

# Nilsson model の実装についてのメモ

20B01392 松本侑真

2023 年 11 月 12 日

概要

目次

ハミルトニアンは

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + \frac{m}{2}(\omega_r^2(x^2 + y^2) + \omega_z^2 z^2) \quad (0.1)$$

となり、固有エネルギーは

$$E = \hbar\omega_r(n_x + n_y + 1) + \hbar\omega_z(n_z + 1/2) \quad (0.2)$$

である。ここで、 $n_x, n_y, n_z$  はそれぞれ  $x, y, z$  方向の量子数である。ラプラシアンは円筒座標 ( $r = \sqrt{x^2 + y^2}, \phi, z$ ) で表すと

$$\nabla^2 = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left( r \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \quad (0.3)$$

であるため、

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left( r \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) + \frac{m}{2} (\omega_r^2 r^2 + \omega_z^2 z^2) \right] \psi = E\psi \quad (0.4)$$

となる。 $\psi = R(r)Z(z)\Phi(\phi)$  と変数分離をすると、

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{Z(z)\Phi(\phi)}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left( r \frac{\partial R(r)}{\partial r} \right) + \frac{R(r)Z(z)}{r^2} \frac{\partial^2 \Phi(\phi)}{\partial \phi^2} + R(r)\Phi(\phi) \frac{\partial^2 Z(z)}{\partial z^2} \right) + \left[ \frac{m}{2} (\omega_r^2 r^2 + \omega_z^2 z^2) \right] \psi = E\psi \quad (0.5)$$

となり、両辺  $\psi$  で割ると

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left( r \frac{\partial R(r)}{\partial r} \right) \frac{1}{R(r)} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2 \Phi(\phi)}{\partial \phi^2} \frac{1}{\Phi(\phi)} + \frac{\partial^2 Z(z)}{\partial z^2} \frac{1}{Z(z)} \right) + \left[ \frac{m}{2} (\omega_r^2 r^2 + \omega_z^2 z^2) \right] = E \quad (0.6)$$

となる。定数  $m_\phi$  を用いて書き換えると

$$\frac{\Phi''}{\Phi} = -\frac{2mr^2}{\hbar^2} \left( E - \left[ \frac{m}{2} (\omega_r^2 r^2 + \omega_z^2 z^2) \right] + \frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left( r \frac{\partial R(r)}{\partial r} \right) \frac{1}{R(r)} + \frac{\partial^2 Z(z)}{\partial z^2} \frac{1}{Z(z)} \right) \right) = -m_\phi^2 \quad (0.7)$$

となる。これより  $\Phi(\phi)$  の解

$$\Phi(\phi) = A \exp(im_\phi \phi) \quad (0.8)$$

と、 $R(r), Z(z)$  についての方程式

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left[ \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left( r \frac{\partial R(r)}{\partial r} \right) \frac{1}{R(r)} + \frac{\partial^2 Z(z)}{\partial z^2} \frac{1}{Z(z)} \right] = E - \left[ \frac{m}{2} (\omega_r^2 r^2 + \omega_z^2 z^2) \right] \quad (0.9)$$

を得る。 $z$  方向は 1 次元調和振動子の方程式であるため、解はエルミート多項式で表される：

$$Z(z) = H_n \left( \sqrt{\frac{m\omega_z}{\hbar}} z \right) \quad (0.10)$$