角運動量 —それでも地球は回っている—

角運動量演算子と Δ

中心力ポテンシャルの議論で，角度座標 θ, ϕ に関する部分 $Y(\theta,\phi)$ の微分方程式が以下のようになることを導いた．

$$\left[\frac{\partial^2 Y}{\partial\theta^2}+\frac{\cos\theta}{\sin\theta}\frac{\partial Y}{\partial\theta}+\frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2 Y}{\partial\phi^2}\right]=-\lambda Y\quad(\lambda\text{ は定数})$$

この方程式を数学的に解いていくことは可能だが，物理的意味をよりはっきりさせるために角運動量の演算子を考える．$\vec{L}=\vec{r}\times\vec{p}$ より

$$\hat{L}_x=y\hat{p}_z-z\hat{p}_y\ ,\quad \hat{L}_y=z\hat{p}_x-x\hat{p}_z\ ,\quad \hat{L}_z=x\hat{p}_y-y\hat{p}_x$$

これらの間には次の交換関係が成立する．

$$[L_x\ ,\ L_y]=i\hbar L_z\ ,\quad [L_y\ ,\ L_z]=i\hbar L_z\ ,\quad [L_z\ ,\ L_x]=i\hbar L_y$$

角運動量演算子を具体的に微分を用いて表現すると以下のようになる．

$$\begin{aligned}
\hat{L}_x &= -i\hbar\left[y\frac{\partial}{\partial z}-z\frac{\partial}{\partial y}\right]\\
&= -i\hbar\left[r\sin\theta\sin\phi\left(\cos\theta\frac{\partial}{\partial r}-\frac{\sin\theta}{r}\frac{\partial}{\partial\theta}\right)-r\cos\theta\left(\sin\theta\sin\phi\frac{\partial}{\partial r}+\frac{\cos\theta\sin\phi}{r}\frac{\partial}{\partial\theta}+\frac{\cos\phi}{r\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\phi}\right)\right]\\
&= -i\hbar\left[-\sin\phi\frac{\partial}{\partial\theta}-\frac{\cos\theta\cos\phi}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\phi}\right]\ ,\\
\hat{L}_y &= -i\hbar\left[z\frac{\partial}{\partial x}-x\frac{\partial}{\partial z}\right]=-i\hbar\left[\cos\phi\frac{\partial}{\partial\theta}-\frac{\cos\theta\sin\phi}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\phi}\right]\ ,\\
\hat{L}_z &= -i\hbar\left[x\frac{\partial}{\partial y}-y\frac{\partial}{\partial z}\right]=-i\hbar\frac{\partial}{\partial\phi}
\end{aligned}$$

後のために $\hat{L}_\pm=\hat{L}_x\pm i\hat{L}_y$ も計算しておくと

$$\hat{L}_+=\hat{L}_x+i\hat{L}_y=\hbar e^{i\phi}\left[\frac{\partial}{\partial\theta}+i\frac{\cos\theta}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\phi}\right]\quad,\quad \hat{L}_-=\hat{L}_x-i\hat{L}_y=\hbar e^{-i\phi}\left[-\frac{\partial}{\partial\theta}+i\frac{\cos\theta}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\phi}\right]$$

ここで

$$\begin{aligned}
\hat{L}_+\hat{L}_- &= (\hat{L}_x+i\hat{L}_y)(\hat{L}_x-i\hat{L}_y)=\hat{L}_x^2+\hat{L}_y^2-i[\hat{L}_x,\hat{L}_y]=\hat{L}_x^2+\hat{L}_y^2+\hbar\hat{L}_z\\
&= \hbar e^{i\phi}\left[\frac{\partial}{\partial\theta}+i\frac{\cos\theta}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\phi}\right]\hbar e^{-i\phi}\left[-\frac{\partial}{\partial\theta}+i\frac{\cos\theta}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\phi}\right]\\
&= \hbar^2\left[\frac{\partial}{\partial\theta}+i\frac{\cos\theta}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\phi}+\frac{\cos\theta}{\sin\theta}\right]\left[-\frac{\partial}{\partial\theta}+i\frac{\cos\theta}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\phi}\right]\\
&= \hbar^2\left[-\frac{\partial^2}{\partial\theta^2}-i\frac{\cos\theta}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\phi}\frac{\partial}{\partial\theta}-\frac{\cos\theta}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}-\frac{i}{\sin^2\theta}\frac{\partial}{\partial\phi}+i\frac{\cos\theta}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\frac{\partial}{\partial\phi}-\frac{\cos^2\theta}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}+i\frac{\cos^2\theta}{\sin^2\theta}\frac{\partial}{\partial\phi}\right]\\
&= \hbar^2\left[-\frac{\partial^2}{\partial\theta^2}-\frac{\cos\theta}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}-\frac{\cos^2\theta}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}-i\frac{\partial}{\partial\phi}\right]
\end{aligned}$$

よって

$$\begin{aligned}\hat{\vec{L}}^2 &= \hat{L}_x^2+\hat{L}_y^2+\hat{L}_z^2 = L_+L_- - \hbar\hat{L}_z+\hat{L}_z^2 \\ &= -\hbar^2\left[\frac{\partial^2}{\partial\theta^2}+\frac{\cos\theta}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}+\frac{\cos^2\theta}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}+\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}\right] = -\hbar^2\left[\frac{\partial^2}{\partial\theta^2}+\frac{\cos\theta}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}+\frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}\right]\end{aligned}$$

すなわち

$$\hat{\vec{L}}^2 Y = \hbar^2\lambda Y$$

が成立し，$Y, \hbar^2\lambda$ は，それぞれ角運動量の二乗の固有関数，固有値になっていることがわかる．この微分方程式を具体的に解いて Y を求めてもよいが (数学的補足を参照せよ)，計算が複雑なので以下では別の方法で固有関数と固有値を求める．

<u>角運動量の固有状態</u>

まず，求めた $\hat{\vec{L}}^2$ と $\hat{L}_z$ を見て $[\hat{\vec{L}}^2, \hat{L}_z] = 0$ であることがわかる．この場合のように，**2 つの演算子 $\hat{A}$, $\hat{B}$ が交換可能であるとき，同時に $\hat{A}$, $\hat{B}$ 双方の固有状態であるような状態 (波動関数) をとることができる．これを同時固有状態という．**行列の言葉で表現すれば，エルミート行列 A, B を同時に対角化するユニタリー行列が存在することになる．$\vec{J}^2 = \hat{\vec{L}}^2/\hbar^2$ と $J_z = \hat{L}_z/\hbar$ の同時固有状態を考え，$\vec{J}^2$ の固有値を λ，J_z の固有値を m とし，それを $|\lambda, m\rangle$ と表すことにする．(取扱いを簡単にするため，常に現れる定数 $\hbar$ の部分を除いた．)

$$\vec{J}^2|\lambda,m\rangle = \lambda|\lambda,m\rangle\ ,\quad J_z|\lambda,m\rangle = m|\lambda,m\rangle\ ,\ \ \langle\lambda,m|\lambda',m'\rangle = \delta_{\lambda,\lambda'}\delta_{mm'}$$

ここで $|\lambda,m\rangle$ に $J_\pm = \hat{L}_\pm/\hbar$ を作用させてみる．交換関係に留意して計算すると

$$\begin{aligned} J_+J_z|\lambda,m\rangle &= (J_x+iJ_y)J_z|\lambda,m\rangle \\ J_+(m|\lambda,m\rangle) &= \{J_zJ_x - iJ_y + i(J_zJ_y+iJ_x)\}|\lambda,m\rangle \\ mJ_+|\lambda,m\rangle &= \{J_z(J_x+iJ_y)-(J_x+iJ_y)\}|\lambda,m\rangle = (J_z-1)J_+|\lambda,m\rangle \\ J_z(J_+|\lambda,m\rangle) &= (m+1)(J_+|\lambda,m\rangle)\end{aligned}$$

すなわち，$J_+|\lambda,m\rangle$ は J_z の固有値 $m+1$ の固有状態になっている．$[\vec{J}^2, J_\pm]=0$ なので，$\vec{J}^2$ の固有値は変わらない．同様にして $J_-|\lambda,m\rangle$ は J_z の固有値 $m-1$ の固有状態になっている．

$$J_+|\lambda,m\rangle = C_m^+|\lambda,m+1\rangle\ ,\quad J_-|\lambda,m\rangle = C_m^-|\lambda,m-1\rangle$$

一方

$$0 \le \langle\lambda,m|(J_x^2+J_y^2)|\lambda,m\rangle = \langle\lambda,m|(\vec{J}^2-J_z^2)|\lambda,m\rangle = (\lambda-m^2)$$

よって $|m|\le\sqrt{\lambda}$ であり，m のとりうる値には制限があることがわかる．$|\lambda,m\rangle$ に J_+ または J_- を何度も作用させていくと，J_z の固有値は 1 ずつ変化していくが，この制限によりどこかで

$$J_+|\lambda,m_{max}\rangle = 0\ \ ,\ \ J_-|\lambda,m_{min}\rangle = 0$$

とならねばならない．(さもないと制限を超えた m の値になってしまう．) そのような状態を考えると

$$\begin{aligned} 0 &= J_-J_+|\lambda,m_{max}\rangle = (\vec{J}^2-J_z^2-J_z)|\lambda,m_{max}\rangle = (\lambda-m_{max}^2-m_{max})|\lambda,m_{max}\rangle \\ 0 &= J_+J_-|\lambda,m_{min}\rangle = (\vec{J}^2-J_z^2+J_z)|\lambda,m_{min}\rangle = (\lambda-m_{min}^2+m_{min})|\lambda,m_{min}\rangle\end{aligned}$$

これより

$$m_{max}^2+m_{max}=\lambda=m_{min}^2-m_{min}\ \Rightarrow\ (m_{max}+m_{min})(m_{max}-m_{min}+1)=0$$

$m_{max}\geq m_{min}$ なので $m_{max}=-m_{min}$ となる．m の値は 1 ずつの変化なので，結局取りうる値は

$$m_{max}\ ,\ m_{max}-1\ ,\ldots\ ,\ -m_{max}+1\ ,\ -m_{max}$$

となり，m_{max} から 0 以上の整数 (引き算の回数) を引いたものが $-m_{max}$ となるので，$m_{max}-k=-m_{max}$ (k は 0 以上の整数)，$m_{max}=k/2$ が得られ，m のとりうる値は整数もしくは半奇数となる．また，このとき

$$\lambda=m_{max}^2+m_{max}=m_{max}(m_{max}+1)$$

となり，これも制限される．

前に出した $J_\pm|\lambda,m\rangle=C_m^\pm|\lambda,m\pm1\rangle$ の $C_m^\pm$ を求める．$(J_+)^\dagger=J_-$ であることを用いて

$$\begin{aligned}
|C_m^+|^2\langle\lambda,m+1|\lambda,m+1\rangle &= \langle\lambda,m|J_-J_+|\lambda,m\rangle=\langle\lambda,m|(\vec{J}^2-J_z^2-J_z)|\lambda,m\rangle=(\lambda^2-m^2-m)\\
|C_m^+| &= \sqrt{m_{max}(m_{max}+1)-m^2-m}=\sqrt{(m_{max}-m)(m_{max}+m+1)}\\
|C_m^-|^2\langle\lambda,m-1|\lambda,m-1\rangle &= \langle\lambda,m|J_-J_+|\lambda,m\rangle=\langle\lambda,m|(\vec{J}^2-J_z^2+J_z)|\lambda,m\rangle=(\lambda^2-m^2+m)\\
|C_m^-| &= \sqrt{m_{max}(m_{max}+1)-m^2+m}=\sqrt{(m_{max}+m)(m_{max}-m+1)}
\end{aligned}$$

m のとりうる値は整数または半奇数であることは示したが，実際に元の微分方程式を解くと，整数値しかあり得ないことがわかる．ここで議論した角運動量は粒子がある中心の周りを運動する場合の角運動量であって，軌道角運動量とよばれる．それ以外にも，粒子が固有の角運動量を持つことがあり，それをスピンという．スピンの場合は半奇数の角運動量が可能となる．たとえば電子のスピンでは $m_{max}=1/2$ になる．(軌道角運動量が太陽の周りの地球の公転のようなイメージであり，スピンは自転のイメージとよくいわれる．しかし，電子などの素粒子は大きさを持たないので実際に自転しているのでは無く，スピンは相対論の効果を考えることで導かれるものである．)

角運動量の合成

二つの独立な各運動量演算子 $\vec{J}_1$ と $\vec{J}_2$ を考える．($[\vec{J}_1,\vec{J}_2]=0$) $(\vec{J}_1)^2$, J_{1z}, $(\vec{J}_2)^2$, J_{2z} は互いに交換可能なので，同時固有状態として $|\ell_1,m_1\rangle|\ell_2,m_2\rangle$ をとる．($\ell_i=m_{max}$) この状態に対して演算子 $\vec{J}_1$ は前のケットだけに，$\vec{J}_2$ は後ろのケットだけに作用する．例えば α,β を定数として，

$$\begin{aligned}
J_{1i}J_{2j}|\ell_1,m_1\rangle|\ell_2,m_2\rangle &= (J_{1i}|\ell_1,m_1\rangle)(J_{2j}|\ell_2,m_2\rangle)\\
(\alpha J_{1i}+\beta J_{2j})|\ell_1,m_1\rangle|\ell_2,m_2\rangle &= \alpha(J_{1i}|\ell_1,m_1\rangle)|\ell_2,m_2\rangle+\beta|\ell_1,m_1\rangle(J_{2j}|\ell_2,m_2\rangle)
\end{aligned}$$

である．(このような状態を，状態 $|\ell_1,m_1\rangle$ と状態 $|\ell_2,m_2\rangle$ の直積といい，$|\ell_1,m_1\rangle\otimes|\ell_2,m_2\rangle$ と表すことがある．) 一方，$\vec{J}=\vec{J}_1+\vec{J}_2$ とすると，$(\vec{J})^2$, J_z, $(\vec{J}_1)^2$, $(\vec{J}_2)^2$ も互いに交換可能なので，それらの固有値を用いて $|\ell,m;\ell_1,\ell_2\rangle$ という状態を考えることもできる．完全性から，これらの状態の間には以下の関係が成立する．

$$\begin{aligned}
|\ell,m;\ell_1,\ell_2\rangle &= \sum_{\ell_1,m_1,\ell_2,m_2}|\ell_1,m_1\rangle|\ell_2,m_2\rangle\langle\ell_1,m_1|\langle\ell_2,m_2|\ell,m;\ell_1,\ell_2\rangle\\
&= \sum_{\ell_1,m_1,\ell_2,m_2}(\langle\ell_1,m_1|\langle\ell_2,m_2|\ell,m;\ell_1,\ell_2\rangle)|\ell_1,m_1\rangle|\ell_2,m_2\rangle\\
&\equiv \sum_{\ell_1,m_1,\ell_2,m_2}C^{\ell,m}_{\ell_1,m_1,\ell_2,m_2}|\ell_1,m_1\rangle|\ell_2,m_2\rangle
\end{aligned}$$

ここで現れた係数 $C_{\ell_1,m_1,\ell_2,m_2}$ はクレプシュ・ゴルダン係数とよばれる．$J_z = J_{1z} + J_{2z}$ を両辺に作用させると

$$
\begin{aligned}
J_z|\ell,m;\ell_1,\ell_2\rangle &= (J_{1z}+J_{2z})\sum_{\ell_1,m_1,\ell_2,m_2} C^{\ell,m}_{\ell_1,m_1,\ell_2,m_2}|\ell_1,m_1\rangle|\ell_2,m_2\rangle \\
m|\ell,m;\ell_1,\ell_2\rangle &= \sum_{\ell_1,m_1,\ell_2,m_2} C^{\ell,m}_{\ell_1,m_1,\ell_2,m_2}(J_{1z}|\ell_1,m_1\rangle|\ell_2,m_2\rangle + |\ell_1,m_1\rangle J_{2z}|\ell_2,m_2\rangle) \\
&= \sum_{\ell_1,m_1,\ell_2,m_2} C^{\ell,m}_{\ell_1,m_1,\ell_2,m_2}(m_1|\ell_1,m_1\rangle|\ell_2,m_2\rangle + m_2|\ell_1,m_1\rangle|\ell_2,m_2\rangle) \\
&= \sum_{\ell_1,m_1,\ell_2,m_2} C^{\ell,m}_{\ell_1,m_1,\ell_2,m_2}(m_1+m_2)|\ell_1,m_1\rangle|\ell_2,m_2\rangle
\end{aligned}
$$

よって和 $\displaystyle\sum_{\ell_1,m_1,\ell_2,m_2}$ は $m_1+m_2=m$ の制限が付いているものとして行う．

ℓ_1, ℓ_2 を固定して，最も大きな m の値の場合を考えると，$m=\ell=m_1+m_2=\ell_1+\ell_2$ の場合しかないので

$$|\ell,\ell;\ell_1,\ell_2\rangle = |\ell_1,\ell_1\rangle|\ell_2,\ell_2\rangle$$

この右辺は $(\vec{J}_1+\vec{J}_2)^2$ の固有値 $(\ell_1+\ell_2)(\ell_1+\ell_2+1)$ の固有状態になっている．両辺に $J_- = J_{1-}+J_{2-}$ を作用させる．

$$
\begin{aligned}
J_-|\ell,\ell;\ell_1,\ell_2\rangle &= J_{1-}|\ell_1,\ell_1\rangle|\ell_2,\ell_2\rangle + |\ell_1,\ell_1\rangle J_{2-}|\ell_2,\ell_2\rangle \\
\sqrt{(\ell+\ell)(\ell-\ell+1)}|\ell,\ell-1;\ell_1,\ell_2\rangle &= \sqrt{(\ell_1+\ell_1)(\ell_1-\ell_1+1)}|\ell_1,\ell_1-1\rangle|\ell_2,\ell_2\rangle \\
&\quad +\sqrt{(\ell_2+\ell_2)(\ell_2-\ell_2+1)}|\ell_1,\ell_1\rangle|\ell_2,\ell_2-1\rangle \\
|\ell,\ell-1;\ell_1,\ell_2\rangle &= \sqrt{\frac{\ell_1}{\ell}}|\ell_1,\ell_1-1\rangle|\ell_2,\ell_2\rangle + \sqrt{\frac{\ell_2}{\ell}}|\ell_1,\ell_1\rangle|\ell_2,\ell_2-1\rangle
\end{aligned}
$$

これで $|\ell,\ell-1;\ell_1,\ell_2\rangle$ の状態をつくることができた．同様にして J_- を作用させていくことにより，$|\ell,\ell-2;\ell_1,\ell_2\rangle$, $|\ell,\ell-3;\ell_1,\ell_2\rangle$, $\ldots$, $|\ell,-\ell;\ell_1,\ell_2\rangle$ までの状態 $(2\ell+1$ 個$)$ を作ることができる．

次に $\sqrt{\frac{\ell_1}{\ell}}|\ell_1,\ell_1-1\rangle|\ell_2,\ell_2\rangle + \sqrt{\frac{\ell_2}{\ell}}|\ell_1,\ell_1\rangle|\ell_2,\ell_2-1\rangle$ に直交する状態として

$$\sqrt{\frac{\ell_2}{\ell}}|\ell_1,\ell_1-1\rangle|\ell_2,\ell_2\rangle - \sqrt{\frac{\ell_1}{\ell}}|\ell_1,\ell_1\rangle|\ell_2,\ell_2-1\rangle$$

を考える．これに $(\vec{J}_1+\vec{J}_2)^2 = (\vec{J}_1)^2 + (\vec{J}_2)^2 + J_{1+}J_{2-} + J_{1-}J_{2+} + 2J_{1z}J_{2z}$ を作用させると

$$
\begin{aligned}
&(\vec{J}_1+\vec{J}_2)^2[\sqrt{\frac{\ell_2}{\ell}}|\ell_1,\ell_1-1\rangle|\ell_2,\ell_2\rangle - \sqrt{\frac{\ell_1}{\ell}}|\ell_1,\ell_1\rangle|\ell_2,\ell_2-1\rangle] \\
=\ & \sqrt{\frac{\ell_2}{\ell}}\{\ell_1(\ell_1+1)+\ell_2(\ell_2+1)+2(\ell_1-1)\ell_2\}|\ell_1,\ell_1-1\rangle|\ell_2,\ell_2\rangle \\
&+\sqrt{\frac{\ell_2}{\ell}}\sqrt{(\ell_1-\ell_1+1)(\ell_1+\ell_1-1+1)}\sqrt{(\ell_2+\ell_2)(\ell_2-\ell_2+1)}|\ell_1,\ell_1\rangle|\ell_2,\ell_2-1\rangle \\
&-\sqrt{\frac{\ell_1}{\ell}}\{\ell_1(\ell_1+1)+\ell_2(\ell_2+1)+2\ell_1(\ell_2-1)\}|\ell_1,\ell_1\rangle|\ell_2,\ell_2-1\rangle \\
&-\sqrt{\frac{\ell_1}{\ell}}\sqrt{(\ell_1+\ell_1)(\ell_1-\ell_1+1)}\sqrt{(\ell_2-\ell_2+1)(\ell_2+\ell_2-1+1)}|\ell_1,\ell_1-1\rangle|\ell_2,\ell_2\rangle \\
=\ & (\ell_1+\ell_2-1)(\ell_1+\ell_2)[\sqrt{\frac{\ell_2}{\ell}}|\ell_1,\ell_1-1\rangle|\ell_2,\ell_2\rangle - \sqrt{\frac{\ell_1}{\ell}}|\ell_1,\ell_1\rangle|\ell_2,\ell_2-1\rangle]
\end{aligned}
$$

となって，固有値 $(\ell_1+\ell_2-1)(\ell_1+\ell_2)$ の固有状態である．これに J_- を何度も作用させれば，$|\ell-1,\ell-1;\ell_1,\ell_2\rangle$, $|\ell-1,\ell-2;\ell_1,\ell_2\rangle$, ..., $|\ell-1,-(\ell-1);\ell_1,\ell_2\rangle$ までの状態 ($2\ell-1$ 個) を作ることができる．

さらにこのやり方を進めていくと，

m_{max}	とりうる m	状態の数
$\ell=\ell_1+\ell_2$	$\ell,\ell-1,\ldots,-\ell$	$2\ell+1$
$\ell-1$	$\ell-1,\ell-2,\ldots,-\ell+1$	$2\ell-1$
$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$
$\lvert\ell_1-\ell_2\rvert$	$\lvert\ell_1-\ell_2\rvert,\lvert\ell_1-\ell_2\rvert-1,\ldots,-\lvert\ell_1-\ell_2\rvert$	$2\lvert\ell_1-\ell_2\rvert+1$

となり，元々 $(2\ell_1+1)(2\ell_2+1)$ 個あった可能な状態が，$\ell_1\geq\ell_2$ として，

$$\begin{aligned}\sum_{k=|\ell_1-\ell_2|}^{\ell_1+\ell_2}(2k+1) &= (\ell_1+\ell_2)(\ell_1+\ell_2+1)-(\ell_1-\ell_2-1)(\ell_1-\ell_2)+(\ell_1+\ell_2)-(\ell_1-\ell_2)+1 \\ &= 4\ell_1\ell_2+2\ell_1+2\ell_2+1=(2\ell_1+1)(2\ell_2+1)\end{aligned}$$

で尽くされることがわかる．すなわち，$|\ell_1,m_1\rangle$, $|\ell_2,m_2\rangle$ で合成される角運動量の大きさの可能な値は $\ell_1+\ell_2$ から $|\ell_1-\ell_2|$ までである．この結果は当然ながら古典力学と一致している．

数学的補足

ルジャンドル多項式

ヘルムホルツ型方程式 $[\Delta + a]\Psi(x,y,z)=0$ でラプラシアン Δ を球座標 (r,θ,ϕ) で表し，変数分離して ϕ のみに依存する関数 $\Phi(\phi)$ が満たす方程式

$$\frac{1}{\Phi}\frac{d^2R}{d\phi^2}\Phi(\phi) = -m^2 \quad (\text{定数})$$

が得られる．これを解いて，さらに z 軸のまわりに一周すると関数は元に戻るという条件 $\Phi(\phi) = \Phi(\phi+2\pi)$ を課すと次の結果を得る．

$$\Phi(\phi) = C_1^{\phi} e^{im\phi} + C_2^{\phi} e^{-im\phi} \quad (m\ \text{は整数})$$

θ にのみ依存する関数 $\Theta(\theta)$ が満たすべき方程式は，この結果を用いると

$$\frac{d^2\Theta}{d\theta^2} + \frac{\cos\theta}{\sin\theta}\frac{d\Theta}{d\theta} + \left(\lambda - \frac{m^2}{\sin^2\theta}\right)\Theta = 0 \quad (\lambda\ \text{は定数})$$

となる．$\cos\theta = z$ と変数変換して $\Theta(\theta) = L(z)$ と置いて

$$(1-z^2)\frac{d^2L}{dz^2} - 2z\frac{dL}{dz} + \left(\lambda - \frac{m^2}{1-z^2}\right)L = 0$$

ルジャンドルの陪微分方程式が得られた．以下で，この解を求めていく．

まず $m=0$ の場合を考える．

$$(1-z^2)\frac{d^2L}{dz^2} - 2z\frac{dL}{dz} + \lambda L = 0$$

この 2 階常微分方程式で $z=0$ は特異点ではないので $L(z) = \sum_{k=0} a_k z^k$ を代入する．

$$\begin{aligned}
&(1-z^2)\sum_{k=2} a_k k(k-1) z^{k-2} - 2z\sum_{k=1} a_k k z^{k-1} + \lambda \sum_{k=0} a_k z^k = 0 \\
&\sum_{k=0} a_{k+2}(k+2)(k+1)z^k - \sum_{k=2} a_k k(k-1)z^k - \sum_{k=1} 2a_k k z^k + \lambda\sum_{k=0} a_k z^k = 0 \\
&(2a_2 + \lambda a_0) + (6a_3 - 2a_1 + \lambda a_1)z + \sum_{k=2}[(k+2)(k+1)a_{k+2} - \{k(k-1)+2k-\lambda\}a_k]z^k = 0
\end{aligned}$$

これから

$$a_{k+2} = \frac{k(k+1)-\lambda}{(k+2)(k+1)}a_k$$

という関係が得られる．(最後の式の右辺第 1 項と第 2 項が 0 になるという関係もこの結果に含まれる．) ここで $k\to\infty$ とすると $a_{k+2}\simeq a_k$ となり，a_k が無限に続くと $\sum_{k=0} a_k z^k$ は発散してしまう．よって，意味のある解を得るには，ある 0 以上の整数 n で $n(n+1)=\lambda$ とならねばならない．このとき $a_{n+2} = a_{n+4} = a_{n+6} = \cdots = 0$ となるが，$a_{n+1}, a_{n+3}, a_{n+5}, \ldots$ は $n(n+1)=\lambda$ の条件だけでは必ずしも 0 にならないので，まだ $\sum_{k=0} a_k z^k$ は発散する可能性がある．これをさけるため

$$\begin{aligned}
&n\ \text{が偶数のとき} \quad a_1 = 0 \ \to a_1 = a_3 = a_5 = \cdots = 0 \\
&n\ \text{が奇数のとき} \quad a_0 = 0 \ \to a_0 = a_2 = a_4 = \cdots = 0
\end{aligned}$$

ととる．係数の漸化式から $L(z)$ の一般形を求めることはできるが，より見通しよくするために次の関数を考える．

$$P_n(z) = \frac{1}{2^n n!}\frac{d^n}{dz^n}(z^2-1)^n$$

このとき

$$\begin{aligned}\frac{d^{n+1}}{dz^{n+1}}\left[(z^2-1)\frac{d}{dz}(z^2-1)^n\right] &= (z^2-1)\frac{d^{n+2}}{dz^{n+2}}(z^2-1)^n + (n+1)2z\frac{d^{n+1}}{dz^{n+1}}(z^2-1)^n \\ &\quad + \frac{n(n+1)}{2}2\frac{d^n}{dz^n}(z^2-1)^n\end{aligned}$$

一方

$$\begin{aligned}\frac{d^{n+1}}{dz^{n+1}}\left[(z^2-1)\frac{d}{dz}(z^2-1)^n\right] &= \frac{d^{n+1}}{dz^{n+1}}\left[n(z^2-1)^n 2z\right] = 2n\frac{d^{n+1}}{dz^{n+1}}\left[z(z^2-1)^n\right] \\ &= 2n\left[z\frac{d^{n+1}}{dz^{n+1}}(z^2-1)^n + (n+1)\frac{d^n}{dz^n}(z^2-1)^n\right]\end{aligned}$$

どちらも同じものを計算したので結果を等しいと置いて

$$\begin{aligned}2n\left[z\frac{d^{n+1}}{dz^{n+1}}(z^2-1)^n + (n+1)\frac{d^n}{dz^n}(z^2-1)^n\right] &= (z^2-1)\frac{d^{n+2}}{dz^{n+2}}(z^2-1)^n + (n+1)2z\frac{d^{n+1}}{dz^{n+1}}(z^2-1)^n \\ &\quad + \frac{n(n+1)}{2}2\frac{d^n}{dz^n}(z^2-1)^n \\ \{2n(n+1)-n(n+1)\}\frac{d^n}{dz^n}(z^2-1)^n &= (z^2-1)\frac{d^{n+2}}{dz^{n+2}}(z^2-1)^n + 2z\frac{d^{n+1}}{dz^{n+1}}(z^2-1)^n \\ -n(n+1)\frac{d^n}{dz^n}(z^2-1)^n &= (1-z^2)\frac{d^{n+2}}{dz^{n+2}}(z^2-1)^n - 2z\frac{d^{n+1}}{dz^{n+1}}(z^2-1)^n\end{aligned}$$

両辺に $\dfrac{1}{2^n n!}$ をかけて

$$-n(n+1)P_n(z) = (1-z^2)\frac{d^2}{dz^{+2}}P_n(z) - 2z\frac{d}{dz}P_n(z)$$

$$(1-z^2)\frac{d^2}{dz^{+2}}P_n(z) - 2z\frac{d}{dz}P_n(z) + n(n+1)P_n(z) = 0$$

よって $P_n(z)$ が元の微分方程式の解になっている． $P_n(z)$ の定義から級数解を求める．

$$(z^2-1)^n = \sum_{j=0}^{n}\frac{n!}{j!(n-j)!}z^{2(n-j)}(-1)^j$$

$z^{2(n-j)}$ を z で n 階微分すると，$n-2j \geq 0$ のとき

$$\frac{d^n}{dz^n}z^{2(n-j)} = (2n-2j)(2n-2j-1)\cdots(2n-2j-n+1)z^{n-2j} = \frac{(2n-2j)!}{(2n-2j-n)!}z^{n-2j} = \frac{(2n-2j)!}{(n-2j)!}z^{n-2j}$$

$n-2j<0$ では 0 になる．よって

$$P_n(z) = \sum_{j=0}^{[n/2]}\frac{1}{2^n n!}\frac{(-1)^j n!}{j!(n-j)!}\frac{(2n-2j)!}{(n-2j)!}z^{n-2j} = \frac{1}{2^n}\sum_{j=0}^{[n/2]}\frac{(-1)^j(2n-2j)!}{j!(n-j)!(n-2j)!}z^{n-2j}$$

この $P_n(z)$ をルジャンドルの多項式という．

$$P_0(z)=1\ ,\ P_1(z)=z\ ,\ P_2(z)=\frac{1}{2}(3z^2-1)\ ,\ P_3(z)=\frac{1}{2}(5z^3-3z)\ ,\ldots$$

ルジャンドルの多項式どうしの積分

前の議論で $\cos\theta = z$ と置いたことから考えられるように，普通ルジャンドル多項式の変数は -1 から 1 の範囲で考えられることが多い．そこで，$\int_{-1}^{1} P_n(x)P_m(x)dx$ を求めてみる．前に求めた関係式 $P_n(x) = \frac{1}{2^n n!}\frac{d^n}{dx^n}(x^2-1)^n$ を用いて

$$
\begin{aligned}
\int_{-1}^{1} P_n(x)P_m(x)dx &= \int_{-1}^{1} \frac{1}{2^n n!}\frac{1}{2^m m!}\{\frac{d^n}{dx^n}(x^2-1)^n\}\{\frac{d^m}{dx^m}(x^2-1)^m\}dx \\
\text{部分積分して} &= \frac{1}{2^{n+m}n!m!}\left[\{\frac{d^{n-1}}{dx^{n-1}}(x^2-1)^n\}\{\frac{d^m}{dx^m}(x^2-1)^m\}\right]_{-1}^{1} \\
&\quad -\frac{1}{2^{n+m}n!m!}\int_{-1}^{1}\{\frac{d^{n-1}}{dx^{n-1}}(x^2-1)^n\}\{\frac{d^{m+1}}{dx^{m+1}}(x^2-1)^m\}dx
\end{aligned}
$$

右辺第 1 項 は $(x^2-1)^n$ を x で $n-1$ 回しか微分しないので，(x^2-1) が少なくとも 1 つ以上かかったものになる．よって $x=\pm 1$ では 0 になる．部分積分をくり返せば

$$
\begin{aligned}
\int_{-1}^{1} P_n(x)P_m(x)dx &= \frac{-1}{2^{n+m}n!m!}\int_{-1}^{1}\{\frac{d^{n-1}}{dx^{n-1}}(x^2-1)^n\}\{\frac{d^{m+1}}{dx^{m+1}}(x^2-1)^m\}dx \\
&= \frac{(-1)^2}{2^{n+m}n!m!}\int_{-1}^{1}\{\frac{d^{n-2}}{dx^{n-2}}(x^2-1)^n\}\{\frac{d^{m+2}}{dx^{m+2}}(x^2-1)^m\}dx \\
&= \cdots \\
&= \frac{(-1)^n}{2^{n+m}n!m!}\int_{-1}^{1}(x^2-1)^n\{\frac{d^{m+n}}{dx^{m+n}}(x^2-1)^m\}dx
\end{aligned}
$$

$n \geq m$ としても一般性を失わない．最後の $\{\ \}$ 内は x の $2m$ 次を $n+m \geq 2m$ 回微分するので，$n \neq m$ では 0 になる．$n = m$ では

$$
\begin{aligned}
\int_{-1}^{1} P_n(x)P_n(x)dx &= \frac{(-1)^n}{2^{2n}(n!)^2}\int_{-1}^{1}(x^2-1)^n\{\frac{d^{2n}}{dx^{2n}}(x^2-1)^n\}dx \\
&= \frac{(-1)^n}{2^{2n}(n!)^2}(2n)!\int_{-1}^{1}(x^2-1)^n dx \\
x=2t-1\ \text{とおくと} &= \frac{(-1)^n}{2^{2n}(n!)^2}(2n)!\int_{0}^{1}(4t^2-4t)^n 2dt = \frac{2}{(n!)^2}(2n)!\int_0^1 t^n(1-t)^n dt \\
&= \frac{2}{(n!)^2}(2n)!B(n+1,n+1) = \frac{2}{(n!)^2}(2n)!\frac{\Gamma(n+1)\Gamma(n+1)}{\Gamma(2n+2)} \\
&= \frac{2}{(n!)^2}(2n)!\frac{n!n!}{(2n+1)!} = \frac{2}{2n+1}
\end{aligned}
$$

よって以下の結果を得る．

$$
\int_{-1}^{1} P_n(x)P_m(x)dx = \frac{2}{(2n+1)}\delta_{mn}
$$

ルジャンドル陪関数

これまではルジャンドルの陪微分方程式

$$
(1-z^2)\frac{d^2L}{dz^2} - 2z\frac{dL}{dz} + \left(n(n+1) - \frac{m^2}{1-z^2}\right)L = 0
$$

で $m=0$ の場合を考えてきた．(注：以前のルジャンドルの陪微分方程式で $\lambda = n(n+1)$ としている．) $m \neq 0$ の場合を以下で考える．$m>0$ として一般性を失わない．$z=\pm 1$ が特異点であるので，まず $z=1$ 付近での振る舞いを調べる．$z=1$ の近傍で $L(z)=(1-z)^s f(z)$ と置いて代入すると

$$\begin{aligned}&(1-z^2)[s(s-1)(1-z)^{s-2}f - 2s(1-z)^{s-1}f' + (1-z)^s f''] - 2z[-s(1-z)^{s-1}f + (1-z)^s f'] \\ &+ \left(n(n+1) - \frac{m^2}{1-z^2}\right)(1-z)^s f = 0\end{aligned}$$

ここで $1-z=t$ とし，$|t| \ll 1$ で考えると

$$\begin{aligned}&t(2-t)[s(s-1)t^{s-2}f - 2st^{s-1}f' + t^s f''] - 2(1-t)[-st^{s-1}f + t^s f'] \\ &+ \left(n(n+1) - \frac{m^2}{t(2-t)}\right)t^s f = 0\end{aligned}$$

t^s で割って
$$\begin{aligned}&\frac{2-t}{t}s(s-1)f - 2s(2-t)f' + t(2-t)f'' + 2s\frac{1-t}{t}f - 2(1-t)f' \\ &+ \left(n(n+1) - \frac{m^2}{t(2-t)}\right)f = 0 \\ &\frac{1}{t}\left[2s(s-1) + 2s - \frac{m^2}{2}\right]f + O(1) = 0\end{aligned}$$

$|t| \ll 1$ で $1/t$ の部分が 0 ならねばならないので

$$2s(s-1) + 2s - \frac{m^2}{2} = 0 \ \Rightarrow\ s = \pm\frac{m}{2}$$

$z \to 1$ で L が発散しないよう $s=m/2$ を採用する．$z \to -1$ でも同様に考えて (元の微分方程式は $z \leftrightarrow -z$ で形が不変)，結局

$$L(z) = (1-z)^{m/2}(1+z)^{m/2}f(z) = (1-z^2)^{m/2}f(z)$$

を得る．これを元の方程式に代入して整理すると以下のようになる．

$$(1-z^2)\frac{d^2f}{dz^2} - 2(m+1)z\frac{df}{dz} + \{n(n+1) - m(m+1)\}f = 0$$

これをそのまま級数を用いて解いてもよいが，ここでは別のやり方で解を求めてみる．$m=0$ の場合のルジャンドルの陪微分方程式を思い出すと，解は $P_n(z)$ なので

$$(1-z^2)\frac{d^2P_n}{dz^2} - 2z\frac{dP_n}{dz} + n(n+1)P_n = 0$$

この両辺を z で微分すると

$$\begin{aligned}&(1-z^2)\frac{d^3P_n}{dz^3} - 2z\frac{d^2P_n}{dz^2} - 2z\frac{d^2P_n}{dz^2} - 2\frac{dP_n}{dz} + n(n+1)\frac{dP_n}{dz} = 0 \\ &(1-z^2)\frac{d^3P_n}{dz^3} - 4z\frac{d^2P_n}{dz^2} + \{n(n+1) - 2\}\frac{dP_n}{dz} = 0\end{aligned}$$

これを見ると，$\dfrac{dP_n}{dz}$ が先ほどの微分方程式で $m=1$ とした場合の解になっていることがわかる．数学的帰納法を用いて，f が

$$(1-z^2)\frac{d^2f}{dz^2} - 2(m+1)z\frac{df}{dz} + \{n(n+1) - m(m+1)\}f = 0$$

の解であると仮定して，両辺を z で微分すれば

$$(1-z^2)\frac{d^3f}{dz^3}-2z\frac{d^2f}{dz^2}-2(m+1)z\frac{d^2f}{dz^2}-2(m+1)\frac{df}{dz}+\{n(n+1)-m(m+1)\}\frac{df}{dz}=0$$
$$(1-z^2)\frac{d^3f}{dz^3}-2(m+2)z\frac{d^2f}{dz^2}+\{n(n+1)-(m+1)(m+2)\}\frac{df}{dz}=0$$

すなわち，$\dfrac{df}{dz}$ が m を一つ増やした場合の微分方程式の解になっている．よって

$$f(z)=\frac{d^m}{dz^m}P_n(z)\ \rightarrow\ L(z)=(1-z^2)^{m/2}\frac{d^m}{dz^m}P_n(z)\equiv P_n^m(z)$$

ここで現れた $P_n^m(z)$ がルジャンドル陪微分方程式の解 (の一つで物理に有用なもの) である．$P_n(z)$ は z^n の多項式なので，$m\le n$ の時のみ有効である．負の m については $P_n(z)=\dfrac{1}{2^n n!}\dfrac{d^n}{dz^n}(z^2-1)^n$ を用いて

$$P_n^m(z)=\frac{1}{2^n n!}(1-z^2)^{m/2}\frac{d^{n+m}}{dz^{n+m}}(z^2-1)^n$$

を定義とすれば，$m\ge -n$ で有効となり，結局 m のとりうる値は $-n,-n+1,\ldots n-1,n$ となる．

球面調和関数

これまでの結果を基に，球座標での角度座標 θ,ϕ に関する部分 $Y(\theta,\phi)$ が満たす微分方程式

$$\left[\frac{\partial^2 Y}{\partial\theta^2}+\frac{\cos\theta}{\sin\theta}\frac{\partial Y}{\partial\theta}+\frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2 Y}{\partial\phi^2}\right]=-\lambda Y\quad(\lambda\text{ は定数})$$

の解を議論する．ϕ に依存する部分は，定数を除いて $e^{\pm im\phi}$ (m は整数) であった，$Y(\theta,\phi)=e^{\pm im\phi}L(\theta)$ として

$$e^{\pm im\phi}\left[\frac{\partial^2 L}{\partial\theta^2}+\frac{\cos\theta}{\sin\theta}\frac{\partial L}{\partial\theta}-\frac{m^2}{\sin^2\theta}L\right]=-\lambda e^{\pm im\phi}L$$
$$\frac{\partial^2 L}{\partial\theta^2}+\frac{\cos\theta}{\sin\theta}\frac{\partial L}{\partial\theta}+\left(\lambda-\frac{m^2}{\sin^2\theta}\right)L=0$$

$\cos\theta=z$ として

$$(1-z^2)\frac{d^2L}{dz^2}-2z\frac{dL}{dz}+\left(\lambda-\frac{m^2}{1-z^2}\right)L=0$$

この解は $L(z)=P_n^m(z)$ で与えられた．よって

$$Y_n^m(\theta,\phi)=C_n^m e^{im\phi}P_n^m(\cos\theta)$$

が求める解となる．ここで C_n^m は n,m に依存する定数であり，

$$\int_0^{2\pi}\int_0^{\pi}\{Y_n^m(\theta,\phi)\}^* Y_{n'}^{m'}(\theta,\phi)\sin\theta d\theta d\phi=\delta_{nn'}\delta_{mm'}$$

となるように決める．この Y_n^m を球面調和関数という．n は 0 以上の整数であり，m は $-n$ から n までの整数である．