

5735

Экз. чит. зала

СООБЩЕНИЯ
ОБЪЕДИНЕННОГО
ИНСТИТУТА
ЯДЕРНЫХ
ИССЛЕДОВАНИЙ

Дубна

11 - 5735



ЛАБОРАТОРИЯ ВЫЧИСЛИТЕЛЬНОЙ ТЕХНИКИ
И АВТОМАТИЗАЦИИ

Н.Ю. Ширикова

ВЫЧИСЛЕНИЕ КОЭФФИЦИЕНТОВ
КЛЕБША-ГОРДОНА
(Программа на языке ФОРТРАН)

1971

11 - 5735

Н.Ю. Ширикова

**ВЫЧИСЛЕНИЕ КОЭФФИЦИЕНТОВ
КЛЕБША-ГОРДОНА**

(Программа на языке ФОРТРАН)

**Научно-техническая
библиотека
ОИЯИ**

Общая формула^{I/}, определяющая коэффициенты Клебша-Гордона через значения их аргументов, имеет вид:

$$\begin{aligned}
 & (j_1 j_2 m_1 m_2 | j m) = \delta(m_1 + m_2, m) \times \\
 & \times [(2j+1)(j_1+j_2-j)!(j+j_1-j_2)(j+j_2-j_1)!((j_1+j_2+j+1)!)^{-1} \\
 & (j_1+m_1)!(j_1-m_1)!(j_2+m_2)!(j_2-m_2)!(j+m)!(j-m)!]^{1/2} \quad (I) \\
 & \sum_x (-1)^x [x!(j_1+j_2-j-x)!(j_1-m_1-x)!(j_2+m_2-x)!(j-j_2+m_1+x)!(j-j_1-m_2+x)!]^{-1}
 \end{aligned}$$

Коэффициент Клебша-Гордона определен для всех положительных целых или полуцелых значений аргументов j_1, j_2, j , на которые накладываются следующие ограничения:

$$j_1 + j_2 + j = \text{целое число}, \quad (2)$$

а сами числа удовлетворяют неравенству

$$|j_1 - j_2| < j < j_1 + j_2. \quad (3)$$

Каждое из чисел m_1, m_2, m может быть либо положительным, либо отрицательным целым или полуцелым числом; значения этих чисел ограничены следующими условиями:

$$\begin{aligned}
 |m_1| & \leq j_1, \\
 |m_2| & \leq j_2, \\
 |m| & \leq j,
 \end{aligned} \quad (4)$$

а также требованием, чтобы

$$\begin{aligned} j_1 + m_1 &= \text{целое число,} \\ j_2 + m_2 &= \text{целое число,} \\ j + m &= \text{целое число.} \end{aligned} \quad (5)$$

При невыполнении условий (2)–(5), а также соотношения $m_1 + m_2 = m$, коэффициент Клебша–Гордона обращается в нуль.

Непосредственное использование формулы (I) для вычисления коэффициентов на ЭВМ, диапазон чисел которых при расчетах находится в пределах $|x| < 10^{19}$, представляется невозможным из-за больших значений факториалов.

Если обозначить через $fac(i)$ массив логарифмов факториалов

$$\begin{aligned} fac(0) &= 0, \quad fac(1) = 0 \\ fac(i+1) &= fac(i) + \ln(i+1), \quad i = 1, 2, \dots, \end{aligned}$$

то для вычисления коэффициентов Клебша–Гордона вместо (I) можно использовать следующее выражение:

$$(j_1 j_2 m_1 m_2 | j m) = \delta(m_1 + m_2, m) \times \sum_{k_{min}}^{k_{max}} (-1)^k \exp \left\{ b_1 - fac(k) - fac(j_1 + j_2 - j - k) - fac(j_1 - m_1 - k) - \right. \\ \left. - fac(j_2 + m_2 - k) - fac(j - j_2 + m_1 + k) - fac(j - j_1 - m_2 + k) \right\},$$

где

$$k_{min} = \max \{ 0, -j + j_2 - m_1, -j + j_1 + m_2 \}$$

$$k_{max} = \min \{ j_1 + j_2 - j, j_1 - m_1, j_2 + m_2 \}$$

$$\begin{aligned} b_1 = \frac{1}{2} \{ &fac(j_1 + j_2 - j) + fac(j + j_1 - j_2) + fac(j + j_2 - j_1) + \ln(2j + 1) + \\ &+ fac(j_1 + m_1) + fac(j_1 - m_1) + fac(j_2 + m_2) + fac(j_2 - m_2) + \\ &+ fac(j + m) + fac(j - m) - fac(j + j_1 + j_2 + 1) \}. \end{aligned}$$

Описание программы

В конце статьи приводится текст программы, написанной на языке ФОРТРАН-ЦЕРН.

Назначение: Вычисляется коэффициент Клебша-Гордона
($AJ \quad BJ \quad AM \quad BM / CJ \quad CM$),

где $AJ = j_1$, $BJ = j_2$, $AM = m_1$, $BM = m_2$, $CJ = j$, $CM = m$.

Структура: Подпрограмма-функция

Идентификатор: *CLEBSH*

Использование: Обращение к подпрограмме

$C = \text{CLEBSH}(AJ, BJ, AM, BM, CJ, CM)$,

аргументы должны быть заданы в виде действительных чисел.

Ограничения. Так как подпрограмма *CLEBSH* использует массив значений логарифмов факториалов от 0 до 499, то при

$$AJ + BJ + CJ > 498$$

будет выдана диагностика ошибки:

```
ERROR IN FUNCTION CLEBSH
AJ+BJ+CJ IS LARGER THAN 500
```

и заслан 0 в качестве значения коэффициента.

Если потребуется вычисление коэффициента для больших квантовых чисел, то нужно будет внести изменения в первый и четвертый операторы программы:

```
DIMENSION FAC(500)
N = 500
```

Вместо числа 500 задать новое значение.

Точность вычисления. Для значений аргументов, не превышающих по модулю $9/2$, абсолютная ошибка в вычислении коэффициента Клебша-Гордона не превышает $1 \cdot 10^{-9}$.

Сравнение с работами других авторов.

На машине CDC-1604A было проведено сравнение программы *CLEBSH* с программами *CLEBS* (U 100) библиотеки ЦЕРН/2/ и *CLEB* /3/.

Выявлены следующие недостатки программы *CLEBS* по сравнению с программой *CLEBSH* :

1. Длины программ *CLEBS* I3545₈ и *CLEBSH* I445₈ соответственно.
2. Был проведен счет таблицы коэффициентов, опубликованной в /1/. Счет по программе *CLEBSH* в 10 раз быстрее, чем по *CLEBS*. Было замечено, что для больших значений аргументов эта разница в скорости счета будет еще больше.
3. В программе *CLEBS* нет никаких проверок ограничений (1)-(5), которые накладываются на значения аргументов.

Программа *CLEB* почти идентична программе *CLEBSH*. В программе *CLEB* делается перестановка аргументов для уменьшения числа членов ряда (1), чего в действительности не происходит, ибо после перестановки аргументов не только сумма ряда, но и его члены остаются неизменными /4/.

Программы *CLEBS* и *CLEB* требуют задания удвоенных значений аргументов и используют арифметику целых чисел. Учитывая специфику представления целых чисел на БЭСМ-6, из-за которой операции над целыми числами выполняются несколько медленнее операций над теми же числами в действительном представлении, в программе *CLEBSH*, написанной для машины БЭСМ-6, приняты не удвоенные значения аргументов и используется арифметика действительных чисел.

В заключение автор выражает благодарность А.А.Корнейчуку за внимание к работе и полезное обсуждение.

ЛИТЕРАТУРА

1. A. Simon, ORNL-1718, 1954.
Деформация атомных ядер, ИЛ, 1958.
2. CERN Computer 6000 Series. Program Library II.
3. T. Tamura, ORNL-3877, 1965.
4. H.E. Rose. Elementary Theory of Angular Momentum
N.Y.-London, Willy-Chapman, 1957.

Рукопись поступила в издательский отдел
6 апреля 1971 года.

FUNCTION CLEBSH(AJ,BJ,AM,BM,CJ,CM)	CLEB	10
C CLEBSH	CLEB	20
C THIS SUBPROGRAM CALCULATES CLEBSCH-GORDAN COEFFICIENTS	CLEB	30
C (AJ BJ AM BM /CJ CM)	CLEB	40
C REFERENCE FORMULA 3.6.1 PAGE 45 OF A.R. EDMONDS, ANGULAR MOMENTUM	CLEB	50
C IN QUANTUM MECHANICS	CLEB	60
C THE SUBPROGRAM CHECKS THAT THE TRIANGLE CONDITIONS FOR THE EXISTENCE	CLEB	70
C OF A COEFFICIENT ARE SATISFIED AND AJ+BJ+CJ IS INTEGER, IF THE	CLEB	80
C CONDITIONS ARE NOT SATISFIED THE VALUE OF CLEBSH-COEFFICIENT IS ZERO	CLEB	90
C IF AJ+BJ+CJ IS LARGER THAN N THEN DIAGNOSTIC WILL BE	CLEB	100
C AND CLEBSH WILL BE ZERO	CLEB	110
C	CLEB	120
DIMENSION FAC(500)	CLEB	130
DATA(KEY=0)	CLEB	140
IF(KEY) 301,306,301	CLEB	150
306 KEY=1	CLEB	160
N=500	CLEB	170
FAC(1)=0.	CLEB	180
FAC(2)=0.	CLEB	190
R=2.	CLEB	200
DO 300 I=3,N	CLEB	210
FAC(I)=ALOG(R)+FAC(I-1)	CLEB	220
300 R=R+1.	CLEB	230
301 CG=0.	CLEB	240
RM=AM+BM-CM	CLEB	250
IF(RM) 10,20,1	CLEB	260
20 RJ=CJ-ABS(AJ-BJ)	CLEB	270
IF(RJ) 10,30,30	CLEB	280
30 RRJ=AJ+BJ-CJ	CLEB	290
IF(RRJ) 10,40,40	CLEB	300
40 IF(ABS(AM)-AJ) 150,150,10	CLEB	310
150 IF(ABS(BM)-BJ) 60,60,10	CLEB	320
60 IF(ABS(CM)-CJ) 70,70,10	CLEB	330
70 RK7=AJ+BJ+CJ	CLEB	340
S1=AJ+AM	CLEB	350
S2=BJ+BM	CLEB	360
S3=CJ+CM	CLEB	370
IF(S1-AINT(S1)) 10,81,10	CLEB	380
81 IF(S2-AINT(S2)) 10,82,10	CLEB	390
82 IF(S3-AINT(S3)) 10,83,10	CLEB	400
83 IF(RK7-AINT(RK7)) 10,80,10	CLEB	410
80 IF(BJ) 84,85,84	CLEB	420
85 CG=1.	CLEB	430
GO TO 10	CLEB	440
84 K1=RK7+2.	CLEB	450
IF(K1-N) 302,302,303	CLEB	460
303 PRINT 304,N	CLEB	470
304 FORMAT(2X,4RHERROR IN FUNCTION CLEBSH AJ+BJ+CJ IS LARGER THAN,14/)	CLEB	480
GO TO 10	CLEB	490
302 B1=ALOG(2.*CJ+1.)	CLEB	500
L1=RRJ	CLEB	510
B1=B1+FAC(L1+1)	CLEB	520
B1=B1-FAC(K1)	CLEB	530
K1=AJ+CJ-BJ+1.	CLEB	540
B1=B1+FAC(K1)	CLEB	550
K1=BJ+CJ-AJ+1.	CLEB	560

B1=B1+FAC(K1)	CLFB 570
L2=AJ-AM	CLFB 580
K1=S1+1.	CLFB 590
K2=L2+1	CLFB 600
B1=B1+FAC(K1)+FAC(K2)	CLFB 610
L3=S2	CLFB 620
K2=BJ-BM+1.	CLFB 630
K1=L3+1	CLFB 640
B1=B1+FAC(K1)+FAC(K2)	CLFB 650
K1=S3+1.	CLFB 660
K2=CJ-CM+1.	CLFB 670
B1=B1+FAC(K1)+FAC(K2)	CLFB 680
B1=.5*B1	CLFB 690
I1=0	CLFB 700
L5=CJ-BJ+AM	CLFB 710
IF(L5) 90,91,91	CLFB 720
90 I1=-L5	CLFB 730
91 L6=CJ-AJ-BM	CLFB 740
IF(L6+I1) 92,93,93	CLFB 750
92 I1=-L6	CLFB 760
93 I2=L1	CLFB 770
IF(L3-I2) 94,95,95	CLFB 780
94 I2=L3	CLFB 790
95 IF(L2-I2) 96,97,97	CLFB 800
96 I2=L2	CLFB 810
97 IF(I1-2*(I1/2)) 98,99,98	CLFB 820
99 P1=1.	CLFB 830
GO TO 52	CLFB 840
98 P1=-1.	CLFB 850
52 I2=I2+1	CLFB 860
I1=I1+1	CLFB 870
DO 50 I=I1,I2	CLFB 880
P2=B1-FAC(I)	CLFB 890
K1=L1-I+2	CLFB 900
P2=P2-FAC(K1)	CLFB 910
K1=L2-I+2	CLFB 920
P2=P2-FAC(K1)	CLFB 930
K1=L3-I+2	CLFB 940
P2=P2-FAC(K1)	CLFB 950
K1=L5+1	CLFB 960
P2=P2-FAC(K1)	CLFB 970
K1=L6+1	CLFB 980
P2=P2-FAC(K1)	CLFB 990
CG=CG+P1*EXP(P2)	CLFB1000
P1=-P1	CLFB1010
50 CONTINUE	CLFB1020
10 CLEBSH=CG	CLFB1030
RETURN	CLFB1040
END	CLFB1050