遠心力ポテンシャル

動径方向のシュレディンガー方程式 (121) の第 3 項が遠心力であることの説明。

$\hat{\boldsymbol{L}}^2$ の固有値が $\ell(\ell+1)\hbar^2$ であることより、この項は波動関数 $\psi(\boldsymbol{r})$ に作用する演算子として

$$\frac{\ell(\ell+1)\hbar^2}{2\mu r^2}\psi(\boldsymbol{r}) = \frac{\hat{\boldsymbol{L}}^2}{2\mu r^2}\psi(\boldsymbol{r})$$

と書ける。以下、古典力学で中心力ポテンシャルを極座標表示すると、動径方向の運動エネルギー以外に上の表式に対応する項があらわれ、遠心力と解釈できることを示す。

位置座標 $\boldsymbol{r}$ にある古典粒子（質量 μ）が中心力ポテンシャル $V(r)$ 中で運動している。エネルギー E は運動エネルギーとポテンシャルエネルギーの和なので

$$E = \frac{1}{2}\mu\boldsymbol{v}^2 + V(r)$$

角運動量は

$$\boldsymbol{L} = \mu\boldsymbol{r}\times\boldsymbol{v}$$

成分で書くと

$$L_i = \mu\epsilon_{ijk}r_j v_k$$

よって角運動量の 2 乗は

$$\begin{aligned}
\boldsymbol{L}^2 &= \sum_i L_i L_i \\
&= \mu^2\sum_{ijk\ell m}\epsilon_{ijk}r_j v_k\epsilon_{i\ell m}r_\ell v_m \\
&= \mu^2\sum_{ijk\ell m}\epsilon_{ijk}\epsilon_{i\ell m}r_j v_k r_\ell v_m \\
&= \mu^2\sum_{jk\ell m}(\delta_{j\ell}\delta_{km}-\delta_{jm}\delta_{k\ell})r_j v_k r_\ell v_m \\
&= \mu^2\left(\sum_{jk\ell m}\delta_{j\ell}\delta_{km}r_j v_k r_\ell v_m - \sum_{jk\ell m}\delta_{jm}\delta_{k\ell}r_j v_k r_\ell v_m\right) \\
&= \mu^2\left(\sum_{jk}r_j v_k r_j v_k - \sum_{jk}r_j v_k r_k v_j\right) \\
&= \mu^2\boldsymbol{r}^2\boldsymbol{v}^2 - \mu^2(\boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{v})^2
\end{aligned}$$

これより

$$\frac{\boldsymbol{L}^2}{\mu r^2} = \mu\boldsymbol{v}^2 - \mu\left(\frac{\boldsymbol{r}}{r}\cdot\boldsymbol{v}\right)^2$$

であるが、$\boldsymbol{r}/r$ は $\boldsymbol{r}$ 方向の単位ベクトルなので、$\boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{v}/r$ は速度の r 方向成分である。これを v_r と書くと

$$\frac{\boldsymbol{L}^2}{\mu r^2} = \mu\boldsymbol{v}^2 - \mu v_r^2$$

となるので、運動エネルギーは

$$\frac{1}{2}\mu\boldsymbol{v}^2 = \frac{1}{2}\mu v_r^2 + \frac{\boldsymbol{L}^2}{2\mu r^2}$$

と書ける。よってエネルギーは

$$E = \frac{1}{2}\mu v_r^2 + \frac{\boldsymbol{L}^2}{2\mu r^2} + V(r)$$

とかける。中心力では角運動量が保存するので、第 1 項を（動径方向の）運動エネルギー、残りを有効ポテンシャルと見做した r に関する 1 次元運動と考えることができる。元のポテンシャル $V(r)$ に加えて、回転運動からくる

$$\frac{\boldsymbol{L}^2}{2\mu r^2}$$

がポテンシャルに追加されている。この項は常に正であることから斥力であり、r 方向の力を計算すると

$$F_r = -\frac{d}{dr}\frac{\boldsymbol{L}^2}{2\mu r^2} = \frac{\boldsymbol{L}^2}{\mu r^3}$$

等速円運動の場合、$v = r\omega$ で $\boldsymbol{v}$ と $\boldsymbol{r}$ が直交するので $|\boldsymbol{L}| = \mu r^2\omega$、これを代入して

$$F_r = \frac{(\mu r^2\omega)^2}{\mu r^3} = \mu r\omega^2 \quad \text{(等速円運動)}$$

となり、遠心力を表していることがわかる。

$1/r$ のラプラシアン

公式 (129)

$$\boldsymbol{\nabla}^2\frac{1}{r} = -4\pi\delta(\boldsymbol{r})$$

の説明。

ナイーブには、$r \neq 0$ のとき左辺が 0 になることと、ガウスの定理より

$$\int \boldsymbol{\nabla}^2\frac{1}{r}dV = \int \boldsymbol{\nabla}\frac{1}{r}\cdot\boldsymbol{n}dS = -\int\frac{\boldsymbol{r}}{r^3}\cdot\boldsymbol{n}dS = -\int\frac{1}{r^2}dS = -\frac{4\pi r^2}{r^2} = -4\pi$$

より、$r = 0$ の点で $-4\pi\delta(\boldsymbol{r})$ となることを示すが、この導出ではガウスの定理を特異性のある $\boldsymbol{r}/r^3$ という関数に使っており、厳密ではない。しかし最終的に同じ等式が得られるので、簡易的な説明としてよく使われる。

そもそも左辺は $r = 0$ で微分できないことから通常の関数として定義されておらず、超関数として考える必要がある。超関数[6]は、テスト関数をかけて積分した値を返す汎関数（関数から数への写像）として定義される。また、超関数の微分は、テスト関数の微分を通じて定義される。超関数として定義した式 (129) の意味は、$r = 0$ で正則な関数 $f(\boldsymbol{r})$ を用いて

$$\int d^3r\frac{1}{r}\boldsymbol{\nabla}^2 f(\boldsymbol{r}) = -4\pi\int d^3r\delta(\boldsymbol{r})f(\boldsymbol{r})$$

が成り立つことである。左辺のラプラシアンが $f(\boldsymbol{r})$ にかかることに注意。右辺は

$$-4\pi\int d^3rf(\boldsymbol{r})\delta(\boldsymbol{r}) = -4\pi f(\boldsymbol{0})$$

であるので、左辺がこれに等しいことを示す。原点を中心とした半径 ϵ の球領域を V_ϵ、全空間から V_ϵ を引いたものを V'_ϵ とすると

$$\int d^3r\frac{1}{r}\boldsymbol{\nabla}^2 f(\boldsymbol{r}) = \int_{V_\epsilon} d^3r\frac{1}{r}\boldsymbol{\nabla}^2 f(\boldsymbol{r}) + \int_{V'_\epsilon} d^3r\frac{1}{r}\boldsymbol{\nabla}^2 f(\boldsymbol{r})$$

右辺で $\epsilon \to 0$ の極限を取ると、第 1 項は（$f(\boldsymbol{r})$ が原点に特異性がないので）$\sim 4\pi\epsilon^3/3\epsilon$ となり消え、

$$\begin{aligned}
\int d^3rf(\boldsymbol{r})\boldsymbol{\nabla}^2\frac{1}{r} &= \lim_{\epsilon\to 0}\int_{V'_\epsilon} d^3r\frac{1}{r}\boldsymbol{\nabla}^2 f(\boldsymbol{r}) \\
&= \lim_{\epsilon\to 0}\int_{V'_\epsilon} d^3r\left[\boldsymbol{\nabla}\cdot\left\{\frac{1}{r}\boldsymbol{\nabla}f(\boldsymbol{r})\right\} - \left(\boldsymbol{\nabla}\frac{1}{r}\right)\cdot\boldsymbol{\nabla}f(\boldsymbol{r})\right] \\
&= \lim_{\epsilon\to 0}\int_{V'_\epsilon} d^3r\left[\boldsymbol{\nabla}\cdot\left\{\frac{1}{r}\boldsymbol{\nabla}f(\boldsymbol{r})\right\} - \boldsymbol{\nabla}\cdot\left\{\left(\boldsymbol{\nabla}\frac{1}{r}\right)f(\boldsymbol{r})\right\} + \left(\boldsymbol{\nabla}^2\frac{1}{r}\right)f(\boldsymbol{r})\right]
\end{aligned}$$

[6]超関数についてはライトヒル「フーリエ解析と超関数」（ダイヤモンド社）などを参照。

V'_ϵ では $r \neq 0$ なので第 3 項は $\boldsymbol{\nabla}^2 r^{-1}$ が常にゼロで消える。また、$r \neq 0$ より第 1,2 項の被積分関数に特異性はないのでガウスの定理と $\boldsymbol{\nabla} r^{-1} = -\boldsymbol{r}/r^3$ が使え、

$$\int d^3 r f(\boldsymbol{r}) \boldsymbol{\nabla}^2 \frac{1}{r} = \lim_{\epsilon \to 0} \int_{\partial V'_\epsilon} dS \boldsymbol{n} \cdot \left[\frac{1}{r} \boldsymbol{\nabla} f(\boldsymbol{r}) - \frac{\boldsymbol{r}}{r^3} f(\boldsymbol{r}) \right]$$

ここで $\partial V'_\epsilon$ は半径 ϵ の球面で $\boldsymbol{n}$ は $\partial V'_\epsilon$ の法線ベクトルである。第 1 項は（$f(\boldsymbol{r})$ が原点に特異性がないので）$\epsilon \to 0$ で $\sim 4\pi\epsilon^2/\epsilon$ となり消え、第 2 項は $\boldsymbol{n} \cdot \boldsymbol{r} = r$ に注意すると

$$\begin{aligned}
\int d^3 r f(\boldsymbol{r}) \boldsymbol{\nabla}^2 \frac{1}{r} &= -\lim_{\epsilon \to 0} \int_{\partial V'_\epsilon} dS \frac{f(\boldsymbol{r})}{r^2} \\
&= -\lim_{\epsilon \to 0} \frac{4\pi\epsilon^2}{\epsilon^2} \left. f(\boldsymbol{r}) \right|_{|\boldsymbol{r}|=\epsilon} \\
&= -4\pi f(\boldsymbol{0})
\end{aligned}$$

となる。これは右辺に一致する。