3 次元極座標調和振動子のエネルギー固有値と縮退度

3 次元極座標調和振動子のハミルトニアンは

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + \frac{1}{2}m\omega^2 r^2$$

なので、動径方向のシュレディンガー方程式は $\hat{L}^2 |l,m\rangle = \hbar^2 l(l+1) |l,m\rangle$ に注意すると、

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2u}{du^2} + \left(\frac{1}{2}m\omega^2 r^2 + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2}\right)u(r) = Eu(r)$$

となる。解が発散しないようにすると

$$u(r) \sim \exp\left(-\frac{m\omega^2}{2\hbar}r^2\right) \qquad (r \to \infty)$$
$$u(r) \sim r^{l+1} \qquad (r \to 0)$$

のふるまいをする必要があるので、解は

$$u(r) = F(r) r^{l+1} e^{-\frac{m\omega^2}{2\hbar}r^2}$$

となる。これを動径方向のシュレディンガー方程式に代入して、$y = \frac{m\omega}{\hbar}r^2$ とすると

$$y\frac{d^2F}{dy^2} + (l + \frac{3}{2} - y)\frac{dF}{dy} - (\frac{l}{2} + \frac{3}{4} - \frac{E}{2\hbar\omega})F(y) = 0$$

となる。これは合流型超幾何微分方程式となる。この解が収束するためには解の無限級数が途中で打ち切られることが必要とされるので、

$$-n_r = \frac{l}{2} + \frac{3}{4} - \frac{E}{2\hbar\omega} \qquad (n_r = 0, 1, 2, \cdots)$$

となる。よって、エネルギー固有値 $E_{n,l}$

$$E_{n,l} = \hbar\omega\left(2n_r + l + \frac{3}{2}\right)$$

が得られる。Principles of Stellar Evolution and Nucleosynthesis 第 4 章では $n_r = 1, 2, \cdots$ であり、基準エネルギーは V_0 だけ下がっているので、

$$E(n,l) = -V_0 + \hbar\omega\left(2n_r + l - \frac{1}{2}\right)$$

となる。

縮退度

3 次元デカルト座標の調和振動子の固有エネルギーは

$$E_n = \hbar\omega(n_x + n_y + n_z + \frac{3}{2})$$

なので、

$$2n_r + l = n_x + n_y + n_z$$

という関係がある。

基底状態 (N=0) では

$$(n_x, n_y, n_z) = (0, 0, 0)$$
$$(n_r, l, m) = (0, 0, 0)$$

第 1 励起状態では

$$(n_x, n_y, n_z) = (1, 0, 0), (0, 1, 0), (0, 0, 1)$$
$$(n_r, l, m) = (0, 1, -1 \sim 1)$$

第 2 励起状態では

$$(n_x, n_y, n_z) = (2, 0, 0), (0, 2, 0), (0, 0, 2), (1, 1, 0), (1, 0, 1), (0, 1, 1)$$
$$(n_r, l, m) = (1, 0, 0), (0, 2, -2 \sim 2)$$

第 3 励起状態では

$$(n_x, n_y, n_z) = (3, 0, 0) \times 3 \quad (2, 1, 0) \times 6 \quad (1, 1, 1) \times 1$$
$$(n_r, l, m) = (1, 1, -1 \sim 1), (0, 3, -3 \sim 3)$$

パウリの排他原理より、上向き下向きスピンの 2 つの粒子がはいるので、各準位に入れる粒子は

$$2, 6, 12, 20, \cdots, \frac{(N+1)(N+2)}{2}, \cdots$$

累積では

$$2, 8, 20, 40, \cdots$$

となる。これは原子核物理学のシェルモデル（殻模型）において、エネルギーの低い準位から順に陽子や中性子を詰めていったときに、殻が閉じて特に安定となる粒子の総数を表している。