

# 非対称回転子のエネルギーレベルの計算コード

坂 本 薫\*

昭和49年9月30日受理

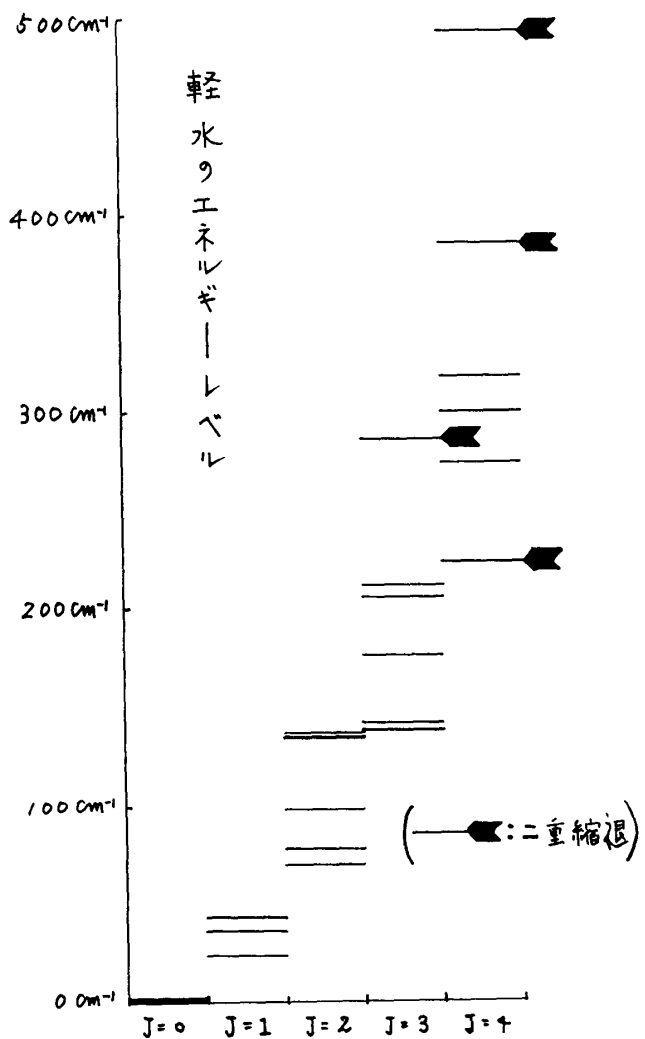
## The Computational Code of The Energy Level of Asymmetric Rotors

Kaoru SAKAMOTO

**要約** 3つの慣性モーメントが違う非対称回転子のエネルギーレベルの計算コードを作成した。入力として3つの慣性主軸モーメントを与えれば、エネルギー固有値と固有ベクトルが出力される。

軽水、重水などの回転子としての力学的挙動の研究として、3つの慣性主軸モーメントが違う場合のエネルギー固有値、固有ベクトルの計算をする必要がある。それ故に、それらの値を計算するコードを作成した。これらの計算する方法は<sup>1)</sup>以前に述べられているのでコードの説明をする。A(1), A(2), A(3)は各々の慣性主軸モーメント、IPは回転行列を出力するとき1そうでないとき0である。EIGは固有エネルギーのベクトルでLはその固有ベクトルのなす行列である。

JMAXは回転の量子数の最大数で入力として与えられる。サブルーチンEVは回転行列を計算し、サブルーチンMEIGNJをよんで対角化する。MEIGNJは実対称行列をヤコビ法によって対角化するサブルーチンで、固有値、固有ベクトルが同時に計算される。实例として、軽水のと看このコードを使用した結果が図示されている。このコードは倍精度で計算される。



\* 応用数学科

軽水の3つの慣性主軸モーメントは次のように与えられた.

$$A(1) = 0.100735D-2 \quad (\times 10^{-37} \text{cm}^2 \text{g})$$

$$A(2) = 0.193200D-2 \quad (\times 10^{-37} \text{cm}^2 \text{g})$$

$$A(3) = 0.302675D-2 \quad (\times 10^{-37} \text{cm}^2 \text{g})$$

**謝辞** このコードの作成にあたって、京大大型計算センターの FACOM 230-60 と本校の計算センターの HITAC-8400 を使用しました.

### 参 考 文 献

- 1) 坂本 薫 岡山理大紀要 85, 9, 1973

```

1 C   PROGRAM SAKAMO
2 C   CALCULATION OF ENERGY LEVEL OF ASYMMETRIC ROTAR
3     COMMON AI, JMAX
4     NN=10
5     DIMENSION EIG(10), AI(3), L(10, 10)
6     REAL*8 EIG, AI, L
7 1000 READ(5, 100, END=2000) IP, JMAX, (AI(I), I=1, 3)
8 100  FORMAT(2I2, 3D14.7)
9     JJMAX=2*JMAX+1
10    WRITE(6, 400) JMAX, (AI(I), I=1, 3)
11 400  FORMAT(1H, 10X, 'JMAX=', I2, ' JIX=', D14, 7, 'RIY=', D14.7, 'RIZ=', D14.7)
12    CALL EV(IP, EIG, L, NN)
13    DO 500 I=1, JJMAX
14 500  EIG(I)=6.94155D0*EIG(I)
15    WRITE(6, 600) (EIG(I), I=1, JJMAX)
16 600  FORMAT(1H, 20X, 'ROTATIONARY FREQUANCY*1.0D-3(MEV)'
17      1/1H, (20X, 5D15.7))
18    DO 700 I=1, JJMAX
19 700  EIG(I)=EIG(I)*8.065460D-3
20    WRITE(6, 800) (EIG(I), I=1, JJMAX)
21 800  FORMAT(1H, 20X, 'ROTATIONARY FREQUANCY (1.0/CM)'
22      1/1H, (20X, 5D15.7))
23    GO TO 1000
24 2000 STOP
25    END

26    SUBROUTINE MEIGNJ(A, S, N, NN)
27    DIMENSION A(NN, NN), S(NN, NN)
28    REAL*8 A, S, ANORM, E, FNORM, CONSTF, COS, SIN, B, C, APP, AQQ
29    1, U, V, W, W1, ABSV

```

```

30      E=1.0D-10
31      IN=0
32      CONSTF=N
33      DO 1000 J=1, N
34      DO 1000 I=1, N
35      IF(I-J) 2000, 3000, 2000
36 2000 S(I, J)=0.0D0
37      GO TO 1000
38 3000 S(I, J)=1.0D0
39 1000 CONTINUE
40      ANORM=0.0D0
41      DO 10 J=1, N
42      DO 10 I=1, N
43      IF(J-I) 100, 10, 100
44 100 ANORM=ANORM+A(I, J)**2
45 10 CONTINUE
46      ANORM=DSQRT(ANORM)
47      FNORM=ANORM*E
48 90 ANORM=ANORM/CONSTF
49 80 DO 21 IQ=2, N
50      M=IQ-1
51      DO 21 IP=1, M
52      IF(DABS(A(IP, IQ))-ANORM)21, 201, 201
53 201 IN=1
54      U=2.0D0*A(IP, IQ)
55      V=A(IQ, IQ)-A(IP, IP)
56      W=V*V+U*U
57      W1=DSQRT(W)
58      ABSV=DABS(V)
59      COS=DSQRT((1.0D0+ABSV/W1)/2.0D0)
60      SIN=U/(2.0D0*COS*W1)
61      IF(V)210, 211, 211
62 210 SIN=-SIN
63 211 CONTINUE
64      DO 40 I=1, N
65      IF(I-IP)300, 301, 300
66 300 IF(I-IQ)302, 301, 302
67 302 B=A(I, IP)*COS-A(I, IQ)*SIN
68      A(I, IQ)=A(I, IP)*SIN+A(I, IQ)*COS
69      A(I, IP)=B
70 301 CONTINUE
71      C=S(I, IP)*COS-S(I, IQ)*SIN
72      S(I, IQ)=S(I, IP)*SIN+S(I, IQ)*COS
73      S(I, IP)=C

```

```

74 40 CONTINUE
75 APP=A(IP,IP)*COS**2+A(IQ,IQ)*SIN**2-2.0D0*A(IP,IQ)*SIN*COS
76 AQQ=A(IP,IP)*SIN**2+A(IQ,IQ)*COS**2+2.0D0*A(IP,IQ)*SIN*COS
77 A(IP,IQ)=(A(IP,IP)-A(IQ,IQ))*SIN*COS+A(IP,IQ)*(COS**2-
78 1SIN**2)
79 A(IQ,IP)=A(IP,IQ)
80 A(IP,IP)=APP
81 A(IQ,IQ)=AQQ
82 DO 70 I=1,N
83 A(IP,I)=A(I,IP)
84 70 A(IQ,I)=A(I,IQ)
85 21 CONTINUE
86 IF(IN-1) 600,601,600
87 601 IN=0
88 GO TO 80
89 600 IF(ANORM-FNORN)99,99,90
90 99 CONTINUE
91 RETURN
92 END

93 SUBROUTINE EV(IP,EIG,H,NN)
94 COMMON AI,JMAX
95 REAL*8 AI,V,EIG,H,ENERG1,ENERG2
96 DIMENSION AI(3),V(10,10),EIG(NN),H(NN,NN)
97 JJ1=JMAX*2+1
98 DO 50 J=1,JJ1
99 DO 50 I=1,JJ1
100 50 V(I,J)=0.0D0
101 IF(JMAX)9999,60,70
102 60 H(1,1)=1.0D0
103 GO TO 170
104 70 IF(JMAX.GE.3) GO TO 300
105 GO TO (100,200),JMAX
106 100 V(1,1)=ENERG1(1.0D0)-ENERG2(-1.0D0)
107 V(2,2)=ENERG1(0.0D0)
108 V(3,3)=ENERG1(1.0D0)+ENERG2(-1.0D0)
109 DO 160 I=1,JJ1
110 DO 160 J=1,JJ1
111 IF(I-J) 110,150,110
112 110 H(I,J)=0.0D0
113 GO TO 160
114 150 H(I,J)=1.0D0
115 160 CONTINUE
116 170 DO 180 I=1,JJ1
117 180 EIG(I)=V(I,I)

```

```
118     IF(IP.EQ.1) GO TO 181
119     GO TO 9999
120 181  WRITE(6,182)
121 182  FORMAT(IH0,'ROTATION ENERGY MATRIX')
122     DO 183 I=1, JJ1
123 183  WRITE(6,184)I, (V(I, J), J=1, JJ1)
124 184  FORMAT(1H , I5, 5D20.7)
125     GO TO 9999
126 200  V(1, 1)=ENERG1(2.0D0)
127     V(2, 2)=EENRH1(1.0D0)-ENERG2(-1.0D0)
126     V(3, 3)=ENERG1(0.0D0)
129     V(4, 4)=ENERG1(1.0D0)+ENERG2(-1.0D0)
130     V(5, 5)=V(1, 1)
131     V(3, 5)=DSQRT(2.0D0)*ENERG2(0.0D0)
132     V(5, 3)=V(3, 5)
133     GO TO 340
134 300  V(JMAX, JMAX)=ENERG1(1.0D0)-ENERG1(-1.0D0)
135     J1=JMAX+1
136     J2=JMAX+2
137     J3=JMAX+3
138     V(J1, J1)=ENERG1(0.0D0)
139     V(J1, J2)=ENERG1(1.0D0)+ENERG2(-1.0D0)
140     V(J1, J3)=DSQRT(2.0D0)*ENERG2(0.0D0)
141     DO 310 I=2, JMAX
142     II0=I-1
143     II1=JMAX-I+2
144     II2=JMAX+I+1
145     V(II0, II0)=ENERG1(DFLOAT(II1))
146     V(II2, II2)=ENERG1(DFLOAT(I))
147 310  CONTINUE
148     DO 320 I=3, JMAX
149     II4==JMAX-I+1
150     II5=I-2
151     II6=J1+I
152     II7=II6-2
153     V(II5, I)=ENERG2(DFLOAT(II4))
154     V(II7, II6)=ENERG2(DFLOAT(II5))
155 320  CONTINUE
156     DO 330 I=1, JJ1
157     DO 330 J=1, JJ1
158 330  V(J, I)=V(I, J)
159 340  IF(IP.EQ.1) GO TO 400
160     GO TO 500
161 400  WRITE(5,410)
162 410  FORMAT(1H , ' ROTATION ENERGY MATRIX')
```

```
163      DO 420 I=1, JJ1
164 420  WRITE(6, 430)I, (V(I, J), J=1, JJ1)
165 430  FORMAT(1H , I5, (6D20, 7))
166 500  CALL MEIGNJ(V, H, JJ1, NN)
167      DO 510 I=1, JJ1
168 510  EIG(I)=V(I, I)
169 9999 RETURN
170      END
```

```
171      DOUBLE PRECISION FUNCTION ENERG1(RK)
172      COMMON AI, J
173      REAL*8 AI(3), RK
174      ENERG1=(1.0D0/4.0D0)*((1.0D0/AI(1)+1.0D0/AI(2))*
175 1(DFLOAT(J)*(DFLOAT(J)+1.0D0)-RK*RK)+2.0D0*RK*RK/AI(3))
176      RETURN
177      END
```

```
178      DOUBLE PRECISION FUNCTION ENeRG2(RK)
179      COMMON AI, J
180      REAL*8 AI(3), RK
181      ENeRG2=1.0D0/8.0D0*((AI(1)-AI(2))/(AI(1)*AI(2)))
182 1*DSQRT((DFLOAT(J)-RK)*(DFLOAT(J)-RK-1.0D0)*(DFLOAT(J)+RK+1.0D0)
183 2*(DFLOAT(J)+RK+2.0D0))
184      RETURN
185      END
```