Nilsson model の実装についてのメモ

20B01392 松本侑真

2023 年 11 月 13 日

概要

目次

ハミルトニアンは

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

となり、固有エネルギーは

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

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

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

であるため、

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

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

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

となり、両辺 ψ で割ると

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

となる。定数 m_ϕ を用いて書き換えると

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

となる。これより $\Phi(\phi)$ の解

$$\Phi(\phi) = A\exp(im_\phi\phi) \tag{0.8}$$

と、$R(r)$, $Z(z)$ についての方程式

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

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：

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