_j = \frac{1}{4} n_{H_2} \quad (2.34)$$

これから n_0, n_1 が求まる。

以上により，単位体積あたり 1 秒間に放出される輻射のエネルギー（輻射冷却率）は

$$\begin{aligned} \Lambda &= \sum_{j=0} \varepsilon(j) \{ [1 + J'(j)]n_{j+2} - G(j)J'(j)n_j \} A(j) \quad (2.35) \\ &= \sum_{j=0} G(j)C(j)n_j \varepsilon(j) \left\{ \frac{A(j)J'(j) + [A(j) + A(j)J'(j)] \exp(-\varepsilon(j)/k_B T_k)}{A(j) + A(j)J'(j) + C(j)} \right\} \end{aligned}$$

(2.35)の第一項，第二項はそれぞれ自発放射，誘導放射であり，第三項は誘導吸収を示す。

特に，背景の輻射場 $J'(j)$ が十分小さく，しかも分子数密度が十分小さい $A \gg C$ 場合，(2.33)は

$$A(j+2, j)n_{j+2} = C(j, j+2)n_j \quad (2.36)$$

となり，(2.35)は

$$\begin{aligned}\Lambda &= \sum_{j=0} A(j+2, j)n_{j+2}\varepsilon(j) = \sum_{j=0} C(j, j+2)n_j\varepsilon(j) & (2.37) \\ &= \sum_{j=0} G(j)C(j+2, j)\exp(-\varepsilon(j)/k_B T_k)n_j\varepsilon(j)\end{aligned}$$

となる。

逆に、数密度が大きく衝突励起・衝突逆励起が優勢で背景放射が十分弱い $A, BJ' \ll C$ の場合、(2.32),(2.33)はそれぞれ

$$C(j+2, j)n_{j+2} = C(j, j+2)n_j \quad (2.38)$$

$$n_{j+2} = G(j)\exp(-\varepsilon(j)/k_B T_k)n_j \quad (2.39)$$

となり、ガスと同じ温度でボルツマン分布し熱平衡状態 (LTE) にある。このとき(2.35)は次のようになる。

$$\Lambda = \sum_{j=0} A(j+2, j)n_{j+2}\varepsilon(j) \quad (2.40)$$

Λ を計算するには $A(j), \varepsilon(j), C(j)$ の値が必要である。水素分子にいては自然放射係数は次のように与えられる。

$$A(j) = \frac{32\pi^6 v(j)^5}{5hc^5} \frac{(j+1)(j+2)}{(2j+3)(2j+5)} \left\langle j+2|Q|j \right\rangle^2 \quad (2.41)$$

ここで Q は水素分子の電気四重極モーメントの作用素である。また、(2.25)より

$$\varepsilon(j) = E_{j+2} - E_j = 2hB(2j+3) \quad (2.42)$$

である。さらに、 $C(j)$ については水素原子との衝突、水素分との衝突による係数を考えなければならぬ。衝突遷移反応断面積 σ 、相対速度 v を用いて次の式のように表せる。

$$C_H(j+2, j) = n_H \langle \sigma_{j+2, j}^H v \rangle \equiv n_H \gamma_{j+2}^H(T) \quad (2.43)$$

$$C_{H_2}(j+2, j) = n_{H_2} \langle \sigma_{j+2, j}^{H_2} v \rangle \equiv n_{H_2} \gamma_{j+2}^{H_2}(T) \quad (2.44)$$

これらの値は数値計算の結果を関数近似 (analytical fit) することにより、温度の関数として表すことができる。((2.51),(2.52)) (Hollenbach Mckee 1979)

以上のような考察を押し進めることにより、水素分子の回転と振動による冷却率は、次のように与えられる。(Hollenbach Mckee 1979)

$$\Lambda_{H_2vr} = n_{H_2} (n_H L_{vr}^H + n_{H_2} L_{vr}^{H_2}) [\text{ergs}^{-1} \text{cm}^{-3}] \quad (2.45)$$

第一項は水素原子、第二項は水素分子との衝突によるものである。 L_{vr}^H 、 $L_{vr}^{H_2}$ を温度と水素分子密度に対しグラフ化したものが、それぞれ図9、図10である。

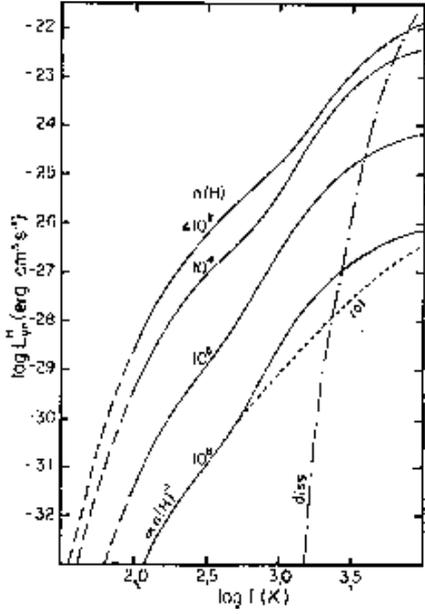


図9 水素原子との衝突による冷却係数

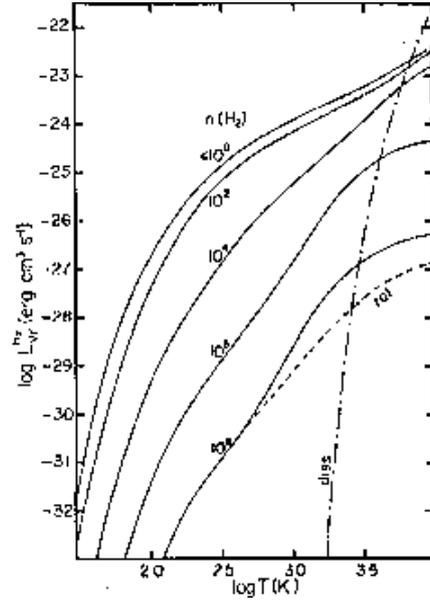


図10 水素分子との衝突による冷却係数

また、これらは次のよう関数近似 (analytical fit) することができる。

$$L_{vr}^{H,H_2} = \frac{L_r^{H,H_2}(n \rightarrow \infty) \cdot L_r^{H,H_2}(n \rightarrow 0)}{L_r^{H,H_2}(n \rightarrow \infty) + L_r^{H,H_2}(n \rightarrow 0)} + \frac{L_v^{H,H_2}(n \rightarrow \infty) \cdot L_v^{H,H_2}(n \rightarrow 0)}{L_v^{H,H_2}(n \rightarrow \infty) + L_v^{H,H_2}(n \rightarrow 0)} \quad (2.46)$$

ここで、 $n \rightarrow 0$ 、 $n \rightarrow \infty$ をそれぞれ、水素分子の低密度、高密度 (LET) の場合として

$$L_r^{H,H_2}(n \rightarrow \infty) = \frac{1}{n_{H,H_2}} \left(\left(\frac{9.5 \times 10^{-22} T_3^{3.76}}{1 + 0.12 T_3^{2.1}} \right) e^{-(0.13/T_3)^3} + 3 \times 10^{-24} e^{-(0.51/T_3)} \right) \quad (2.47)$$

$$L_v^{H,H_2}(n \rightarrow \infty) = \frac{1}{n_{H,H_2}} (6.7 \times 10^{-19} e^{-(5.86/T_3)} + 1.6 \times 10^{-18} e^{-(11.7/T_3)}) \quad (2.48)$$

$$L_r^{H,H_2}(n \rightarrow 0) = 0.25 \left(5 \gamma_2^{H,H_2} (E_2 - E_0) e^{-\frac{E_2 - E_0}{kT}} \right) + 0.75 \left(\frac{7}{3} \gamma_3^{H,H_2} (E_3 - E_1) e^{-\frac{E_3 - E_1}{kT}} \right) \quad (2.49)$$

$$L_v^{H,H_2}(n \rightarrow 0) = \gamma_{10}^{H,H_2} E_{10} e^{-\frac{E_{10}}{kT}} + \gamma_{20}^{H,H_2} E_{20} e^{-\frac{E_{20}}{kT}} \quad (2.50)$$

ただし、

$$\gamma_j^H = \left(\frac{1 \times 10^{-11} T_3^{1/2}}{1 + 60 T_3^{-4}} + 1 \times 10^{-12} T_3 \right) \left(0.33 + 0.9 e^{-\left(\frac{j-3.5}{0.9} \right)^2} \right) \quad (2.51)$$

$$\gamma_j^{H_2} = \left(3.3 \times 10^{-12} + 6.6 \times 10^{-12} T_3 \left(0.276 j^2 e^{-\left(\frac{j}{3.18}\right)^{1.7}} \right) \right) \quad (2.52)$$

$$\gamma_{10}^H = 1 \times 10^{-12} T^{1/2} \exp(-1000/T) \quad (2.53)$$

$$\gamma_{20}^H = 1.6 \times 10^{-12} T^{1/2} \exp\left(-\left(400/T\right)^2\right) \quad (2.54)$$

$$\gamma_{10}^{H_2} = 1.4 \times 10^{-12} T^{1/2} \exp\left(-\left(12000/(T+1200)\right)^2\right) \quad (2.55)$$

$$\gamma_{10}^H = 0 \quad (2.56)$$

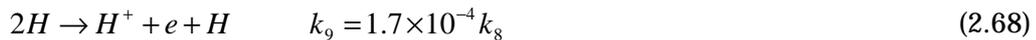
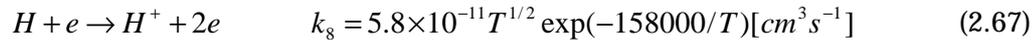
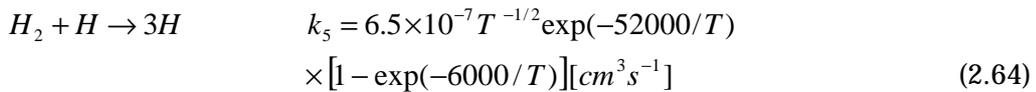
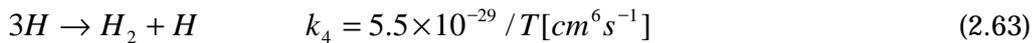
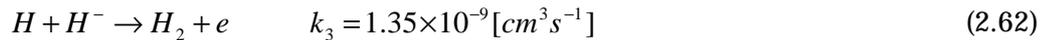
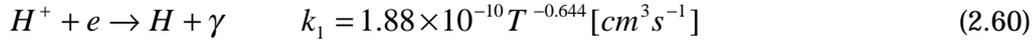
$$T_3 = T/1000[K] \quad (2.57)$$

$$(E_2 - E_0)/k = 512[K], \quad (E_3 - E_1)/k = 845[K] \quad (2.58)$$

$$E_{10}/k = E_{20}/2k = 5860[K] \quad (2.59)$$

2.3 収縮過程における化学反応と水素分子の生成・解離

1.1 の図 2 のように、「宇宙の晴れ上がり」直後の主な粒子成分は H, H^+, H^-, e, H_2, He の 6 種類である。このうち He の励起温度は 10^5 [K] 以上という高温なので考えないものとする。これらが関係する化学反応として次のものがある。(Palla, Salpeter, Stahler 1983)



(2.60) は「宇宙の晴れ上がり」の原因にもなった陽子と電子の再結合であり、高温になると水素原子の生成は抑えられる。(2.61), (2.62) は H^- を介した水素分子の生成であり、高温ほど大きくなる。(2.63), (2.65) は 3 体反応による水素分子の生成であり、高温ほど生成が抑えられ、解離が進む。(2.67), (2.68) は水素イオンの生成であり、高温になると急激に電離が進む。それぞれの反応の反応係数 k と温度 T の関係のグラフが図 1 1 である。

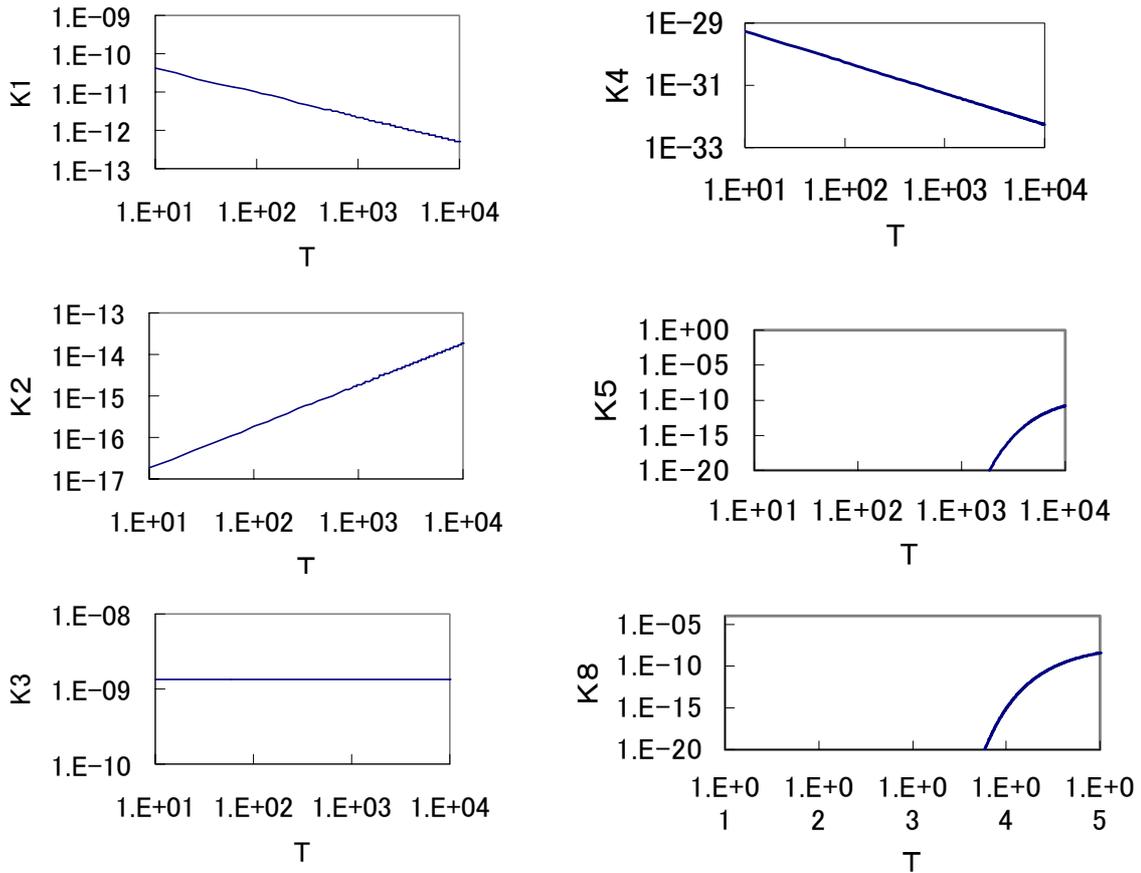


図 11 反応係数の温度変化

2. 4 収縮過程におけるエネルギーの関係式および反応速度方程式

回転楕円体内部に含まれる \$i\$ 種の粒子 (\$H, H^+, H^-, e, H_2\$) の個数を \$N_i\$, 質量を \$m_i\$, 1 個あたりの定積および定圧モル比熱をそれぞれ \$c_{vi}, c_{pi}\$ とし, 全粒子数を \$N\$, 全数密度を \$n\$ とする。内部エネルギーは次のように表すことができる。

$$U = \sum N_i c_{vi} T = \sum N_i \frac{k_B T}{\gamma_i - 1} \quad (2.69)$$

ここで, \$\gamma_i \equiv c_{pi} / c_{vi}\$, マイヤーの関係 \$c_{pi} - c_{vi} = k_B\$ を用いた。

さらに, 水素分子の輻射による冷却率を \$\Lambda [\text{erg} \cdot \text{cm}^{-3} \cdot \text{s}^{-1}]\$, 水素分子の解離による冷却率を \$\Lambda_{diss} [\text{erg} \cdot \text{cm}^{-3} \cdot \text{s}^{-1}]\$, ガスの圧力を \$P\$, 回転楕円体の体積を \$V\$ とすると, 熱力学の第一法則から次の式が成り立つ。

$$\frac{d}{dt} \left(\sum \frac{N_i k_B T}{\gamma_i - 1} \right) = -P \frac{dV}{dt} - \Lambda V - \Lambda_{diss} V \quad (2.70)$$

ここで，気体の状態方程式 $PV = Nk_B T$ を代入し，両辺を Nk_B で割り

$$\frac{d}{dt} \left(\sum \frac{N_i}{N} \frac{T}{\gamma_i - 1} \right) = -\frac{T}{V} \frac{dV}{dt} - \frac{V}{Nk_B} \Lambda - \frac{V}{Nk_B} \Lambda_{diss} \quad (2.71)$$

を得る。また，水素分子の解離エネルギーを $\varepsilon_d \equiv 7.16 \times 10^{-12} [\text{erg}]$ とすると

$$-\Lambda_{diss} V = \varepsilon_d \frac{dN_{H_2}}{dt} \quad (2.72)$$

となる。輻射や解離・生成がなければ，(2.71)は断熱変化の式となる。さらに，時間を自由落下時間で規格化して ($\tau = t/T_{ff}$)，次の式を得る。

$$\frac{d}{d\tau} \left(\sum \frac{N_i}{N} \frac{T}{\gamma_i - 1} \right) = -\frac{T}{V} \frac{dV}{d\tau} - \frac{VT_{ff}}{Nk_B} \Lambda + \frac{\varepsilon_d}{Nk_B} \frac{dN_{H_2}}{d\tau} \quad (2.73)$$

上式第三項の水素分子の解離・生成率を得るには，化学反応の反応速度方程式を解かなければならない。次に，その問題を考える。一般に i 種の粒子の数密度を

$$n_i \equiv \frac{N_i}{V} \quad (2.74)$$

とし，2体反応，3体反応の反応係数をそれぞれ k_{lm} , k_{lmn} とすると，反応速度方程式は次のようにかける。

$$\frac{dN_i}{dt} = \sum_l \sum_m k_{lm} \frac{N_l N_m}{V} + \sum_l \sum_m \sum_n k_{lmn} \frac{N_l N_m N_n}{V^2} \quad (2.75)$$

考えている5種の粒子 (H, H^+, H^-, e, H_2) の反応では次の量が保存される。

$$\text{全核子数} \quad N_b = N_{H^+} + N_{H^-} + N_H + 2N_{H_2} \quad (2.76)$$

$$\text{全電荷} \quad N_{H^+} - (N_e + N_{H^-}) = 0 \quad (2.77)$$

また，全粒子数 $N = N_e + N_{H^+} + N_{H^-} + N_H + N_{H_2}$ は保存量 N_b と次の関係がある。

$$N + N_{H_2} - N_e = N_b \quad (2.78)$$

ここで， i 種の粒子の全核子数に対する割合を $f_i \equiv N_i / N_b$ とすると，(2.78) より

$$\frac{N}{N_b} = 1 - f_{H_2} + f_e \quad (2.79)$$

さて，(2.76) を保存量 N_b で割り

$$\frac{df_i}{dt} = \frac{N_b}{V} \sum \sum k_{lm} f_l f_m + \left(\frac{N_b}{V} \right)^2 \sum \sum \sum k_{lmn} f_l f_m f_n \quad (2.80)$$

となる。また，添字 0 を $t=0$ での値として核子数密度に対し，

$$n_b V = n_{b0} V_0 \quad (2.81)$$

が成り立つ。回転楕円体の場合には

$$n_b = n_{b0} \frac{V_0}{V} = n_{b0} \frac{4\pi/3r_0^2 z_0}{4\pi/3r^2 z} = \frac{n_{b0}}{R^2 Z} \quad (2.82)$$

であり，さらに時間を自由落下時間で規格化して(2.80)は最終的に次のようになる。

$$\frac{df_i}{d\tau} = T_{ff} \frac{n_{b0}}{R^2 Z} \left\{ \sum \sum k_{lm} f_l f_m + \frac{n_{b0}}{R^2 Z} \sum \sum \sum k_{lmn} f_l f_m f_n \right\} \quad (2.83)$$

この式を(2.60)～(2.68)に適用して，次の反応速度方程式を得る。

$$\frac{df_e}{d\tau} = T_{ff} \frac{n_{b0}}{R^2 Z} (-k_1 f_{H^+} f_e - k_2 f_H f_e + k_3 f_H f_{H^-} + k_8 f_H f_e + k_9 f_H f_H) \quad (2.84)$$

$$\frac{df_{H^+}}{d\tau} = T_{ff} \frac{n_{b0}}{R^2 Z} (-k_1 f_{H^+} f_e + k_8 f_H f_e + k_9 f_H f_H) \quad (2.85)$$

$$\frac{df_e}{d\tau} = T_{ff} \frac{n_{b0}}{R^2 Z} (k_2 f_H f_e - k_3 f_H f_{H^-}) \quad (2.86)$$

$$\begin{aligned} \frac{df_H}{d\tau} = T_{ff} \frac{n_{b0}}{R^2 Z} & (k_1 f_{H^+} f_e - k_2 f_H f_e - k_3 f_H f_{H^-} - 2k_4 f_H^3 \frac{n_{b0}}{R^2 Z} + 2k_5 f_{H_2} f_H \\ & - 2k_6 f_H^2 f_{H_2} \frac{n_{b0}}{R^2 Z} + 2k_7 f_{H_2}^2 - k_8 f_{H_2} f_e - k_9 f_H^2) \end{aligned} \quad (2.87)$$

$$\frac{df_{H_2}}{d\tau} = T_{ff} \frac{n_{b0}}{R^2 Z} (k_3 f_H f_{H^-} + k_4 f_H^3 \frac{n_{b0}}{R^2 Z} - k_5 f_{H_2} f_H + k_6 f_H^2 f_{H_2} \frac{n_{b0}}{R^2 Z} - k_7 f_{H_2}^2) \quad (2.88)$$

また，エネルギーの関係式(2.73)は f_i で表すと次のようになる。

$$\begin{aligned} \frac{d}{d\tau} \left(\sum_i \frac{f_i}{(1-f_{H_2}+f_e)} \frac{T}{(\gamma_i-1)} \right) = & -T \left(\frac{2}{R} \frac{dR}{d\tau} + \frac{1}{Z} \frac{dZ}{d\tau} \right) - \frac{T_{ff}}{k_B} \frac{1}{(1-f_{H_2}+f_e)} \frac{R^2 Z}{n_{b0}} \Lambda \\ & + \frac{1}{(1-f_{H_2}+f_e)} \frac{\varepsilon_d}{k_B} \frac{df_{H_2}}{d\tau} \end{aligned} \quad (2.89)$$

ただし， Λ は(2.45)の輻射冷却率であり， n_{b0} は初期核子数密度である。

さらに，運動方程式(2.11)，(2.12) は1階の微分方程式に変形できる。

$$\frac{dR}{d\tau} = u \quad (2.90)$$

$$\frac{du}{d\tau} = -\alpha_0 \frac{F(\alpha)}{R^2} \quad (2.91)$$

$$\frac{dZ}{d\tau} = v \quad (2.92)$$

$$\frac{dv}{d\tau} = -\frac{1}{\alpha_0} \frac{G(\alpha)}{RZ} \quad (2.93)$$

微分方程式は(2.84) ~ (2.93)の10個であり, 未知数も $R, u, Z, v, T, f_e, f_{H^+}, f_{H^-}, f_H, f_{H_2}$ の10個であるので, 初期条件を与えれば原理的に解くことができる。

2.5 数値計算の方法

重力収縮の時間尺度 T_{ff} よりも化学反応の時間尺度が短いので, 通常のルンゲ・クッター法ではうまくいかない。2つの異なった時間尺度を含む微分方程式は「硬い(stiff)」と呼ばれる。このような「硬い」微分方程式を解く方法として「陰的方法」がある。今回は「半陰的方法」と呼ばれる手法を用いた。これらの方法をまとめておく。

常微分方程式

$$\frac{d\vec{y}}{dx} = \vec{f}(\vec{y}) \quad (2.94)$$

を考える。 \vec{y}_n が与えられて \vec{y}_{n+1} を求める場合, 次のように後退微分で差分化する。

$$\vec{y}_{n+1} = \vec{y}_n + h\vec{f}(\vec{y}_{n+1}) \quad (2.95)$$

この式から \vec{y}_{n+1} を解く方法を, 左辺, 右辺に未知数 \vec{y}_{n+1} があるので「陰的方法」という。

さらに右辺の第二項を \vec{y}_n のまわりで展開すると

$$\vec{y}_{n+1} = \vec{y}_n + h \left[\vec{f}(\vec{y}_n) + \frac{\partial \vec{f}}{\partial \vec{y}_n} \cdot (\vec{y}_{n+1} - \vec{y}_n) \right] \quad (2.96)$$

となり, この式を整理して

$$\vec{y}_{n+1} = \vec{y}_n + h \left[\vec{1} - h \frac{\partial \vec{f}}{\partial \vec{y}} \right]^{-1} \cdot \vec{f}(\vec{y}_n) \quad (2.97)$$

を得る。この式の右辺は \vec{y}_n だけで表されている(陽的な形)。「陰的方法」をテーラー展開により「陽的な形」に変形したので「半陰的方法」と呼ばれる。これらの解法の特徴は通常の前進微分を用いる「オイラー法」やその4次の解法である「ルンゲ・クッター法」に比べ, 数値解が発散しにくいということである。ただし, ヤコビアン $\partial \vec{f} / \partial \vec{y}$ を要求するのでプログラムが複雑化することが短所である。

さらに精度を上げるために(2.95)の代わりに次の中央差分を用いる。

$$\vec{y}_{n+1} - \vec{y}_{n-1} = 2h\vec{f}\left(\frac{\vec{y}_{n+1} + \vec{y}_{n-1}}{2}\right) \quad (2.98)$$

右辺を \vec{y}_n のまわりで展開し, 整理して

$$\left[\vec{1} - h \frac{\partial \vec{f}}{\partial \vec{y}} \right] \cdot \vec{y}_{n+1} = \left[\vec{1} + h \frac{\partial \vec{f}}{\partial \vec{y}} \right] \cdot \vec{y}_{n-1} + 2h \left[\vec{f}(\vec{y}_n) - \frac{\partial \vec{f}}{\partial \vec{y}} \cdot \vec{y}_n \right] \quad (2.99)$$

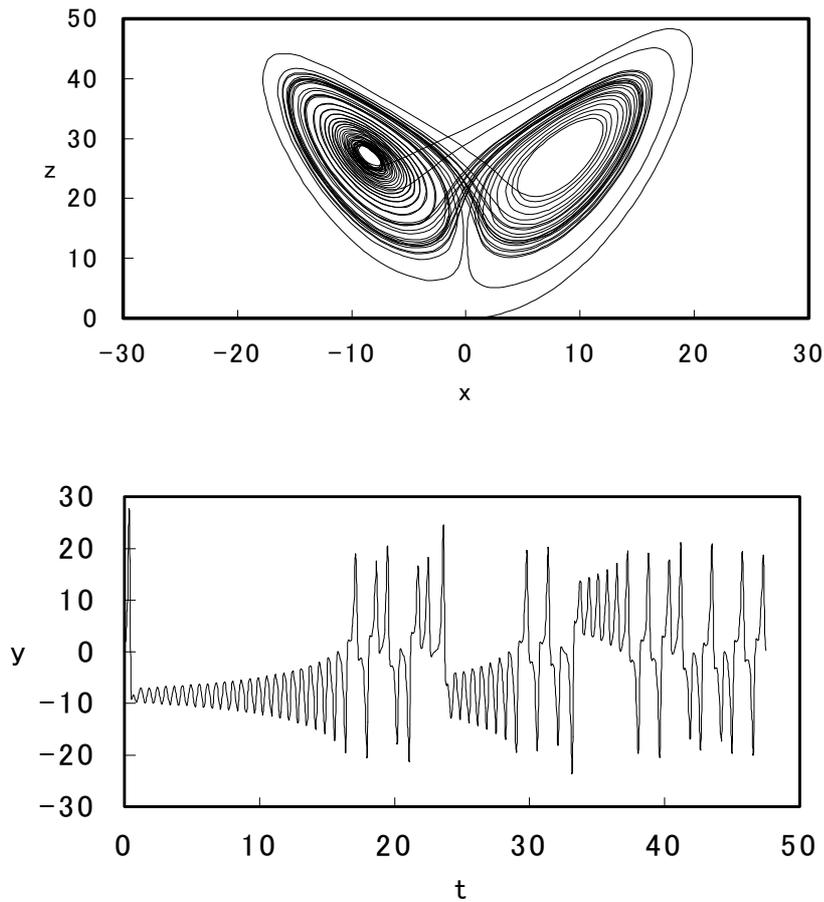


図1.2 ローレンツ・アトラクタ

さらに $\bar{\Delta}_k \equiv \bar{y}_{k+1} - \bar{y}_k$, $h = H/m$ と置くと , $k = 1, \dots, m-1$ に対して

$$\bar{\Delta}_k = \bar{\Delta}_{k-1} + 2 \left[\bar{1} - h \frac{\partial \bar{f}}{\partial \bar{y}} \right]^{-1} \cdot [h \bar{f}(\bar{y}_k) - \bar{\Delta}_{k-1}] \quad (2.100)$$

$$\bar{y}_{k+1} = \bar{y}_k + \bar{\Delta}_k \quad (2.101)$$

を得る。また , $k = 0, m$ に対しては , それぞれ

$$\bar{\Delta}_0 = \left[\bar{1} - h \frac{\partial \bar{f}}{\partial \bar{y}} \right]^{-1} \cdot h \bar{f}(\bar{y}_0) \quad , \quad \bar{y}_1 = \bar{y}_0 + \bar{\Delta}_0 \quad (2.102)$$

$$\bar{\Delta}_m = \left[\bar{1} - h \frac{\partial \bar{f}}{\partial \bar{y}} \right]^{-1} \cdot [h \bar{f}(\bar{y}_m) - \bar{\Delta}_{m-1}] \quad , \quad \bar{y}_m = \bar{y}_m + \bar{\Delta}_m \quad (2.103)$$

とする。

今回の数値計算では「半陰的方法」に加え、 \bar{y} の変化の大小にしたがって適切なステップ幅 h を自動的に設定するサブルーチンも用いた。

例として、ローレンツが熱対流のモデルとして導いた微分方程式

$$\begin{aligned}\frac{dX}{dt} &= -10X + 10Y \\ \frac{dY}{dt} &= 28X - Y - XZ \\ \frac{dZ}{dt} &= -\frac{8}{3}Z + XY\end{aligned}$$

を初期条件 $X = 0, Y = 1.1, Z = 0$ を課して、「半陰的方法」で解いたものが図 1 2 である。これらはローレンツ・アトラクタと呼ばれていてカオス的な変化をするので有名である。

3 結果と考察

陽子と電子の「再結合」後、温度が 100 K まで降下したとき（ビッグバンの後 10^{14} 秒経過した時刻）の宇宙の状況を初期条件として考えた。従って、図 2 の分子・原子の時間的发展とほぼ一致するように各原子・分子・イオン・電子の割合(fraction)を決めた。すなわち、 $T = 100[\text{K}]$, $f_e = f_{\text{H}^+} = 2.8 \times 10^{-5}$, $f_{\text{H}^-} = 3.0 \times 10^{-12}$, $f_{\text{H}_2} = 6.3 \times 10^{-6}$, $n = 2.9[\text{cm}^{-3}]$ とした。なお、このときの質量密度は $\rho = 4.6 \times 10^{-24}[\text{gcm}^{-3}]$ である。また、原始ガス雲の質量は「再結合」直後のジーンズ質量 $10^6 \times M_s$ (M_s は太陽質量) とした。これらの初期条件のもとで種々の形状の回転楕円体について、その後の数密度、温度、各粒子の割合(fraction)などを半陰的方法で数値計算して調べた。

運動方程式で圧力項を小さいとして無視しているのので、原則として圧力項が大きくなり力学平衡に近くなった状況で数値計算は止めなければならない。この条件は粗く見積もって(2.26)の右边が 1 ということである。すなわち

$$T_{ff} \equiv (4\pi G\rho)^{-1/2} = T_p \equiv \frac{\min(r, z)}{C_s} \quad (2.104)$$

収縮してこの条件を満たす状況では運動方程式(2.91), (2.93)は成り立たなくなる。

初期条件が球に近い短半径と長半径の比が 0.995 ($\alpha_0 = 0.995$) の場合の数値計算の結果が図 1 3 ~ 図 1 6 である。なお、(2.104)の条件から $\log n = 9.35$ で計算を止めるべきであるが、化学反応の全体の傾向を見るために $\log n = 12$ までの計算を行った。

図 1 3 から、 $\log n$ が 2 の付近までは断熱圧縮が起こっており T は n の $2/3$ 乗に比例して増加し、約 1000 K に達する。その後 $\log n$ が大きくなると水素分子からの輻射冷却の影響が効き温度は一端下降してから微増し、数密度 n にほとんどよらず、ほぼ 1000 K を保つことがわかる。図 1 4 から、最初の断熱変化の温度上昇で水素分子の割合(fraction)が 10^{-6}

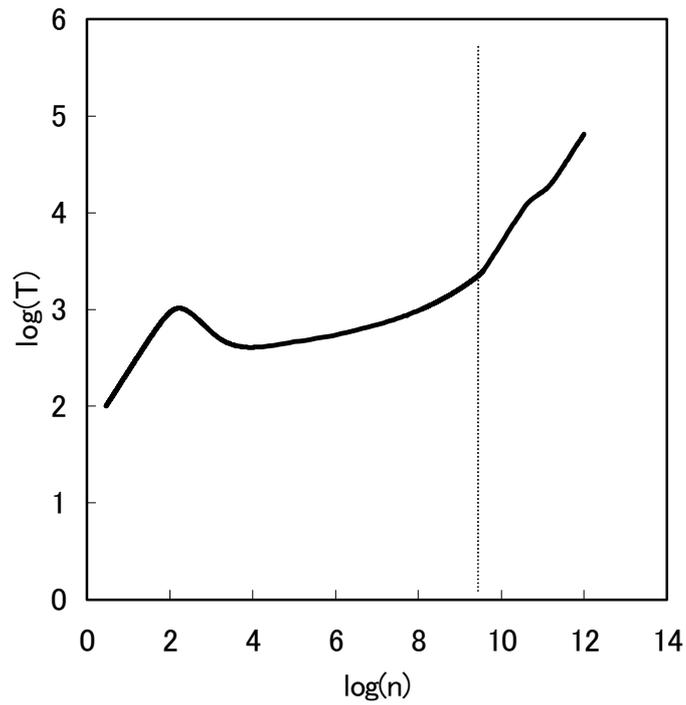


図 1.3 温度 T と数密度 n の関係 ($\alpha_0=0.995$)

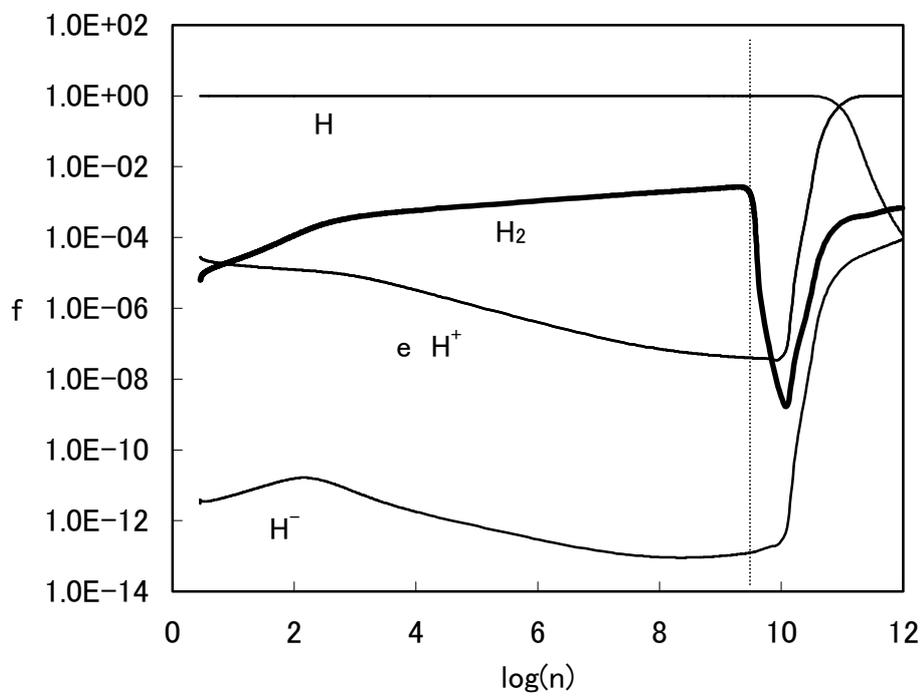


図 1.4 各粒子の割合(fraction)と数密度 n の関係 ($\alpha_0=0.995$)

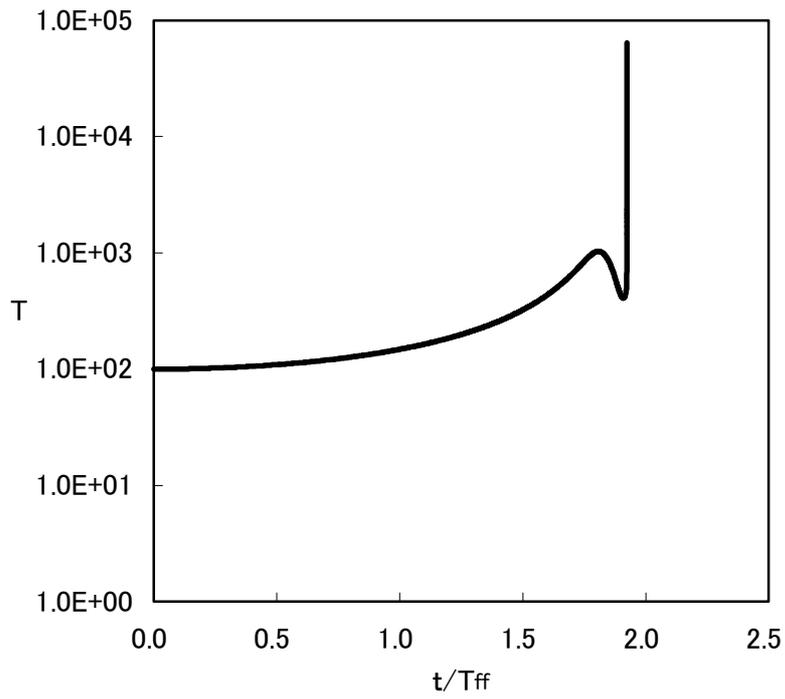


図 1 5 温度 T の時間変化 ($\rho_0=0.995$)

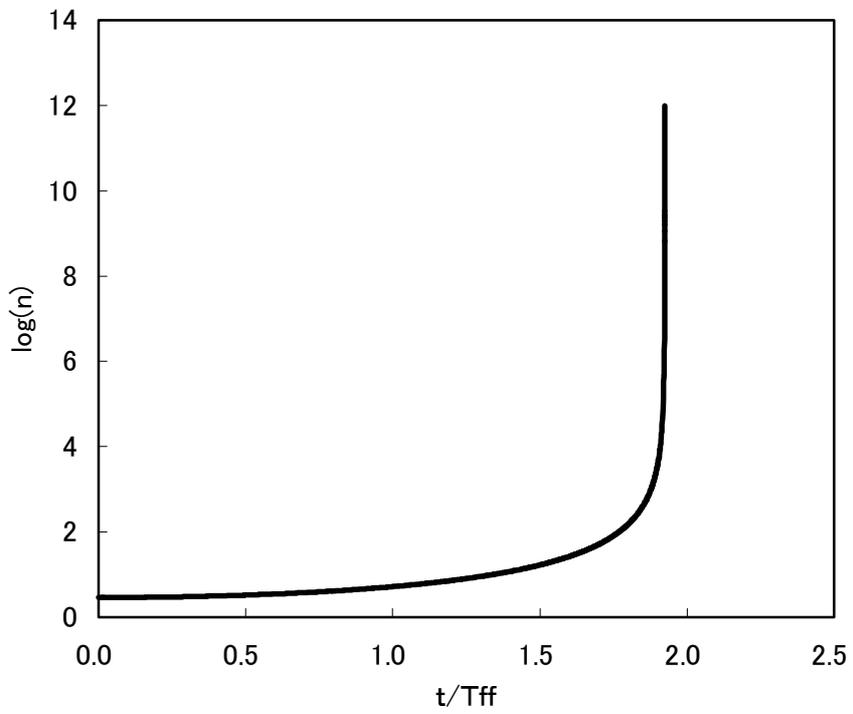


図 1 6 数密度 n の時間変化 ($\rho_0=0.995$)

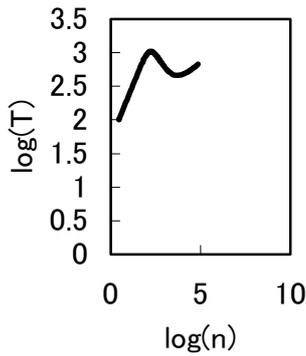


図 1 7 Tとnの関係($\beta_0=0.9$)

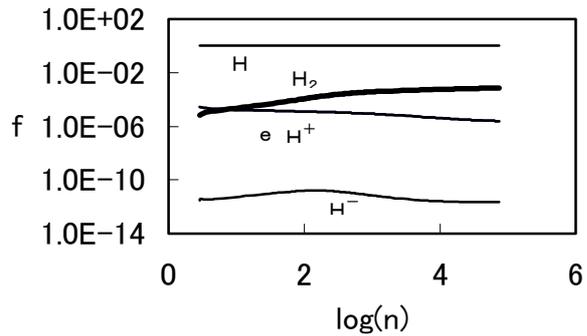


図 1 8 各粒子の割合($\beta_0=0.9$)

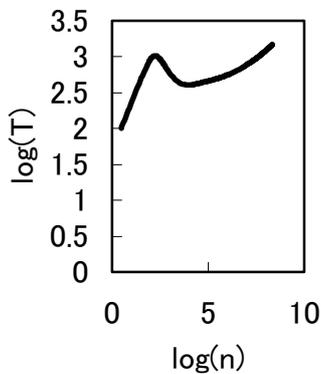


図 1 9 Tとnの関係 $\beta_0=(0.99)$

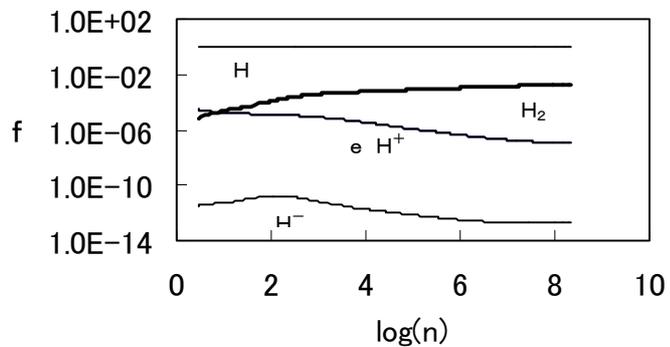


図 2 0 各粒子の割合($\beta_0=0.99$)

から 10^{-3} まで増加しているがこれは収縮による数密度 n の増加のため $H + H^- \rightarrow H_2 + e$ の 2 体反応が進むためである。温度が上昇し $T=2000\text{ K}$, $\log n=9.5$ あたりでは水素分子の解離反応 $H_2 + H \rightarrow 3H$, $2H_2 \rightarrow 2H + H_2$ が進み, 水素分子の割合が急激に低下する。しかし, $\log n$ が 10 を越すと 3 体反応 $3H \rightarrow H_2 + H$, $2H + H_2 \rightarrow 2H_2$ により, 再び増加に転ずる。また, $T=10000\text{ K}$, $\log n=11$ 以上では水素原子の電離反応 $H + e \rightarrow H^+ + 2e$ や $2H \rightarrow H^+ + e + H$ が急激に進み, ほとんど水素イオンの状態になり, 断熱圧縮の $n - T$ 関係が再び成り立つようになる。以上の考察では条件(2.104)を越えた状況にも触れてしまったが, この条件の範囲内では 3 体反応による水素分子の生成は起こらないことがわかる。

図 1 5 , 図 1 6 はそれぞれ温度と密度の時間変化であるが収縮の最後の段階で温度, 密度, 化学反応の急激な変化が起こることがわかる。それゆえ, 数値計算に半陰的方法を用いる必要があるのである。

図 1 7 ~ 図 2 0 は β_0 が 0.9 , 0.99 の場合の $\log n - T$, $f - \log n$ グラフである。初期条件において偏平度の大きい偏平回転楕円体ほど小さい数密度 n で条件 (2.104) に達する。これは偏平度の大きいもほど, 圧縮が一方向 (z 方向) に急速に進み, 球の場合の 3 方向か