

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、

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

となる。解が発散しないようにすると

$$\begin{aligned} u(r) &\sim \exp\left(-\frac{m\omega^2}{2\hbar} r^2\right) & (r \rightarrow \infty) \\ u(r) &\sim r^{l+1} & (r \rightarrow 0) \end{aligned}$$

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

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

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、

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

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 $n_r = 1, 2, \dots$ であり、基準エネルギーは V_0 だけ下がっているなので、

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

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

$$2, 6, 12, 20, \dots, (N+1)(N+2), \dots$$

累積では

$$2, 8, 20, 40, \dots$$

となる。これはスピン軌道相互作用を無視したときの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す。

実際には原子核でスピン軌道相互作用が働きハミルトニアンに $\hat{L} \cdot \hat{S}$ 項が追加されることで縮退が割れるので

$$2, 8, 20, 28, 50, 82, \dots$$

となる。これは**魔法数 (Magic Number)** とも呼ばれている。