角運動量演算子

角運動量演算子と $\boldsymbol{L}^2$ の極座標表示の計算。

以下では $\hat{L}_x$ などが作用する関数を省略するが、微分演算子は常に右にある関数を微分することに注意。角運動量演算子の各成分を極座標で評価する。

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

$$\hat{L}_x = i\hbar\left(\sin\phi\frac{\partial}{\partial \theta} + \cot\theta\cos\phi\frac{\partial}{\partial \phi}\right)$$

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

$$\hat{L}_y = -i\hbar\left(\cos\phi\frac{\partial}{\partial \theta} - \cot\theta\sin\phi\frac{\partial}{\partial \phi}\right)$$

$$\begin{aligned}
\hat{L}_z &= \hat{x}\hat{p}_y - \hat{y}\hat{p}_x \\
&= -i\hbar\left(x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x}\right) \\
&= -i\hbar\left[r\sin\theta\cos\phi\left(\sin\theta\sin\phi\frac{\partial}{\partial r} + \frac{\cos\theta\sin\phi}{r}\frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{\cos\phi}{r\sin\theta}\frac{\partial}{\partial \phi}\right)\right. \\
&\qquad \left. - r\sin\theta\sin\phi\left(\sin\theta\cos\phi\frac{\partial}{\partial r} + \frac{\cos\theta\cos\phi}{r}\frac{\partial}{\partial \theta} - \frac{\sin\phi}{r\sin\theta}\frac{\partial}{\partial \phi}\right)\right] \\
&= -i\hbar\left[\cos^2\phi\frac{\partial}{\partial \phi} + \sin^2\phi\frac{\partial}{\partial \phi}\right]
\end{aligned}$$

$$\hat{L}_z = -i\hbar\frac{\partial}{\partial \phi}$$

角運動量演算子の 2 乗：

$$\hat{\boldsymbol{L}}^2 = \hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 + \hat{L}_z^2$$

各成分：

$$\begin{aligned}
\hat{L}_x^2 &= i\hbar\left(\sin\phi\frac{\partial}{\partial\theta} + \cot\theta\cos\phi\frac{\partial}{\partial\phi}\right)\left[i\hbar\left(\sin\phi\frac{\partial}{\partial\theta} + \cot\theta\cos\phi\frac{\partial}{\partial\phi}\right)\right] \\
&= -\hbar^2\left[\sin\phi\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\phi\frac{\partial}{\partial\theta} + \cot\theta\cos\phi\frac{\partial}{\partial\phi}\right) + \cot\theta\cos\phi\frac{\partial}{\partial\phi}\left(\sin\phi\frac{\partial}{\partial\theta} + \cot\theta\cos\phi\frac{\partial}{\partial\phi}\right)\right] \\
&= -\hbar^2\Bigg[\sin^2\phi\frac{\partial^2}{\partial\theta^2} + \sin\phi\cos\phi\left(\frac{\partial\cot\theta}{\partial\theta}\right)\frac{\partial}{\partial\phi} + \cot\theta\sin\phi\cos\phi\frac{\partial^2}{\partial\theta\partial\phi} \\
&\quad + \cot\theta\cos\phi\left(\frac{\partial\sin\phi}{\partial\phi}\right)\frac{\partial}{\partial\theta} + \cot\theta\sin\phi\cos\phi\frac{\partial^2}{\partial\phi\partial\theta} \\
&\quad + \cot^2\theta\cos\phi\left(\frac{\partial\cos\phi}{\partial\phi}\right)\frac{\partial}{\partial\phi} + \cot^2\theta\cos^2\phi\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}\Bigg] \\
&= -\hbar^2\Bigg[\sin^2\phi\frac{\partial^2}{\partial\theta^2} + \sin\phi\cos\phi\left(\frac{-1}{\sin^2\theta}\right)\frac{\partial}{\partial\phi} + \cot\theta\sin\phi\cos\phi\frac{\partial^2}{\partial\theta\partial\phi} \\
&\quad + \cot\theta\cos\phi(\cos\phi)\frac{\partial}{\partial\theta} + \cot\theta\sin\phi\cos\phi\frac{\partial^2}{\partial\phi\partial\theta} \\
&\quad + \cot^2\theta\cos\phi\,(-\sin\phi)\,\frac{\partial}{\partial\phi} + \cot^2\theta\cos^2\phi\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}\Bigg] \\
&= -\hbar^2\Bigg[\sin^2\phi\frac{\partial^2}{\partial\theta^2} + \cot\theta\cos^2\phi\frac{\partial}{\partial\theta} + 2\cot\theta\sin\phi\cos\phi\frac{\partial^2}{\partial\theta\partial\phi} \\
&\quad + \cot^2\theta\cos^2\phi\frac{\partial^2}{\partial\phi^2} - \frac{1+\cos^2\theta}{\sin^2\theta}\sin\phi\cos\phi\frac{\partial}{\partial\phi}\Bigg] \\
\hat{L}_y^2 &= -i\hbar\left(\cos\phi\frac{\partial}{\partial\theta} - \cot\theta\sin\phi\frac{\partial}{\partial\phi}\right)\left[-i\hbar\left(\cos\phi\frac{\partial}{\partial\theta} - \cot\theta\sin\phi\frac{\partial}{\partial\phi}\right)\right] \\
&= -\hbar^2\left[\cos\phi\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\cos\phi\frac{\partial}{\partial\theta} - \cot\theta\sin\phi\frac{\partial}{\partial\phi}\right) - \cot\theta\sin\phi\frac{\partial}{\partial\phi}\left(\cos\phi\frac{\partial}{\partial\theta} - \cot\theta\sin\phi\frac{\partial}{\partial\phi}\right)\right] \\
&= -\hbar^2\Bigg[\cos^2\phi\frac{\partial^2}{\partial\theta^2} - \sin\phi\cos\phi\left(\frac{\partial\cot\theta}{\partial\theta}\right)\frac{\partial}{\partial\phi} - \cot\theta\sin\phi\cos\phi\frac{\partial^2}{\partial\theta\partial\phi} \\
&\quad - \cot\theta\sin\phi\left(\frac{\partial\cos\phi}{\partial\phi}\right)\frac{\partial}{\partial\theta} - \cot\theta\sin\phi\cos\phi\frac{\partial^2}{\partial\theta\partial\phi} \\
&\quad + \cot^2\theta\sin\phi\left(\frac{\partial\sin\phi}{\partial\phi}\right)\frac{\partial}{\partial\phi} + \cot^2\theta\sin^2\phi\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}\Bigg] \\
&= -\hbar^2\Bigg[\cos^2\phi\frac{\partial^2}{\partial\theta^2} - \sin\phi\cos\phi\left(\frac{-1}{\sin^2\theta}\right)\frac{\partial}{\partial\phi} - \cot\theta\sin\phi\cos\phi\frac{\partial^2}{\partial\theta\partial\phi} \\
&\quad - \cot\theta\sin\phi\,(-\sin\phi)\,\frac{\partial}{\partial\theta} - \cot\theta\sin\phi\cos\phi\frac{\partial^2}{\partial\theta\partial\phi}
\end{aligned}$$

$$
\begin{aligned}
&\quad + \cot^2\theta \sin\phi\,(\cos\phi)\,\frac{\partial}{\partial\phi} + \cot^2\theta\sin^2\phi\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}\Bigg] \\
&= -\hbar^2\Bigg[\cos^2\phi\frac{\partial^2}{\partial\theta^2} + \cot\theta\sin^2\phi\frac{\partial}{\partial\theta} - 2\cot\theta\sin\phi\cos\phi\frac{\partial^2}{\partial\theta\partial\phi} \\
&\quad + \cot^2\theta\sin^2\phi\frac{\partial^2}{\partial\phi^2} + \frac{1+\cos^2\theta}{\sin^2\theta}\sin\phi\cos\phi\frac{\partial}{\partial\phi}\Bigg] \\
\hat{L}_z^2 &= \left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial\phi}\right)\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial\phi}\right) \\
&= -\hbar^2\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}
\end{aligned}
$$

のように計算されるので、全て足すと

$$
\begin{aligned}
\hat{\boldsymbol{L}}^2 &= -\hbar^2\Bigg[\sin^2\phi\frac{\partial^2}{\partial\theta^2} + \cot\theta\cos^2\phi\frac{\partial}{\partial\theta} + 2\cot\theta\sin\phi\cos\phi\frac{\partial^2}{\partial\theta\partial\phi} \\
&\quad + \cot^2\theta\cos^2\phi\frac{\partial^2}{\partial\phi^2} - \frac{1+\cos^2\theta}{\sin^2\theta}\sin\phi\cos\phi\frac{\partial}{\partial\phi}\Bigg] \\
&\quad - \hbar^2\Bigg[\cos^2\phi\frac{\partial^2}{\partial\theta^2} + \cot\theta\sin^2\phi\frac{\partial}{\partial\theta} - 2\cot\theta\sin\phi\cos\phi\frac{\partial^2}{\partial\theta\partial\phi} \\
&\quad + \cot^2\theta\sin^2\phi\frac{\partial^2}{\partial\phi^2} + \frac{1+\cos^2\theta}{\sin^2\theta}\sin\phi\cos\phi\frac{\partial}{\partial\phi}\Bigg] \\
&\quad - \hbar^2\frac{\partial^2}{\partial\phi^2} \\
&= -\hbar^2\Bigg[(\sin^2\phi+\cos^2\phi)\frac{\partial^2}{\partial\theta^2} + \cot\theta(\cos^2\phi+\sin^2\phi)\frac{\partial}{\partial\theta} \\
&\quad + \cot^2\theta(\cos^2\phi+\sin^2\phi)\frac{\partial^2}{\partial\phi^2} + \frac{\partial^2}{\partial\phi^2}\Bigg] \\
&= -\hbar^2\left[\frac{\partial^2}{\partial\theta^2} + \cot\theta\frac{\partial}{\partial\theta} + \frac{\cos^2\theta+\sin^2\theta}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}\right] \\
&= -\hbar^2\left[\frac{\partial^2}{\partial\theta^2} + \frac{\cos\theta}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta} + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}\right] \\
&= -\hbar^2\left[\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}\right]
\end{aligned}
$$

よって

$$
\begin{aligned}
\hat{\boldsymbol{L}}^2 Y(\theta,\phi) &= -\hbar^2\left[\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left[\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}Y(\theta,\phi)\right] + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}Y(\theta,\phi)\right] \\
&= -\hbar^2\hat{B}Y(\theta,\phi)
\end{aligned}
$$

を得る。

別解）示したいのは $\hat{B} = -\hat{\boldsymbol{L}}^2/\hbar^2$ であるので、変数分離前の式に戻ると

$$\begin{aligned} \boldsymbol{\nabla}^2 &= \frac{1}{r}\frac{\partial^2}{\partial r^2}r + \frac{1}{r^2}\hat{B} \\ \boldsymbol{\nabla}^2 &= \frac{1}{r}\frac{\partial^2}{\partial r^2}r - \frac{\hat{\boldsymbol{L}}^2}{\hbar^2 r^2} \end{aligned} \tag{C14}$$

を示せばよい。角運動量演算子を成分表示すると、

$$(\hat{\boldsymbol{L}})_i = (\hat{\boldsymbol{r}} \times \hat{\boldsymbol{p}})_i = \sum_{j,k=1}^{3} \epsilon_{ijk}\hat{r}_j\hat{p}_k$$

ここで添字の 1,2,3 はそれぞれ x, y, z 成分を表し、完全反対称テンソルは $\epsilon_{123} = 1$ として全ての添字の入れ替えに対して反対称である。このとき角運動量の 2 乗は

$$\begin{aligned} \hat{\boldsymbol{L}}^2 &= (\hat{\boldsymbol{r}} \times \hat{\boldsymbol{p}}) \cdot (\hat{\boldsymbol{r}} \times \hat{\boldsymbol{p}}) \\ &= \sum_i \sum_{jk} \epsilon_{ijk}\hat{r}_j\hat{p}_k \sum_{lm} \epsilon_{ilm}\hat{r}_l\hat{p}_m \\ &= \sum_{jklm} (\sum_i \epsilon_{ijk}\epsilon_{ilm})\hat{r}_j\hat{p}_k\hat{r}_l\hat{p}_m \\ &= \sum_{jklm} (\delta_{jl}\delta_{km} - \delta_{jm}\delta_{kl})\hat{r}_j\hat{p}_k\hat{r}_l\hat{p}_m \\ &= \sum_{jk} (\hat{r}_j\hat{p}_k\hat{r}_j\hat{p}_k - \hat{r}_j\hat{p}_k\hat{r}_k\hat{p}_j) \end{aligned} \tag{C15}$$

ここで公式[5]

$$\sum_i \epsilon_{ijk}\epsilon_{ilm} = \delta_{jl}\delta_{km} - \delta_{jm}\delta_{kl}$$

を使った。位置と運動量の交換関係は、3 次元の場合は同じ成分同士で交換させたときにのみ $i\hbar$ となるので

$$[\hat{r}_i, \hat{p}_j] = i\hbar\delta_{ij}, \quad \Rightarrow \quad \hat{r}_i\hat{p}_j - \hat{p}_j\hat{r}_i = i\hbar\delta_{ij}$$

これを用いると式 (C15) の第 1 項は

$$\begin{aligned} \sum_{jk} \hat{r}_j\hat{p}_k\hat{r}_j\hat{p}_k &= \sum_{jk} \hat{r}_j(\hat{r}_j\hat{p}_k - i\hbar\delta_{jk})\hat{p}_k \\ &= \sum_{jk} \hat{r}_j\hat{r}_j\hat{p}_k\hat{p}_k - i\hbar\sum_{jk} \hat{r}_j\hat{p}_k\delta_{jk} \\ &= \sum_j \hat{r}_j\hat{r}_j \sum_k \hat{p}_k\hat{p}_k - i\hbar\sum_j \hat{r}_j\hat{p}_j \\ &= (\hat{\boldsymbol{r}}^2)(\hat{\boldsymbol{p}}^2) - i\hbar\hat{\boldsymbol{r}} \cdot \hat{\boldsymbol{p}} \end{aligned}$$

[5]完全反対称性により ϵ の添字は全て異なるので、左辺の i を例えば 1 に固定すると (j,k)、(l,m) として許されるのは (2,3) または (3,2)。これらの組み合わせは必ず 2 つの添字の組が一致し、反対称性から符号を決めると右辺が得られる。

となる。一方第 2 項は

$$
\begin{aligned}
-\sum_{jk}\hat{r}_j\hat{p}_k\hat{r}_k\hat{p}_j &= -\sum_{jk}(\hat{p}_k\hat{r}_j + i\hbar\delta_{kj})\hat{r}_k\hat{p}_j \\
&= -\sum_{jk}\hat{p}_k\hat{r}_j\hat{r}_k\hat{p}_j - i\hbar\sum_{jk}\delta_{kj}\hat{r}_k\hat{p}_j \\
&= -\sum_{jk}\hat{p}_k\hat{r}_k\hat{r}_j\hat{p}_j - i\hbar\sum_{j}\hat{r}_j\hat{p}_j \\
&= -\sum_{jk}(\hat{r}_k\hat{p}_k - i\hbar\delta_{kk})\hat{r}_j\hat{p}_j - i\hbar\sum_{j}\hat{r}_j\hat{p}_j \\
&= -\sum_{k}\hat{r}_k\hat{p}_k\sum_{j}\hat{r}_j\hat{p}_j + i\hbar\sum_{k}\delta_{kk}\sum_{j}\hat{r}_j\hat{p}_j - i\hbar\sum_{j}\hat{r}_j\hat{p}_j \\
&= -(\hat{\boldsymbol{r}}\cdot\hat{\boldsymbol{p}})(\hat{\boldsymbol{r}}\cdot\hat{\boldsymbol{p}}) + 3i\hbar(\hat{\boldsymbol{r}}\cdot\hat{\boldsymbol{p}}) - i\hbar(\hat{\boldsymbol{r}}\cdot\hat{\boldsymbol{p}}) \\
&= -(\hat{\boldsymbol{r}}\cdot\hat{\boldsymbol{p}})(\hat{\boldsymbol{r}}\cdot\hat{\boldsymbol{p}}) + 2i\hbar(\hat{\boldsymbol{r}}\cdot\hat{\boldsymbol{p}})
\end{aligned}
$$

ここで

$$
\begin{aligned}
[\hat{r}_i, \hat{r}_j] = 0, \quad &\Rightarrow \quad \hat{r}_i\hat{r}_j = \hat{r}_j\hat{r}_i \\
\sum_k \delta_{kk} &= \delta_{11} + \delta_{22} + \delta_{33} = 3
\end{aligned}
$$

を用いた。以上まとめると

$$
\begin{aligned}
\hat{\boldsymbol{L}}^2 &= (\hat{\boldsymbol{r}}^2)(\hat{\boldsymbol{p}}^2) - i\hbar\hat{\boldsymbol{r}}\cdot\hat{\boldsymbol{p}} - (\hat{\boldsymbol{r}}\cdot\hat{\boldsymbol{p}})(\hat{\boldsymbol{r}}\cdot\hat{\boldsymbol{p}}) + 2i\hbar(\hat{\boldsymbol{r}}\cdot\hat{\boldsymbol{p}}) \\
(\hat{\boldsymbol{r}}^2)(\hat{\boldsymbol{p}}^2) &= (\hat{\boldsymbol{r}}\cdot\hat{\boldsymbol{p}})(\hat{\boldsymbol{r}}\cdot\hat{\boldsymbol{p}}) - i\hbar\hat{\boldsymbol{r}}\cdot\hat{\boldsymbol{p}} + \hat{\boldsymbol{L}}^2
\end{aligned}
$$

を得る。座標表示では

$$
\begin{aligned}
-\hbar^2 r^2\boldsymbol{\nabla}^2 &= -i\hbar(\boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{\nabla})[-i\hbar(\boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{\nabla})] - i\hbar(-i\hbar(\boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{\nabla})) + \hat{\boldsymbol{L}}^2 \\
-\hbar^2 r^2\boldsymbol{\nabla}^2 &= -\hbar^2(\boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{\nabla})(\boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{\nabla}) - \hbar^2(\boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{\nabla}) + \hat{\boldsymbol{L}}^2 \\
\boldsymbol{\nabla}^2 &= \frac{1}{r^2}(\boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{\nabla})(\boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{\nabla}) + \frac{1}{r^2}(\boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{\nabla}) - \frac{\hat{\boldsymbol{L}}^2}{\hbar^2 r^2}
\end{aligned}
$$

となる。ここで $\boldsymbol{r}$ は動径方向を向いているので、$\boldsymbol{r}$ との内積をとると $\boldsymbol{\nabla}$ の動径方向成分、つまり $\partial/(\partial r)$ が残る。よって

$$
\begin{aligned}
\boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{\nabla} &= r\frac{\partial}{\partial r} \\
(\boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{\nabla})(\boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{\nabla}) &= r\frac{\partial}{\partial r}\left(r\frac{\partial}{\partial r}\right) \\
&= r\frac{\partial}{\partial r} + r^2\frac{\partial^2}{\partial r^2}
\end{aligned}
$$

となるので

$$
\begin{aligned}
\boldsymbol{\nabla}^2 &= \frac{1}{r^2}\left(r\frac{\partial}{\partial r} + r^2\frac{\partial^2}{\partial r^2}\right) + \frac{1}{r^2}r\frac{\partial}{\partial r} - \frac{\hat{\boldsymbol{L}}^2}{\hbar^2 r^2} \\
&= \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r} - \frac{\hat{\boldsymbol{L}}^2}{\hbar^2 r^2} \\
&= \frac{1}{r}\frac{\partial^2}{\partial r^2}r - \frac{\hat{\boldsymbol{L}}^2}{\hbar^2 r^2}
\end{aligned}
$$

と式 (C14) を得る。

交換する演算子と同時固有状態

交換する演算子に対して、同時固有状態が存在することの説明。

演算子 $\hat{A}, \hat{B}$ が交換する場合

$$[\hat{A}, \hat{B}] = 0$$

を考える。$\hat{A}$ の固有値 a_i を持つ固有状態を $|\, a_i\,\rangle$ とすると

$$\hat{A}|\, a_i\,\rangle = a_i|\, a_i\,\rangle$$

左から $\hat{B}$ を作用させると、

$$\begin{aligned} \hat{B}\hat{A}|\, a_i\,\rangle &= a_i\hat{B}|\, a_i\,\rangle \\ \hat{A}\hat{B}|\, a_i\,\rangle &= a_i\hat{B}|\, a_i\,\rangle \qquad \leftarrow [\hat{A}, \hat{B}] = 0 \\ \hat{A}(\hat{B}|\, a_i\,\rangle) &= a_i(\hat{B}|\, a_i\,\rangle) \end{aligned} \tag{C16}$$

となる。これは状態 $\hat{B}|\, a_i\,\rangle$ の $\hat{A}$ の固有値が a_i であることを示している。

1) $\hat{A}$ の固有値に縮退がない場合
固有値 a_i を持つ状態は $|\, a_i\,\rangle$ のみなので、$\hat{B}|\, a_i\,\rangle$ は $|\, a_i\,\rangle$ に比例する。比例係数を b_i とおくと

$$\hat{B}|\, a_i\,\rangle = b_i|\, a_i\,\rangle$$

となり、これは $|\, a_i\,\rangle$ が固有値 b_i を持つ $\hat{B}$ の固有状態であることを示している。よってこの状態を $|\, a_i, b_i\,\rangle$ と書き直すと

$$\begin{aligned} \hat{A}|\, a_i, b_i\,\rangle &= a_i|\, a_i, b_i\,\rangle \\ \hat{B}|\, a_i, b_i\,\rangle &= b_i|\, a_i, b_i\,\rangle \end{aligned}$$

という同時固有状態が存在することになる。

2) $\hat{A}$ の固有値に縮退がある場合
固有値 a_i を持つ状態が N 個存在する（N 重に縮退している）とする。異なる状態を区別するために添字 n を導入すると、

$$\begin{aligned} \hat{A}|\, a_i^{(n)}\,\rangle &= a_i|\, a_i^{(n)}\,\rangle \quad (n = 1, 2, \cdots, N) \\ \langle\, a_i^{(n)}\,|\, a_i^{(m)}\,\rangle &= \delta_{nm} \end{aligned}$$

となる。どの $|\, a_i^{(n)}\,\rangle$ に $\hat{A}$ を作用させても同じ a_i を返すので、$C^{(n)}$ を定数として $|\, a_i^{(n)}\,\rangle$ の線型結合

$$|\, \psi\,\rangle = \sum_{n=1}^{N} C^{(n)}|\, a_i^{(n)}\,\rangle$$

を作ると、$|\,\psi\,\rangle$ の $\hat{A}$ の固有値は a_i になる：

$$\hat{A}|\,\psi\,\rangle = \sum_{n=1}^{N} C^{(n)}\hat{A}|\,a_i^{(n)}\,\rangle = \sum_{n=1}^{N} C^{(n)} a_i|\,a_i^{(n)}\,\rangle = a_i \sum_{n=1}^{N} C^{(n)}|\,a_i^{(n)}\,\rangle = a_i|\,\psi\,\rangle$$

つまり、固有値 a_i を持つ一般の状態は $|\,a_i^{(n)}\,\rangle$ の線型結合で書ける。$|\,a_i^{(n)}\,\rangle$ に対し (C16) を適用すると

$$\hat{A}(\hat{B}|\,a_i^{(n)}\,\rangle) = a_i(\hat{B}|\,a_i^{(n)}\,\rangle)$$

となるため、$\hat{B}|\,a_i^{(n)}\,\rangle$ は固有値 a_i を持つ $\hat{A}$ の固有状態であり、$|\,\psi\,\rangle$ のように展開できる。添字 n は既に使っているので、和をとる添字を m にして、展開係数を $b_i^{(m,n)}$（固有値 a_i を持つ n 番目の状態を展開した時の m 番目の状態の係数）とすると

$$\hat{B}|\,a_i^{(n)}\,\rangle = \sum_{m=1}^{N} b_i^{(m,n)}|\,a_i^{(m)}\,\rangle$$

左から $\langle\,a_i^{(\ell)}\,|$ をかけると

$$\langle\,a_i^{(\ell)}\,|\hat{B}|\,a_i^{(n)}\,\rangle = \sum_{m=1}^{N} b_i^{(m,n)}\langle\,a_i^{(\ell)}\,|\,a_i^{(m)}\,\rangle = \sum_{m=1}^{N} b_i^{(m,n)}\delta_{\ell m} = b_i^{(\ell,n)}$$

となる。つまり $b_i^{(\ell,n)}$ は $\hat{B}$ の行列要素である。$\hat{B}$ がエルミート演算子のとき、$\hat{B}$ の行列要素はエルミート行列になる。任意のエルミート行列はユニタリー行列で対角化できるので、相似変換で

$$\langle\,a_i^{(\ell)}\,|\hat{B}|\,a_i^{(n)}\,\rangle \sim \begin{pmatrix} b_i^{(1)} & & & \\ & b_i^{(2)} & & \\ & & \ddots & \\ & & & b_i^{(N)} \end{pmatrix}$$

となる。これは、適切な $|\,a_i^{(m)}\,\rangle$ の線型結合を取ると、$\hat{B}$ の固有値が $b_i^{(n)}$ となるような状態が作れることを意味している。よって固有値 $b_i^{(n)}$ を与えるような $|\,a_i^{(m)}\,\rangle$ の線型結合を $|\,a_i, b_i^{(n)}\,\rangle$ と書き直すと

$$\begin{aligned} \hat{A}|\,a_i, b_i^{(n)}\,\rangle &= a_i|\,a_i, b_i^{(n)}\,\rangle \\ \hat{B}|\,a_i, b_i^{(n)}\,\rangle &= b_i^{(n)}|\,a_i, b_i^{(n)}\,\rangle \end{aligned}$$

という同時固有状態が存在することになる。

ルジャンドル多項式

ルジャンドルの微分方程式

$$(1-z^2)\frac{d^2}{dz^2}P(z)-2z\frac{d}{dz}P(z)+\lambda P(z)=0 \tag{106}$$

の有限の（発散しない）解を得るには ℓ を非負整数として $\lambda=\ell(\ell+1)$ が成立する必要があり、解がルジャンドル多項式 $P_\ell(z)$ になることの説明。

解の性質を調べるために級数展開

$$P(z)=\sum_{n=0}^{\infty}a_n z^n \tag{107}$$

を代入すると、

$$\begin{aligned}
(1-z^2)\frac{d^2}{dz^2}\sum_{n=0}^{\infty}a_n z^n-2z\frac{d}{dz}\sum_{n=0}^{\infty}a_n z^n+\lambda\sum_{n=0}^{\infty}a_n z^n&=0\\
\sum_{\ell=0}^{\infty}\left[(1-z^2)a_n\frac{d}{dz}nz^{n-1}-2za_n nz^{n-1}+\lambda a_n z^n\right]&=0\\
\sum_{n=0}^{\infty}\left[(1-z^2)a_n n(n-1)z^{n-2}-2na_n z^n+\lambda a_n z^n\right]&=0\\
\sum_{n=0}^{\infty}n(n-1)a_n z^{n-2}+\sum_{n=0}^{\infty}\left[-(n^2-n)-2n+\lambda\right]a_n z^n&=0\\
\sum_{m=-2}^{\infty}(m+2)(m+1)a_{m+2}z^m+\sum_{n=0}^{\infty}\left(-n^2-n+\lambda\right)a_n z^n&=0\quad(m+2=n)
\end{aligned}$$

z のべきの各項が 0 にならないといけないので、z^ℓ の項の係数に注目すると

$$\begin{aligned}
(\ell+2)(\ell+1)a_{\ell+2}+\left(-\ell^2-\ell+\lambda\right)a_\ell=0&\\
(\ell+2)(\ell+1)a_{\ell+2}&=\left(\ell^2+\ell-\lambda\right)a_\ell\\
a_{\ell+2}&=\frac{\ell(\ell+1)-\lambda}{(\ell+2)(\ell+1)}a_\ell
\end{aligned} \tag{108}$$

という a_ℓ に関する漸化式を得る。a_0, a_1（2 階の微分方程式なので積分定数は 2 つ）を与えれば式 (108) が全ての a_ℓ を決定し、固有関数 $P(z)$ が定まる。もし λ が任意の実数で $a_0\neq 0$、$a_1\neq 0$ なら級数は $\ell\to\infty$ の次数まで続く。ℓ が大きいときの係数は

$$a_{\ell+2}=\frac{\ell^2+\cdots}{\ell^2+\cdots}a_\ell\sim a_\ell\quad \ell\gg 1$$

となることから、十分大きい ℓ では係数は一定の値に収束する

$$\lim_{\ell\to\infty}a_\ell=a$$

このとき、$P(z)$ の $z=1$ での値は

$$P(z=1)=\sum_{\ell=0}^{\infty}a_\ell\sim\sum_{\ell\gg1}^{\infty}a=\infty$$

と発散してしまう。$P(z)$ は波動関数の一部分なので、発散すると波動関数としての性質を満たさない（確率が無限大）。$z=1$ で $P(z)$ が発散しないためには**級数展開が有限項で終わる**必要がある。λ が任意の実数のままで発散しない解を作るには

$$a_0=a_1=0$$

つまり全ての項の係数を 0 にして

$$P(z)=0$$

とするしかないが、これは物理的意味のない自明な解 $\psi(\boldsymbol{r})=0$ になってしまう。もし非負整数 ℓ に対し

$$\lambda=\ell(\ell+1) \tag{109}$$

であれば、

$$\begin{aligned}
&\vdots\\
a_{\ell-2}&=\frac{(\ell-4)(\ell-3)-\ell(\ell+1)}{(\ell-2)(\ell-3)}a_{\ell-4}=\frac{-8\ell+12}{(\ell-2)(\ell-3)}a_{\ell-4}\\
a_\ell&=\frac{(\ell-2)(\ell-1)-\ell(\ell+1)}{\ell(\ell-1)}a_{\ell-2}=\frac{-4\ell+2}{\ell(\ell-1)}a_{\ell-2}\\
a_{\ell+2}&=\frac{\ell(\ell+1)-\ell(\ell+1)}{(\ell+2)(\ell+1)}a_\ell=0\\
&\vdots
\end{aligned}$$

のように、$a_{\ell-2},a_{\ell-4},\cdots$ が有限であっても $a_{\ell+2},a_{\ell+4},\cdots$ は全て 0 になる。$a_{\ell-2},a_{\ell-4},\cdots$ を有限にするには、

1.) ℓ が偶数の場合：$a_0\neq0$

2.) ℓ が奇数の場合：$a_1\neq0$

という条件が必要である（$\lambda=\ell(\ell+1)$ であったとしても、$a_0=a_1=0$ であれば自明な解 $P(z)=0$ になってしまう）。

a_ℓ から 1 ずれた系列の漸化式、つまり 1.) の場合の奇数次項、2.) の場合の偶数次項について考える。この級数は $\lambda=\ell(\ell+1)$ としても初項が 0 でない限り無限に続く。よって意味のある解を得るためには

1.) ℓ が偶数の場合：$a_1 = 0$

2.) ℓ が奇数の場合：$a_0 = 0$

という条件が必要であり、これを**要請する**（シュレディンガー方程式を解く際に、束縛状態の波動関数が無限遠での境界条件を満たすように遠方で発散する解を捨てる操作と同じ）。まとめると、物理的に意味のある解の条件は非負整数 ℓ に対し $\lambda = \ell(\ell+1)$ として、

1.) ℓ が偶数の場合：$a_0 \neq 0$、$a_1 = 0$

2.) ℓ が奇数の場合：$a_1 \neq 0$、$a_0 = 0$

となる。つまり 1.) の場合 $P(z)$ は有限の偶数べきのみの多項式、2.) の場合は有限の奇数べきのみの多項式になる。この場合の解を（有限項の和なので）**ルジャンドル多項式**と呼び $P_\ell(z)$ と書く。具体的な形は

$$P_\ell(z) = \frac{1}{2^\ell \ell!} \frac{d^\ell}{dz^\ell} (z^2 - 1)^\ell \tag{110}$$

で与えられる。（$z^{2\ell}$ を ℓ 回微分するので）**$P_\ell(z)$ の最大の次数の項は z^ℓ**。具体形は

$$\begin{aligned}
P_0(z) &= 1 \\
P_1(z) &= z \\
P_2(z) &= \frac{1}{2}(3z^2 - 1) \\
P_3(z) &= \frac{1}{2}(5z^3 - 3z) \\
P_4(z) &= \frac{1}{8}(35z^4 - 30z^2 + 3) \\
&\ \ \vdots
\end{aligned}$$

ルジャンドル陪微分方程式

ルジャンドル陪多項式

$$P_\ell^m(z) = (1-z^2)^{|m|/2} \frac{d^{|m|} P_\ell(z)}{dz^{|m|}} \tag{111}$$

がルジャンドル陪微分方程式（$\lambda = \ell(\ell+1)$ を代入）

$$\frac{d}{dz}\left[(1-z^2)\frac{d}{dz}P_\ell^m(z)\right] + \left(\ell(\ell+1) - \frac{m^2}{1-z^2}\right) P_\ell^m(z) = 0 \tag{104}$$

の解になっていることの説明。

$m = 0$ の場合、式 (111) は

$$P_\ell^m(z) = (1-z^2)^0 \frac{d^0 P_\ell(z)}{dz^0} = P_\ell(z)$$

とルジャンドル多項式に帰着し、式 (104) もルジャンドルの微分方程式になるため、明らかに解になっている。$m < 0$ の場合、式 (104) は

$$\frac{d}{dz}\left[(1-z^2)\frac{d}{dz}P_\ell^{-|m|}(z)\right] + \left(\ell(\ell+1) - \frac{m^2}{1-z^2}\right) P_\ell^{-|m|}(z) = 0$$

となるが、これは $P_\ell^{|m|}(z)$ に対する微分方程式と同じ形をしている。つまり解 $P_\ell^{-|m|}(z)$ と $P_\ell^{|m|}(z)$ は同じ形をしており、$m > 0$ の場合に式 (111) が式 (104) を満たすことを示せば良い。

以下 $m > 0$ とし

$$P_\ell^m(z) = (1-z^2)^{m/2} \frac{d^m P_\ell(z)}{dz^m}$$

について考える。方針は以下のとおり：

1.) ルジャンドルの微分方程式を z で m 階微分する

2.) $P_\ell^m(z)$ の z による 1 階、2 階微分を計算する

3.) 1.) の結果に $(1-z^2)^{m/2}$ をかけて 2.) を用いることで $P_\ell^m(z)$ が式 (104) を満たすことを示す。

1.) 準備として以下の微分を計算する

$$
\begin{aligned}
\frac{d^m}{dz^m}\left[z^2\frac{d^2}{dz^2}P_\ell(z)\right] &= \frac{d^{m-1}}{dz^{m-1}}\left[2z\frac{d^2}{dz^2}P_\ell(z)+z^2\frac{d^3}{dz^3}P_\ell(z)\right] \\
&= \frac{d^{m-2}}{dz^{m-2}}\left[\frac{d}{dz}\left(2z\frac{d^2}{dz^2}P_\ell(z)\right)+\frac{d}{dz}\left(z^2\frac{d^3}{dz^3}P_\ell(z)\right)\right] \\
&= \frac{d^{m-2}}{dz^{m-2}}\left[2\frac{d^2}{dz^2}P_\ell(z)+2z\frac{d^3}{dz^3}P_\ell(z)+2z\frac{d^3}{dz^3}P_\ell(z)+z^2\frac{d^4}{dz^4}P_\ell(z)\right] \\
&= \frac{d^{m-2}}{dz^{m-2}}\left[2\frac{d^2}{dz^2}P_\ell(z)+4z\frac{d^3}{dz^3}P_\ell(z)+z^2\frac{d^4}{dz^4}P_\ell(z)\right] \qquad \text{(C17)} \\
&= \frac{d^{m-3}}{dz^{m-3}}\left[2\frac{d^3}{dz^3}P_\ell(z)+\frac{d}{dz}\left(4z\frac{d^3}{dz^3}P_\ell(z)\right)+\frac{d}{dz}\left(z^2\frac{d^4}{dz^4}P_\ell(z)\right)\right] \\
&= \frac{d^{m-3}}{dz^{m-3}}\left[2\frac{d^3}{dz^3}P_\ell(z)+4\frac{d^3}{dz^3}P_\ell(z)+4z\frac{d^4}{dz^4}P_\ell(z)+2z\frac{d^4}{dz^4}P_\ell(z)+z^2\frac{d^5}{dz^5}P_\ell(z)\right] \\
&= \frac{d^{m-3}}{dz^{m-3}}\left[6\frac{d^3}{dz^3}P_\ell(z)+6z\frac{d^4}{dz^4}P_\ell(z)+z^2\frac{d^5}{dz^5}P_\ell(z)\right] \qquad \text{(C18)}
\end{aligned}
$$

ここで (C17) と (C18) を比較すると、第 2 項の係数は微分を 1 回処理するごとに（z^2 を微分して出てくる）$2z$ が加算されるので n 回目には $2nz$、第 1 項の係数は毎回（$2(n-\ell)z$ を微分して出てくる）第 2 項の係数が加えられるので

$$
\sum_{\ell=1}^{n}2(n-\ell)=2n\sum_{\ell=1}^{n}1-2\sum_{\ell=1}^{n}\ell=2n^2-2\frac{n(n+1)}{2}=n^2-n=n(n-1)
$$

となる。よって n 個の微分を処理した段階で

$$
\frac{d^m}{dz^m}\left[z^2\frac{d^2}{dz^2}P_\ell(z)\right]=\frac{d^{m-n}}{dz^{m-n}}\left[n(n-1)\frac{d^n}{dz^n}P_\ell(z)+2nz\frac{d^{n+1}}{dz^{n+1}}P_\ell(z)+z^2\frac{d^{n+2}}{dz^{n+2}}P_\ell(z)\right]
$$

となることがわかる。最終的に m 個全ての微分を処理すると（$n=m$ とすると）

$$
\frac{d^m}{dz^m}\left[z^2\frac{d^2}{dz^2}P_\ell(z)\right]=m(m-1)\frac{d^m}{dz^m}P_\ell(z)+2mz\frac{d^{m+1}}{dz^{m+1}}P_\ell(z)+z^2\frac{d^{m+2}}{dz^{m+2}}P_\ell(z)
$$

となることがわかる。同様に

$$
\begin{aligned}
\frac{d^m}{dz^m}\left[z\frac{d}{dz}P_\ell(z)\right] &= \frac{d^{m-1}}{dz^{m-1}}\left[\frac{d}{dz}P_\ell(z)+z\frac{d^2}{dz^2}P_\ell(z)\right] \\
&= \frac{d^{m-2}}{dz^{m-2}}\left[\frac{d^2}{dz^2}P_\ell(z)+\frac{d}{dz}\left(z\frac{d^2}{dz^2}P_\ell(z)\right)\right] \\
&= \frac{d^{m-2}}{dz^{m-2}}\left[\frac{d^2}{dz^2}P_\ell(z)+\frac{d^2}{dz^2}P_\ell(z)+z\frac{d^3}{dz^3}P_\ell(z)\right] \\
&= \frac{d^{m-2}}{dz^{m-2}}\left[2\frac{d^2}{dz^2}P_\ell(z)+z\frac{d^3}{dz^3}P_\ell(z)\right] \\
&= \frac{d^{m-3}}{dz^{m-3}}\left[2\frac{d^3}{dz^3}P_\ell(z)+\frac{d}{dz}\left(z\frac{d^3}{dz^3}P_\ell(z)\right)\right]
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
&= \frac{d^{m-3}}{dz^{m-3}}\left[2\frac{d^3}{dz^3}P_\ell(z) + \frac{d^3}{dz^3}P_\ell(z) + z\frac{d^4}{dz^4}P_\ell(z)\right] \\
&= \frac{d^{m-3}}{dz^{m-3}}\left[3\frac{d^3}{dz^3}P_\ell(z) + z\frac{d^4}{dz^4}P_\ell(z)\right] \\
&= \cdots \\
&= \frac{d^{m-n}}{dz^{m-n}}\left[n\frac{d^n}{dz^n}P_\ell(z) + z\frac{d^{n+1}}{dz^{n+1}}P_\ell(z)\right] \\
&= \cdots \\
&= m\frac{d^m}{dz^m}P_\ell(z) + z\frac{d^{m+1}}{dz^{m+1}}P_\ell(z)
\end{aligned}
$$

となる。以上を利用してルジャンドルの微分方程式を m 階微分すると

$$
\begin{aligned}
0 &= \frac{d^m}{dz^m}\left[(1-z^2)\frac{d^2}{dz^2}P_\ell(z) - 2z\frac{d}{dz}P_\ell(z) + \ell(\ell+1)P_\ell(z)\right] \\
&= \frac{d^{m+2}}{dz^{m+2}}P_\ell(z) - \frac{d^m}{dz^m}\left[z^2\frac{d^2}{dz^2}P_\ell(z)\right] - 2\frac{d^m}{dz^m}\left[z\frac{d}{dz}P_\ell(z)\right] + \ell(\ell+1)\frac{d^m}{dz^m}P_\ell(z) \\
&= \frac{d^{m+2}}{dz^{m+2}}P_\ell(z) - m(m-1)\frac{d^m}{dz^m}P_\ell(z) - 2mz\frac{d^{m+1}}{dz^{m+1}}P_\ell(z) - z^2\frac{d^{m+2}}{dz^{m+2}}P_\ell(z) \\
&\quad - 2m\frac{d^m}{dz^m}P_\ell(z) - 2z\frac{d^{m+1}}{dz^{m+1}}P_\ell(z) + \ell(\ell+1)\frac{d^m}{dz^m}P_\ell(z) \\
&= \frac{d^{m+2}}{dz^{m+2}}P_\ell(z) - z^2\frac{d^{m+2}}{dz^{m+2}}P_\ell(z) \\
&\quad - 2mz\frac{d^{m+1}}{dz^{m+1}}P_\ell(z) - 2z\frac{d^{m+1}}{dz^{m+1}}P_\ell(z) \\
&\quad - m(m-1)\frac{d^m}{dz^m}P_\ell(z) - 2m\frac{d^m}{dz^m}P_\ell(z) + \ell(\ell+1)\frac{d^m}{dz^m}P_\ell(z) \\
&= (1-z^2)\frac{d^{m+2}}{dz^{m+2}}P_\ell(z) - 2(m+1)z\frac{d^{m+1}}{dz^{m+1}}P_\ell(z) + [\ell(\ell+1) - m(m+1)]\frac{d^m}{dz^m}P_\ell(z) \qquad \text{(C19)}
\end{aligned}
$$

という関係を得る。

2.) 次にルジャンドル陪多項式（$m > 0$）を z で微分すると

$$
\begin{aligned}
\frac{d}{dz}P_\ell^m(z) &= \frac{d}{dz}\left[(1-z^2)^{m/2}\frac{d^m P_\ell(z)}{dz^m}\right] \\
&= \frac{m}{2}(1-z^2)^{m/2-1}(-2z)\frac{d^m P_\ell(z)}{dz^m} + (1-z^2)^{m/2}\frac{d^{m+1}}{dz^{m+1}}P_\ell(z) \\
&= -mz(1-z^2)^{-1}(1-z^2)^{m/2}\frac{d^m P_\ell(z)}{dz^m} + (1-z^2)^{m/2}\frac{d^{m+1}}{dz^{m+1}}P_\ell(z) \\
&= -\frac{mz}{1-z^2}P_\ell^m(z) + (1-z^2)^{m/2}\frac{d^{m+1}}{dz^{m+1}}P_\ell(z) \\
(1-z^2)^{m/2}\frac{d^{m+1}}{dz^{m+1}}P_\ell(z) &= \frac{d}{dz}P_\ell^m(z) + \frac{mz}{1-z^2}P_\ell^m(z) \qquad \text{(C20)}
\end{aligned}
$$

という関係を得る。この結果を用いて $P_\ell^m(z)$ を z で 2 階微分すると

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

ここで (C20) を使うと

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

よって

$$(1-z^2)^{m/2}\frac{d^{m+2}}{dz^{m+2}}P_\ell(z)=\frac{m+mz^2+m^2z^2}{(1-z^2)^2}P_\ell^m(z)+\frac{2mz}{1-z^2}\frac{d}{dz}P_\ell^m(z)+\frac{d^2}{dz^2}P_\ell^m(z) \qquad \text{(C21)}$$

を得る。

3.) 最後に (C19) に $(1-z^2)^{m/2}$ をかけて (C20) と (C21) およびルジャンドル陪多項式の定義を代入すると

$$\begin{aligned}
0 &= (1-z^2)(1-z^2)^{m/2}\frac{d^{m+2}}{dz^{m+2}}P_\ell(z)-2(m+1)z(1-z^2)^{m/2}\frac{d^{m+1}}{dz^{m+1}}P_\ell(z) \\
&\quad +[\ell(\ell+1)-m(m+1)](1-z^2)^{m/2}\frac{d^m}{dz^m}P_\ell(z)
\end{aligned}$$

$$
\begin{aligned}
0 &= (1-z^2)\left[\frac{m+mz^2+m^2z^2}{(1-z^2)^2}P_\ell^m(z)+\frac{2mz}{1-z^2}\frac{d}{dz}P_\ell^m(z)+\frac{d^2}{dz^2}P_\ell^m(z)\right] \\
&\quad -2(m+1)z\left[\frac{d}{dz}P_\ell^m(z)+\frac{mz}{1-z^2}P_\ell^m(z)\right] \\
&\quad +[\ell(\ell+1)-m(m+1)]P_\ell^m(z) \\
0 &= (1-z^2)\frac{d^2}{dz^2}P_\ell^m(z)+\frac{m+mz^2+m^2z^2}{1-z^2}P_\ell^m(z)+2mz\frac{d}{dz}P_\ell^m(z) \\
&\quad -2(m+1)z\frac{d}{dz}P_\ell^m(z)+\frac{-2(m^2+m)z^2}{1-z^2}P_\ell^m(z) \\
&\quad +[\ell(\ell+1)-m(m+1)]P_\ell^m(z) \\
0 &= (1-z^2)\frac{d^2}{dz^2}P_\ell^m(z) \\
&\quad +2mz\frac{d}{dz}P_\ell^m(z)+(-2mz-2z)\frac{d}{dz}P_\ell^m(z) \\
&\quad +\frac{m+mz^2+m^2z^2}{1-z^2}P_\ell^m(z)+\frac{-2(m^2+m)z^2}{1-z^2}P_\ell^m(z)+[\ell(\ell+1)-m(m+1)]P_\ell^m(z) \\
0 &= (1-z^2)\frac{d^2}{dz^2}P_\ell^m(z)-2z\frac{d}{dz}P_\ell^m(z) \\
&\quad +\left[\ell(\ell+1)+\frac{m+(m^2+m)z^2-2(m^2+m)z^2-(m^2+m)(1-z^2)}{1-z^2}\right]P_\ell^m(z) \\
0 &= (1-z^2)\frac{d^2}{dz^2}P_\ell^m(z)-2z\frac{d}{dz}P_\ell^m(z)+\left(\ell(\ell+1)-\frac{m^2}{1-z^2}\right)P_\ell^m(z)
\end{aligned}
$$

これは

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

より式 (104) と等価である。よってルジャンドル陪多項式はルジャンドル陪微分方程式の解である。