

角運動量演算子

角運動量演算子と 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。

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

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

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

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

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

角運動量演算子の2乗：

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

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 \left[\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} \right. \\ &\quad \left. + \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} \right. \\ &\quad \left. + \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} \right] \\ &= -\hbar^2 \left[\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} \right. \\ &\quad \left. + \cot\theta \cos\phi (\cos\phi) \frac{\partial}{\partial\theta} + \cot\theta \sin\phi \cos\phi \frac{\partial^2}{\partial\phi\partial\theta} \right. \\ &\quad \left. + \cot^2\theta \cos\phi (-\sin\phi) \frac{\partial}{\partial\phi} + \cot^2\theta \cos^2\phi \frac{\partial^2}{\partial\phi^2} \right] \\ &= -\hbar^2 \left[\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} \right. \\ &\quad \left. + \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} \right] \\ \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 \left[\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} \right. \\ &\quad \left. - \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} \right. \\ &\quad \left. + \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} \right] \\ &= -\hbar^2 \left[\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} \right. \\ &\quad \left. - \cot\theta \sin\phi (-\sin\phi) \frac{\partial}{\partial\theta} - \cot\theta \sin\phi \cos\phi \frac{\partial^2}{\partial\theta\partial\phi} \right] \end{aligned}$$

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

のように計算されるので、全て足すと

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

よって

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

を得る。

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

$$\begin{aligned}\nabla^2 &= \frac{1}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} r + \frac{1}{r^2} \hat{B} \\ \nabla^2 &= \frac{1}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} r - \frac{\hat{\mathbf{L}}^2}{\hbar^2 r^2}\end{aligned}\tag{C15}$$

を示せばよい。角運動量演算子を成分表示すると、

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

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

$$\begin{aligned}\hat{\mathbf{L}}^2 &= (\hat{\mathbf{r}} \times \hat{\mathbf{p}}) \cdot (\hat{\mathbf{r}} \times \hat{\mathbf{p}}) \\ &= \sum_i \sum_{jk} \epsilon_{ijk} \hat{r}_j \hat{p}_k \sum_{lm} \epsilon_{ilm} \hat{r}_l \hat{p}_m \\ &= \sum_{jklm} \left(\sum_i \epsilon_{ijk} \epsilon_{ilm} \right) \hat{r}_j \hat{p}_k \hat{r}_l \hat{p}_m \\ &= \sum_{jklm} (\delta_{jl} \delta_{km} - \delta_{jm} \delta_{kl}) \hat{r}_j \hat{p}_k \hat{r}_l \hat{p}_m \\ &= \sum_{jk} (\hat{r}_j \hat{p}_k \hat{r}_j \hat{p}_k - \hat{r}_j \hat{p}_k \hat{r}_k \hat{p}_j)\end{aligned}\tag{C16}$$

ここで公式⁶

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

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 (C16) の第 1 項は

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

⁶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

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

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

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

を得る。座標表示では

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

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

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

となるので

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

と式 (C15) 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、

$$\begin{aligned}\hat{B}\hat{A}|a_i\rangle &= a_i\hat{B}|a_i\rangle \\ \hat{A}\hat{B}|a_i\rangle &= a_i\hat{B}|a_i\rangle \quad \leftarrow [\hat{A}, \hat{B}] = 0 \\ \hat{A}(\hat{B}|a_i\rangle) &= a_i(\hat{B}|a_i\rangle)\end{aligned}\tag{C17}$$

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、

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

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 $|a_i^{(n)}\rangle$ の線形結合

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

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 $|a_i^{(n)}\rangle$ の線形結合で書ける。 $|a_i^{(n)}\rangle$ に対し (C17) 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

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

となる。これは、適切な $|a_i^{(m)}\rangle$ の線形結合を取ると、 \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 $|a_i^{(m)}\rangle$ の線形結合を $|a_i, b_i^{(n)}\rangle$ 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

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

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る、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

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

を代入すると、

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

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

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

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 $\ell \rightarrow \infty$ の次数まで続く。 ℓ が大きいときの係数は

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

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

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

このとき、 $P(z)$ の $z = 1$ での値は

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

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 $\psi(\mathbf{r}) = 0$ 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、 $a_{\ell-2}, a_{\ell-4}, \dots$ が有限であっても $a_{\ell+2}, a_{\ell+4}, \dots$ は全て 0 になる。 $a_{\ell-2}, a_{\ell-4}, \dots$ を有限にするには、

- 1.) ℓ が偶数の場合： $a_0 \neq 0$
- 2.) ℓ が奇数の場合： $a_1 \neq 0$

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

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

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

$$P_0(z) = 1$$

$$P_1(z) = z$$

$$P_2(z) = \frac{1}{2}(3z^2 - 1)$$

$$P_3(z) = \frac{1}{2}(5z^3 - 3z)$$

$$P_4(z) = \frac{1}{8}(35z^4 - 30z^2 + 3)$$

⋮

ルジャンドル陪微分方程式

ルジャンドル陪多項式

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

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

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

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

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

$$\begin{aligned}
&= \frac{d^{m-3}}{dz^{m-3}} \left[2 \frac{d^3}{dz^3} P_\ell(z) + \frac{d}{dz} \left(4z \frac{d^3}{dz^3} P_\ell(z) \right) + \frac{d}{dz} \left(z^2 \frac{d^4}{dz^4} P_\ell(z) \right) \right] \\
&= \frac{d^{m-3}}{dz^{m-3}} \left[2 \frac{d^3}{dz^3} P_\ell(z) + 4 \frac{d^3}{dz^3} P_\ell(z) + 4z \frac{d^4}{dz^4} P_\ell(z) + 2z \frac{d^4}{dz^4} P_\ell(z) + z^2 \frac{d^5}{dz^5} P_\ell(z) \right] \\
&= \frac{d^{m-3}}{dz^{m-3}} \left[6 \frac{d^3}{dz^3} P_\ell(z) + 6z \frac{d^4}{dz^4} P_\ell(z) + z^2 \frac{d^5}{dz^5} P_\ell(z) \right] \tag{C19}
\end{aligned}$$

ここで (C18) と (C19) 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

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

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

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

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

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

$$\begin{aligned}
\frac{d}{dz} P_\ell^m(z) &= \frac{d}{dz} \left[(1-z^2)^{m/2} \frac{d^m P_\ell(z)}{dz^m} \right] \\
&= \frac{m}{2} (1-z^2)^{m/2-1} (-2z) \frac{d^m P_\ell(z)}{dz^m} + (1-z^2)^{m/2} \frac{d^{m+1} P_\ell(z)}{dz^{m+1}} \\
&= -mz (1-z^2)^{-1} (1-z^2)^{m/2} \frac{d^m P_\ell(z)}{dz^m} + (1-z^2)^{m/2} \frac{d^{m+1} P_\ell(z)}{dz^{m+1}} \\
&= -\frac{mz}{1-z^2} P_\ell^m(z) + (1-z^2)^{m/2} \frac{d^{m+1} P_\ell(z)}{dz^{m+1}} \\
(1-z^2)^{m/2} \frac{d^{m+1} P_\ell(z)}{dz^{m+1}} &= \frac{d}{dz} P_\ell^m(z) + \frac{mz}{1-z^2} P_\ell^m(z) \quad (\text{C21})
\end{aligned}$$

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 (C21) 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

$$(1-z^2)^{m/2} \frac{d^{m+2}}{dz^{m+2}}P_\ell(z) = \frac{m+mz^2+m^2z^2}{(1-z^2)^2}P_\ell^m(z) + \frac{2mz}{1-z^2} \frac{d}{dz} P_\ell^m(z) + \frac{d^2}{dz^2}P_\ell^m(z) \quad (\text{C22})$$

を得る。

3.) 最後に (C20) に $(1-z^2)^{m/2}$ をかけて (C21) と (C22) 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。