A 3D –s harmonikus oszcillátor és az impulzusmomentum

Az elméleti fizikában….ide kell írni egy kis bevezetőt….

Tekintsük a következő 3D-s oszcillátor potenciált:

$$V(\bar{r}) = V_0\left(\frac{r^2}{R^2} - 1\right) \qquad r \le R \tag{1}$$

ahol V_0 a potenciál mélysége, R karakterisztikus hossz, amelyen belül a potenciál kifejti hatását (pl.: atommag sugara). A potenciál jellegéből fakadóan centrális potenciál, ezért invariáns a térbeli forgatásra, ennek következtében a rendszerben az impulzusmomentum megmaradó mennyiség. Ennek kvantummechanikai következménye, hogy egy ilyen potenciálban mozgó részecske lehetséges állapotai jellemezhetők az impulzusmomentum operátor *l* sajátértékeivel. Tekintsünk egy s=1/2 spinű fermiont, amely az (1) képlettel jellemzett potenciálban mozog. A részecske lehetséges sajátállapotait és az energiaspektrumát nemrelativisztikus esetben az időfüggetlen Schrödinger-egyenlet határozza meg:

$$\hat{H}\Psi(\bar{r}) = E\Psi(\bar{r}) \tag{2a}$$

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V_0\left(\frac{r^2}{R^2} - 1\right) \tag{2b}$$

ahol *m* a részecske tömege. A (2a) egyenletet némileg átrendezve a következőt kapjuk:

$$\Delta\Psi(\bar{r}) + \frac{2m}{\hbar^2}\left[E + V_0 - V_0\frac{r^2}{R^2}\right]\Psi(\bar{r}) = 0 \tag{3}$$

A kölcsönhatást jellemző potenciál csak az r^2-től függ, amely Descartes-koordinátákkal kifejezve $r^2 = x^2 + y^2 + z^2$ alakba írható. Ebből viszont explicit módon leolvasható, hogy a potenciál koordinátánként szeparálható összegként írható fel $V(\bar{r}) = V(x) + V(y) + V(z)$. Mivel a Hamilton-operátor többi komponense szintén koordinátánkét szeparálható, így a sajátfüggvény szorzat alakban szeparálható:

$$\Psi(\bar{r}) = \varphi_1(x_1)\varphi_2(x_2)\varphi_3(x_3) \tag{4}$$

ahol x_1, x_2, x_3 rendre x, y, z. Mielőtt a szorzat alakban felbontott sajátfüggvényt alkalmaznánk, egyszerűsítsük a (3) egyenletet:

$$\Delta\Psi(\bar{r}) + \left[\tilde{k} - \tilde{V}_0\frac{r^2}{R^2}\right]\Psi(\bar{r}) = 0 \tag{5}$$

ahol $\tilde{k} = \frac{2m}{\hbar^2}(E + V_0)$, $\tilde{V}_0 = \frac{2m}{\hbar^2}V_0$. Az (5) egyenletbe behelyettesítjük a (4) kifejezést, majd az egész egyenletet osztjuk a teljes sajátfüggvénnyel, akkor egy olyan egyenletre jutunk, amelynek komponensei más-más koordinátákat tartalmaz, de formálisan azonos alakúak

$$\sum_{i=1}^{3}\left[\frac{1}{\varphi_i(x_i)}\frac{d^2\varphi_i(x_i)}{dx_i^2} - \tilde{V}_0\frac{x_i^2}{R^2}\right] + \tilde{k} = 0 \tag{6}$$

A kapott egyenletnek értelemszerűen akkor lesz megoldása minden x_i értékre, ha a bal oldali szumma minden tagja konstans. Ezzel egy koordináták szerinti egyenletrendszert kapunk, amelyben az egyenletek közötti csatolás csak a konstansokra vonatkozó additív feltételben nyilvánul meg:

$$\frac{d^2\varphi_i(x_i)}{dx_i^2}+\left[\tilde{k}_i-\tilde{V}_0\frac{x_i^2}{R^2}\right]\varphi_i(x_i)=0 \qquad i=1,2,3 \tag{7a}$$

$$\tilde{k}_1+\tilde{k}_2+\tilde{k}_3=\tilde{k} \tag{7b}$$

ahol a konstansok praktikus paraméterezése $\tilde{k}_i=\frac{2m}{\hbar^2}E_i$. A (7a) egyenletek (koordináták szerinti) függetlensége azt eredményezi, hogy a centrális oszcillátor felfogható úgy is, mint a megfelelő koordinátairányokban lévő három független lineáris oszcillátor összege. Így a megoldás felé vezető lépések visszavezethetők az egydimenziós oszcillátor problémájára.

Az egydimenziós megoldás egyik lehetséges módszere a Sommerfeld-polinom módszer. Ehhez célszerű a (7a) egyenletet átalakítani úgy, hogy az x_i változó helyett áttérünk az $\alpha_i=x_i\cdot\left(\frac{\tilde{V}_0}{R^2}\right)^{1/4}$ változóra, ekkor a (7a) a következő alakot ölti:

$$\frac{d^2\varphi_i(\alpha_i)}{d\alpha_i^2}+\left[k_i-\alpha_i^2\right]\varphi_i(\alpha_i)=0 \tag{8}$$

ahol $k_i=\sqrt{\frac{R^2}{\tilde{V}_0}}\tilde{k}_i$. A Sommerfeld-módszer lényege, hogy a (8) egyenletnek az $\alpha_i>>k_i$ aszimptotikus tartományban megkeressük a megoldását, majd a teljes megoldást ezen aszimptotikus megoldás és egy véges fokszámú polinom szorzataként állítjuk elő. Első lépésben oldjuk meg az aszimptotikus egyenletet:

$$\frac{d^2\varphi_i^a(\alpha_i)}{d\alpha_i^2}-\alpha_i^2\varphi_i^a(\alpha_i)=0 \tag{9}$$

A (9) általános megoldása a módosított Bessel-függvények szerint állítható elő:

$$\varphi_i^a(\alpha_i)=A\sqrt{\alpha_i}\,I_{\frac{1}{4}}\left(\frac{1}{2}\alpha_i^2\right)+B\sqrt{\alpha_i}\,K_{\frac{1}{4}}\left(\frac{1}{2}\alpha_i^2\right) \tag{10}$$

a konkrét megoldáshoz természetesen rögzíteni kell a peremfeltételeket. Mivel most aszimptotikus tartományban vagyunk, csak a végtelenre vonatkozó feltételt rögzíthetjük, amely természetesen az lesz, hogy a megoldásnak regulárisnak kell lenni. Mivel az $I_n(x)$ elsőfajú módosított Bessel-függvény a végtelenben divergens, a kívánt feltétel csak akkor teljesülhet, ha A=0. Szokás a $K_n(x)$ Bessel-függvényt sorbafejteni (*Abramowitz, 378 o.*):

$$K_n(x)\sim\frac{1}{\sqrt{x}}e^{-x}\left(1+\frac{4n^2-1}{8x}+\frac{(4n^2-1)(4n^2-9)}{2!(8x)^2}+\ldots\right), \tag{10}$$

Mivel nagy argumentumú tartományban vagyunk csak a nullad rendű tagot tartjuk meg, akkor ezzel a közelítéssel az aszimptotikus megoldás az irodalomban használatos alakban írható fel:

$$\varphi_i^a(\alpha_i)=B\cdot e^{-\frac{1}{2}\alpha_i^2} \quad . \tag{11}$$

A (11)-ben szereplő *B* normálási faktor tartalmazza a sorfejtéssel járó konstans járulékokat is! A teljes megoldás próbafüggvényét ezek alapján felírhatjuk, mint

$$\varphi_{n_i}(\alpha_i) = B \cdot e^{-\frac{1}{2}\alpha_i^2} f_{n_i}(\alpha_i) \quad , \tag{12}$$

ahol $f_n(x)$ egy n_i-ed fokú polinom, amelyet a továbbiakban meg kell határoznunk. Ehhez nem kell mást tennünk, mint hogy a próbafüggvényt visszahelyettesítjük a (8)-ba, ezzel az $f_n(x)$ polinomra vonatkozóan kapunk egy egyenletet

$$\frac{d^2 f_{n_i}(\alpha_i)}{d\alpha_i^2} - 2\alpha_i \frac{df_{n_i}(\alpha_i)}{d\alpha_i} + [k_i - 1] f_{n_i}(\alpha_i) = 0 \tag{13}$$

Ezen leírásban nem részletezett számításokkal belátható, hogy a polinom csak abban az esetben lesz reguláris, ha teljesül a

$$k_i = 2n_i + 1, \qquad \text{ahol } n_i = 0,1,2,3,... \tag{14}$$

feltétel. Ezzel a feltevéssel a (12) egyenlet a

$$\frac{d^2 f_{n_i}(\alpha_i)}{d\alpha_i^2} - 2\alpha_i \frac{df_{n_i}(\alpha_i)}{d\alpha_i} + 2n_i f_{n_i}(\alpha_i) = 0 \tag{15}$$

alakra hozható, amely nem más, mint az Hermite-differenciálegyenlet, amelynek megoldásai a $H_{n_i}(\alpha_i)$ Hermite-polinomok. Ezzel a (8) egyenlet teljes megoldása

$$\varphi_{n_i}(\alpha_i) = B \cdot e^{-\frac{1}{2}\alpha_i^2} \cdot H_{n_i}(\alpha_i) \quad , \tag{16}$$

a keresett energiaspektrum (sajátérték) a (14) kifejezésből kapható meg, ha kihasználjuk a k_i definícióját

$$E_{n_i} = \hbar\omega\left(n_i + \frac{1}{2}\right), \qquad \text{ahol } n_i = 0,1,2,3,... \tag{17}$$

és $\omega = \sqrt{\frac{\tilde{V}_0}{R^2}\frac{\hbar}{m}}$. Természetesen ezek az eredmények csak az egyik koordináta szerinti oszcillátorra vonatkoznak, a teljes megoldáshoz a (7) egyenleteket kell figyelembe venni, valamint a (4) szeparációt, ezek alapján a 3D-s oszcillátor sajátfüggvénye

$$\Psi_{n_x n_y n_z}(x,y,z) = N \cdot e^{-\frac{1}{2}\left(\alpha_x^2 + \alpha_y^2 + \alpha_z^2\right)} \cdot H_{n_x}(\alpha_x) \cdot H_{n_y}(\alpha_y) \cdot H_{n_z}(\alpha_z) \quad , \tag{18}$$

míg a megfelelő sajátérték

$$E_{n_x n_y n_z} = \hbar\omega\left(n + \frac{3}{2}\right) - V_0, \qquad \text{ahol } n = n_x + n_y + n_z \tag{19}$$

Az energia-sajátértékekből leolvasható, hogy a sajátállapotokat az *n* érték jellemzi, ebből viszont következik, hogy egy adott *n* értékkel jellemzett energia-sajátállapot degenerált, hiszen az különböző n_x, n_y, és n_z értékekből állítható elő, amelyekhez más-más hullámfüggvény tartozik. Az egy adott *n*-hez tartozó degenerációk száma

$$\frac{1}{2}(n+1)(n+2) \xrightarrow[\text{SPIN}=1/2]{} (n+1)(n+2), \tag{20}$$

a spin arra utal, hogy fermionokra vonatkozólag a kétféle spinfüggvény miatt egy energia-sajátállapot duplán degenerált (Pauli-elv).

Az eddigi számítások során a sajátállapotokban és a sajátértékekben explicit módon nem jelent meg az impulzusmomentum, holott arról beszéltünk, hogy ez jól jellemzi a rendszert, mert megmaradó mennyiség. Ahhoz, hogy erre vonatkozólag tudjunk valamit mondani, vissza kell térnünk az (5) egyenlethez. Az előző szakaszban ezt az egyenletet a sajátfüggvény Descartes-koordináták szerinti szorzatfelbontása alapján oldottuk meg, viszont tudjuk, hogy az impulzusmomentum a térbeli forgatásokkal van kapcsolatban, ezért praktikus a hullámfüggvényt gömbi koordinátarendszerben felírt alakjában keresni.

Tudjuk, hogy a potenciál gömbszimmetrikus, ezért a hullámfüggvényt a szokásos

$$\Psi_{\tilde{n},lm}(\bar{r}) = \frac{R_{\tilde{n}}(r)}{r} Y_l^m(\vartheta, \varphi) \tag{21}$$

formára alakíthatjuk. Mivel az Y_{lm} gömbfüggvények az L^2 operátor sajátfüggvényei, így az általunk keresett rendszer hullámfüggvényében már explicit módon megjelent az impulzusmomentum *l* kvantumszáma, így a (21) nem más, mint a rendszer *l* impulzusmomentummal jellemzett sajátállapota. Ha a (21)-ben alkalmazott próbafüggvényt behelyettesítjük az (5) kifejezésbe a következőt kapjuk:

$$\Delta_r\left(\frac{R_{\tilde{n}}}{r}\right)Y_l^m + \frac{R_{\tilde{n}}}{r}\Delta_{\vartheta\varphi}\left(Y_l^m\right) + \left[\tilde{k} - \tilde{V}_0\frac{r^2}{R^2}\right]\frac{R_{\tilde{n}}}{r}Y_l^m = 0\,, \tag{22}$$

ahol a Laplace-operátor alsó indexe arra utal, hogy mely változókra vonatkozó deriváltakat tartalmaz. A kapott egyenletben a szögfüggő deriváltat tartalmazó komponens a rotátor egyenletének segítségével kifejezhető, hiszen $\Delta_{\vartheta\varphi}Y_l^m = \frac{1}{r^2}l(l+1)Y_l^m$, így a (22) a

$$\Delta_r\left(\frac{R_{\tilde{n}}}{r}\right)Y_l^m + \left[\tilde{k} - \frac{l(l+1)}{r^2} - \tilde{V}_0\frac{r^2}{R^2}\right]\frac{R_{\tilde{n}}}{r}Y_l^m = 0\,, \tag{23}$$

alakot ölti, ahol az Y_{lm} gömbfüggvény csak, mint szorzótényező szerepel, ezért egyszerűsíthetünk vele. Meg kell említeni, hogy egy adott *l* momentumhoz 2*l*+1 különböző *m* érték tartozik, tehát az *l* kvantumszámmal jellemzett állapot is degenerált (*m* szerint).

A továbbiakban vizsgáljuk a radiális hullámfüggvényt, ha kifejtjük a Laplace-operátor radiális komonensét, akkor a következőt kapjuk:

$$\frac{d^2R_{\tilde{n}}}{dr^2} + \left[\tilde{k} - \frac{l(l+1)}{r^2} - \tilde{V}_0\frac{r^2}{R^2}\right]R_{\tilde{n}} = 0\,, \tag{24}$$

ahol a potenciálnak az *l*(*l*+1)-től függő tagja nem más, mint a centripetális potenciál. Ahhoz, hogy a radiális egyenletet könnyebben megoldhassuk vezessük be a $\xi = r\sqrt{\tilde{k}}$ dimenziótlan változót, amellyel a fenti egyenlet az alábbi alakba írható:

$$\frac{d^2R_{\tilde{n}}}{d\xi^2} + \left[1 - \frac{l(l+1)}{\xi^2} - b\xi^2\right]R_{\tilde{n}} = 0\,,\ \text{ahol}\ b = \frac{\tilde{V}_0}{R^2\tilde{k}^2}\,. \tag{25}$$

Az egyenlete szerkezete ebben a formában még nem azonosítható valamilyen speciális egyenlettel, ezért végezzünk el még egy változócserét: $z = \sqrt{b}\xi^2$, ha ezt megtesszük az egyenlet az alábbi formába írható:

$$\frac{d^2R_{\tilde{n}}}{dz^2} + \left[\frac{1}{4\sqrt{b}z} - \frac{l(l+1)}{4z^2} - \frac{1}{4}\right]R_{\tilde{n}} = 0\,. \tag{26}$$

Az így kapott egyenlet pedig nem más mint a *Whittaker-egyenlet*, amelynek az általános alakja a következő

$$\frac{d^2F}{dz^2}+\left[\frac{\mu}{z}+\frac{(1/4-\nu^2)}{z^2}-\frac{1}{4}\right]F=0\ , \tag{27}$$

amelynek megoldása a *Whittaker-függvények* kombinációja, azaz a mi esetünkben a (26) alapján ez a következőt jelenti (a megfelelő paraméterek azonosítása mellett):

$$R_{\tilde{n}}(z)=AM_{\mu\nu}\left(\sqrt{b}\xi^2\right)+BW_{\mu\nu}\left(\sqrt{b}\xi^2\right),\ \text{ahol} \tag{28a}$$

$$\mu=\frac{1}{4\sqrt{b}}\ \text{ és }\ \nu=\frac{1}{4}\sqrt{1+4\cdot l(l+1)}=\frac{1}{4}(2l+1), \tag{28b}$$

az *M* és *W* függvények az un. *Whittaker*-függvények, amelyek kifejezhetők, a konfluens hipergeometrikus függvénnyel (*M*(c,d,x)) és a Kummer-függvénnyel (*U*(c,d,x)) (ld. *Abramowitz,* 505.o.):

$$\left.\begin{matrix}M_{\mu\nu}(z)\\ W_{\mu\nu}(z)\end{matrix}\right\}=e^{-\frac{1}{2}z}z^{\frac{1}{2}+\nu}\cdot\left\{\begin{matrix}M(c,d,z)\\ U(c,d,z)\end{matrix}\right.,\ \text{ahol} \tag{29a}$$

$$\begin{aligned}c&=\frac{1}{2}+\nu-\mu\\ d&=1+2\nu\end{aligned} \tag{29b}$$

A mi esetünkben a megoldás *c* és *d* paraméterei a (26) alapján a következők:

$$c=\frac{1}{2}+\frac{1}{4}(2l+1)-\frac{1}{4\sqrt{b}} \tag{30a}$$

$$d=1+\frac{1}{2}(2l+1) \tag{30b}$$

$$z=\sqrt{b}\xi^2 \tag{30c}$$

A (29) kifejezésekkel definiált megoldások általános függvények, amelyeknek feltételektől függően léteznek speciális megoldásaik, ezek közül kell kiválasztani az adott problémának megfelelőt. Jelen esetben a lehetőségeket jelentősen szűkíti egyrészt, hogy a (26) megoldásai kétindexes függvények, viszont a keresett (25) egyenlet megoldása csak egy indexet tartalmazhat, ezért ebben az esetben csak az egyindexes függvények megfelelőek, másrészt a (30c) szerint az argumentum a változó másodrendű hatványát tartalmazza, ezért olyan függvény kell, amely argumentuma a változót ennek megfelelően tartalmazza. Még az említett kikötések mellett is több függvény áll rendelkezésre (ld. *Abramovitz* 510.o.), amely nem meglepő, hiszen a peremfeltételekre való illesztést még meg tenni. A peremfeltételek szerint végtelenben reguláris és nulla helyen nulla értékű függvény szükséges. Az elmondottak alapján csak egyetlen speciális megoldás marad, amely minden említett feltételt teljesít, az ennek megfelelő paraméterrögzítés (indexrögzítés):

$$c=-\tilde{n}\Rightarrow-\tilde{n}=\frac{1}{2}+\frac{1}{4}(2l+1)-\frac{1}{4\sqrt{b}} \tag{31a}$$

$$d=\frac{1}{2} \tag{31b}$$

$$z=\frac{1}{2}y^2 \tag{31c}$$

ahol leolvasható, hogy már csak egy index az $\tilde{n}$ maradt meg, míg a változó kvadratikusan szerepel az argumentumban, az ehhez tartozó megoldás az Hermite-polinom lesz:

$$M(a,b,z) = \frac{\tilde{n}!}{(2\tilde{n})!}\left(-\frac{1}{2}\right)^{-\tilde{n}} H_{2\tilde{n}}\left(\frac{1}{2}y^2\right), \text{ ahol } \tilde{n} = 0,1,2,3.... \tag{32}$$

A kapott megoldáshoz természetesen a (26) szerint a *B*=0 kell választanunk. A radiális megoldásban szereplő $\tilde{n}$ kvantumszám kapcsolata az l impulzusmomentummal és az energiát jellemző *n* kvantumszámmal a (31a) egyenlettel könnyen meghatározható. Mielőtt ezt megtennénk érdemes a (31a) *b* paraméterét kifejezni, ehhez felhasználjuk a (8) és (17) kifejezéseket, a végeredmény:

$$\frac{1}{b} = 4\left(n + \frac{3}{2}\right)^2. \tag{33}$$

Ha a (33)-t behelyettesítjük a (31a)-ba, majd néhány lépésben egyszerűsítjük az egyenletet, akkor a következő összefüggést kapjuk a kvantumszámok között:

$$\tilde{n} = \frac{n-l}{2}. \tag{34}$$

Viszont a (30)-ból tudjuk, hogy az $\tilde{n}$ értéke nullától skálázódik, nekünk azonban az atomfizikához hasonlatosan jobb lenne (főkvantumszám), ha 1-től skálázódna a radiális kvantumszám, ennek megfelelően vezessük be az $n_r = \tilde{n} + 1$ kvantumszámot, ezzel a (34) a következőképpen módosul:

$$n_r = \frac{n-l}{2} + 1, \tag{35}$$

amely már valóban az irodalomban szokásos összefüggés a kvantumszámok között.

Felmerül a kérdés, hogy ha egy adott rendszer állapotainak két különböző leírási módja is létezik, akkor hogyan lehet közöttük kapcsolatot teremteni? Más szavakkal, ha adott egy *n* kvantumszámmal jellemzett állapot, akkor ebben az esetben milyen *l* kvantumszámokkal jellemzett állapotok valósulhatnak meg?
A kérdés megválaszolásához az állapotot leíró hullámfüggvények tulajdonságát kell figyelembe vennünk. Az első és talán a legfontosabb szempont a tértükrözéssel szembeni viselkedése az állapotnak, azaz a paritás (P), ugyanis ezt a tulajdonságot leírási módtól függetlenül kell hordoznia a hullámfüggvényeknek. Először vizsgáljuk meg egy *n* állapot viselkedését a tértükrözéssel szemben. Ekkor a hullámfüggvény a (18)-nak megfelelő alakba írható

$$\hat{P}\Psi_{n_x n_y n_z}(x,y,z) = \Psi_{n_x n_y n_z}(-x,-y,-z) = Ne^{-\frac{1}{2}\left(\alpha_x^2+\alpha_y^2+\alpha_z^2\right)} H_{n_x}(-\alpha_x) H_{n_y}(-\alpha_y) H_{n_z}(-\alpha_z) \quad , \tag{36}$$

ahol kihasználtuk, hogy az α_i függvények a Descartes-koordináták lineáris függvényei, valamint, hogy az exponenciális komponens invariáns a tükrözésre. Az Hermite-polinomok tükrözési tulajdonsága viszont ismert: $H_n(-x) = (-1)^n H_n(x)$, ezt felhasználva a (36) könnyen kiértékelhető:

$$\begin{aligned}\hat{P}\Psi_{n_x n_y n_z}(x,y,z) &= (-1)^{n_x+n_y+n_z} Ne^{-\frac{1}{2}\left(\alpha_x^2+\alpha_y^2+\alpha_z^2\right)} H_{n_x}(\alpha_x) H_{n_y}(\alpha_y) H_{n_z}(\alpha_z) = \\ &= (-1)^n \Psi_{n_x n_y n_z}(x,y,z)\end{aligned} \tag{37}$$

A kapott eredményből látszik, hogy az oszcillátor állapot paritás-sajátállapot is, tehát egy *n* energia-sajátállapot paritása $(-1)^n$. Most vizsgáljuk meg egy *l* kvantumszámmal jellemezett állapot paritását, ehhez a (21) hullámfüggvényt kell vizsgálnunk:

$$\hat{P}\Psi_{lm}(\bar{r}) = \Psi_{lm}(-\bar{r}) = \frac{R_l(r)}{r} Y_l^m(\vartheta + \pi, \varphi + \pi) = (-1)^l \frac{R_l(r)}{r} Y_l^m(\vartheta, \varphi) = (-1)^l \Psi_{lm}(\bar{r}) \tag{38}$$

ahol az *r* változó invariáns a tértükrözésre, míg a paritás hatása a gömbfüggvényre $PY_l^m(\vartheta,\varphi) = (-1)^l Y_l^m(\vartheta,\varphi)$. Miután azt állapítottuk meg, hogy egy *n* kvantumszámmal jellem-zett állapotban csak olyan *l* állapotok valósulhatnak meg melyeknek a paritása azonos, ezen kvantumszámok között a (37) és (38) alapján definiálhatunk egy kiválasztási szabályt, mely szerint:

$$(-1)^n = (-1)^l \quad . \tag{39}$$

Az adott *n*-hez tartozó tényleges *l* értékeket az állapot degenerációs számából határozhatjuk meg. Legyen egy *n* állapotban l_1, l_2, l_3 stb. impulzusmomentummal jellemzett állapot, ekkor a kvantumszámok szerinti degenerációs számoknak meg kell egyezniük, azaz

$$(n+1)(n+2) = 2[(2l_1+1) + (2l_2+1) + (2l_3+1) + \ldots] \quad . \tag{40}$$

Az eddig megállapítottak alapján nézzük meg konkrét esetben, hogy adott *n* pályához milyen lehetséges *l* momentumok tartozhatnak: legyen *n*=0, ezen a pályán a degeneráció alapján 2 részecske lehet, a (39) feltétel értelmében az impulzusmomentum lehetséges értékei *l*=0,2,4…, viszont a (40) miatt csak az *l*=0 valósulhat meg, hiszen ennek a degeneráltsága már kimeríti az adott feltételt. Az *n*=1 pályán 6 részecske lehet, a paritás -1, ezért csak páratlan *l* értékekből választhatunk, *l*=1 esetén a degeneráció 6, ezzel megint kimerítettük a (40)-et. Az *n*=2 pálya paritása +1, degenerációja 12, így az *l* értékei csak párosak lehetnek (és nulla): ha *l*=0 akkor ebben az állapotban 2 részecske lehet, de még van tíz „hely", amelyet az *l*=2 mo-mentumú állapot be is tölt a 10-es degeneráltságával. Ezek alapján már lehet látni az *n* és a hozzá tartozó *l* kvantumszámok rendszerét, amelyet az 1. táblázatban foglalunk össze. A 2. táblázatban (35) összefüggés alapján az n_r radiális kvantumszám és az l, n kvantumszámok szisztematikáját mutatjuk be.

1.táblázat: Az egyes *n* pályákhoz tartozó *l* impulzusmomentum értékek

n	0	1	2	3	4	5
l	0	1	0, 2	1, 3	0, 2, 4	1, 3, 5

2.táblázat: Az n_r radiális kvantumszámok rendszere

n	*l*	n_r
0	0	1
1	1	1
2	0	2
	2	1
3	1	2
	3	1
4	0	3
	2	2
	4	1
5	1	3
	3	2
	5	1