

A.13 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 (A21) の第3項が遠心力であることの説明。

$\hat{L}^2$ 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 $\psi(\mathbf{r})$ に作用する演算子として

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

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 $\mathbf{r}$ 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

$$E = \frac{1}{2}\mu\mathbf{v}^2 + V(r) \quad (\text{A23})$$

角運動量は

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

成分で書くと

$$L_i = \mu\epsilon_{ijk}r_jv_k$$

よって角運動量の2乗は

$$\begin{aligned} L^2 &= \sum_i L_i L_i \\ &= \mu^2 \sum_{ijk\ell m} \epsilon_{ijk}r_jv_k\epsilon_{i\ell m}r_\ell v_m \\ &= \mu^2 \sum_{ijk\ell m} \epsilon_{ijk}\epsilon_{i\ell m}r_jv_kr_\ell v_m \\ &= \mu^2 \sum_{jklm} (\delta_{j\ell}\delta_{km} - \delta_{jm}\delta_{k\ell})r_jv_kr_\ell v_m \\ &= \mu^2 \left(\sum_{jklm} \delta_{j\ell}\delta_{km}r_jv_kr_\ell v_m - \sum_{jklm} \delta_{jm}\delta_{k\ell}r_jv_kr_\ell v_m \right) \\ &= \mu^2 \left(\sum_{jk} r_jv_kr_jv_k - \sum_{jk} r_jv_kr_kv_j \right) \\ &= \mu^2\mathbf{r}^2\mathbf{v}^2 - \mu^2(\mathbf{r} \cdot \mathbf{v})^2 \end{aligned}$$

これより ($r = |\mathbf{r}|$)

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

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

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

となるので、運動エネルギーは

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

と書ける。よって式 (A23) のエネルギーは

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

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

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

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

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

等速円運動の場合、 $v = r\omega$ で $\mathbf{v}$ と $\mathbf{r}$ が直交するので $|\mathbf{L}| = \mu r^2 \omega$ 、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。

A.14 $1/r$ のラプラシアン

公式 (129)

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

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

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

より、 $r = 0$ の点で $-4\pi\delta(\mathbf{r})$ 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 $\mathbf{r}/r^3$ 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 $f(\mathbf{r})$ を用いて

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

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

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

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

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

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

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

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 $\nabla^2 r^{-1}$ 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 $\nabla r^{-1} = -\mathbf{r}/r^3$ が使える、

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

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

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

となる。これは右辺に一致する。

A.15 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 $r \rightarrow 0$ での漸近形 (143)、(144) の説明。

演算子 $z^{-1}(d/dz)$ を z のべき乗に作用させると

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

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

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

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 (143) が確認できる。具体的に係数を計算するには、

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

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 (141) の球ベッセル関数 $j_\ell(z)$ の $z \rightarrow 0$ 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 (143) 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 (143) が確認できる。具体的には

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

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

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 (141) の球ノイマン関数 $n_\ell(z)$ の $z \rightarrow 0$ の振る舞いは

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

となり、式 (143) の係数を決めることができる。