

計算物理学2 第1回レポート課題

Clebsch-Gordan 係数を出力する関数副プログラム (関数) を作成して以下の Clebsch-Gordan 係数を出力せよ。

$$\begin{aligned} \langle j_1 m_1 j_2 m_2 | j_1 j_2; JM \rangle = & \delta_{M, m_1 + m_2} \sqrt{\frac{(2J+1)(j_1+j_2-J)!(j_1-j_2+J)!(-j_1+j_2+J)!}{(j_1+j_2+J+1)!}} \\ & \times \sqrt{(j_1+m_1)!(j_1-m_1)!(j_2+m_2)!(j_2-m_2)!(J+M)!(J-M)!} \\ & \times \sum_z \frac{(-1)^z}{z!(j_1+j_2-J-z)!(j_1-m_1-z)!(j_2+m_2-z)!(J-j_2+m_1+z)!(J-j_1-m_2+z)!} \end{aligned}$$

ただし、整数 z はこれを含むすべての階乗が負にならない範囲をとるものとする。0 の階乗は 1 とする ($0! = 1$)。

j_1, j_2, J は角運動量であり、ゼロまたは正の整数あるいは半整数 ($0, 1/2, 1, 3/2, 2, \dots$) の値を取るものとする。 m_1, m_2, M はそれぞれの角運動量の第三成分であり、 $|m| \leq j$ をみたす整数あるいは半整数の値をとる。 $(j$ が整数なら m も整数、 j は半整数なら m も半整数) 例えば $j_1 = 3/2$ のときに許される m_1 の値は $3/2, 1/2, -1/2, -3/2$ となる。 $j_2 = 2$ のときは $m_2 = 2, 1, 0, -1, -2$ が許される。また、 j_1, j_2, J の組についても、これらを含むすべての階乗が負や半整数になるものは許されない。 $(j_1, j_2$ が半整数であれば J は整数) これらの条件を満たさないものについてはゼロを出力するようにする。

作成したプログラムと以下の値を印刷して提出してください。

- $j_1 = j_2 = 1/2$ のときのすべてのゼロでない CG 係数の値を ($2j_1, 2m_1, 2j_2, 2m_2, 2J, 2M, \text{CG 係数}$) の形で出力
- $j_1 = 9/2, j_2 = 7/2, J = 1$ のときのすべてのゼロでない CG 係数の値を ($2j_1, 2m_1, 2j_2, 2m_2, 2J, 2M, \text{CG 係数}$) の形で出力

■Clebsch-Gordan 係数とは 角運動量の合成を行ったときの展開係数である (量子力学 3)。2 つの角運動量演算子 \hat{j}_1 と \hat{j}_2 の固有状態 $|j_1 m_1\rangle$ と $|j_2 m_2\rangle$ を合成したとき合成後の全角運動量演算子 $\hat{J} = \hat{j}_1 + \hat{j}_2$ の固有状態 $|j_1 j_2; JM\rangle$ との間には以下の関係式がある。

$$|j_1 j_2; JM\rangle = \sum_{m_1=-j_1}^{j_1} \sum_{m_2=-j_2}^{j_2} |j_1 m_1\rangle |j_2 m_2\rangle \langle j_1 m_1 j_2 m_2 | j_1 j_2; JM \rangle$$

この展開係数 $\langle j_1 m_1 j_2 m_2 | j_1 j_2; JM \rangle$ が Clebsch-Gordan 係数である。

■ヒント

- Clebsch-Gordan 係数を計算する関数副プログラム ($\text{CG}(j_1, m_1, j_2, m_2, J, M)$) の他に階乗を計算する関数副プログラム $\text{factorial}(n)$ も必要となる。
- j や m は整数または半整数。実数として扱ってもよいが、階乗の計算の入力は整数となるため、 $2j$ や $2m$ を Clebsch-Gordan 関数副プログラムの引数に用いることで整数のまま階乗の関数副プログラムに値を渡すことができる。(例えば $j_1=1$ のときは $j_1 = 1/2$ 、 $j_2=4$ のときは $j_2 = 2$ である、というふう読み替える)。ただしもとの 2 倍の値をプログラムの中で使っていることを忘れないようにすること。 $(j_1 - m_1)!$ を計算するときは $\text{factorial}((j_1 - m_1)/2)$ となる。

- 平方根を計算する組み込み関数 $\text{SQRT}(x)$ の引数は実数。階乗は倍精度実数で計算するか、倍精度実数への型変換が必要 (整数で階乗を計算する場合は 4 バイトで表現できる数を超えることがないよう注意が必要)
- z の値を適切に決定する。和の中にある 6 つの階乗から z として取りうる最小値と最大値を決定する。 $\text{MIN}(x,y,\dots)$ や $\text{MAX}(x,y,\dots)$ 組み込み関数を用いてそれらを決定する。 z_{\min} と z_{\max} を決定した後 DO $z = z_{\min}, z_{\max}$ などのようにして DO 文で和を計算する。
- Clebsch-Gordan 係数の値は量子力学の教科書に表で掲載されている場合もある。作成したプログラムが正しい値を出すのかをチェックする。 参考 ($j = 5/2$ までの値) :
https://en.wikipedia.org/wiki/Table_of_Clebsch-Gordan_coefficients
- ゼロでない値のみを出力するには、多重 DO 文で j や m などの引数をカウンタで回してすべての係数を計算し、IF 文で CG 係数の値が 0 でない (例えば絶対値が十分に小さい正の数より大きい) 場合のみ出力するようにする。
- 関数副プログラムの内部では PRINT 文や WRITE 文が使えない (一回だけは使える? が呼び出した直後にプログラムが止まる) ので、デバッグが少しやりにくい。途中経過でチェックしたい値を一時的に返り値に代入して直後に RETURN 文を書くことで予想された動作をしているかを確認したり、あるいはメインのプログラムに関数の内容を直接書いてデバッグし、動作確認が終わってから副プログラムに移すなどの方法が考えられる。