第14章　軌道角運動量

３次元空間での運動を記述する準備として，軌道角運動量について述べる。軌道角運動量演算子の交換関係は座標と運動量の交換関係から導かれる。その結果，軌道角運動量の大きさは量子化され，離散的な値 $\ell = 0,\, 1,\, 2,\, \cdots$ だけが許される。

14.1　軌道角運動量演算子と交換関係

定義： 軌道角運動量の演算子 $\boldsymbol{L}$ を，座標の演算子 $\boldsymbol{x}$ と 運動量の演算子 $\boldsymbol{p}$ のベクトル積で定義する：

$$\boldsymbol{L} \,=\, \boldsymbol{x} \times \boldsymbol{p}. \tag{14.1}$$

交換関係： $L_x,\, L_y,\, L_z$ の交換関係は，交換関係 $[\,x_i, p_j\,] = \delta_{ij} i\hbar$ から導かれる：

$$\begin{aligned} [\,L_x,\, L_y\,] &= i\hbar L_z, & [\,L_y,\, L_z\,] &= i\hbar L_x, & [\,L_z,\, L_x\,] &= i\hbar L_y, \\ [\,L_x,\, L_x\,] &= 0, & [\,L_y,\, L_y\,] &= 0, & [\,L_z,\, L_z\,] &= 0, \end{aligned} \tag{14.2}$$

また，$\boldsymbol{L}^2$ は $\boldsymbol{L}$ の３つの成分と可換である：

$$[\,\boldsymbol{L}^2,\, L_x\,] \,=\, [\,\boldsymbol{L}^2,\, L_y\,] \,=\, [\,\boldsymbol{L}^2,\, L_z\,] \,=\, 0. \tag{14.3}$$

軌道角運動量を具体的に成分で表すと

$$\begin{pmatrix} L_x \\ L_y \\ L_z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} yp_z - zp_y \\ zp_x - xp_z \\ xp_y - yp_x \end{pmatrix} \tag{14.4}$$

である。以下，式を簡潔に表すため，ベクトルの直角座標成分（x 成分，y 成分，z 成分）を，数字の添字 1, 2, 3 で表す：

$$\boldsymbol{x} \,=\, \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} \qquad \boldsymbol{p} \,=\, \begin{pmatrix} p_x \\ p_y \\ p_z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} p_1 \\ p_2 \\ p_3 \end{pmatrix} \tag{14.5}$$

ここで，Levi Civita の記号 ϵ_{ijk} を導入する。ϵ_{ijk} は隣合う添字の交換に対して反対称であり，また，$\epsilon_{123}=1$ とする：

$$\epsilon_{ijk} \;=\; \begin{cases} +1 & (ijk) \;=\; (123),\ (231),\ (312) \\ -1 & (ijk) \;=\; (213),\ (321),\ (132) \\ \ \ 0 & \text{その他} \end{cases} \tag{14.6}$$

反対称性より，3 つの添字 ijk の中に等しい値がある場合，ϵ_{ijk} の値は 0 になる。Levi Civita の記号を用いて，軌道角運動量演算子の i 成分は次のように表せる：

$$L_i \;=\; \sum_{jk} \epsilon_{ijk} x_j p_k. \tag{14.7}$$

なお，軌道角運動量 $\boldsymbol{L}=\boldsymbol{x}\times\boldsymbol{p}$ の次元は,

$$\begin{aligned} (\text{長さ})\cdot(\text{質量})\cdot\frac{(\text{長さ})}{(\text{時間})} \;&=\; \frac{(\text{質量})\cdot(\text{長さ})^2}{(\text{時間})^2}\cdot(\text{時間}) \\ &=\; (\text{エネルギー})\cdot(\text{時間}) \end{aligned}$$

であり，これはプランク定数 $\hbar$ の次元と同じである。

(14.2) の導出

軌道角運動量演算子の交換関係は，座標と運動量の交換関係から導かれる。まず，軌道角運動量を (14.7) によって座標と運動量の演算子で表し，交換関係 $[\,x_i, p_j\,]=\delta_{ij}i\hbar$ を代入する：

$$\begin{aligned} [\,L_i,\,L_j\,] \;&=\; \sum_{k\ell mn} \epsilon_{ik\ell}\epsilon_{jmn}\,[\,x_k p_\ell,\,x_m p_n\,] \\ &=\; \sum_{k\ell mn} \epsilon_{ik\ell}\epsilon_{jmn}\Big(x_m\,[\,x_k,\,p_n\,]\,p_\ell + x_k[\,p_\ell,\,x_m\,]\,p_n\Big) \\ &=\; i\hbar\left(\sum_{k\ell m}\epsilon_{ik\ell}\epsilon_{jmk}x_m p_\ell - \sum_{k\ell n}\epsilon_{ik\ell}\epsilon_{j\ell n}x_k p_n\right). \end{aligned}$$

ここで，Levi Civita の記号の積の和に関する関係式

$$\sum_k \epsilon_{ijk}\epsilon_{\ell mk} = \delta_{i\ell}\delta_{jm} - \delta_{im}\delta_{j\ell}. \tag{14.8}$$

を用いると

$$[\,L_i,\,L_j\,] = i\hbar\left(-\delta_{ij}\boldsymbol{x}\cdot\boldsymbol{p} + x_i p_j + \delta_{ij}\boldsymbol{x}\cdot\boldsymbol{p} - x_j p_i\right) = i\hbar\left(x_i p_j - x_j p_i\right)$$

となる。よって，軌道角運動量演算子の交換関係は

$$[\,L_i,\,L_j\,] \;=\; i\hbar\sum_k \epsilon_{ijk}L_k. \tag{14.9}$$

と表される。成分で書くと (14.2) となる。

(14.3) の導出
$\boldsymbol{L}^2 = \boldsymbol{L}\cdot\boldsymbol{L}$ と $\boldsymbol{L}$ の成分との交換関係は，(14.9) を用いて

$$\begin{aligned} [\,\boldsymbol{L}^2,\,L_i\,] &= \sum_j [\,L_j L_j,\,L_i\,] \\ &= \sum_j \Big(L_j\,[\,L_j,\,L_i\,] + [\,L_j,\,L_i\,]\,L_j \Big) \\ &= \sum_{jk} i\epsilon_{jik} L_j L_k + \sum_{jk} i\epsilon_{jik} L_k L_j \end{aligned}$$

と書ける。ここで，最右辺の第２項で，まず，和をとる２つの添字 j と k を交換し，ついで ϵ_{jik} の反対称性 $\epsilon_{kij} = -\epsilon_{jik}$ を用いる：

$$\sum_{jk} i\epsilon_{jik} L_k L_j = \sum_{jk} i\epsilon_{kij} L_j L_k = -\sum_{jk} i\epsilon_{jik} L_j L_k.$$

よって，第２項は第１項と符号が異なるだけであることがわかる。従って (14.3) が得られる。

軌道角運動量演算子の交換関係 (14.2) と (14.3) より，$\boldsymbol{L}^2$ と１つの成分 L_i とが同時に対角になる表現（同時固有状態）をとることができる。通常，14.3.1 に示すように，$\boldsymbol{L}^2$ と L_z の同時固有状態を用いる。

14.2　角運動量演算子の極座標表現

14.2.1　デカルト座標と極座標

３次元空間内の点 P は，原点 O からの距離 r，直線 OP と z 軸の正の部分とのなす角 θ，及び，点 P の xy 平面に投影した点を P$'$ として，直線 OP$'$ と x 軸の正の部分とのなす角を反時計まわりに測った ϕ で表すことができる：

$$(x,\, y,\, z\,) \iff (r,\, \theta,\, \phi\,)$$

これを **空間極座標** という（図 14.1）。

デカルト座標 $(x,\, y,\, z)$ と極座標 $(r,\, \theta,\, \phi)$ のあいだには次の関係がある：

$$\begin{aligned} x &= r\sin\theta\cos\phi, \\ y &= r\sin\theta\sin\phi, \\ z &= r\cos\theta. \end{aligned} \tag{14.10}$$

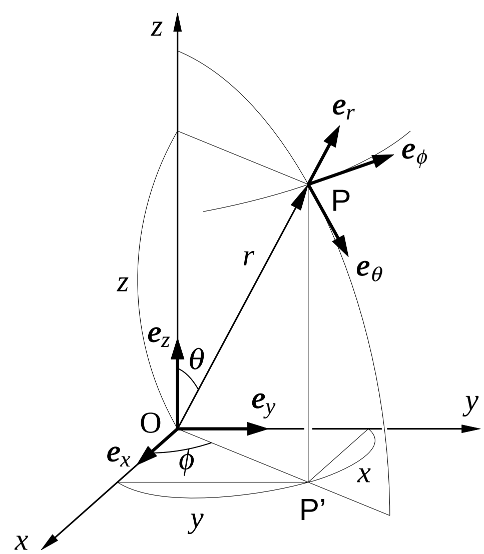

図 14.1: 極座標

３つの座標 $r,\, \theta,\, \phi$ と空間内の一つの点を一対一に対応させるため，座標の値の取り得る範囲を

$$0 \le r < \infty, \quad 0 \le \theta \le \pi, \quad 0 \le \phi < 2\pi \tag{14.11}$$

と制限する。逆に，極座標 $r,\, \theta,\, \phi$ は，デカルト座標 $x,\, y,\, z$ によって

$$r \,=\, \sqrt{x^2 + y^2 + z^2}, \qquad \cos\theta \,=\, \frac{z}{r}, \qquad \tan\phi \,=\, \frac{y}{x} \tag{14.12}$$

と表せる。

単位ベクトル　極座標における単位ベクトルは，デカルト座標の場合と同じように定義できる。すなわち，

$$\begin{aligned} \boldsymbol{e}_r &: \ \theta \text{ と } \phi \text{ が一定で } r \text{ が増加する向き}, \\ \boldsymbol{e}_\theta &: \ \phi \text{ と } r \text{ が一定で } \theta \text{ が増加する向き}, \\ \boldsymbol{e}_\phi &: \ r \text{ と } \theta \text{ が一定で } \phi \text{ が増加する向き}. \end{aligned}$$

極座標系は曲線直交座標系であり，単位ベクトルは次の関係を満たす：

$$\begin{gathered} \boldsymbol{e}_r \cdot \boldsymbol{e}_\theta \,=\, \boldsymbol{e}_\theta \cdot \boldsymbol{e}_\phi \,=\, \boldsymbol{e}_\phi \cdot \boldsymbol{e}_r \,=\, 0, \\ \boldsymbol{e}_r \times \boldsymbol{e}_\theta \,=\, \boldsymbol{e}_\phi, \quad \boldsymbol{e}_\theta \times \boldsymbol{e}_\phi \,=\, \boldsymbol{e}_r, \quad \boldsymbol{e}_\phi \times \boldsymbol{e}_r \,=\, \boldsymbol{e}_\theta. \end{gathered} \tag{14.13}$$

極座標の単位ベクトルはデカルト座標の単位ベクトルで

$$\begin{aligned} \boldsymbol{e}_r &= \sin\theta\cos\phi\, \boldsymbol{e}_x + \sin\theta\sin\phi\, \boldsymbol{e}_y + \cos\theta\, \boldsymbol{e}_z, \\ \boldsymbol{e}_\theta &= \cos\theta\cos\phi\, \boldsymbol{e}_x + \cos\theta\sin\phi\, \boldsymbol{e}_y - \cos\theta\, \boldsymbol{e}_z, \\ \boldsymbol{e}_\phi &= -\sin\phi\, \boldsymbol{e}_x + \cos\phi\, \boldsymbol{e}_y, \end{aligned} \tag{14.14}$$

その逆変換は

$$\begin{aligned} \boldsymbol{e}_x &= \sin\theta\cos\phi\,\boldsymbol{e}_r + \cos\theta\cos\phi\,\boldsymbol{e}_\theta - \sin\phi\,\boldsymbol{e}_\phi, \\ \boldsymbol{e}_y &= \sin\theta\sin\phi\,\boldsymbol{e}_r + \cos\theta\sin\phi\,\boldsymbol{e}_\theta + \cos\phi\,\boldsymbol{e}_\phi, \\ \boldsymbol{e}_z &= \cos\theta\,\boldsymbol{e}_r + \sin\theta\,\boldsymbol{e}_\theta \end{aligned} \tag{14.15}$$

である。

14.2.2　座標の微小変位と関数の変化

座標ベクトル $\boldsymbol{x}$ は，$\boldsymbol{e}_r$ の向きをもつ大きさが r のベクトルであるから，極座標では

$$\boldsymbol{x} = r\,\boldsymbol{e}_r \tag{14.16}$$

と表される。座標の微小変位

$$\mathrm{d}\boldsymbol{x} = \frac{\partial\boldsymbol{x}}{\partial r}\,\mathrm{d}r + \frac{\partial\boldsymbol{x}}{\partial\theta}\,\mathrm{d}\theta + \frac{\partial\boldsymbol{x}}{\partial\phi}\,\mathrm{d}\phi$$

を求める際には注意を要する。それは，座標 (r, θ, ϕ) を変化させると単位ベクトルの向きが変わるためである。すなわち，

$$\begin{aligned} \frac{\partial\boldsymbol{e}_r}{\partial\theta} &= \boldsymbol{e}_\theta, & \frac{\partial\boldsymbol{e}_\theta}{\partial\theta} &= -\boldsymbol{e}_r, & \frac{\partial\boldsymbol{e}_\phi}{\partial\theta} &= 0, \\ \frac{\partial\boldsymbol{e}_r}{\partial\phi} &= \sin\theta\,\boldsymbol{e}_\phi, & \frac{\partial\boldsymbol{e}_\theta}{\partial\phi} &= \cos\theta\,\boldsymbol{e}_r, & \frac{\partial\boldsymbol{e}_\phi}{\partial\phi} &= -\sin\theta\,\boldsymbol{e}_r - \cos\theta\,\boldsymbol{e}_\theta. \end{aligned} \tag{14.17}$$

これらの関係式は，デカルト座標の単位ベクトルが座標に依らないことに注意して (14.14) を微分し，その後，(14.15) を代入して得られる。(14.17) より，

$$\frac{\partial\boldsymbol{x}}{\partial r} = \boldsymbol{e}_r, \qquad \frac{\partial\boldsymbol{x}}{\partial\theta} = r\,\boldsymbol{e}_\theta, \qquad \frac{\partial\boldsymbol{x}}{\partial\phi} = r\sin\theta\,\boldsymbol{e}_\phi$$

であるので，座標の微小変位は

$$\mathrm{d}\boldsymbol{x} = \mathrm{d}r\,\boldsymbol{e}_r + r\,\mathrm{d}\theta\,\boldsymbol{e}_\theta + r\sin\theta\,\mathrm{d}\phi\,\boldsymbol{e}_\phi \tag{14.18}$$

と書けることがわかる。ここに，３つの項の $\mathrm{d}r$，$r\,\mathrm{d}\theta$，及び，$r\sin\theta\,\mathrm{d}\phi$ は，それぞれの単位ベクトルの向きの微小な長さを表している。よって，デカルト座標では $\mathrm{d}^3x = \mathrm{d}x\,\mathrm{d}y\,\mathrm{d}z$ で与えられる体積要素は，極座標で

$$\mathrm{d}^3x = r^2\sin\theta\,\mathrm{d}r\,\mathrm{d}\theta\,\mathrm{d}\phi \tag{14.19}$$

と表される。

座標 (r, θ, ϕ) の関数 $f(r, \theta, \phi)$ の微小変化は

$$\mathrm{d}f = \frac{\partial f}{\partial r}\,\mathrm{d}r + \frac{\partial f}{\partial\theta}\,\mathrm{d}\theta + \frac{\partial f}{\partial\phi}\,\mathrm{d}\phi = (\boldsymbol{\nabla}f)\cdot\mathrm{d}\boldsymbol{x}. \tag{14.20}$$

ここで，(14.18)，及び，極座標の単位ベクトルの直交性より，微分演算子 $\boldsymbol{\nabla}$ は極座標で

$$\boldsymbol{\nabla} \;=\; \boldsymbol{e}_r \frac{\partial}{\partial r} + \boldsymbol{e}_\theta \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} + \boldsymbol{e}_\phi \frac{1}{r\sin\theta} \frac{\partial}{\partial \phi} \tag{14.21}$$

と表せる。一方，デカルト座標で

$$\boldsymbol{\nabla} = \boldsymbol{e}_x \frac{\partial}{\partial x} + \boldsymbol{e}_y \frac{\partial}{\partial y} + \boldsymbol{e}_z \frac{\partial}{\partial z}$$

であるから，デカルト座標の単位ベクトルの直交性，及び，デカルト座標と極座標の単位ベクトルの関係 (14.14) より，デカルト座標の微分は極座標の微分で

$$\begin{aligned}
\frac{\partial}{\partial x} &= \frac{\partial r}{\partial x}\frac{\partial}{\partial r} + \frac{\partial \theta}{\partial x}\frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{\partial \phi}{\partial x}\frac{\partial}{\partial \phi} \\
&= \sin\theta\cos\phi \frac{\partial}{\partial r} + \frac{\cos\theta\cos\phi}{r}\frac{\partial}{\partial \theta} - \frac{\sin\phi}{r\sin\theta}\frac{\partial}{\partial \phi}, \\
\frac{\partial}{\partial y} &= \frac{\partial r}{\partial y}\frac{\partial}{\partial r} + \frac{\partial \theta}{\partial y}\frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{\partial \phi}{\partial y}\frac{\partial}{\partial \phi} \\
&= \sin\theta\sin\phi \frac{\partial}{\partial r} + \frac{\cos\theta\sin\phi}{r}\frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{\cos\phi}{r\sin\theta}\frac{\partial}{\partial \phi}, \\
\frac{\partial}{\partial z} &= \frac{\partial r}{\partial z}\frac{\partial}{\partial r} + \frac{\partial \theta}{\partial z}\frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{\partial \phi}{\partial z}\frac{\partial}{\partial \phi} \\
&= \cos\theta \frac{\partial}{\partial r} - \frac{\sin\theta}{r}\frac{\partial}{\partial \theta}
\end{aligned} \tag{14.22}$$

と表される。

14.2.3　軌道角運動量の極座標表示

軌道角運動量演算子 L_x，L_y，L_z は極座標で次のように表される：

$$\begin{aligned}
L_x &= i\hbar\left(\sin\phi\frac{\partial}{\partial\theta} + \frac{\cos\theta\cos\phi}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\phi}\right), \\
L_y &= -i\hbar\left(\cos\phi\frac{\partial}{\partial\theta} - \frac{\cos\theta\sin\phi}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\phi}\right), \\
L_z &= -i\hbar\frac{\partial}{\partial\phi}.
\end{aligned} \tag{14.23}$$

$\boldsymbol{L}^2$ は次の式で表される：

$$\boldsymbol{L}^2 = -\hbar^2\left[\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}\right]. \tag{14.24}$$

軌道角運動量演算子は 2 つの角 θ と ϕ に関する微分演算子で表され，動径 r についての微分は含まない。

デカルト座標を用いると角運動量演算子は (14.4) で与えられ，その運動量は微分演算子

$$\boldsymbol{p} = \frac{\hbar}{i}\boldsymbol{\nabla} = \left(\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x_1},\ \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x_2},\ \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x_3}\right). \tag{14.25}$$

で表される。ここで，デカルト座標の微分を極座標の微分で表す関係式 (14.22) を用いると，軌道角運動量演算子 L_x, L_y, L_z の極座標による表現 (14.23) が得られる。あるいは，角運動量演算子

$$\boldsymbol{L} \,=\, \boldsymbol{x}\times\boldsymbol{p} \,=\, \frac{\hbar}{i}\boldsymbol{x}\times\boldsymbol{\nabla}$$

において，$\boldsymbol{x}$ には (14.16) を，微分演算子 $\boldsymbol{\nabla}$ には (14.21) を代入し，

$$\boldsymbol{L} \,=\, \frac{\hbar}{i}\, r\, \boldsymbol{e}_r \times \left(\boldsymbol{e}_r\frac{\partial}{\partial r} + \boldsymbol{e}_\theta\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial\theta} + \boldsymbol{e}_\phi\frac{1}{r\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\phi}\right)$$

極座標の単位ベクトルのベクトル積の関係 (14.13) を用いると

$$\boldsymbol{L} \,=\, \frac{\hbar}{i}\left(\boldsymbol{e}_\phi\frac{\partial}{\partial\theta} - \boldsymbol{e}_\theta\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\phi}\right) \tag{14.26}$$

と書ける。さらに，(14.14) を用いて，極座標の単位ベクトルをデカルト座標の単位ベクトルで表せば (14.23) が得られる。$\boldsymbol{L}^2$ は角運動量演算子の極座標表示 (14.26)，及び，単位ベクトルの微分 (14.17) を用いて直ちに求められる。

なお，L_x と L_y を合わせると，(14.23) より

$$L_x \pm i\,L_y \,=\, \pm\hbar\,\mathrm{e}^{\mp i\phi}\frac{\partial}{\partial\theta} + i\hbar\cot\theta\,\mathrm{e}^{\pm i\phi}\frac{\partial}{\partial\phi} \tag{14.27}$$

が得られる。$L_x + i\,L_y$ は昇演算子（raising operator），$L_x - i\,L_y$ は降演算子（lowering oprator）と呼ばれる。

14.3　軌道角運動量の固有状態

14.3.1　$\boldsymbol{L}^2$ と L_z の同時固有関数と固有値

球面調和関数 $Y_{\ell m}(\theta,\phi)$ は $\boldsymbol{L}^2$ と L_z の同時固有関数である：

$$\boldsymbol{L}^2\, Y_{\ell m}(\theta,\phi) \;=\; \ell(\ell+1)\hbar^2\, Y_{\ell m}(\theta,\phi), \tag{14.28}$$

$$L_z\, Y_{\ell m}(\theta,\phi) \;=\; m\hbar\, Y_{\ell m}(\theta,\phi). \tag{14.29}$$

ここで，ℓ と m の取り得る値は

$$\ell \;=\; 0,\,1,\,2,\,\cdots, \tag{14.30}$$

$$m \;=\; \ell,\,\ell-1,\,\cdots,\,0,\,\cdots,\,-(\ell-1),\,-\ell. \tag{14.31}$$

ただし，球面調和関数は次の式で表される：

$$Y_{\ell m}(\theta,\phi) = (-1)^{\frac{m+|m|}{2}} \left[\frac{2\ell+1}{2}\,\frac{(\ell-|m|)!}{(\ell+|m|)!}\right]^{1/2} P_\ell^{|m|}(\cos\theta)\,\frac{1}{(2\pi)^{1/2}}\,\mathrm{e}^{im\phi}. \tag{14.32}$$

ここに，$P_\ell^m(\cos\theta)$ はルジャンドルの陪関数である。

$\boldsymbol{L}^2$ の固有関数を $Y(\theta,\phi)$，固有値を $\lambda\hbar^2$ とする：

$$\boldsymbol{L}^2\, Y(\theta,\phi) \;=\; \lambda\hbar^2\, Y(\theta,\phi). \tag{14.33}$$

ここで，θ の関数 $\Theta(\theta)$ と ϕ の関数 $\Phi(\phi)$ の積に表されることを仮定する：

$$Y(\theta,\phi) \;=\; \Theta(\theta)\,\Phi(\phi). \tag{14.34}$$

$\boldsymbol{L}^2$ の極座標表示 (14.24) を用いると変数 θ と ϕ が分離でき，式の値を μ^2 とおく：

$$-\frac{\sin^2\theta}{\Theta}\,\frac{1}{\sin\theta}\,\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\theta}\left(\sin\theta\,\frac{\mathrm{d}\Theta}{\mathrm{d}\theta}\right) - \lambda\sin^2\theta \;=\; -\frac{1}{\Phi}\,\frac{\mathrm{d}^2\Phi}{\mathrm{d}\phi^2} \;=\; \mu^2. \tag{14.35}$$

$\Phi(\phi)$ は微分方程式

$$\frac{\mathrm{d}^2\Phi}{\mathrm{d}\phi^2} + \mu^2\,\Phi \;=\; 0 \tag{14.36}$$

を満たす。規格化因子を別にすれば，解は $\cos\mu\phi$ と $\sin\mu\phi$ である。周期境界条件 $\Phi(\phi+2\pi) = \Phi(\phi)$ を課すと μ は整数でなければならない。
一方，$\Theta(\theta)$ に関しては，$z=\cos\theta$ とおくと，微分方程式

$$(1-z^2)\,\frac{\mathrm{d}^2\Theta}{\mathrm{d}z^2} - 2z\,\frac{\mathrm{d}\Theta}{\mathrm{d}z} + \left[\lambda - \frac{\mu^2}{1-z^2}\right]\Theta \;=\; 0 \tag{14.37}$$

を満たす。この方程式の解の中で，$z=\pm 1$（$\theta=0,\,\pi$）で有界であるという条件から，固有値を $\lambda=\ell(\ell+1)$ として，解は第１種の**ルジャンドルの陪関数**（Legendre associated function）が選ばれる：

$$P_\ell^\mu(\cos\theta) \qquad (\mu,\ \ell \text{ は 0 または正の整数},\ \mu\le\ell). \tag{14.38}$$

よって，求める $Y(\theta,\phi)$ は，ℓ を 0 または正の整数として，各々の ℓ の値に対して

$$P_\ell(\cos\theta), \quad P_\ell^\mu(\cos\theta)\cos\mu\phi, \quad P_\ell^\mu(\cos\theta)\sin\mu\phi \qquad (\mu\ =\ 1,\,2,\,\cdots,\,\ell) \tag{14.39}$$

の $(2\ell+1)$ 個の関数になる。ここで，$\cos\mu\phi$ と $\sin\mu\phi$ の線形結合をつくり，

$$\cos\mu\phi\pm i\sin\mu\phi\ =\ \mathrm{e}^{\pm i\mu\phi} \qquad (\mu\ =\ 1,\,2,\,\cdots,\,\ell) \tag{14.40}$$

μ の代わりに m を用いると，$(2\ell+1)$ 個の関数 (14.39) は (14.32) の形にまとめられる。なお，$\boldsymbol{L}^2$ の固有値は $\ell(\ell+1)\hbar^2$，L_z の固有値は $m\hbar$ としているので，ℓ と m は次元をもたない数である。

14.3.2　球面調和関数の性質

規格直交性

球面調和関数は規格直交関数系を成す：

$$\int_0^{2\pi}\mathrm{d}\phi\int_0^\pi \sin\theta\,\mathrm{d}\theta\,Y_{\ell m}(\theta,\phi)^* Y_{\ell' m'}(\theta,\phi)\ =\ \delta_{\ell\ell'}\delta_{mm'}. \tag{14.41}$$

複素共役

球面調和関数 (14.32) は，複素共役に対して

$$Y_{\ell m}(\theta,\phi)^*\ =\ (-1)^m\,Y_{\ell\,-m}(\theta,\phi) \tag{14.42}$$

と変換するように位相因子が選ばれている。

漸化式

$$\begin{aligned}\frac{\partial}{\partial\theta}Y_{\ell m} &= \frac{\sqrt{(\ell-m)(\ell+m+1)}}{2}\,Y_{\ell m+1}\mathrm{e}^{-i\phi}\\ &\quad -\frac{\sqrt{(\ell+m)(\ell-m+1)}}{2}\,Y_{\ell m-1}\mathrm{e}^{+i\phi}\end{aligned} \tag{14.43}$$

$$\begin{aligned}m\cot\theta\,Y_{\ell m} &= -\frac{\sqrt{(\ell-m)(\ell+m+1)}}{2}\,Y_{\ell m+1}\mathrm{e}^{-i\phi}\\ &\quad -\frac{\sqrt{(\ell+m)(\ell-m+1)}}{2}\,Y_{\ell m-1}\mathrm{e}^{+i\phi}\end{aligned} \tag{14.44}$$

$$\cos\theta\,Y_{\ell m}\ =\ \sqrt{\frac{(\ell-m+1)(\ell+m+1)}{(2\ell+1)(2\ell+3)}}\,Y_{\ell+1,m}$$

$$+\sqrt{\frac{(\ell-m)(\ell+m)}{(2\ell-1)(2\ell+1)}}\,Y_{\ell-1,m} \tag{14.45}$$

$$\begin{aligned}\sin\theta\,\mathrm{e}^{\pm i\theta}Y_{\ell m} &= \mp\sqrt{\frac{(\ell\pm m+1)(\ell\pm m+2)}{(2\ell+1)(2\ell+3)}}\,Y_{\ell+1,m\pm1}\\ &\quad\pm\sqrt{\frac{(\ell\mp m)(\ell\mp m-1)}{(2\ell-1)(2\ell+1)}}\,Y_{\ell-1,m\pm1}\end{aligned} \tag{14.46}$$

具体的な形

$$Y_{00}(\theta,\phi) = \sqrt{\frac{1}{4\pi}} \tag{14.47}$$

$$\begin{aligned}Y_{10}(\theta,\phi) &= \sqrt{\frac{3}{4\pi}}\cos\theta\\ Y_{1\pm1}(\theta,\phi) &= \mp\sqrt{\frac{3}{8\pi}}\sin\theta\,\mathrm{e}^{\pm i\theta}\end{aligned} \tag{14.48}$$

$$\begin{aligned}Y_{20}(\theta,\phi) &= \sqrt{\frac{5}{16\pi}}\,(\,2\cos^2\theta-\sin^2\theta)\\ Y_{2\pm1}(\theta,\phi) &= \mp\sqrt{\frac{15}{8\pi}}\cos\theta\sin\theta\,\mathrm{e}^{\pm i\theta}\\ Y_{2\pm2}(\theta,\phi) &= \sqrt{\frac{15}{32\pi}}\,\sin^2\theta\,\mathrm{e}^{\pm 2i\theta}\end{aligned} \tag{14.49}$$

$$\begin{aligned}Y_{30}(\theta,\phi) &= \sqrt{\frac{7}{16\pi}}\,(\,2\cos^3\theta-3\cos\theta\sin^2\theta)\\ Y_{3\pm1}(\theta,\phi) &= \mp\sqrt{\frac{21}{64\pi}}\,(4\cos^2\theta\sin\theta-\sin^2\theta)\,\mathrm{e}^{\pm i\theta}\\ Y_{3\pm2}(\theta,\phi) &= \sqrt{\frac{105}{32\pi}}\,\cos\theta\sin^2\theta\,\mathrm{e}^{\pm 2i\theta}\\ Y_{3\pm3}(\theta,\phi) &= \mp\sqrt{\frac{35}{64\pi}}\,\sin^3\theta\,\mathrm{e}^{\pm 3i\theta}\end{aligned} \tag{14.50}$$

なお，$\ell=1$ の 3 つの成分に r をかけると

$$\sqrt{\frac{4\pi}{3}}\,r\,Y_{10} = z, \qquad \sqrt{\frac{4\pi}{3}}\,r\,Y_{1\pm1} = \mp\frac{1}{\sqrt{2}}\left(x\pm iy\right) \tag{14.51}$$

と表すことができる。