

令和3年度 卒業論文  
漸化式を用いたウィグナーの  $d$  関数の数値計算

先進理工学科応用物理工学コース  
1413075 齊藤佑一郎

指導教員 森下亨

令和4年2月1日

# 目次

第 1 章	序論	2
第 2 章	理論	3
2.1	$d$ 関数の定義 . . . . .	3
2.2	三項の漸化式 . . . . .	4
2.3	漸化式を解く順番 . . . . .	4
第 3 章	方法	6
3.1	初期値の計算 . . . . .	6
3.2	アルゴリズム . . . . .	6
3.3	対称性 . . . . .	7
3.4	$d$ 関数の直交性 . . . . .	8
第 4 章	結果	9
第 5 章	考察	15
第 6 章	結論	17
付録 A	Fortran ソースコード	19
参考文献		23

# 第 1 章

## 序論

波動関数を回転させる上で重要なウィグナーの  $d$  関数の計算は、解析解は存在するものの、その正確な計算には多くの時間を必要としている。本研究は  $d$  関数を高速、高精度で計算するためのプログラムの実装を本研究の目的としている。本研究では参考文献 [1] にて提示された計算方法を用い FORTRAN での実装を試みた。

## 第2章

# 理論

### 2.1 $d$ 関数の定義

関数を回転させる回転演算子の行列要素  $D_{mm'}^l(\alpha, \beta, \gamma)$  は  $D$  関数と呼ばれる。  $D$  関数は Euler 角  $\alpha, \beta, \gamma$  と量子数  $l, m, m'$  で指定される。 Euler 角は 3 つの角度  $\alpha, \beta, \gamma$  で回転を表しており、  $z$  軸周りに角度  $\alpha$  の回転を行い、  $x, y$  軸が  $x', y'$  軸となる。 その後  $y'$  軸周りに角度  $\beta$  の回転を行い、  $x', z$  軸が  $x'', z'$  軸となる。

$l$  は全角運動量を表す量子数に対応しており、  $m, m'$  はそれぞれ  $z, z'$  軸に対する  $l$  の射影であり、  $-l \leq m, m' \leq l$  の値をとる量子数である。

$D$  関数は以下のように角運動量演算子の同時固有状態になっている。

$$\hat{J}^2 D_{mm'}^l(\alpha, \beta, \gamma) = l(l+1) D_{mm'}^l(\alpha, \beta, \gamma) \quad (2.1)$$

$$\hat{J}_z D_{mm'}^l(\alpha, \beta, \gamma) = m D_{mm'}^l(\alpha, \beta, \gamma) \quad (2.2)$$

$$\hat{J}_{z'} D_{mm'}^l(\alpha, \beta, \gamma) = m' D_{mm'}^l(\alpha, \beta, \gamma) \quad (2.3)$$

$\hat{J}_z$  と  $\hat{J}_{z'}$  が対角であることから  $D_{mm'}^l(\alpha, \beta, \gamma)$  は以下の形で表すことができる。

$$D_{mm'}^l(\alpha, \beta, \gamma) = e^{-im\alpha} d_{mm'}^l(\beta) e^{-im'\gamma} \quad (2.4)$$

このとき、  $d_{mm'}^l(\beta)$  は小文字の  $d$  を用いて  $d$  関数と呼ばれ、以下の形で表される。

$$d_{mm'}^l(\beta) = \langle lm | \exp\left[-i\frac{\beta}{\hbar} \hat{J}_y\right] |lm'\rangle \quad (2.5)$$

また,  $d_{mm'}^l(\beta)$  は以下の二階の微分方程式を満たしている.

$$\frac{d^2 d_{mm'}^l(\beta)}{d\beta^2} + \cot \beta \frac{d d_{mm'}^l(\beta)}{d\beta} + \left( \frac{2mm' \cos \beta - m^2 - m'^2}{\sin^2 \beta} + l(l+1) \right) d_{mm'}^l(\beta) = 0 \quad (2.6)$$

## 2.2 三項の漸化式

式 (2.6) から以下のような三項の漸化式が求められる.

$$\frac{-m + m' \cos \beta}{\sin \beta} d_{mm'}^l(\beta) = \frac{1}{2} \sqrt{(l+m')(l-m'+1)} d_{mm'-1}^l(\beta) + \frac{1}{2} \sqrt{(l-m')(l+m'+1)} d_{mm'+1}^l(\beta) \quad (2.7)$$

## 2.3 漸化式を解く順番

一般的に三項の漸化式には線型独立した二つの解が存在し, これを  $f_n, g_n$  とする. これらの解は振動的であったり指数関数的に増減する. 振動しない場合, 振動しない場合,  $f_n$  は最初の解となり, 以下のような場合は  $g_n$  が支配的な解となる.

$$\frac{f_n}{g_n} \rightarrow 0 \text{ as } n \rightarrow \infty \quad (2.8)$$

古典的には粒子が存在しないが, 量子力学的には波動関数が 0 でない非古典的な領域にのみ指数関数的に増加/減少する解が表れる.

$I$  を慣性モーメント,  $T$  を運動エネルギー,  $p$  を運動量として対称こまの運動方程式を考えると以下のようなになる.

$$2IT = p_\beta^2 + \frac{1}{\sin^2 \beta} (p_\gamma^2 + p_\alpha^2 - 2p_\alpha p_\gamma \cos \beta) \quad (2.9)$$

量子力学においてはこの式に  $p_\alpha \rightarrow -i \frac{\partial}{\partial \alpha}, p_\beta \rightarrow -i \frac{\partial}{\partial \beta}, p_\gamma \rightarrow -i \frac{\partial}{\partial \gamma}$  が代入される.

よって, 古典的な領域は以下の式を満たしている範囲になる.

$$l(l+1) + \frac{2mm' \cos \beta - m^2 - m'^2}{\sin^2 \beta} \geq 0. \quad (2.10)$$

つまりこの式が満たされなければ、解が指数関数的に減衰されたり増大したりする。  
式 (2.7) を用いて解を求める場合、 $m'$  を増加させるか減少させるか選択する必要がある。  
 $m = 0$  とすると式 (2.10) は以下のようなになる

$$l(l+1) - \frac{m'^2}{\sin^2 \beta} \geq 0. \quad (2.11)$$

$m'$  を増加させていった場合、 $m' \geq \sin \beta \sqrt{l(l+1)}$  で関係式を満たさなくなるため、漸化式 (2.7) を安定して使うためには  $|m'|$  を減らしていく必要がある。

## 第3章

# 方法

参考文献 [1] で示された方法を用いて計算を行う.

### 3.1 初期値の計算

$m' = l$  となる初期値の計算には参考文献 [1] に示されている以下の計算式を用いる.

$$d_{m,l}^l(\beta) = A \left( \cos \frac{\beta}{2} \right)^{l+m} \left( \sin \frac{\beta}{2} \right)^{l-m} \quad (3.1)$$

このとき  $A = \sqrt{(2l)!/(l+m)!(l-m)!}$  である.

### 3.2 アルゴリズム

式 (2.7) を  $d_{mm'-1}^l$  について変形して

$$d_{mm'-1}^l(\beta) = \frac{2 \frac{-m+m' \cos \beta}{\sin \beta} d_{mm'}^l(\beta) - \sqrt{(l-m')(l+m'+1)} d_{mm'+1}^l(\beta)}{\sqrt{(l+m')(l-m'+1)}} \quad (3.2)$$

式 (3.2) に関して,  $d_{mm'+1}^l, d_{mm'}^l$  に対して初期値を代入し,  $-l \leq m' \leq l$  に対する全ての  $d_{mm'}^l$  を求める.

$d_{mm'+1}^l$  の初期値は  $m'+1 = l+1$  となり  $m'$  の範囲を越えるため, 0 となる.  $d_{mm'}^l$  の初期値を計算する際には式 (3.1) の  $A$  に関しては対数をとって計算している. また, 全ての計算は 4 倍精度で行っている.

### 3.3 対称性

計算の数を減らすために、 $d$  関数の持つ対称性の関係を用いて全範囲の結果を求める。

$$d_{mm'}^l(\beta) = (-1)^{m-m'} d_{-m-m'}^l(\beta) \quad (3.3)$$

$$d_{mm'}^l(\beta) = (-1)^{m-m'} d_{m'm}^l(\beta) \quad (3.4)$$

$$d_{mm'}^l(\beta) = d_{-m'-m}^l(\beta) \quad (3.5)$$

これらの式を用いることで、実際に計算する必要がある範囲は

$$\begin{aligned} 0 \leq m' \leq l_{max} \\ -m' \leq m \leq m' \end{aligned}$$

となる。

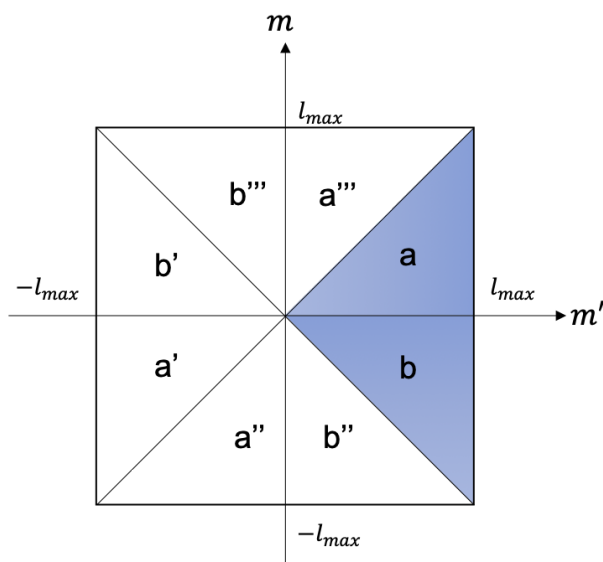


図 3.1:  $d$  関数の対称性

図 (3.1) において、青く塗りつぶされている部分がプログラム内で計算を行う部分となる。  $m \geq 0$  の範囲を  $a$ ,  $m \leq 0$  の範囲を  $b$  と名付ける。このとき、式 (3.3)(3.4)(3.5) を



用いると、 $a', a'', a''', b', b'', b'''$  の範囲内の  $d_{mm'}^l$  は  $a, b$  内の  $d_{mm'}^l$  に対して以下のような関係になっている。

$$\begin{aligned} a' &= (-1)^{m-m'} a \\ a'' &= a \\ a''' &= (-1)^{m-m'} a \\ b' &= (-1)^{m-m'} b \\ b'' &= b \\ b''' &= (-1)^{m-m'} b \end{aligned}$$

### 3.4 $d$ 関数の直交性

球面調和関数に対して回転行列  $R$  を作用させたとき、球面調和関数は以下のように表すことができる。

$$RY_{lm}(\mathbf{r}) = Y_{lm}(\mathbf{r}') = \sum_{m'} Y_{lm'}(\mathbf{r}) d_{mm'}^l(\beta) \quad (3.6)$$

$\beta \rightarrow 0$  のとき、回転が起こっていない状態に近づくはずなので

$$RY_{lm}(\mathbf{r}) \rightarrow Y_{lm}(\mathbf{r})$$

となると推測すると、 $d$  関数は

$$d_{mm'}^l(\beta) \rightarrow \delta_{mm'} \quad (3.7)$$

となると考えられる。

## 第 4 章

# 結果

式 (3.1) から,  $l$  を固定したとき,  $\beta$  が小さくなると, 初期値の値が指数的に小さくなる  
ことがわかる.  $l = 1000$  とした場合,  $m = -l$  のときの初期値は最小

$$d_{0,-1000}^{1000}(\beta) = \sqrt{(2000)!/(0)!(2000)!} \left(\cos \frac{\beta}{2}\right)^0 \left(\sin \frac{\beta}{2}\right)^{2000} = \left(\sin \frac{\beta}{2}\right)^{2000}$$

4 倍精度で表現可能な正の最小値は  $2^{-16382} \approx 3.3621 \times 10^{-4932}$  である. ここで初期値が  
その値をとるときの  $\beta$  を計算する.

$\beta$  が限りなく小さな値について考えるので  $\sin \frac{\beta}{2} \doteq \frac{\beta}{2}$  である.

$$\left(\frac{\beta}{2}\right)^{2000} = 3.3621 \times 10^{-4932}$$

対数をとる

$$2000 \log \left(\frac{\beta}{2}\right) = \log_{10} 3.3621 - 4900$$

$$\beta \doteq 0.0068$$

この値を計算できる最小の  $\beta$  の値とした. いくつかの  $l$  について同様に  $\beta$  の下限を計算  
し, 以下の表 4.1 にまとめた.

表 4.1: 計算可能な  $\beta$  の下限

$l$	1000	100	10
計算可能な $\beta$ の下限	$6.8 \times 10^{-3}$	$4.4 \times 10^{-25}$	$5.3 \times 10^{-247}$

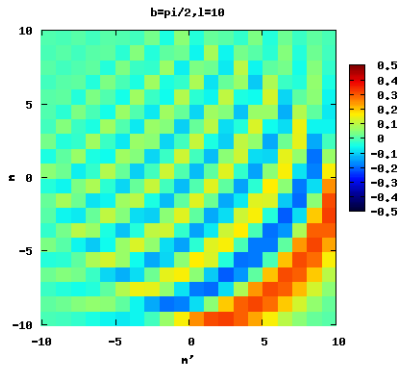
ここで誤差評価を行うため、下限より少し大きな  $\beta$  として、初期値が  $1.0 \times 10^{-4900}$  程度になる  $\beta$  を計算し、表 4.2 にまとめた。

表 4.2: 誤差評価のための  $\beta$

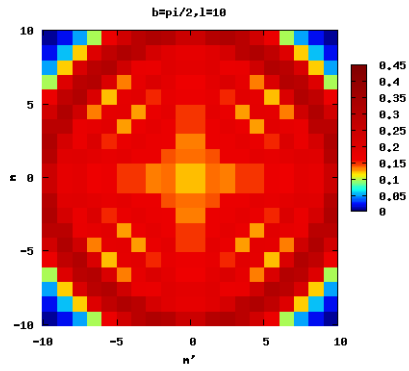
1	1000	100	10
誤差評価のための $\beta$	$7.1 \times 10^{-3}$	$6.3 \times 10^{-25}$	$2.0 \times 10^{-245}$

この値を用いて Mathematica の計算結果と比較すると相対誤差は最大で  $10^{-27}$  以下となった。

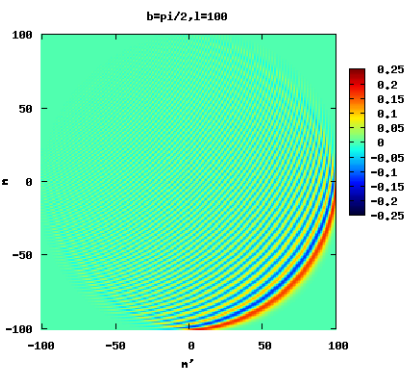
またいくつかの  $\beta$  についての計算結果を以下のグラフにプロットした。また解が振動している領域をわかりやすくするため、絶対値でのプロットもそれぞれについて行った。



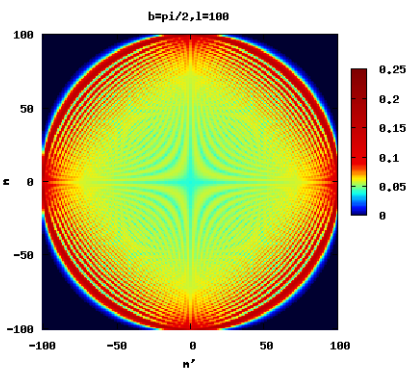
(a)  $l = 10$  の計算結果



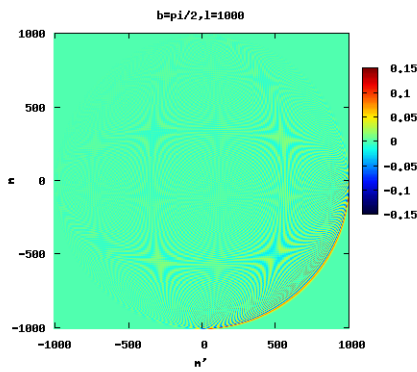
(b)  $l = 10$  の計算結果の絶対値



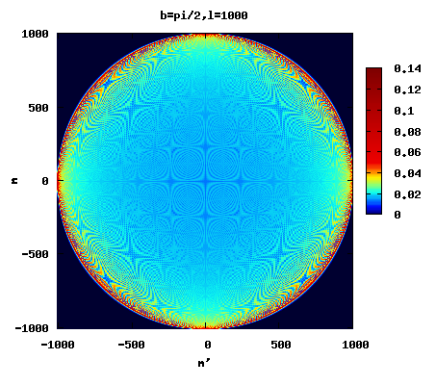
(c)  $l = 100$  の計算結果



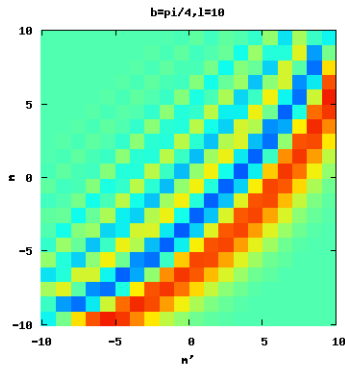
(d)  $l = 100$  の計算結果の絶対値



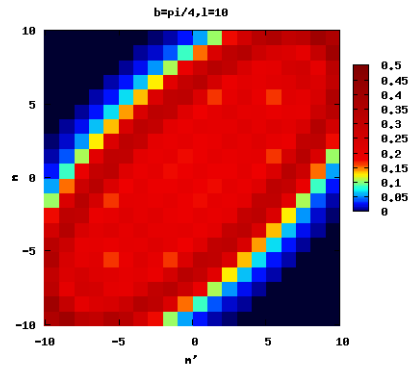
(e)  $l = 1000$  の計算結果



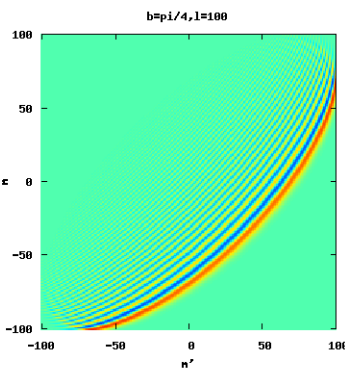
(f)  $l = 1000$  の計算結果の絶対値



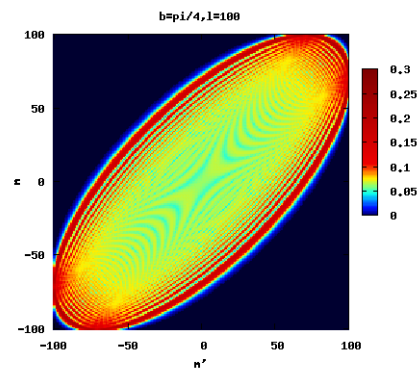
(a)  $l = 10$  の計算結果



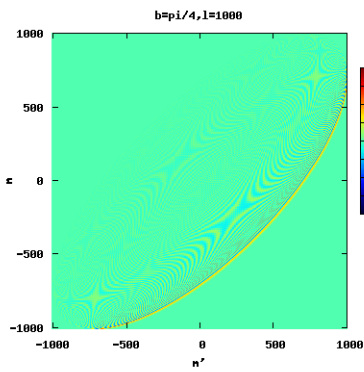
(b)  $l = 10$  の計算結果の絶対値



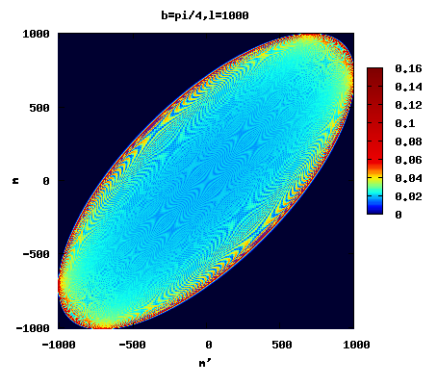
(c)  $l = 100$  の計算結果



(d)  $l = 100$  の計算結果の絶対値

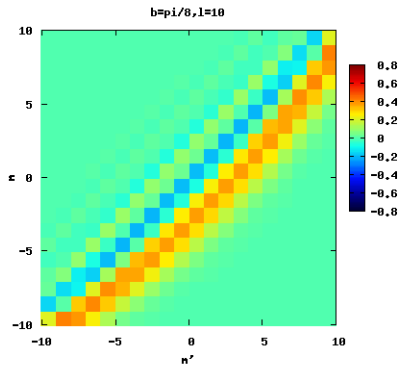


(e)  $l = 1000$  の計算結果

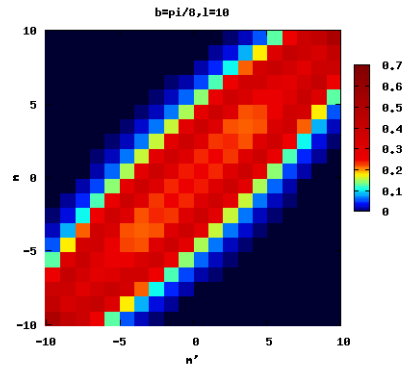


(f)  $l = 1000$  の計算結果の絶対値

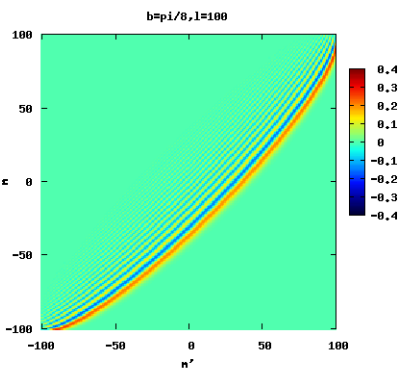
図 4.2:  $\beta = \pi/4$



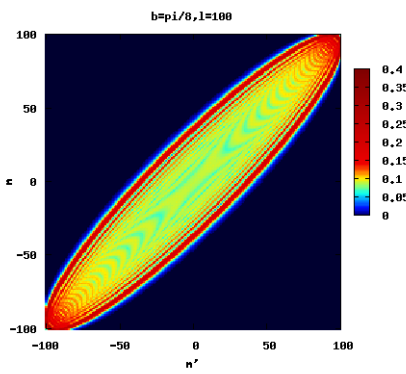
(a)  $l = 10$  の計算結果



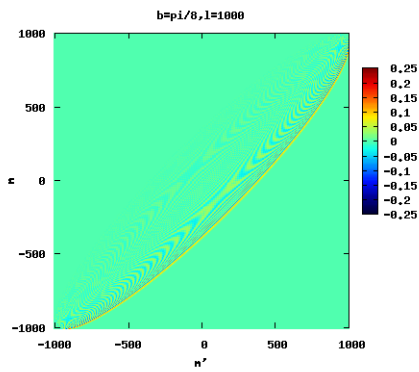
(b)  $l = 10$  の計算結果の絶対値



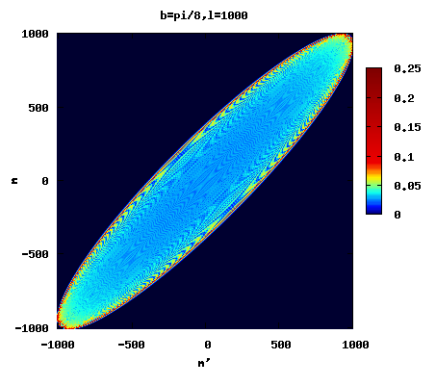
(c)  $l = 100$  の計算結果



(d)  $l = 100$  の計算結果の絶対値

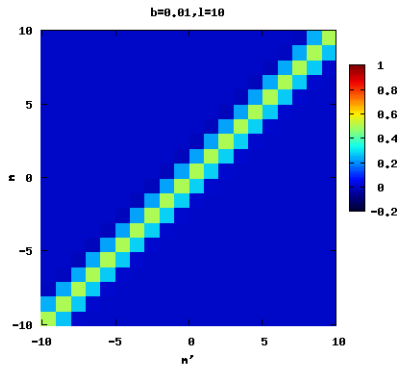


(e)  $\beta = \frac{\pi}{8}$ ,  $l = 1000$  の計算結果

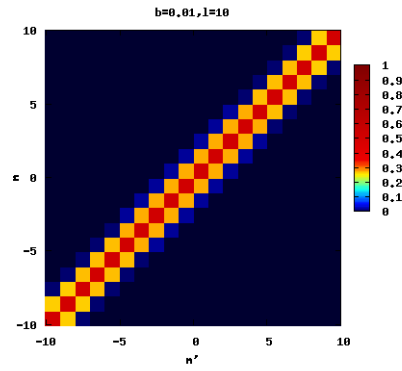


(f)  $l = 1000$  の計算結果の絶対値

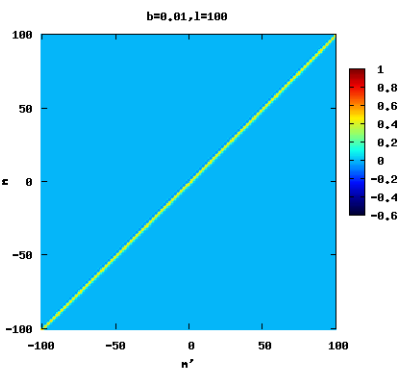
図 4.3:  $\beta = \pi/8$



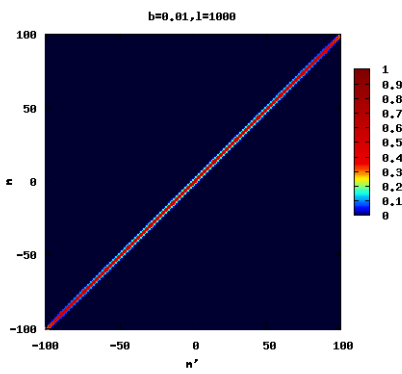
(a)  $l = 10$  の計算結果



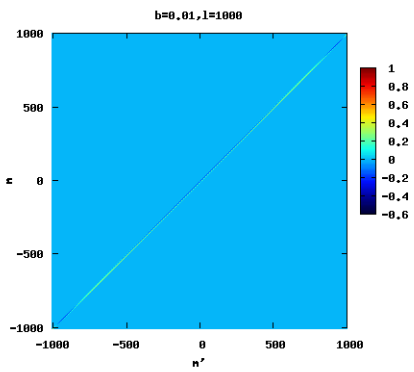
(b)  $l = 10$  の計算結果の絶対値



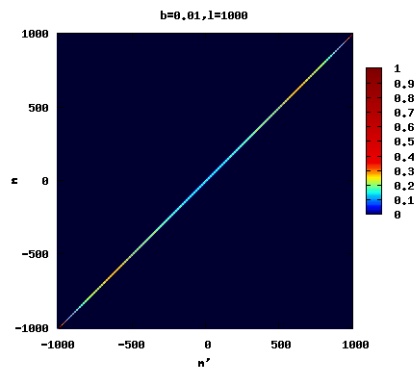
(c)  $l = 100$  の計算結果



(d)  $l = 100$  の計算結果の絶対値



(e)  $l = 1000$  の計算結果



(f)  $l = 1000$  の計算結果の絶対値

図 4.4:  $\beta = 0.01$

## 第5章

## 考察

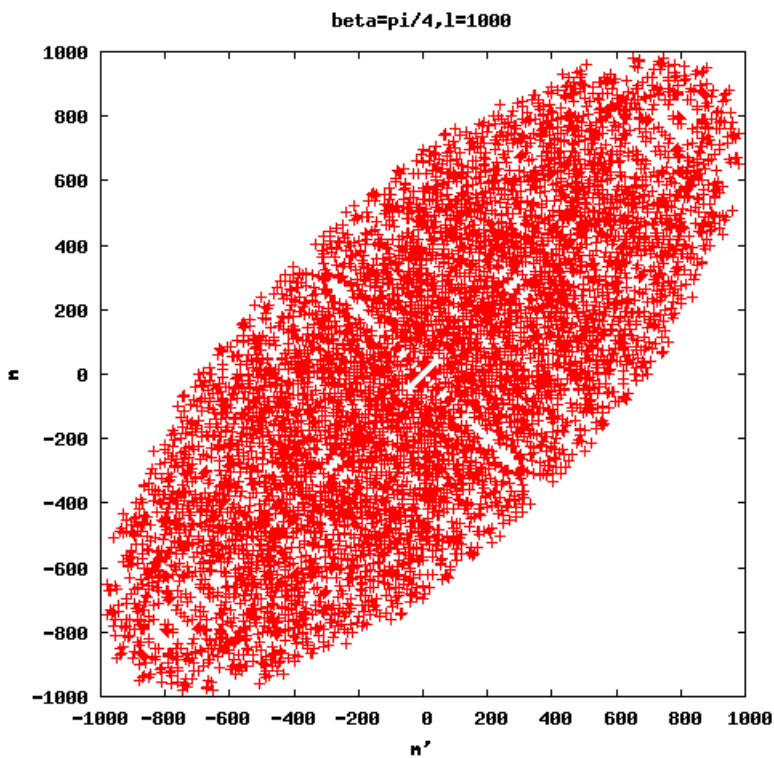


図 5.1:  $\beta = \pi/4$  における相対誤差  $10^{-29}$  以上の点

Mathematica を用いた計算結果とプログラムによる計算結果との相対誤差を計算し、 $10^{-30}$  より大きくなっている  $d_{mm'}^l$  の点を図 (5.1) にプロットした. 図 (4.2f) と比較すると、相対誤差が大きくなっている点は古典的な領域に集中していることがわかった. これは漸化式が古典的な領域において振動する解を持つため、小さな誤差が積み重なって生じ



たものだと考えられる。

また、4倍精度での計算可能な範囲であれば、限りなく0に近い領域の計算も漸化式を用いる方向を間違えなければ30桁程度の精度で計算できていることが確認できた。古典的な領域であっても相対誤差は最大で $10^{-27}$ 程度であった。

## 第 6 章

# 結論

Mathematica では  $l = 1000$  程度の計算の場合 1 日程度の時間を必要としていたが、今回のサブルーチンを用いた場合おおよそ数分で計算が完了した。

非古典的な領域では  $d_{mm'}^l(\beta)$  の値は限りなく 0 となるため、正確な漸化式の計算が困難になることが懸念されている。

図 (4.1)~(4.4) からわかるように  $\beta$  の値が小さくなると古典的な領域が  $m = m'$  に漸近している。これは 3.4 説で述べた  $d$  関数の性質によるものである。結果として非古典的な領域が増加し正確な計算が困難となる。 $\beta$  の値をさらに小さくしても正確な計算が行えるようにすることは今後の課題である。

# 謝辞

基本的な数学や物理から研究を進める上での心構えまで，本当に多くのことをご指導していただいた森下亨教授に感謝の意を表します．また日頃の研究や輪講などでは森下研究室の皆様からの多くのご協力を賜りました．松井氏，濱川氏には発表の仕方や，研究とはどのようなものなのかを教えていただきました．播磨氏，安田氏には同期として，相談に乗ってもらったり協力をしてもらったり多くのことで助けられました．本当にありがとうございました．

## 付録 A

# Fortran ソースコード

ソースコード A.1: 実装したソースコード

---

```
1  IMPLICIT REAL*8(A-C,F-H,O,P,R-Z)
2  IMPLICIT REAL*16(D,E,Q)
3  real(16), dimension (:,:,), allocatable:: DJM
4  real(16), dimension (:,:,), allocatable:: DJM1
5  REAL(16) QBE,QN,QMI
6  integer LMAX,MMAX,b
7  REAL(16),PARAMETER::PI=4.q0*qatan(1.q0)
8
9  write(*,*)'input LMAX'
10 read *,LMAX
11 write(*,*)LMAX
12 write(*,*)'input 0:Enter beta as a multiple of pi'
13 write(*,*)'input 1:Enter beta as a number'
14 read *,b
15 if(b==0)then
16     write(*,*)'input the number to multiply by pi'
17     read *,QN
18     QBE=PI*QN
19 else
20     write(*,*)'input number'
21     read *,QBE
22 end if
23 QMI=2.q0*(10.q0**(-4900.q0/(2.q0*LMAX)))
```

```

24     if(QBE.le.QMI)then
25         write(*,*)'Enter a value greater than beta =',QMI
26     else
27         write(*,*)'beta:',QBE,'LMAX:',LMAX
28         MMAX=LMAX
29
30
31         allocate(DJM(0:MMAX,-MMAX:MMAX,-MMAX:MMAX))
32         allocate(DJM1(0:MMAX,-MMAX:MMAX,-MMAX:MMAX))
33
34
35         MMAX=LMAX
36         CALL TABDJM(DJM,LMAX,MMAX,QBE)
37
38         DO LL=0,LMAX
39             DO MM=-LL,LL
40                 DO MP=-LL,LL
41                     write(98,*)LL,MM,MP,DJM(LL,MM,MP)
42                 ENDDO
43             ENDDO
44         ENDDO
45     end if
46     STOP
47     END
48
49     SUBROUTINE TABDJM(DJM,LMAX,MMAX,QBE)
50     IMPLICIT REAL*8(A-C,F-H,O,P,R-Z)
51     IMPLICIT REAL*16(D,E,Q)
52     C=====
53     C Table for Wigner D-function, DJMMP at beta=pi/2
54     C G. Preseau & M. Reinecke,
55     C Astrophys. J. Supp. Ser. 190, 267 (2010)
56     C-----
57     C TM, 8/31/2021
58     C=====
59     DIMENSION DJM(0:MMAX,-MMAX:MMAX,-MMAX:MMAX)
60     real(16), dimension (:,:), allocatable:: QSQ1,QSQ2
61     real(16), dimension (:), allocatable:: QLGS

```

```

62     PARAMETER(NTHREAD=36)
63     integer LMAX,MMAX
64     real(16) QBE
65 C
66     DIMENSION T(0:10)
67 !$ use omp_lib
68 C
69     allocate (QSQ1(0:LMAX,0:LMAX),QSQ2(0:LMAX,0:LMAX))
70     allocate (QLGS(0:2*LMAX))
71 C
72 c t(0)=elaptime()
73     DO LL=0,LMAX
74         DO MP=-LL,LL
75             QSQ1(MP,LL)=qsqrt((LL-MP)*(LL+MP+1.q0))
76             QSQ2(MP,LL)=qsqrt((LL+MP)*(LL-MP+1.q0))
77         ENDDO
78     ENDDO
79 C
80     QLGS(0)=0.q0 ! from 0!=1
81     QSS=0.q0
82     DO II=1,2*LMAX
83         QSS=QSS+QLOG(REAL(II,16))
84         QLGS(II)=QSS
85     ENDDO
86 C
87 c t(2)=elaptime()
88     IF (LMAX.gt.MMAX) STOP 'TABDJM'
89 C
90 c CALL omp_set_num_threads(NTHREAD)
91 C
92
93 c DO LL=LL1,LL2
94     write(6,*)'LL',LL
95     DO LL=0,LMAX
96         DO MM=-LL,LL
97             QSS=QLGS(2*LL)-QLGS(LL+MM)-QLGS(LL-MM)
98             QSS=QSS*0.5q0
99             QSS=QSS+(LL+MM)*QLOG(qcos(QABS(QBE/2.q0)))

```

```

100          QSS=QSS+(LL-MM)*QLOG(qsin(QABS(QBE/2.q0)))
101 C
102 C--- 3 term recursion, eq. (7)
103          QM2=0.q0
104          QM1=QEXP(QSS)
105          DJM(LL,MM,LL)=QM1
106          DO MP=LL,IABS(MM)+1,-1
107              QMM2=2.q0*(-MM+MP*qcos(QBE))/qsin(QBE)
108              QM=QMM2*QM1-QSQ1(MP,LL)*QM2
109              QM=QM/QSQ2(MP,LL)
110              QM2=QM1
111              QM1=QM
112              DJM(LL,MM,MP-1)=QM
113          ENDDO
114      ENDDO
115      DO MM=-LL,LL
116          DO MP=IABS(MM),LL
117              DJM(LL,-MM,-MP)=(-1)**(MM-MP)*DJM(LL,MM,MP)
118              DJM(LL,-MP,-MM)=DJM(LL,MM,MP)
119              DJM(LL,MP,MM)=(-1)**(MM-MP)*DJM(LL,MM,MP)
120          ENDDO
121      ENDDO
122  ENDDO
123  RETURN
124  END

```

---

## 参考文献

- [1] G. Prézeau and M. Reinecke. ALGORITHM FOR THE EVALUATION OF REDUCED WIGNER MATRICES. Published 2010 September 16, The Astrophysical Journal Supplement Series, Volume 190, Number 2
- [2] M. E. ROSE. 角運動量の基礎理論. みすず書房, 1971 年, 246p, 4-622-02520-5
- [3] J. J. Sakurai. 現代の量子力学 (上). 吉岡書店, 1989 年, 371p, 4-8427-0222-2
- [4] 小形正男. 量子力学. 裳華房, 2007 年, 271p, 978-4-7853-2229-8
- [5] 中田育男. 基礎 FORTRAN. 岩波書店, 1991 年, 227p, 4-00-007854-2
- [6] T.Inui Y.Tanabe Y.Onodera. Group Theory and Its Applications in Physics. Manuel Cardona, 1995, 415p, 3-540-60445-6
- [7] A.R.EDMONDS. ANGULAR MOMENTUM IN QUANTUM MECHANICS. PRINCETON UNIVERSITY PRESS, 1960, 146p