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

$$E = \frac{1}{2}\mu \boldsymbol{v}^2 + V(r) \tag{C23}$$

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（$r = |\boldsymbol{r}|$）

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

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 $\boldsymbol{v}$ 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。よって式 (C23) のエネルギーは

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

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[7]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

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

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、

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

[7]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。

球ベッセル関数、球ノイマン関数の漸近形

球ベッセル関数、球ノイマン関数の $r \to 0$ での漸近形 (142)、(143) の説明。

演算子 $z^{-1}(d/dz)$ を z のべき乗に作用させると

$$\left(\frac{1}{z}\frac{d}{dz}\right) z^n = \begin{cases} \dfrac{1}{z} n z^{n-1} = n z^{n-2} & (n \neq 0) \\ 0 & (n = 0) \end{cases}$$

より、定数（$n=0$）の場合は 0 になるが、それ以外の場合 z のべきを 2 減らす。球ベッセル関数でこの演算子が作用するのは

$$\begin{aligned} \frac{\sin z}{z} &= \frac{1}{z}\sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n}{(2n+1)!} z^{2n+1} \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n}{(2n+1)!} z^{2n} \\ &= 1 + \frac{(-1)}{3!} z^2 + \frac{(-1)^2}{5!} z^4 + \cdots \end{aligned}$$

であり、これは偶数べきのみを含んでいる。$z^{-1}(d/dz)$ を作用させると定数項が消え、残りの項のべきが 2 下り、全体として定数（z^0）から始まる z の偶数べきの形になる。これを ℓ 回繰り返しても同様なので、z の最低次は定数になることがわかる。よって球ベッセル関数の定義で $(-z)^\ell$ をかけると式 (142) が確認できる。具体的に係数を計算するには、

$$\begin{aligned} \left(\frac{1}{z}\frac{d}{dz}\right) \frac{\sin z}{z} &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n}{(2n+1)!} \left(\frac{1}{z}\frac{d}{dz}\right) z^{2n} \\ &= \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-1)^n}{(2n+1)!} 2n z^{2n-2} \\ &= \frac{(-1)}{3!} 2 + \frac{(-1)^2}{5!} 4 z^2 + \cdots \\ \left(\frac{1}{z}\frac{d}{dz}\right)^2 \frac{\sin z}{z} &= \sum_{n=2}^{\infty} \frac{(-1)^n}{(2n+1)!} 2n(2n-2) z^{2n-4} \\ &= \frac{(-1)^2}{5!} 4 \cdot 2 + \frac{(-1)^3}{7!} 6 \cdot 4 z^2 + \cdots \\ \left(\frac{1}{z}\frac{d}{dz}\right)^\ell \frac{\sin z}{z} &= \sum_{n=\ell}^{\infty} \frac{(-1)^n}{(2n+1)!} 2n(2n-2)\cdots(2n-2(\ell-1)) z^{2n-2\ell} \\ &= \frac{(-1)^\ell}{(2\ell+1)!} 2\ell(2\ell-2)\cdots 2 + \mathcal{O}(z^2) \end{aligned}$$

となる。この定数は

$$
\begin{aligned}
\frac{(-1)^\ell}{(2\ell+1)!}2\ell(2\ell-2)\cdots 2 &= (-1)^\ell \frac{2\ell(2\ell-2)\cdots 2}{(2\ell+1)(2\ell)(2\ell-1)(2\ell-2)\cdots 3\cdot 2\cdot 1} \\
&= (-1)^\ell \frac{1}{(2\ell+1)(2\ell-1)\cdots 3\cdot 1} \\
&= (-1)^\ell \frac{1}{(2\ell+1)!!}
\end{aligned}
$$

とかける。ここで二重階乗は

$$
(2n+1)!! = \prod_{k=0}^{n}(2k+1) = (2n+1)(2n-1)\cdots 3\cdot 1, \quad -1!! = 1
$$

で定義される。よって式 (140) の球ベッセル関数 $j_\ell(z)$ の $z \to 0$ の振る舞いは

$$
\begin{aligned}
j_\ell(z) &= (-z)^\ell \left(\frac{1}{z}\frac{d}{dz}\right)^\ell \left(\frac{\sin z}{z}\right) \\
&= (-1)^\ell z^\ell \left[(-1)^\ell \frac{1}{(2\ell+1)!!} + \mathcal{O}(z^2)\right] \\
&= \frac{1}{(2\ell+1)!!} z^\ell + \mathcal{O}(z^2)
\end{aligned}
$$

となり、式 (142) の係数を決めることができる。

一方

$$
\begin{aligned}
\frac{\cos z}{z} &= \frac{1}{z}\sum_{n=0}^{\infty}\frac{(-1)^n}{(2n)!}z^{2n} \\
&= \sum_{n=0}^{\infty}\frac{(-1)^n}{(2n)!}z^{2n-1} \\
&= z^{-1} + \frac{(-1)}{2!}z + \frac{(-1)^2}{4!}z^3 + \cdots
\end{aligned}
$$

であり、これは奇数べきのみを含んでいる。$z^{-1}(d/dz)$ を作用させると全ての項のべきが 2 下り、z^{-3} から始まる z の奇数べきの形になる。球ベッセル関数の場合と異なり、定数を含まないため最低次数が小さくなることに注意。これを ℓ 回繰り返すと z の最低次は $z^{-1-2\ell}$ になることがわかる。よって球ノイマン関数の定義で $-(-z)^\ell$ をかけると式 (142) が確認できる。具体的には

$$
\begin{aligned}
\left(\frac{1}{z}\frac{d}{dz}\right)\frac{\cos z}{z} &= \sum_{n=0}^{\infty}\frac{(-1)^n}{(2n)!}(2n-1)z^{2n-3} \\
&= (-1)z^{-3} + \frac{(-1)}{2!}1z^{-1} + \frac{(-1)^2}{4!}3z^1 + \cdots \\
\left(\frac{1}{z}\frac{d}{dz}\right)^2\frac{\cos z}{z} &= \sum_{n=2}^{\infty}\frac{(-1)^n}{(2n)!}(2n-1)(2n-3)z^{2n-5}
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
&= (-1)(-3)z^{-5} + \frac{(-1)}{2!}1(-1)z^{-3} + \frac{(-1)^2}{4!}3\cdot 1 z^{-1} + \cdots \\
\left(\frac{1}{z}\frac{d}{dz}\right)^{\ell}\frac{\sin z}{z} &= \sum_{n=0}^{\infty}\frac{(-1)^n}{(2n)!}(2n-1)(2n-3)\cdots(2n-1-2(\ell-1))z^{2n-1-2\ell} \\
&= (-1)(-3)\cdots(-1-2(\ell-1))z^{-1-2\ell} + \mathcal{O}(z^{1-2\ell})
\end{aligned}
$$

となる。最低次の係数は

$$
\begin{aligned}
(-1)(-3)\cdots(-1-2(\ell-1)) &= \underbrace{(-1)(-3)\cdots(1-2\ell)}_{\ell\text{個}} \\
&= (-1)^{\ell}(2\ell-1)(2\ell-3)\cdots 3\cdot 1 \\
&= (-1)^{\ell}(2\ell-1)!!
\end{aligned}
$$

となる。よって式 (140) の球ノイマン関数 $n_\ell(z)$ の $z\to 0$ の振る舞いは

$$
\begin{aligned}
n_\ell(z) &= -(-z)^{\ell}\left(\frac{1}{z}\frac{d}{dz}\right)^{\ell}\left(\frac{\cos z}{z}\right) \\
&= -(-1)^{\ell}z^{\ell}\left[(-1)^{\ell}(2\ell-1)!!z^{-1-2\ell} + \mathcal{O}(z^{1-2\ell})\right] \\
&= -(2\ell-1)!!z^{-\ell-1} + \mathcal{O}(z^{-\ell+1})
\end{aligned}
$$

となり、式 (142) の係数を決めることができる。