

第4章 ルジャンドル関数

ルジャンドル関数は、ヘルムホルツ方程式を極座標で変数分離したときに現れる天頂角の依存性を表す微分方程式の解である。物理学で興味のあるルジャンドル関数は多項式で表現されるので、ルジャンドル多項式と呼ばれる。本章は、ルジャンドルの微分方程式の解としてルジャンドル関数を定義し、その性質を調べる。

4.1 ルジャンドル多項式

ルジャンドルの微分方程式は、ヘルムホルツ方程式を球面座標で変数分離したときの天頂角依存性に関する微分方程式である。本章の応用例で、ヘルムホルツ方程式からルジャンドル微分方程式を導出するが、その結果は、

$$(1 - x^2)y''(x) - 2xy'(x) + n(n + 1) = 0, \quad (4.1)$$

のような形をしている。

4.1.1 ルジャンドル微分方程式の級数解

微分方程式 (4.1) の解を、前章と同様に級数解として求めてみよう。微分方程式 (4.1) の解を、

$$y(x) = \sum_{k=0}^{\infty} c_k x^{p+k}, \quad (4.2)$$

と仮定しよう。ここで、少なくとも $c_0 \neq 0$ であるとする。つまり、 p は級数の最低次数である。この式を微分方程式 (4.1) に代入すると、

$$p(p-1)c_0x^{p-2} + \sum_{k=0}^{\infty} \left[(p+k+2)(p+k+1)c_{k+2} + \left[n(n+1) - (p+k)(p+k+1) \right] c_k \right] x^{k+p} = 0, \quad (4.3)$$

が得られる。この式が恒等的に成立するには、すべての次数の係数がゼロでなければならない。まず、 x^{p-2} の係数に着目すると、 $p = 0, 1$ となる。つまり、最低次数はゼロか1である。続いて、最低次数が0, 1のそれぞれに対して展開係数を決定しよう。

最低次数が0の場合 ルジャンドル微分方程式に、級数を仮定した解を代入して得られた関係式(4.3)について、 $k+p$ 次の係数がゼロである条件から、展開係数は、

$$c_{k+2} = -\frac{n(n+1) - k(k+1)}{(k+2)(k+1)}c_k = -\frac{(n-k)(n+k+1)}{(k+2)(k+1)}c_k,$$

なる関係式を満たす。展開式の最低次の係数 c_0 が決まれば、この関係式を用いて偶数項 c_{2k} が順次、決まっていく。奇数次を決めるには c_1 が必要であるが、その値を決める条件が(4.3)に規定されていない。とりあえず、 $c_1 = 0$ としておこう。つまり、展開係数の奇数項は、必ず、ゼロであると仮定したことになる。展開係数の偶数項を計算するため、上に書いた展開係数の漸化式を、

$$c_{2k} = -\frac{(n-2k+2)(n+2k+1)}{2k(2k-1)}c_{2(k-1)},$$

のように書き換えておこう。この漸化式を見ると、 $n-2k+2=0$ を満たすと展開係数がゼロになる。また、それ以降の展開係数はすべてゼロとなる。つまり、 n がゼロ、または、正の偶数であれば、級数解は有限項の多項式となる。ここで、 $n \equiv 2m$ としておこう。その過程のもとで、漸化式を繰り返し適用して c_{2k} を計算すると、

$$\begin{aligned} c_{2k} &= -\frac{(2m-2k+2)(2m+2k-1)}{2k(2k-1)}c_{2(k-1)} \\ &= (-1)^2 \frac{(2m-2k+2)(2m-2k+4)(2m+2k-1)(2m+2k-3)}{2k(2k-1)(2k-2)(2k-3)}c_{2(k-2)} = \cdots \\ &= (-1)^k \frac{(2m-2k+2)(2m-2k+4)\cdots(2m)\cdot(2m+2k-1)(2m+2k-3)\cdots(2m+1)}{(2k)!}c_0 \\ &= \frac{(-1)^k}{(2k)!} \frac{2^m m!}{2^{m-k}(m-k)!} \frac{(2m+2k)!}{2^{m+k}(m+k)!} \frac{2^m m!}{(2m)!} c_0, \end{aligned}$$

が得られる。したがって、ルジャンドル微分方程式の解は、

$$y(x) = \sum_{k=0}^m \frac{(-1)^k}{(2k)!} \frac{2^m m!}{2^{m-k}(m-k)!} \frac{(2m+2k)!}{2^{m+k}(m+k)!} \frac{2^m m!}{(2m)!} c_0 x^{2k},$$

のような多項式として書くことができる。この多項式がルジャンドル多項式である。

上に書いたルジャンドル多項式は最高次数を $2m$ とする多項式である。最高次数を与える m はゼロ、または、正の整数であるので、最高次数を明示する意味で、ルジャンドル多項式を $P_{2m}(x)$ と書こう。すると、

$$P_{2m}(x) = \sum_{k=0}^m \frac{(-1)^k}{(2k)!} \frac{2^m m!}{2^{m-k}(m-k)!} \frac{(2m+2k)!}{2^{m+k}(m+k)!} \frac{2^m m!}{(2m)!} c_0 x^{2k}, \quad (4.4)$$

のように書き換えることができる。

最低次数が1の場合 ルジャンドル微分方程式に、級数を仮定した解を代入して得られた関係式(4.3)について、 $k+p$ 次の係数がゼロである条件から、展開係数は、

$$c_{k+2} = -\frac{n(n+1) - (k+1)(k+2)}{(k+3)(k+2)}c_k = -\frac{(n-k-1)(n+k+2)}{(k+3)(k+2)}c_k,$$

なる関係式を満たす。ここで、漸化式に $p=1$ を代入している。展開式の最低次の係数 c_0 が決まれば、この関係式を用いて偶数項 c_{2k} が順次、決まっていく。この場合も展開係数の奇数項はすべてゼロだと仮定しておこう。展開係数の偶数項を計算するため、上に書いた展開係数の漸化式を、

$$c_{2k} = -\frac{(n-2k+1)(n+2k)}{2k(2k+1)}c_{2(k-1)},$$

のように書き換えておこう。この漸化式を見ると、 $n-2k+1=0$ を満たすと展開係数がゼロとなり、それ以降の係数もゼロとなる。つまり、 n が正の奇数であれば、ルジャンドル多項式の解は有限項の多項式となる。そこで、 $n \equiv 2m+1$ として話を進めよう。その過程のもとで、漸化式を繰り返し適用して c_{2k} を計算すると、

$$\begin{aligned} c_{2k} &= -\frac{(2m-2k+2)(2m+2k+1)}{2k(2k-1)}c_{2(k+1)} = \cdots \\ &= (-1)^k \frac{(2m-2k+2)(2m-2k+4)\cdots(2m) \cdot (2m+2k+1)(2m+2k-1)\cdots(2m+3)}{(2k+1)!}c_0 \\ &= \frac{(-1)^k}{(2k+1)!} \frac{2^m m!}{2^{m-k}(m-k)!} \frac{(2m+2k+2)!}{2^{m+k}(m+k+1)!} \frac{2^{m+1}(m+1)!}{(2m+2)!}c_0, \end{aligned}$$

が得られる。したがって、ルジャンドル微分方程式の解は、

$$y(x) = \sum_{k=0}^m \frac{(-1)^k}{(2k+1)!} \frac{2^m m!}{2^{m-k}(m-k)!} \frac{(2m+2k+2)!}{2^{m+k}(m+k+1)!} \frac{2^{m+1}(m+1)!}{(2m+2)!}c_0 x^{2k+1},$$

のような多項式として書くことができる。このルジャンドル多項式は最高次数を $2m+1$ とする多項式である。最高次数を与える m はゼロ、または、正の整数であるので、最高次数を明示する意味で、ルジャンドル多項式を $P_{2m+1}(x)$ と書こう。すると、

$$P_{2m+1}(x) = \sum_{k=0}^m \frac{(-1)^k}{(2k+1)!} \frac{2^m m!}{2^{m-k}(m-k)!} \frac{(2m+2k+2)!}{2^{m+k}(m+k+1)!} \frac{2^{m+1}(m+1)!}{(2m+2)!}c_0 x^{2k+1}, \quad (4.5)$$

のように書き換えることができる。

4.1.2 ルジャンドル多項式

前項でルジャンドル多項式を、最低次数が0と1の場合について、個別に展開式を記述した。最低次数が0のとき、ルジャンドル多項式の最高次数は偶数となり、一方、最低次数

が1のとき、最高次数は奇数となる。ルジャンドル多項式は、最低次数が0か1かに依存しない統一形式で記述することが可能であり、最高次数を n とすれば、

$$P_n(x) = \sum_{k=0}^{\lfloor n/2 \rfloor} \frac{(-1)^k (2n-2k)!}{2^n k! (n-2k)! (n-k)!} x^{n-2k}, \quad (4.6)$$

のように書くことができる。本項では、この統一形式を証明する。

まず、最低次数が0の場合、 $n = 2m$ であるから、展開式 (4.4) を数式変形すると、

$$\begin{aligned} P_n(x) &= \sum_{p=0}^m \frac{(-1)^{m-p} 2^m m!}{(2m-2p)! 2^p p!} \frac{(4m-2p)!}{2^{2m-p} (2m-2p)!} \frac{2^m m!}{(2m)!} c_0 x^{2m-2p} \\ &= \sum_{p=0}^m \frac{(-1)^p}{(2m-2p)!} \frac{1}{2^{2m} p!} \frac{(4m-2p)!}{(2m-p)!} \cdot \frac{(-1)^m 2^{2m} (m!)^2}{(2m)!} c_0 x^{2m-2p} \\ &= \sum_{p=0}^{\lfloor n/2 \rfloor} \frac{(-1)^p (4m-2p)!}{2^n p! (n-p)! (n-2p)!} x^{n-2p}, \end{aligned}$$

となり、(4.6) と一致する。ここで、 $\lfloor n/2 \rfloor$ は $n/2$ の小数部を切り捨てた整数を与える。つまり、 $n = 2m$ なので $\lfloor n/2 \rfloor = m$ である。さらに、数式変形にあたり、 $2k \equiv 2m - 2p$ とおき、最低次の展開係数 c_0 に関して、

$$\frac{(-1)^m 2^{2m} (m!)^2}{(2m)!} c_0 \equiv 1,$$

が成立することを仮定した。

一方、最低次数が1の場合、 $n = 2m + 1$ であるから、展開式 (4.5) を数式変形すると、

$$\begin{aligned} P_n(x) &= \sum_{p=0}^m \frac{(-1)^{m-p} 2^m m!}{(2m+1-2p)! 2^p p!} \frac{(4m+2-2p)!}{2^{2m+1-p} (2m+1-p)!} \frac{2^{m+1} (m+1)!}{(2m+2)!} c_0 x^{2m+1-2p} \\ &= \sum_{p=0}^m \frac{(-1)^p}{(2m+1-2p)!} \frac{1}{2^{2m+1} p!} \frac{(4m+2-2p)!}{(2m+1-p)!} \\ &\quad \times \frac{(-1)^m 2^{2m+1} m! (m+1)!}{(2m+2)!} c_0 x^{2m+1-2p} \\ &= \sum_{p=0}^{\lfloor n/2 \rfloor} \frac{(-1)^p (2n-2p)!}{2^n p! (n-p)! (n-2p)!} x^{2m+1-2p}, \end{aligned}$$

となり、(4.6) と一致する。この場合は、 $n = 2m + 1$ なので $\lfloor n/2 \rfloor = m$ である。この数式変形にあたり、 $2k \equiv 2m + 1 - 2p$ とおき、最低次の展開係数 c_0 に関して、

$$\frac{(-1)^m 2^{2m+1} m! (m+1)!}{(2m+2)!} c_0 \equiv 1,$$

が成立することを仮定した。

最低次数の展開係数 c_0 を都合がよいように選んでいるものの、最低次数によらずルジャンドル多項式を統一形式で記述することができた。このような統一形式 (4.6) で記述した多項式を、以降、ルジャンドル多項式と呼ぶことにする。

4.2 母関数と漸化式

ルジャンドル多項式も母関数を導入すれば、その性質を調べることが容易にできる。本節では、ルジャンドル多項式の母関数を導入し、性質を調べるための漸化式を導く。

4.2.1 母関数

ルジャンドル多項式の場合、通常母関数を用いると都合がよい。通常母関数とは、 $P_n(x)$ を t^n の展開係数とする関数である。結果を書くと、

$$\sum_{n=0}^{\infty} P_n(x) t^n = (1 - 2xt + t^2)^{-1/2}, \quad (4.7)$$

が成立する。多項式 $P_n(x)$ の導出過程から、母関数がこのような初等関数となるのは意外に思えるかもしれないが、次のように証明することができる。

上の数式 (4.7) の左辺にルジャンドル多項式の展開式 (4.6) を代入すると、

$$\sum_{n=0}^{\infty} P_n(x) t^n = \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{k=0}^{\lfloor n/2 \rfloor} \frac{(-1)^k (2n - 2k)!}{2^n k! (n - k)! (n - 2k)!} x^{n-2k} t^n, \quad (4.8)$$

となる。この計算をさらに進めるには、媒介変数を変換し、総和の順序を入れ替える。母関数を計算するための総和は、図 4.1 に示す格子点を取り尽くしながら実行される。媒介変数 n は、右下から左上に走る破線に付与された番号である。媒介変数 k は格子点の行を表す番号である。この図を見ると、確かに、媒介変数 n は 0 から無限大まで、 k は 0 から $\lfloor n/2 \rfloor$ の範囲で格子点を取り尽くされることがわかる。ここで、図 4.1 に示すように、列に番号 m を付与する。すると、母関数は媒介変数 m を 0 から無限大まで、 k を 0 から m まで取り尽くしながら総和をとる順序も可能である。このとき、 $n \equiv k + m$ の関係が成立するので、

$$\begin{aligned} \text{RHS of (4.8)} &= \sum_{m=0}^{\infty} \sum_{k=0}^m \frac{(-1)^k (2m)!}{2^{k+m} k! m! (m - k)!} x^{m-k} t^{k+m} \\ &= \sum_{m=0}^{\infty} \frac{(2m)!}{2^{2m} (m!)^2} \sum_{k=0}^m \frac{(-1)^k m!}{k! (m - k)!} (2x)^{m-k} t^{m+k} \end{aligned}$$

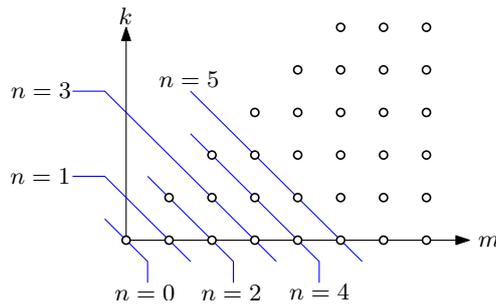


図 4.1: 母関数を計算するための媒介変数の格子点

$$= \sum_{m=0}^{\infty} \frac{(2m)!}{2^{2m}(m!)^2} t^m \sum_{k=0}^m \frac{m!}{k!(m-k)!} (2x)^{m-k} (-t)^k, \quad (4.9)$$

のように計算される。この計算は技巧的であるので、なるべく計算過程を省略しないように書いてある。媒介変数 k に関する総和が多項式の二項展開になっていることに気づけば、この数式は、

$$\text{RHS of (4.9)} = \sum_{m=0}^{\infty} \frac{(2m)!}{2^{2m}(m!)^2} t^m (2x - t)^m = \sum_{m=0}^{\infty} \frac{(2m)!}{2^{2m}(m!)^2} (2xt - t^2)^m, \quad (4.10)$$

のように書くことができる。実は、媒介変数 m についての総和も二項展開である。ここで、 $(2m)!/2^m m! = 1 \cdot 3 \cdot 5 \cdots (2m - 1)$ の関係に注意して計算を続けると、

$$\begin{aligned} \text{RHS of (4.10)} &= \sum_{m=0}^{\infty} \frac{1}{m!} \frac{1 \cdot 3 \cdot 5 \cdots (2m - 1)}{2^m} (2xt - t^2)^m \\ &= \sum_{m=0}^{\infty} \frac{1}{m!} \frac{1}{2} \frac{3}{2} \frac{5}{2} \cdots \frac{2m - 1}{2} (2xt - t^2)^m \\ &= \sum_{m=0}^{\infty} \frac{1}{m!} \left(-\frac{1}{2}\right) \left(-\frac{3}{2}\right) \left(-\frac{5}{2}\right) \cdots \left(-\frac{2m - 1}{2}\right) (-2xt + t^2)^m \\ &= (1 - 2xt + t^2)^{-1/2}, \end{aligned}$$

が導かれ、確かに、ルジャンドル多項式の通常母関数が $(1 - 2xt + t^2)^{-1/2}$ であることが証明された。母関数を用いると、ルジャンドル多項式の漸化式を得ることができる。漸化式を用いると、展開式 (4.6) を用いるよりも少ない計算でルジャンドル多項式の特定が可能になる。本書ではルジャンドル微分方程式の解としてルジャンドル多項式を定義したが、文献¹によっては母関数をルジャンドル多項式の定義としている。

¹ ジョージ・アルフケン, ハンス・ウェーバー, 特殊関数, 基礎物理学 Vol. 3, 第4版, 権平 健一郎, 神原武志, 小山 直人 訳, 講談社, 2001.

4.2.2 特別な関数値

ルジャンドル多項式の母関数から導かれる特殊な値を紹介しよう。紹介する特別な値とは、ルジャンドル多項式の変数 x を $\pm 1, 0$ としたときの関数値:

$$P_n(1) = 1, \quad P_n(-1) = (-1)^n, \quad (4.11)$$

$$P_{2n+1}(0) = 0, \quad P_{2n}(0) = \frac{(-1)^n (2n)!}{2^{2n} (n!)^2}, \quad (4.12)$$

である。これらの関数値が上に示した値になることを証明しよう。

ルジャンドル多項式の母関数表示:

$$(1 - 2xt + t^2)^{-1/2} = \sum_{n=0}^{\infty} P_n(x) t^n,$$

に $x = 1$ を代入すると,

$$\frac{1}{1-t} = \sum_{n=0}^{\infty} P_n(1) t^n,$$

なる等式が得られる。左辺は二項展開によって $1/(1-t) = 1 + t + t^2 + t^3 + \dots$ のように展開されるので、上の等式が任意の t について成立するためには、 $P_n(1) = 1$ でなければならない。続いて、 $x = -1$ をルジャンドルの多項式の母関数表示に代入すると、左辺は $1/(1+t)$ となる。上と同様に二項展開を利用すると、 $P_n(-1) = (-1)^n$ が導かれる。

続いて、母関数表示に $x = 0$ を代入すると,

$$\sum_{n=0}^{\infty} P_n(0) t^n = \frac{1}{\sqrt{1+t^2}},$$

となるのだが、この式の右辺を二項展開すると,

$$\sum_{n=0}^{\infty} P_n(0) t^n = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n}{n!} \frac{1}{2} \frac{3}{2} \frac{5}{2} \dots \frac{2n-1}{2} t^{2n} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n (2n)!}{2^{2n} (n!)^2} t^{2n},$$

が得られる。右辺の展開式には t の偶数項しか存在しないので、 $x = 0$ としたときのルジャンドル多項式の奇数項がゼロとなることがわかる。また、偶数項も本項の冒頭で紹介した値になっている。

4.2.3 パリティ

前項で示した $P_n(-1) = (-1)^n$ はルジャンドル多項式の偶奇性の一部である。ルジャンドル多項式の母関数 $(1 - 2xt + t^2)^{-1/2}$ は、 $x \mapsto -x$ と $t \mapsto -t$ 双方の置き換えをしても値が変化しない。この性質は、数式で表現すると,

$$\sum_{n=0}^{\infty} P_n(x) t^n = \sum_{n=0}^{\infty} P_n(-x) (-t)^n,$$

のように記述できる。この級数における t の各次数の項を等号で結ぶと,

$$P_n(-x) = (-1)^n P_n(x), \quad (4.13)$$

なる関係式が得られる。この関係式は、偶数次のルジャンドル多項式が偶関数であり、奇数次のルジャンドル多項式が奇関数であることを意味している。このような偶奇性はパリティと呼ばれ、量子力学では波動関数の反転の性質を表現するため重要な役割を演じる。

4.2.4 関数値の上限

ルジャンドル多項式は物理学では $P_n(\cos \theta)$ のように、変数が $[-1, 1]$ の範囲で与えられることが多い。そのような制限を与えると、ルジャンドル多項式は $|P_n(\cos \theta)| \leq P_n(1) = 1$ なる関係を満たす。つまり、ルジャンドル多項式は、変数が1に等しいとき最大値をとり、その値は1である。

上記の事実は次のようにして証明できる。ルジャンドルの多項式の母関数表示:

$$(1 - 2t \cos \theta + t^2)^{-1/2} = \sum_{n=0}^{\infty} P_n(\cos \theta) t^n,$$

を考えよう。この式の左辺は,

$$\begin{aligned} (1 - 2t \cos \theta)^{-1/2} &= (1 - te^{i\theta})^{-1/2} (1 - te^{-i\theta})^{-1/2} \\ &= \left(1 + \frac{1}{2} e^{i\theta} t + \frac{3}{8} e^{2i\theta} t^2 + \dots\right) \left(1 + \frac{1}{2} e^{-i\theta} t + \frac{3}{8} e^{-2i\theta} t^2 + \dots\right), \end{aligned}$$

のように二項展開できる。この数式は,

$$(1 - 2t \cos \theta)^{-1/2} = \sum_{n=0}^{\infty} a_n e^{in\theta} t^n \cdot \sum_{m=0}^{\infty} a_m e^{-im\theta} t^m,$$

なる形で書けるはずである。ここで、 $a_0 = 1$, $a_1 = 1/2$, $a_2 = 3/8$, ... である。しかも、展開係数 a_n はすべて正の実数である。この数式の右辺を計算するにあたり、総和の順序を入れ替えると,

$$\begin{aligned} \text{RHS} &= \sum_{k=0}^{\infty} \sum_{m=0}^k a_m a_{k-m} e^{i(k-2m)\theta} t^k \\ &= \sum_{k=0}^{\infty} \sum_{m=0}^{\lfloor k/2 \rfloor} \left(a_m a_{k-m} e^{i(k-2m)\theta} + a_{k-m} m a_m e^{-i(k-2m)\theta} \right) t^k \\ &= 2 \sum_{k=0}^{\infty} \sum_{m=0}^{\lfloor k/2 \rfloor} a_m a_{k-m} t^k \cos(k-2m)\theta, \end{aligned}$$

なる数式変形ができる。ここで、数式を簡略化するために、

$$a_m a_{k-m} \equiv b_{km} \quad (k \neq 2m), \quad a_{k/2}^2 = \frac{1}{2} b_{k,k/2},$$

なる展開係数 b_{km} を定義すると、

$$(1 - 2t \cos \theta + t^2)^{-1/2} = 2 \sum_{k=0}^{\infty} \sum_{m=0}^{\lfloor k/2 \rfloor} b_{km} t^k \cos(k - 2m)\theta,$$

なる関係式が得られる。この数式がルジャンドル多項式の母関数であることに注意すると、 k 次の展開係数は、

$$P_k(\cos \theta) = 2 \sum_{m=0}^{\lfloor k/2 \rfloor} b_{km} \cos(k - 2m)\theta,$$

のように書くことができる。この関係式から、

$$|P_k(\cos \theta)| \leq 2 \sum_{m=0}^{\lfloor k/2 \rfloor} b_{km},$$

なる不等式が成立する。係数の絶対値 $|P_k(\cos \theta)|$ が最大となるのは、いかなる k と m について $\cos(k - 2m)\theta = 1$ が成立するときである。前節で述べたように、そのようなときには k に関わらず $P_k(1) = 1$ が成立する。よって、 $|P_k(\cos \theta)| \leq 1$ となる。つまり、ルジャンドル多項式の最大値は 1 である。¶

4.2.5 漸化式

前項の最後で述べたように、ルジャンドルの多項式を計算するには漸化式を利用すると便利である。ルジャンドル多項式の漸化式とは、

$$P_1(x) = xP_0(x), \tag{4.14a}$$

$$P_{n+1}(x) = \frac{1}{n+1} \left[(2n+1)xP_n(x) - nP_{n-1}(x) \right] \quad (n = 1, 2, 3, \dots), \tag{4.14b}$$

である。前節で示したルジャンドル多項式の展開式では計算途中で非常に大きな数が現れるので、次数が大きくなると計算しづらいが、漸化式を用いると、多少、次数が大きくなっても容易に計算できる。

漸化式は、ルジャンドル多項式の母関数表示:

$$(1 - 2xt + t^2)^{-1/2} = \sum_{n=0}^{\infty} P_n(x) t^n,$$

を t で微分すれば証明できる。両辺を微分すると,

$$\frac{x-t}{(1-2xt+t^2)^{3/2}} = \sum_{n=1}^{\infty} nP_n(x)t^{n-1},$$

が得られる。この等式の両辺に $1-2xt+t^2$ を乗じると,

$$(x-t) \sum_{n=0}^{\infty} P_n(x)t^n = (1-2xt+t^2) \sum_{n=1}^{\infty} nP_n(x)t^{n-1},$$

が得られる。この両辺をさらに展開して整理すると,

$$\sum_{n=1}^{\infty} [(n+1)P_{n+1}(x) - (2n+1)xP_n(x) + nP_{n-1}(x)]t^n + P_1(x) - xP_0(x) = 0,$$

が導かれる。この数式が任意の t について成立するには、 t の各次数の係数がゼロであることなので、その結果として上に記述した漸化式が得られる。◻

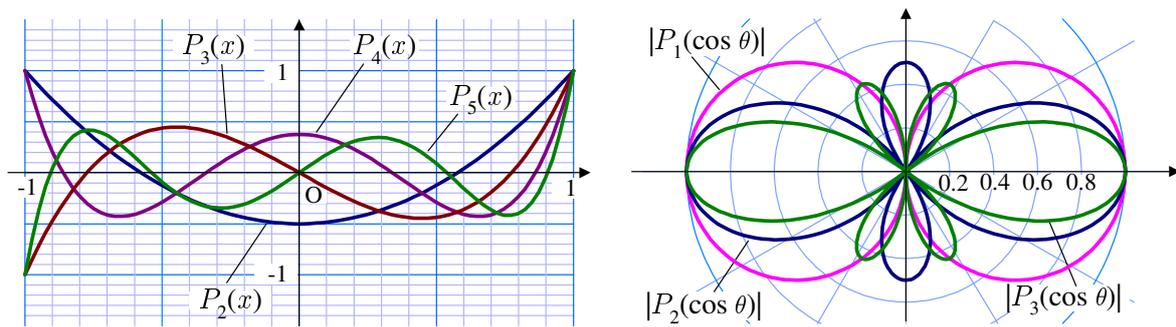
初期項として $P_0(x) = 1$ を与え²、導出された漸化式を用いて8次までのルジャンドル多項式を計算すると,

$$\begin{aligned} P_0(x) &= 1, & P_1(x) &= x, & P_2(x) &= \frac{1}{2}(3x^2 - 1), \\ P_3(x) &= \frac{1}{2}(5x^3 - 3x), & P_4(x) &= \frac{1}{8}(35x^4 - 30x^2 + 3), \\ P_5(x) &= \frac{1}{8}(63x^5 - 70x^3 + 15x), & P_6(x) &= \frac{1}{16}(231x^6 - 315x^4 + 105x^2 - 5), \\ P_7(x) &= \frac{1}{16}(429x^7 - 693x^5 + 315x^3 - 35x), \\ P_8(x) &= \frac{1}{128}(6435x^8 - 12012x^6 + 6930x^4 - 1260x^2 + 35), \end{aligned}$$

が得られる。ルジャンドルの多項式のうち、 $P_2(x)$ から $P_5(x)$ までの多項式は、図4.2に示す曲線を描く。既に述べたように、偶数次のルジャンドルの多項式は偶関数であり、そうでなければ奇関数である。

ルジャンドル多項式は図4.2に示す曲線を描く。図4.2 (a) は横軸を変数 x にとったときの関数値 $P_n(x)$ を描いたグラフである。一方、図4.2 (b) は極座標表現において、多項式の絶対値 $|P_n(\cos \theta)|$ を原点からの距離として描いたグラフである。極座標表示において、 $|P_1(\cos \theta)|$, $|P_2(\cos \theta)|$, $|P_3(\cos \theta)|$ は遠方界としての電気双極子、4重極子、8重極子の静電ポテンシャルの角度依存性を表す。その事実は、第4.3.2節の計算結果について最も次数が低い $1/r$ の依存項を取り出すことでわかる。

²これは母関数に $t = 0$ を代入すれば明らかである。



(a) Value of function vs. variable x . (b) Magnitude in the polar coordinate representation.

図 4.2: ルジャンドル多項式

4.3 ルジャンドル多項式の応用例

ルジャンドル多項式は、物理学では電気多重極子のポテンシャルや、ヘルムホルツ方程式における天頂角依存性を表現する手段として応用される。本節では、応用例として電気多重極子のポテンシャルを紹介する。ヘルムホルツ方程式における天頂角依存性は、後に説明するルジャンドル陪多項式の応用例として紹介する。

4.3.1 点電荷のポテンシャル

原点 O から x 軸方向に a だけ離れた位置に点電荷 q が存在する場合 (図 4.3) の静電ポテンシャルを考えよう。電荷から観測点までの距離を r_1 とすれば、観測点における静電ポテンシャルは、 $\phi = q/4\pi\epsilon_0 r$ となる。ただし、 ϵ_0 は真空中の誘電率という物理定数である。ここで、その静電ポテンシャルを原点からの距離 r と、原点から見た観測点の方向 θ の関数で記述してみよう。余弦定理を用いると、静電ポテンシャルは、

$$\begin{aligned}\phi &= \frac{q}{4\pi\epsilon_0 r_1} = \frac{q}{4\pi\epsilon_0 \sqrt{r^2 + a^2 - 2ar \cos \theta}} \\ &= \frac{q}{4\pi\epsilon_0 r} \left[1 - 2\frac{a}{r} \cos \theta + \left(\frac{a}{r}\right)^2 \right]^{-1/2},\end{aligned}$$

となる。この数式は、ルジャンドル多項式の母関数 $(1 - 2xt + t^2)^{-1/2}$ について、 $x \equiv \cos \theta$, $t \equiv a/r$ とした場合に一致する。つまり、原点から離れた位置に存在する電荷による、静電ポテンシャルはルジャンドル多項式を用いて、

$$\phi = \frac{q}{4\pi\epsilon_0 r} \sum_{n=0}^{\infty} P_n(\cos \theta) \left(\frac{a}{r}\right)^n,$$

のように書くことができる。

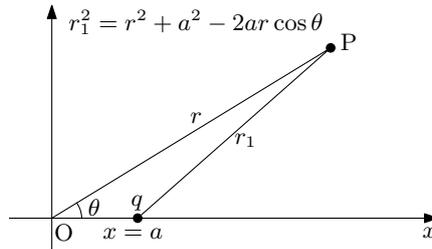


図 4.3: 原点からずれた点電荷と観測点

4.3.2 電気多重極子

前項で述べたように、電荷 q から距離 r 隔てた場所における静電ポテンシャルは、 $\phi = q/4\pi\epsilon_0 r$ のように r に反比例する。複数の電荷を組み合わせて、 $1/r$ や $1/r^n$ のうちの低い次数を消去することができる。

まず、電荷 q が $x = a$ に存在する場合を考えよう。観測点を、 x 軸と角度 θ をなす方向に原点 O から距離 r を隔てた場所にとったとする。ルジャンドル多項式を用いると、観測点における静電ポテンシャルは、

$$\phi = \frac{q}{4\pi\epsilon_0 r_1} = \frac{q}{4\pi\epsilon_0 r} \sum_{n=0}^{\infty} P_n(\cos\theta) \left(\frac{a}{r}\right)^n,$$

と展開することができる。ここで、 r_1 を電荷から観測点までの距離である。

図 4.4 (a) のように、 $x = a$ に電荷 q を、 $x = -a$ を $-q$ を配置した場合の静電ポテンシャルを計算しよう。複数の電荷による静電ポテンシャルは、各電荷に起因するポテンシャルの和を計算すればよい。ポテンシャルの和を計算すると、

$$\begin{aligned} \phi &= \frac{q}{4\pi\epsilon_0 r} \sum_{n=0}^{\infty} \left[P_n(\cos\theta) - (-1)^n P_n(\cos\theta) \right] \left(\frac{a}{r}\right)^n \\ &= \frac{2aq}{4\pi\epsilon_0 r^2} \left[P_1(\cos\theta) + P_3(\cos\theta) \left(\frac{a}{r}\right)^2 + \dots \right], \end{aligned}$$

のように r^{-1} の項が消去されている。巨視的には電荷が中性となるので r^{-1} の項がなくなっているのである。このような逆の極性の電荷の対は電気双極子と呼ばれる。巨視的に中性であっても、電気双極子は異なる場所に正と負の電荷を配置しているので、配置に起因する高次項が残る。なお、分子の $2aq$ は電気双極子モーメントと呼ばれる物理量である。

電気双極子を2つ並べるとポテンシャルから r^{-2} の項までを消去することができる。その一例として、図 4.4 (b) のように、 $x = \pm a$ に電荷 q を、 $x = 0$ に電荷 $-2q$ を配置すればよい。その場合の静電ポテンシャルは、

$$\phi = \frac{q}{4\pi\epsilon_0 r} \left\{ \sum_{n=0}^{\infty} \left[P_n(\cos\theta) + (-1)^n P_n(\cos\theta) \right] \left(\frac{a}{r}\right)^n - 2 \right\}$$

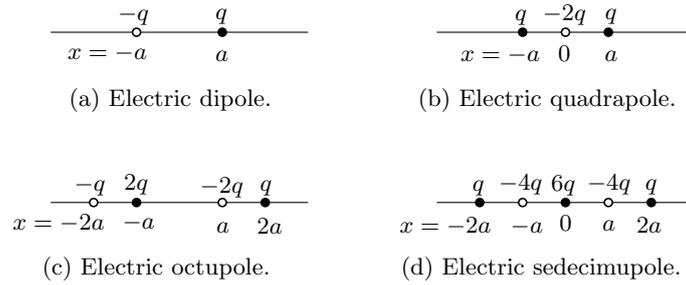


図 4.4: 直線上の電気多重極子の例

$$= \frac{2a^2q}{4\pi\epsilon_0 r^3} \left[P_2(\cos\theta) + P_4(\cos\theta) \left(\frac{a}{r}\right)^2 + \dots \right],$$

のように、最低次数が r^{-3} となる。この電荷の配置は電気 4 重極子と呼ばれる。同様にしてポテンシャルの最低次数を大きくすることができる。例えば、図 4.4 (c) のように電荷を配置すると、ポテンシャルは r^{-4} の次数から始まり、

$$\phi = \frac{2a^3q}{4\pi\epsilon_0 r^4} \left[6P_3(\cos\theta) + 30P_5(\cos\theta) \left(\frac{r}{a}\right)^2 + \dots \right],$$

となる。これは電気 8 重極子である。さらに、図 4.4 (d) のように電荷を配置すると、ポテンシャルは r^{-5} の次数から始まり、

$$\phi = \frac{2a^4q}{4\pi\epsilon_0 r^5} \left[12P_4(\cos\theta) + 60P_6(\cos\theta) \left(\frac{r}{a}\right)^2 + \dots \right],$$

のようになる。これは電気 16 重極子である。電気多重極子の配置法はここに示した配置だけでなく、様々な配置が可能である。

4.4 ルジャンドル多項式の別の定義

本章の冒頭で、ルジャンドル多項式をルジャンドル微分方程式の解として定義した。前に述べたように、母関数によって定義する方法もある。本節では、さらに他の定義法としてロドリグの公式とシュレーフリ積分を紹介する。

4.4.1 ロドリグの公式

ロドリグ (Rodrigues) の公式は、多項式で表現される n 次の特殊関数がある関数の n 階微分を用いて表す公式である。この公式は、ルジャンドル多項式を含め、いくつかの特殊

関数に適用できるため、特殊関数の定義式として用いられることもある。ロドリグの公式によると、ルジャンドル多項式は、

$$P_n(x) = \frac{1}{2^n n!} \frac{d^n}{dx^n} (x^2 - 1)^n, \quad (4.15)$$

なる関係式で定義される。この公式はルジャンドル関数の直交性を導く際にも利用される。

本章の冒頭で、ルジャンドル多項式の級数形式が次のように書かれることを示した。

$$P_n(x) = \sum_{r=0}^{\lfloor n/2 \rfloor} (-1)^r \frac{(2n-2r)!}{2^n r! (n-r)! (n-2r)!} x^{n-2r}.$$

この関係式は、次のように変形できる。

$$\begin{aligned} P_n(x) &= \sum_{r=0}^{\lfloor n/2 \rfloor} (-1)^r \frac{(2n-2r)(2n-2r-1)\cdots(n-2r+1)}{2^n r! (n-r)!} x^{n-2r} \\ &= \sum_{r=0}^{\lfloor n/2 \rfloor} (-1)^r \frac{1}{2^n r! (n-r)!} \frac{d^n}{dx^n} x^{2n-2r} \\ &= \frac{1}{2^n n!} \frac{d^n}{dx^n} \sum_{r=0}^{\lfloor n/2 \rfloor} \frac{(-1)^r n!}{r! (n-r)!} x^{2n-2r}. \end{aligned}$$

この数式はさらに、総和の対象となる媒介変数 r の範囲を拡張し、

$$P_n(x) = \frac{1}{2^n n!} \frac{d^n}{dx^n} \sum_{r=0}^n \frac{(-1)^r n!}{r! (n-r)!} x^{2(n-r)},$$

のように変形することができる。なぜなら、 $r > \lfloor n/2 \rfloor$ のとき、 $2(n-r)$ が n より小さい整数なので $x^{2(n-r)}$ の n 階微分が、必ず、ゼロとなるからである。総和記号の内側に位置する $x^{2(n-r)}$ の係数が二項係数になっていることに注目すれば、その結果としてロドリグの公式が得られる。

4.4.2 シュレーフリ積分

ルジャンドル多項式は、複素積分によって定義することもできる。複素積分によってルジャンドル多項式を表現すると、

$$P_n(z) = \frac{2^{-n}}{2\pi i} \oint \frac{(t^2 - 1)^n}{(t - z)^{n+1}} dt, \quad (4.16)$$

となる。ここで、積分路は複素平面上の $t = x$ を囲む単純閉曲線である。この積分はシュレーフリ積分と呼ばれる。

シュレーフリ積分によるルジャンドル多項式の表現を証明しよう。まず、コーシーの積分公式によって、

$$(z^2 - 1)^n = \frac{1}{2\pi i} \oint \frac{(t^2 - 1)^n}{t - z} dt,$$

が成立する。この式を z について n 階微分して $2^{-n}/n!$ を乗じると、

$$P_n(z) = \frac{1}{2^n n!} \cdot \frac{d^n}{dz^n} (z^2 - 1)^n = \frac{2^{-n}}{2\pi i} \oint \frac{(t^2 - 1)^n}{(t - z)^{n+1}} dt,$$

が得られる。よって、シュレーフリ積分による表現が証明された。◻

検算の意味で、シュレーフリ積分によって定義されたルジャンドル多項式がルジャンドル微分方程式の解であることを示そう。シュレーフリの公式 (4.16) を微分すると、

$$\begin{aligned} \frac{dP_n}{dz} &= \frac{(n+1)2^{-n}}{2\pi i} \oint \frac{(t^2 - 1)^n}{(t - z)^{n+2}} dt, \\ \frac{d^2 P_n}{dz^2} &= \frac{(n+1)(n+2)2^{-n}}{2\pi i} \oint \frac{(t^2 - 1)^n}{(t - z)^{n+3}} dt, \end{aligned}$$

が得られる。シュレーフリの公式 (4.16) とこれらの導関数をルジャンドルの微分方程式に代入すると、

$$\begin{aligned} (1 - z^2) P_n''(z) - 2z P_n'(z) + n(n+1) P_n(z) \\ &= \frac{(n+1)2^{-n}}{2\pi i} \oint \frac{(t^2 - 1)^n}{(t - z)^{n+3}} (n+2 - 2zt - 2nzt + nt^2) dt \\ &= \frac{(n+1)2^{-n}}{2\pi i} \oint \frac{d}{dt} \left[\frac{(t^2 - 1)^{n+1}}{(t - z)^{n+2}} \right] dt, \end{aligned}$$

が得られる。任意の整数 n に対して、関数 $(t^2 - 1)^{n+1}/(t - z)^{n+2}$ が 1 価関数であるので、途中で $t = z$ を通らなければ任意の閉曲線に沿った積分は必ずゼロになる。つまり、シュレーフリの公式 (4.16) によって与えられる関数 $P_n(z)$ はルジャンドルの微分方程式の解である。

次数 n を整数以外の数 ν に拡張する場合には、積分路の選択に注意を要する。次数 ν に拡張したルジャンドルの多項式は、ルジャンドル関数と呼ばれ、

$$P_\nu(z) = \frac{2^{-\nu}}{2\pi i} \oint \frac{(t^2 - 1)^\nu}{(t - z)^{\nu+1}} dt,$$

なる形で記述できる。このルジャンドル関数をルジャンドルの微分方程式に代入すると、

$$\begin{aligned} (1 - z^2) P_\nu''(z) - 2z P_\nu'(z) + \nu(\nu+1) P_\nu(z) \\ &= \frac{(\nu+1)2^{-\nu}}{2\pi i} \oint \frac{d}{dt} \left[\frac{(t^2 - 1)^{\nu+1}}{(t - z)^{\nu+2}} \right] dt, \end{aligned}$$

となる。この式の右辺をゼロにするには積分路の選択に注意が必要なのである。積分変数 t を,

$$t \equiv r_1 e^{i\theta_1} \equiv r_{-1} e^{i\theta_{-1}} \equiv r_z e^{i\theta_z},$$

のような極座標表示をしよう。その場合、被積分関数内のブラケットの中に記述した関数は,

$$\frac{(t^2 - 1)^{\nu+1}}{(t - z)^{\nu+2}} = \frac{r_1^{\nu+1} r_{-1}^{\nu+1}}{r_z^{\nu+2}} e^{i[(\nu+1)(\theta_1 + \theta_{-1}) - (\nu+2)\theta_z]},$$

のように書くことができる。この関数の偏角を θ を書くならば、この数式から、

$$\theta = (\nu + 1)(\theta_1 + \theta_{-1}) - (\nu + 2)\theta_z,$$

が成立する。例えば、 $t = 1$ を反時計回りに周回し、 $t = -1, z$ を周回しない場合、偏角は θ_1 のみを 2π だけ増加させたときの変化をする。すなわち、 θ は $2\pi(\nu + 1)$ だけ増加する。次数 ν が整数でなければ偏角の増加分は 2π の整数倍にはならないので、周回積分はゼロではなく、その結果、ルジャンドルの微分方程式を満足しない。一方、 $t = 1$ と $t = z$ を周回する積分路をとった場合、偏角は θ_1 と θ_z を 2π だけ増加させたときの変化をする。具体的な偏角の増加分は、 $2\pi(\nu + 1 - \nu - 2) = -2\pi$ となる。この場合、 ν に関係なく周回積分がゼ

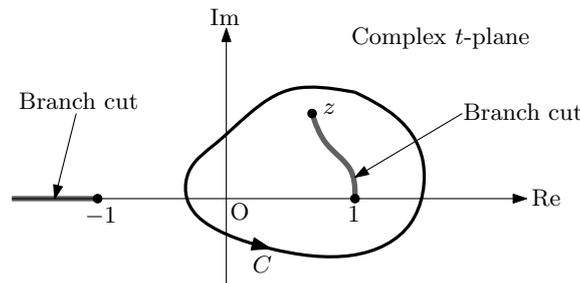


図 4.5: シュレーフリ積分の積分路

ロとなるため、シュレーフリ積分はルジャンドル微分方程式の解となる。つまり、シュレーフリ積分の積分路は、図 4.5 に示すように、積分変数 t の複素平面において、 1 と z を反時計回りに周回する任意の単純閉曲線である。図中の淡色の線は分岐と呼ばれ、これを横切る曲線を積分路として選ぶと、整数以外の ν ではルジャンドル微分方程式を満たさない。

4.5 直交性

ルジャンドル多項式には、異なる次数間での直交性が成立する。直交性をもつ関数系は、フーリエ変換における三角級数のように、物理学では有用である。ルジャンドル多項式の直交性は、

$$\int_{-1}^1 P_m(x) P_n(x) dx = \frac{2}{2n + 1} \delta_{mn}, \quad (4.17)$$

なる数式で表すことができる。ここで、 δ_{mn} はクロネッカーのデルタである。

ルジャンドル多項式の直交性は、ロドリグの公式を用いると証明できる。二つのルジャンドル多項式の積 $P_m(x) P_n(x)$ を区間 $[-1, 1]$ で積分すると、部分積分によって、

$$\int_{-1}^1 P_m(x) P_n(x) dx = \frac{(-1)^n}{2^n n!} \left\{ \left[P_n(x) \frac{d^{n-1}}{dx^{n-1}} (x^2 - 1)^n \right]_{-1}^1 - \int_{-1}^1 P_n'(x) \frac{d^{n-1}}{dx^{n-1}} (x^2 - 1)^n dx \right\}, \quad (4.18)$$

のように計算できる。後で証明するが、この積分の第1項はゼロである。したがって、

$$\int_{-1}^1 P_m(x) P_n(x) dx = -\frac{1}{2^n n!} \int_{-1}^1 P_m'(x) \frac{d^{n-1}}{dx^{n-1}} (x^2 - 1)^n dx,$$

が成立する。ここで、 $m \leq n$ としよう。積 $P_m(x) P_n(x)$ は順序を交換しても不変なので、 $m \leq n$ なる条件を設けても一般性は失われない。部分積分を繰り返すと、

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

のようになる。この式の右辺は部分積分を n 繰り返した結果である。ルジャンドル多項式 $P_m(x)$ は、 x の m 次の多項式であるので、 $m < n$ のとき $P_m^{(n)}(x) = 0$ である。よって、この式の右辺はゼロである。続いて、 $m = n$ の場合を考えよう。このとき、上の式は、

$$\int_{-1}^1 [P_n(x)]^2 dx = \frac{(-1)^n}{2^n n!} \int_{-1}^1 P_n^{(n)}(x) (x^2 - 1)^n dx,$$

のように書き換えられる。ルジャンドル多項式 $P_n(x)$ は n 次の多項式であるので、その n 階微分は定数となる。その定数は、(4.6) より、

$$P_n^{(n)}(x) = \frac{(2n)!}{2^n n!},$$

であることがわかる。これを上の式に代入すると、

$$\int_{-1}^1 [P_n(x)]^2 dx = \frac{(2n)!}{(2^n n!)^2} \int_{-1}^1 (1 - x^2)^n dx,$$

が得られる。ここで、 $x \equiv \sin \theta$ のように置き換えると、上の積分は、

$$\int_{-1}^1 [P_n(x)]^2 dx = \frac{(2n)!}{(2^n n!)^2} \int_{-\pi/2}^{\pi/2} \cos^{2n+1} \theta d\theta,$$

のように変形される。この積分は、ウォリスの公式:

$$\int_0^{\pi/2} \cos^{2n+1} \theta d\theta = \frac{2 \cdot 4 \cdot 6 \cdots (2n-2) 2n}{3 \cdot 5 \cdot 7 \cdots (2n-1) (2n+1)},$$

がそのまま適用でき、その結果、

$$\int_{-1}^1 [P_n(x)]^2 dx = \frac{2}{2n+1},$$

が得られる。つまり、これでルジャンドル多項式の直交性 (4.17) が証明できた。◻

それでは、(4.18) の第1項がゼロになることを証明しよう。その事実を証明するには、 $m \geq 2$ の整数を与えたとき、 $(x^2 - 1)^m f(x)$ の導関数が必ず $(x^2 - 1)$ で因数分解できることを示せばよい。ここで、 $f(x)$ は $[-1, 1]$ で正則な関数であるとする。実際に微分してみると、

$$\begin{aligned} \frac{d}{dx} [(x^2 - 1)^m f(x)] &= m(x^2 - 1)^{m-1} f(x) + (x^2 - 1)^m f'(x) \\ &= (x^2 - 1)^{m-1} [m f(x) + (x^2 - 1) f'(x)], \end{aligned}$$

が得られる。関数 $f(x)$ が正則な関数であるので、必ず、 $f'(x)$ が存在し、ゆえに、ブラケット ([]) の中身は正則な関数とみなせる。したがって、 $(x^2 - 1)^m f(x)$ の導関数が、必ず、 $(x^2 - 1)$ で因数分解できる。さらに、この計算結果から、 $(x^2 - 1)^m f(x)$ の $m - 1$ 次までの導関数は $(x^2 - 1)$ で因数分解できる。よって、 $(x^2 - 1)^m f(x)$ の $m - 1$ 次までの導関数は、 $x = \pm 1$ でゼロとなる。ゆえに、(4.18) の第1項はゼロである。◻

4.6 ルジャンドル陪多項式

ヘルムホルツ方程式を変数分離したとき、天頂角の依存性は厳密にルジャンドル微分方程式になるのではなく、

$$(1 - x^2) y''(x) - 2x y'(x) + \left[n(n+1) - \frac{m^2}{1 - x^2} \right] y(x) = 0, \quad (4.19)$$

のような形になる。この微分方程式はルジャンドル陪微分方程式と呼ばれる。とくに、 m がゼロのとき、ルジャンドル陪微分方程式はルジャンドル微分方程式と一致する。

4.6.1 陪微分方程式の解

ルジャンドルの陪微分方程式の解を特定するため、ルジャンドル多項式から始めよう。ルジャンドル多項式は、方位角の分離定数について $m = 0$ としたときの解であり、微分方程式:

$$(1 - x^2) P_n''(x) - 2x P_n'(x) + n(n+1) P_n(x) = 0,$$

の解である。この方程式を m 階微分すると,

$$(1-x^2)P_n^{(m+2)}(x) - 2x(m+1)P_n^{(m+1)}(x) + (n^2+n-m^2-m)P_n^{(m)}(x) = 0,$$

が得られる。数式変形には、2つの関数の積の高次導関数を得るためのライプニッツの公式を利用した。ここで、 $u(x) \equiv P_n^{(m)}(x)$ とおくと、上の微分方程式は、

$$(1-x^2)u''(x) - 2x(m+1)u'(x) + (n^2+n-m^2-m)u(x) = 0, \quad (4.20)$$

のように書くことができる。この方程式は自己随伴³ではないので、自己随伴になるように方程式を変形しよう。そのために、 $v(x) \equiv (1-x^2)^{m/2}u(x)$ を定義する。この定義式を $u(x)$ について解き、 x について微分すると、

$$\begin{aligned} u(x) &= (1-x^2)^{-m/2}v(x), \\ u'(x) &= \left(v'(x) + \frac{mxv(x)}{1-x^2} \right) (1-x^2)^{-m/2}, \\ u''(x) &= \left[v''(x) + \frac{2mxv'(x)}{1-x^2} + \frac{mv(x)}{1-x^2} + \frac{m(m+2)x^2v(x)}{(1-x^2)^2} \right] (1-x^2)^{-m/2}, \end{aligned}$$

が得られる。これらを (4.20) に代入すると、

$$(1-x^2)v''(x) - 2xv'(x) + \left[n(n+1) - \frac{m^2}{1-x^2} \right] v(x) = 0,$$

が得られる。これは前に示したルジャンドルの陪微分方程式である。すなわち、ルジャンドルの陪微分方程式の解は、

$$y(x) = (1-x^2)^{m/2} \frac{d^m}{dx^m} P_n(x),$$

この解は、媒介変数 n だけでなく、 m によっても個別に定めることができるので、 $P_n^m(x)$ のように添え字を2つ伴って記述される。この関数は、**ルジャンドル陪多項式**と呼ばれ、

$$P_n^m(x) = (1-x^2)^{m/2} \frac{d^m}{dx^m} P_n(x), \quad (4.21)$$

と書くことができる。ルジャンドル多項式 $P_n(x)$ が n 次の多項式であるので、 $m > n$ となれば、 $P_n^m(x)$ はゼロとなる。したがって、ゼロでない解を期待するには $m \leq n$ が条件となる。

計算機による数値計算のため、ルジャンドルの陪多項式を級数で記述してみよう。陪多項式の定義 (4.21) から、 $(1-x^2)^{-m/2}P_n^m(x)$ を計算すると、

$$\begin{aligned} \frac{d^m P_n}{dx^m} &= \sum_{k=0}^{\lfloor n/2 \rfloor} \frac{(-1)^k (2n-2k)! (n-2k)(n-2k-1) \cdots (n-2k-m+1)}{2^n k! (n-k)! (n-2k)!} x^{n-2k-m} \\ &= \sum_{k=0}^{\lfloor n/2 \rfloor} \frac{(-1)^k (2n-2k)!}{2^n k! (n-k)! (n-2k-m)!} x^{n-2k-m}, \end{aligned}$$

³自己随伴の微分方程式とは、 $p(x)u''(x) + p'(x)u'(x) + q(x)u(x) = 0$ の形の方程式である。

が得られる。この式の両辺に $(1-x)^{m/2}$ を乗じると,

$$P_n^m(x) = (1-x^2)^{m/2} \sum_{k=0}^{\lfloor (n-m)/2 \rfloor} \frac{(-1)^k (2n-2k)!}{2^n k! (n-k)! (n-m-2k)!} x^{n-m-2k}, \quad (4.22)$$

が得られる。途中計算と違い, (4.22) の総和の上限が $\lfloor (n-m)/2 \rfloor$ に書き換えられているのは, k がその値を超えると展開係数がゼロになってしまうからである。

ルジャンドル陪多項式の第2の媒介変数 m は, 今のところ, 0 から n までの整数であるとしているが, $-n$ から n までの整数へ拡張が可能である。定義式 (4.21) だけでは, m が負になると, マイナス2階微分などが必要になり, 負の次数のルジャンドル陪多項式が定義できないのであるが, ロドリグの公式 (4.15) を用いて定義式 (4.21) を書き換えると,

$$P_n^m(x) = \frac{1}{2^n n!} (1-x^2)^{m/2} \frac{d^{n+m}}{dx^{n+m}} (x^2-1)^n, \quad (4.23)$$

が得られる。この書き換えられた定義式によって, これならば, 媒介変数 m が $-n$ から n の範囲へ拡張ができるのである。この新たな定義式を用いて, $P_n^m(x)$ と $P_n^{-m}(x)$ を計算すると,

$$\begin{aligned} P_n^m(x) &= \frac{1}{2^n n!} (1-x^2)^{m/2} \sum_{k=m}^n \binom{n+m}{k} \frac{d^k}{dx^k} (x-1)^n \frac{d^{n+m-k}}{dx^{n+m-k}} (x+1)^n \\ &= \frac{1}{2^n n!} (1-x^2)^{m/2} \sum_{k=0}^{n-m} \binom{n+m}{k+m} \frac{d^{k+m}}{dx^{k+m}} (x-1)^n \frac{d^{n-k}}{dx^{n-k}} (x+1)^n \\ &= \frac{1}{2^n n!} (1-x^2)^{m/2} \sum_{k=0}^{n-m} \frac{(n+m)!}{(k+m)! (n-k)!} \frac{n!}{(n-k-m)!} \frac{n!}{k!} (x-1)^{n-k-m} (x+1)^k, \\ P_n^{-m}(x) &= \frac{1}{2^n n!} (1-x^2)^{-m/2} \sum_{k=0}^{n-m} \binom{n-m}{k} \frac{d^k}{dx^k} (x-1)^n \frac{d^{n-m-k}}{dx^{n-m-k}} (x+1)^n \\ &= \frac{(-1)^m}{2^n n!} (1-x^2)^{m/2} \sum_{k=0}^{n-m} \frac{(n-m)!}{k! (n-m-k)!} \frac{n!}{(n-k)!} \frac{n!}{(m+k)!} (x-1)^{n-k-m} (x+1)^k, \end{aligned}$$

が得られる。なお, 上の計算は $x^2-1 = (x-1)(x+1)$ を用いてライプニッツの公式を適用した。この計算結果から,

$$P_n^{-m}(x) = (-1)^m \frac{(n-m)!}{(n+m)!} P_n^m(x), \quad (4.24)$$

なる関係が得られる。この関係式から, $-n \leq m \leq n$ の範囲でルジャンドル陪多項式 $P_n^m(x)$ が定義できたことになる。具体的な数値研鑽に関しては, 正の m については展開式 (4.22) を用いて計算すればよく, 負の m に関しては, 関係式 (4.24) を用いて正の次数から負の次数に変換すればよい。

4.6.2 パリティ

ルジャンドル陪多項式もルジャンドル多項式と同様にパリティの関係を決定できる。ルジャンドル多項式のパリティから、

$$P_p^0(-x) = (-1)^p P_p^0(x),$$

であることは明らかである。パリティを決定するには、ルジャンドル陪多項式の定義式:

$$P_p^m(x) \equiv (1-x^2)^{m/2} \frac{d^m}{dx^m} P_p^m(x),$$

に注目する。偶数階の微分で関数の偶奇性が変化せず、奇数階の微分で偶奇性が反転する。一方、 $(1-x^2)^{m/2}$ に注意が必要である。括弧の中が偶関数であるので、 m が偶数であれば $(1-x^2)^{m/2}$ は偶関数である。一方、 m が奇数の場合、 $(1-x^2)^{m/2}$ は多項式の平方根となるので、正負の符号を選ぶ自由度が生じるのだが、必ず、正の符号をとることにすれば、

$$P_p^m(-x) = (-1)^{p+m} P_p^m(x), \quad (4.25)$$

なるパリティ関係を得ることができる。

4.6.3 直交性

ルジャンドル陪多項式もルジャンドル多項式と同様の直交性があり、

$$\int_{-1}^1 P_p^m(x) P_q^m(x) dx = \frac{2}{2p+1} \frac{(p+m)!}{(p-m)!} \delta_{pq}, \quad (4.26)$$

が成立する。本節ではその関係式を導出する。

まず、導出にあたり $p \geq q$ としておこう。積は順序を交換することが可能なので、この条件は一般性を損なわない。ロドリグの公式から派生した定義式 (4.23) によって、ルジャンドル陪多項式どうしの内積は、

$$\int_{-1}^1 P_p^m(x) P_q^m(x) dx = \frac{(-1)^m}{2^{p+q} p! q!} \int_{-1}^1 X^m \frac{d^{p+m}}{dx^{p+m}} X^p \frac{d^{q+m}}{dx^{q+m}} X^q dx,$$

のように書くことができる。ただし、 $X \equiv x^2 - 1$ である。右辺の積分を実行するにあたり、部分積分を適用すると、

$$\begin{aligned} \text{RHS} = \frac{(-1)^m}{2^{p+q} p! q!} \left\{ \left[X^m \frac{d^{p+m}}{dx^{p+m}} X^p \frac{d^{q+m-1}}{dx^{q+m-1}} X^q \right]_{-1}^1 \right. \\ \left. - \int_{-1}^1 \frac{d}{dx} \left(X^m \frac{d^{p+m}}{dx^{p+m}} X^p \right) \frac{d^{q+m-1}}{dx^{q+m-1}} X^q dx \right\}, \end{aligned}$$

のように数式変形される。右辺の第1項は、 $x = \pm 1$ で $X = 0$ となるため、必ず、ゼロである。さらに、部分積分を繰り返して、 k 回目では、

$$\text{RHS} = \frac{(-1)^{m+k}}{2^{p+q} p! q!} \left\{ \left[\frac{d^{k-1}}{dx^{k-1}} \left(X^m \frac{d^{p+m}}{dx^{p+m}} X^p \right) \frac{d^{q+m-k+1}}{dx^{q+m-k+1}} X^q \right]_{-1}^1 - \int_{-1}^1 \frac{d^k}{dx^k} \left(X^m \frac{d^{p+m}}{dx^{p+m}} X^p \right) \frac{d^{q+m-k}}{dx^{q+m-k}} X^q dx \right\},$$

となることが予想できる。この予想は、右辺の第1項が、必ず、ゼロになる前提で成立するので、第1項がゼロになることを示せばよい。前節で示したように、 $X^m f(x)$ の $m-1$ 階微分までが、 $x = \pm 1$ でゼロとなる。その事実を利用すれば、

$$\begin{aligned} \frac{d^{k-1}}{dx^{k-1}} \left(X^m \frac{d^{p+m}}{dx^{p+m}} X^p \right) &= 0, & \text{if } k \leq m \\ \frac{d^{q+m-k+1}}{dx^{q+m-k+1}} X^q &= 0, & \text{if } k \geq m+1 \end{aligned}$$

が導かれるので、部分積分の第1項が、必ず、ゼロになることが示された。したがって、部分積分を $q+m$ 回繰り返すと、

$$\int_{-1}^1 P_p^m(x) P_q^m(x) dx = \frac{(-1)^{q+2m}}{2^{p+q} p! q!} \int_{-1}^1 \frac{d^{q+m}}{dx^{q+m}} \left(X^m \frac{d^{p+m}}{dx^{p+m}} X^p \right) X^q dx,$$

が得られる。この被積分関数は、ライプニッツの公式を用いて展開すると、

$$X^q \frac{d^{q+m}}{dx^{q+m}} \left(X^m \frac{d^{p+m}}{dx^{p+m}} X^p \right) = X^q \sum_{k=0}^{p+m} \frac{(q+m)!}{k! (q+m-k)!} \frac{d^{q+m-k}}{dx^{q+m-k}} X^m \frac{d^{q+m+k}}{dx^{q+m+k}} X^p$$

となる。ここで、 X^m の最高次が x^{2m} の項であることに注意すると、 $2m$ 階を越える微分はゼロとなる。つまり、総和の対象となる項がゼロ以外の値となる条件は、 $q+m-k \leq 2m$ 、かつ、 $p+m+k \leq 2p$ である。これを整理すると、 $q-m \leq k$ 、かつ、 $k \leq p-m$ となる。まず、 $p > q$ のとき、これら2つの条件を同時に満足する k は存在しない。したがって、

$$\int_{-1}^1 P_p^m(x) P_q^m(x) dx = 0, \quad \text{if } p \neq q$$

である。一方、 $p = q$ のとき、ゼロ以外の値となる項は $k = p+m$ の項のみである。したがって、

$$\int_{-1}^1 [P_p^m(x)]^2 dx = \frac{(-1)^{p+2m} (p+m)!}{2^{2p} p! p! (2m)! (p-m)!} \int_{-1}^1 X^p \frac{d^{2m}}{dx^{2m}} X^m \frac{d^{2p}}{dx^{2p}} X^p dx$$

である。ところで、

$$\frac{d^{2m}}{dx^{2m}} X^m = \frac{d^{2m}}{dx^{2m}} (x^2 - 1) = (2m)!$$

であることに注意すると,

$$\begin{aligned} \int_{-1}^1 [P_p^m(x)]^2 dx &= \frac{(-1)^{p+2m} (2p)! (p+m)!}{2^{2p} p! p! (p-m)!} \int_{-1}^1 X^p dx, \\ &= \frac{(-1)^{p+2m} (2p)! (p+m)!}{2^{2p} p! p! (p-m)!} \int_0^\pi \sin^{2p+1} \theta d\theta \\ &= \frac{2}{2p+1} \frac{(p+m)!}{(p-m)!} \end{aligned}$$

が得られる。したがって、ルジャンドル陪多項式の直交性を表す (4.26) が証明された。□

直交性を表す (4.26) は極座標を用いて記述すると,

$$\int_0^\pi P_p^m(\cos \theta) P_q^m(\cos \theta) \sin \theta d\theta = \frac{2}{2p+1} \frac{(p+m)!}{(p-m)!} \delta_{pq}, \quad (4.27)$$

となる。方位方向の分離定数が $m=0$ の場合、ルジャンドル陪多項式はルジャンドル多項式と一致する。その場合、直交性を表す数式 (4.26) もルジャンドル多項式の直交性と一致している。

4.7 球面調和関数

ルジャンドル陪多項式の応用例として球面調和関数を紹介しよう。球面調和関数は、ヘルムホルツ方程式やシュレーディンガー方程式の解の中に現れる方位角と天頂角の依存性を表す関数である。本節では、ヘルムホルツ方程式の解法から球面調和関数を導入する。

4.7.1 ヘルムホルツ方程式の解

電磁界の波動関数⁴ を $\psi(\mathbf{r})$ としたとき、ヘルムホルツの方程式は、 $(\nabla^2 + k^2)\psi = 0$ と書くことができる。この方程式は、本来、波動方程式:

$$\left(\nabla^2 + \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} \right) \psi = 0,$$

から派生した方程式である。この波動方程式に、時間依存性 $e^{i\omega t}$ を仮定すると、ヘルムホルツの波動方程式が得られる。ただし、 $k \equiv \omega/c$ である。これらの方程式で用いた記号は、 ω が電磁場の各周波数に、 k が波数に対応する。

⁴電場か磁束密度か、また、どの座標成分かは特定しない。特定しないでも同じ法則が成立するからである。

球面座標系 $[r, \theta, \varphi]$ についてヘルムホルツ方程式を解いてみよう。この座標系の角成分は、順に、動径座標、天頂角座標、方位角座標である。ヘルムホルツの方程式を球面座標で記述すると、

$$\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial \psi}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial \psi}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial^2 \psi}{\partial \varphi^2} + k^2 \psi = 0, \quad (4.28)$$

となる。この方程式を解くには、変数分離を利用する。つまり、 $\psi(r, \theta, \varphi) \equiv R(r) \Theta(\theta) \Phi(\varphi)$ とおいて方程式を解くのである。この定義式をヘルムホルツの方程式に代入すると、

$$\frac{\Theta \Phi}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial R}{\partial r} \right) + \frac{R \Phi}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial \Theta}{\partial \theta} \right) + \frac{R \Theta}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial^2 \Phi}{\partial \varphi^2} + k^2 R \Theta \Phi = 0,$$

のように方程式は変形される。この方程式に r^2/R を乗じると、第2項と第3項から r の依存性を排除できる。残された第1項と第4項は、 $1/\Theta \Phi$ を乗じると、 r のみにしか依存しない。そこで、ヘルムホルツの方程式を2つの式:

$$\frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dR}{dr} \right) + \left[k^2 - \frac{l(l+1)}{r^2} \right] R = 0, \quad (4.29a)$$

$$\frac{\Phi}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial \Theta}{\partial \theta} \right) + \left[l(l+1) \Theta \Phi + \frac{\Theta}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2 \Phi}{\partial \varphi^2} \right] = 0, \quad (4.29b)$$

に分離する。前者は r 以外の依存性を排除できているので常微分方程式である。ところで、新たに $l(l+1)$ を含む項が登場しているが、(4.29a) を $\Theta \Phi$ 倍し、(4.29b) を R/r^2 倍して、互いを加算すると、 $l(l+1)$ を含む項が相殺され、ヘルムホルツの方程式に戻る。また、新たに追加した項に $l(l+1)$ を設定した理由は後に説明する。

方位角の依存性について、当然、1価関数でなければならないので、 $\Phi(\varphi)$ は φ について周期 2π の関数である。そこで、整数 m を用いて、 $\Phi_m(\varphi) = e^{im\varphi}/\sqrt{2\pi}$ であるとしよう。方位角の依存性関数が単純に Φ でなく、 Φ_m としたのは、任意の整数 m に対して個別に解が設定できるからである。すると、(4.29b) は、

$$\frac{1}{\sin \theta} \frac{d}{d\theta} \left(\sin \theta \frac{d\Theta}{d\theta} \right) + \left[l(l+1) - \frac{m^2}{\sin^2 \theta} \right] \Theta = 0, \quad (4.29c)$$

のような常微分方程式に変形される。これは既に取り扱ったルジャンドルの陪微分方程式である。この方程式は、 l が整数でなければ収束解が存在しない。これが、先ほど項を追加した際に、 $l(l+1)$ を設定した理由である。これまでに学んだ内容から、この方程式の解が、

$$\Theta_l^m(\theta) = C P_l^m(\cos \theta),$$

であることが容易にわかる。ただし、 C は定数である。天頂角の依存性関数は、媒介変数 l と m の組合せに対して個別に解が設定できるので、 Θ_l^m のように添え字を付加した。ここで、 $-l \leq m \leq l$ である。

先ほど, 方位角の依存関数を $\Phi_m(\varphi) = e^{im\varphi}/\sqrt{2\pi}$ と設定した。この設定は,

$$\int_0^{2\pi} \Phi_m(\varphi) \Phi_n(\varphi) d\varphi = \delta_{mn},$$

のように正規化されたことを意味する。天頂角の依存性関数についても同様の正規化:

$$\int_0^\pi \Theta_p^m(\theta) \Theta_q^m(\theta) d\theta = \delta_{pq},$$

を要求すると, 定数 C が定まり,

$$\Theta_l^m(\theta) = \sqrt{\frac{2l+1}{2} \frac{(l-m)!}{(l+m)!}} P_l^m(\cos \theta),$$

が得られる。方位角と天頂角の依存性関数の積 $Y_l^m(\theta, \varphi) \equiv \Theta(\theta) \Phi(\varphi)$ は球面調和関数と呼ばれる。つまり, 球面調和関数は,

$$Y_l^m(\theta, \varphi) = \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi} \frac{(l-m)!}{(l+m)!}} P_l^m(\cos \theta) e^{im\varphi}, \quad (4.30)$$

である。この関係式は, $-l \leq m \leq l$ なる整数 m について成立するが, $Y_l^m(\theta, \varphi)$ と $Y_l^{-m}(\theta, \varphi)$ の関係を調べておこう。ルジャンドル陪多項式の方位角の分離変数 m の正負次数の対応関係 (4.24) から,

$$Y_l^{-m}(\theta, \varphi) = (-1)^m \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi} \frac{(l-m)!}{(l+m)!}} P_l^m(\cos \theta) e^{im\varphi}, \quad (4.31)$$

が導出される。この関係式を用いると, (4.30) は,

$$Y_l^m(\theta, \varphi) = (-1)^{(m+|m|)/2} \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi} \frac{(l-|m|)!}{(l+|m|)!}} P_l^{|m|}(\cos \theta) e^{im\varphi}, \quad (4.32)$$

のように書き換えられる。これらの数式にしたがって球面調和関数を計算すると,

$$Y_0^0(\theta, \varphi) = \frac{1}{\sqrt{4\pi}},$$

$$Y_1^0(\theta, \varphi) = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos \theta, \quad Y_1^{\pm 1}(\theta, \varphi) = \mp \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin \theta e^{\pm i\varphi},$$

$$Y_2^0(\theta, \varphi) = \sqrt{\frac{5}{4\pi}} \left(\frac{3}{2} \cos^2 \theta - \frac{1}{2} \right),$$

$$Y_2^{\pm 1}(\theta, \varphi) = \mp \sqrt{\frac{5}{24\pi}} 3 \sin \theta \cos \theta e^{\pm i\varphi}, \quad Y_2^{\pm 2}(\theta, \varphi) = \sqrt{\frac{5}{96\pi}} 3 \sin^2 \theta e^{\pm 2i\varphi},$$

が得られる。

本節は球面調和関数の説明をすれば十分であるが、動径方向の依存関数 $R(r)$ を放置するのはいささか気持ち悪いので、 $R(r)$ についても微分方程式を解いてみる。動径座標の依存性に関するヘルムホルツの方程式 (4.29a) は、

$$\frac{d^2 R}{d(kr)^2} + \frac{2}{kr} \frac{dR}{d(kr)} + \left[1 - \frac{l(l+1)}{(kr)^2} \right] R = 0,$$

のように書き換えられる。この方程式は、第3章で取り扱った球ベッセルの微分方程式である。したがって、その解は、

$$R_l(r) = h_l^{(2)}(kr) = \frac{H_{l+1/2}^{(2)}(kr)}{\sqrt{kr}}, \quad (4.33)$$

のように書くことができる。ここで、解は任意の整数 l について設定できるため、 R_l のように添え字を付加した。また、 $h_l^{(2)}$ は第2種の球ハンケル関数である。第2種の関数は原点から無限遠へ放射される電磁場を意味する。数学的には第1種のハンケル関数も解となるのだが、無限遠から原点への電磁場の入力を意味するので、物理学的な興味はなく、解の対象としない。また、半奇整数次のベッセル関数は初等関数を用いて厳密に記述することができる。いくつかの例を書いておくと、

$$h_0^{(2)}(kr) = \sqrt{\frac{2}{\pi}} e^{-ikr} \frac{e^{\pi i/2}}{kr}, \quad h_1^{(2)}(kr) = \sqrt{\frac{2}{\pi}} e^{-ikr} \left(\frac{e^{\pi i/2}}{k^2 r^2} - \frac{1}{kr} \right),$$

$$h_2^{(2)}(kr) = \sqrt{\frac{2}{\pi}} e^{-ikr} \left(\frac{3e^{\pi i/2}}{k^3 r^3} - \frac{3}{k^2 r^2} - \frac{e^{\pi i/2}}{kr} \right),$$

となる。これらの数式を見ると、 $l=0$ は原点に配置された点波源、 $l=1$ は双極子を含む波源、 $l=2$ は4重極子を含む波源に対応することがわかる。

計算されたヘルムホルツ方程式の解に含まれる球面調和関数 $Y_l^m(\theta, \varphi)$ を描くと図4.6のようになる。球面調和関数の大きさ $|Y_l^m(\theta, \varphi)|$ は、 θ と φ で指定される方向の電磁場の強さを表現している。既に説明したように、 $Y_0^0(\theta, \varphi)$ は単極子に対応する解なので関数は球面を描く。高次の球面調和関数は多重極子に対応する解なので、複雑な形状となる。水素原子モデルにおける電子の波動関数⁵ でも同様の形状が現れる。

4.7.2 量子力学の角運動量

球面調和関数は、量子力学における水素原子の電子の波動方程式にも現れる。その波動関数において、球面調和関数は電子の軌道角運動量と関係している。球面調和関数の応用例として、その事実を紹介しよう。

⁵電子の波動方程式はシュレーディンガーの方程式の解であり、その方程式にもラプラシアンが含まれるため、その解には球面調和関数が現れる。

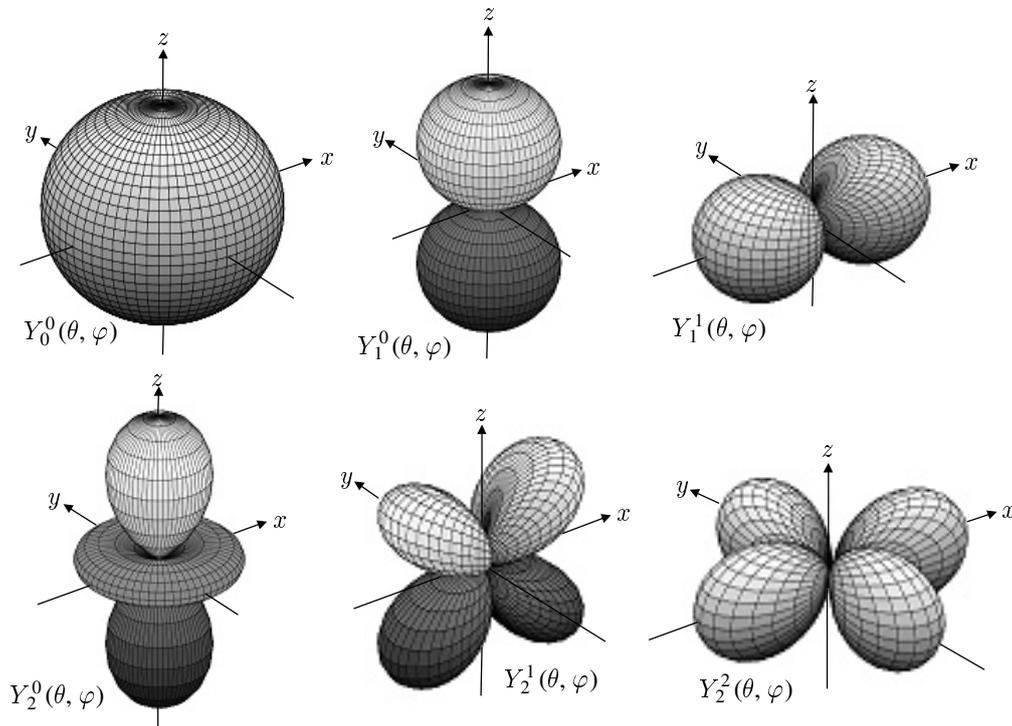


図 4.6: 球面調和関数

原子核が原点に位置するように座標を選んだ場合、電子の軌道角運動量は $\mathbf{L} = \mathbf{r} \times \mathbf{p}$ となる。ここで、 \mathbf{r} は電子の位置、 \mathbf{p} は電子の運動量である。カルテシアン座標系では、 $\mathbf{r} = [x, y, z]$ 、 $\mathbf{p} = [p_x, p_y, p_z]$ のように成分表示できる。ところが、量子力学では運動量の成分は、

$$\mathbf{p} = \left[-i\hbar \frac{\partial}{\partial x}, -i\hbar \frac{\partial}{\partial y}, -i\hbar \frac{\partial}{\partial z} \right],$$

なる演算子で書くことができる。この演算子表示を用いて角運動量 $\mathbf{L} = [L_x, L_y, L_z]$ の各成分を書き下すと、

$$L_x = -i\hbar \left(y \frac{\partial}{\partial z} - z \frac{\partial}{\partial y} \right),$$

$$L_y = -i\hbar \left(z \frac{\partial}{\partial x} - x \frac{\partial}{\partial z} \right),$$

$$L_z = -i\hbar \left(x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right),$$

となる。これらの演算子を球面座標系で書き直してみよう。球面座標系の座標 $[r, \theta, \varphi]$ は、

$$x = r \sin \theta \cos \varphi, \quad y = r \sin \theta \sin \varphi, \quad z = r \cos \theta,$$

なる数式でカルテシアン座標と関係づけられている。この関係式を用いて、カルテシアン

座標系の座標についての偏微分演算子を書き換えると,

$$\frac{\partial}{\partial x} = \sin \theta \cos \varphi \frac{\partial}{\partial r} + \frac{\cos \theta \cos \varphi}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} - \frac{\sin \varphi}{r \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \varphi}, \quad (4.34a)$$

$$\frac{\partial}{\partial y} = \sin \theta \sin \varphi \frac{\partial}{\partial r} + \frac{\cos \theta \sin \varphi}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{\cos \varphi}{r \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \varphi}, \quad (4.34b)$$

$$\frac{\partial}{\partial z} = \cos \theta \frac{\partial}{\partial r} - \frac{\sin \theta}{r} \frac{\partial}{\partial \theta}, \quad (4.34c)$$

が得られる。これを用いて角運動量の各成分を計算すると,

$$L_x = i\hbar \left(\sin \varphi \frac{\partial}{\partial \theta} + \cot \theta \cos \varphi \frac{\partial}{\partial \varphi} \right), \quad (4.35a)$$

$$L_y = -i\hbar \left(\cos \varphi \frac{\partial}{\partial \theta} - \cot \theta \sin \varphi \frac{\partial}{\partial \varphi} \right), \quad (4.35b)$$

$$L_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi}, \quad (4.35c)$$

が得られる。この結果を利用して、角運動量の大きさの自乗を計算すると,

$$\begin{aligned} \mathbf{L}^2 &= L_x^2 + L_y^2 + L_z^2 \\ &= -\hbar^2 \left(\frac{\partial^2}{\partial \theta^2} + \cot \theta \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right) \\ &= -\hbar^2 \left[\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right], \end{aligned}$$

が得られる。第6.3節で導出するが、電子の波動関数を $\psi(r, \theta, \varphi)$ とすると、シュレーディンガー方程式の天頂角と方位角の依存性は,

$$\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial \psi}{\partial \theta} \right) + l(l+1) \psi(r, \theta, \varphi) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2 \psi}{\partial \varphi^2} = 0, \quad (4.36)$$

のように書くことができる。この方程式は、第4.7.1項で導出したヘルムホルツ方程式における電磁場の天頂角と方位角の依存性と一致する。つまり、この方程式の解は球面調和関数 $Y_l^m(\theta, \varphi)$ となるはずである。一方、天頂角と方位角の依存性に関する微分方程式には角運動量の大きさの自乗が含まれている。したがって、シュレーディンガー方程式の天頂角と方位角の依存性は,

$$\mathbf{L}^2 \psi(r, \theta, \varphi) = l(l+1) \hbar^2 \psi(r, \theta, \varphi), \quad (4.37)$$

なる形式に書き直すことができる。この方程式は演算子 \mathbf{L}^2 に関する固有方程式となっている。演算子 \mathbf{L}^2 の固有関数が $\psi(r, \theta, \varphi)$ で、対応する固有値が $l(l+1) \hbar^2$ である。量子力

学の数式では、演算子は測定を意味し、固有値はその測定値である。つまり、水素原子の電子の軌道角運動量の大きさの測定すると、 $\sqrt{l(l+1)}\hbar$ が測定されるのだ。しかも、先ほど述べたように、微分方程式の解、すなわち、演算子 L^2 に対する固有関数が $Y_l^m(\theta, \varphi)$ であることから、 l は整数でなければならない。しかも、ベクトルの大きさの自乗であるので、 l はゼロまたは正の整数である。

球面調和関数のもう一方の媒介変数 m も整数である。波動関数 $\psi(r, \theta, \varphi)$ に球面調和関数が含まれ、しかも、その方位角依存性が $e^{im\varphi}$ であるので、波動関数 $\psi(r, \theta, \varphi)$ に、軌道角運動量の z 成分に対応する演算子 L_z を作用させると、

$$L_z \psi(r, \theta, \varphi) = -i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial \varphi} = m\hbar \psi(r, \theta, \varphi),$$

となる。つまり、演算子 L_z の固有値は $m\hbar$ 、すなわち、軌道角運動量の z 成分を観測すると、 $m\hbar$ が得られる。角運動量の大きさが、

$$l\hbar \leq \sqrt{l(l+1)}\hbar \leq \left(l + \frac{1}{2}\right)\hbar,$$

である⁶ことに注意すると、 $|m| \leq l$ でなければならない。これは、角運動量の z 成分の大きさが角運動量全体の大きさより大きくなれないからである。つまり、ある特定の整数 l

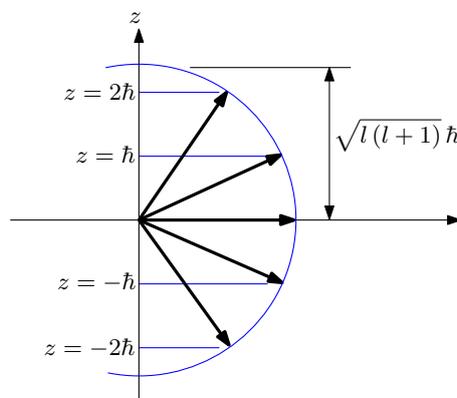


図 4.7: 電子の軌道角運動量 ($l = 2$)

に対して、 $2l + 1$ 通りの m が選択可能である。既に学んだように、球面調和関数 $Y_l^m(\theta, \varphi)$ にはルジャンドル陪多項式 $P_l^m(\theta, \varphi)$ が含まれているので、その関数は、 $|m| \leq l$ の整数でしか定義されていなかった。角運動量として m に要請される制限は、ルジャンドル陪多項式の数学的な制限と一致するのである。

⁶等号が成り立つのは $l = 0$ のときであり、 l が大きくなると $(l + 1/2)\hbar$ に近づく。

4.8 第2種ルジャンドル関数

ルジャンドル微分方程式は、2階の微分方程式であるので2つの独立した解が存在する。ルジャンドル微分方程式の解として、既にルジャンドル多項式を導入した。本節では、もう一方の解として第2種ルジャンドル多項式を導入する。

4.8.1 ルジャンドル多項式の構成

ルジャンドル微分方程式の第2の解を導入する準備としてルジャンドル多項式の構成を調べよう。第4.1.1項で、ルジャンドル微分方程式の級数解としてルジャンドル多項式を導入する際、多項式の最高次数が偶数である場合と、奇数である場合に分類した。本項では、それらの場合におけるルジャンドル多項式の構成を調べる。

最高次数が偶数である場合(4.4)と、奇数である場合(4.5)を個別に調べると、次のように定義される多項式 $p_n(x)$ と $q_n(x)$ がルジャンドル多項式に含まれることがわかる。

$$p_n(x) = 1 + \sum_{k=1}^{\infty} \frac{(-1)^k}{(2k)!} n(n-2)\cdots(n-2k+2) \times (n+1)(n+3)\cdots(n+2k-1)x^{2k}, \quad (4.38a)$$

$$q_n(x) = 1 + \sum_{k=1}^{\infty} \frac{(-1)^k}{(2k+1)!} (n-1)(n-3)\cdots(n-2k+1) \times (n+2)(n+4)\cdots(n+2k)x^{2k+1}. \quad (4.38b)$$

多項式 $p_n(x)$ と $q_n(x)$ はルジャンドル多項式 $P_n(x)$ を $1/c_0$ 倍した多項式である。そのうち、 $p_n(x)$ が n が偶数の場合に対応し、 $q_n(x)$ は n が奇数の場合に対応する。具体的には、ルジャンドル多項式は、

$$P_n(x) = \begin{cases} \frac{(-1)^m(2m)!}{2^{2m}(m!)^2} p_n(x) & \text{if } n = 2m, \\ \frac{(-1)^m(2m+1)!}{2^{2m}(m!)^2} q_n(x) & \text{if } n = 2m+1, \end{cases} \quad (4.39)$$

のように書くことができる。ところで、上に書いた $p_n(x)$ と $q_n(x)$ の定義式は、無限級数として書いてあるが、特定の次数以降でゼロとなるので実際には有限項の多項式である。

4.8.2 第2種ルジャンドル多項式の導入

ルジャンドル多項式は最高次数 n が偶数と奇数の場合で、それぞれ、 $p_n(x)$ と $q_n(x)$ を用いていた。単純にその規則を逆にして、最高次数 n が偶数のときに $q_n(x)$ 、奇数のときに

$p_n(x)$ を用いれば、ルジャンドル関数とは異なる関数を定義できる。

最高次数 n が偶数のときに $q_n(x)$ を用いると、級数は有限項でとどまらず、無限級数となる。それは、 n が奇数のときの $p_n(x)$ も同じである。その事実から、級数 $q_n(x)$ と $p_n(x)$ の収束性に注意が必要である。これらの級数の収束半径は、ともに $|x| < 1$ である。この収束条件に示すように $x = \pm 1$ で収束しない。それは、次のようにして示すことができる。

級数 $p_n(x)$ の $2k$ 次の係数を c_{2k} としよう。この級数について隣り合う次数の係数の比率 c_{2k+2}/c_{2k} は $k \rightarrow \infty$ の極限で、

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \frac{c_{2k+2}}{c_{2k}} = \lim_{k \rightarrow \infty} \left[-\frac{(n-2k+4)(n+2k-3)}{(2k+1)(2k+2)} \right] = 1,$$

となる。つまり、 $k \rightarrow \infty$ の極限で、隣り合う係数は同符号で同じ大きさである。したがって、級数 $p_n(x)$ は $|x| < 1$ では収束するが、そうでない場合には発散するのだ。これで、 $p_n(x)$ の収束性を示すことができた。もう一方、 $q_n(x)$ の収束性も同様の考察で示すことができる。¶

新たに導入する関数は、媒介変数 n の偶奇と級数 $p_n(x)$, $q_n(x)$ の関係をルジャンドル多項式 $P_n(x)$ と逆にするので、

$$Q_n(x) = \begin{cases} C_{2m} q_n(x) & \text{if } n = 2m, \\ D_{2m+1} p_n(x) & \text{if } n = 2m + 1, \end{cases} \quad (4.40)$$

のように定義することができる。ここで、 C_{2m} と D_{2m+1} は規格化係数である。この規格化係数を決定するため、新たに導入する級数 $Q_n(x)$ も $P_n(x)$ と同一の漸化式:

$$Q_{n+1}(x) = \frac{1}{n+1} \left[(2n+1)xP_n(x) - nP_{n-1}(x) \right], \quad (4.41)$$

が成立することを要請しよう。まず、 $n = 2m$ のとき、この漸化式に $p_n(x)$ と $q_n(x)$ の級数展開を代入すると、長い等式であるが、

$$\begin{aligned} & (2m+1) D_{2m+1} \left[1 + \sum_{k=1}^{\infty} \frac{(-1)^k}{(2k)!} (2m+1)(2m-1)\cdots(2m-2k+3) \cdot (2m+2)(2m+4)\cdots(2m+2k) x^{2k} \right] \\ &= (4m+1) C_{2m} \left[x + \sum_{k=1}^{\infty} \frac{(-1)^k}{(2k+1)!} (2m-1)(2m-3)\cdots(2m-2k+1) \cdot (2m+2)(2m+4)\cdots(2m+2k) x^{2k+1} \right] \\ & \quad - 2m D_{2m-1} \left[1 + \sum_{k=1}^{\infty} \frac{(-1)^k}{(2k)!} (2m-1)(2m-3)\cdots(2m-2k+1) \cdot (2m)(2m+2)\cdots(2m+2k-2) x^{2k} \right], \end{aligned}$$

が得られる。この等式について、定数項 (ゼロ次の係数) のみに注目すると、

$$D_{2m+1} = -\frac{2m}{2m+1} D_{2m-1},$$

なる漸化式が得られる。続いて1次の係数に注目すると、

$$C_{2m} = -(2m+1) D_{2m+1},$$

が得られる。この条件を満たす規格化係数は、

$$D_{2m+1} = (-1)^{m+1} \frac{2 \cdot 4 \cdot 6 \cdots (2m)}{3 \cdot 5 \cdot 7 \cdots (2m+1)},$$

$$C_{2m} = (-1)^m \frac{2 \cdot 4 \cdot 6 \cdots (2m)}{1 \cdot 3 \cdot 5 \cdots (2m-1)},$$

が挙げられる。特に、 $D_1 = -1$, $C_0 = 1$ である。この結果を用いて $Q_n(x)$ を記述すると、

$$Q_n(x) = \begin{cases} (-1)^m \frac{2 \cdot 4 \cdot 6 \cdots (2m)}{1 \cdot 3 \cdot 5 \cdots (2m-1)} \cdot q_n(x) & \text{if } n = 2m, \\ (-1)^{m+1} \frac{2 \cdot 4 \cdot 6 \cdots (2m)}{3 \cdot 5 \cdot 7 \cdots (2m+1)} \cdot p_n(x) & \text{if } n = 2m+1, \end{cases} \quad (4.42)$$

のようになる。新たに導入した関数 $Q_n(x)$ はルジャンドル微分方程式の解であるので、第2種ルジャンドル関数⁷と呼ばれる。しかも、第2種ルジャンドル関数 $Q_n(x)$ は、ルジャンドル多項式 $P_n(x)$ と同一の漸化式 (4.41) を満たす。

導入した第2種ルジャンドル関数は、実は、初等関数を用いて書くことができる。まず、(4.42) を用いて $Q_0(x)$ と $Q_1(x)$ を計算しよう。対応する規格化係数が $C_0 = 1$, $D_1 = -1$ であることに注意すると、

$$Q_0(x) = q_0(x) = x + \frac{x^3}{3} + \frac{x^5}{5} + \frac{x^7}{7} + \cdots,$$

$$Q_1(x) = q_0(x) = 1 - x^2 - \frac{x^4}{3} - \frac{x^6}{5} - \frac{x^8}{7} + \cdots,$$

が得られる。これらの級数は、

$$Q_0(x) = \frac{1}{2} \log \frac{1+x}{1-x}, \quad Q_1(x) = \frac{x}{2} \log \frac{1+x}{1-x} - 1, \quad (4.43a)$$

である。さらに高次の $Q_n(x)$ は、級数を直接計算するよりも、漸化式 (4.41) を利用するほうが容易に計算できる。その結果、

$$Q_2(x) = \frac{3x^2 - 1}{4} \log \frac{1+x}{1-x} - \frac{3x}{2}, \quad (4.43b)$$

$$Q_3(x) = \frac{5x^3 - 3x}{4} \log \frac{1+x}{1-x} - \frac{5x^2}{2} + \frac{2}{3}, \quad (4.43c)$$

が得られる。漸化式 (4.41) によるとさらに高次の $Q_n(x)$ にも $\log[(1+x)/(1-x)]$ が残ることが明らかなので、第2種ルジャンドル関数 $Q_n(x)$ は $x = \pm 1$ で発散する関数である。これらの関数をグラフとしてプロットすると図 4.8 のような曲線を描く。図中のどの曲線も $x = \pm 1$ で発散することがわかる。

⁷既に述べたように、 $Q_n(x)$ は有限項の多項式でなく、無限級数であるので第2種ルジャンドル多項式とは呼ばずに、第2種ルジャンドル関数と呼ぶことにする。

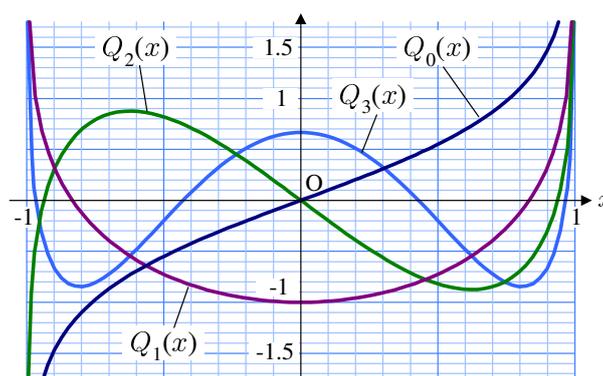
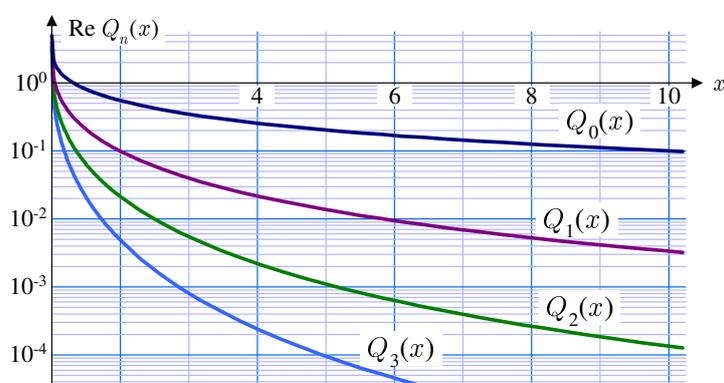


図 4.8: 第2種ルジャンドル関数

級数として表現した場合、 $Q_n(x)$ は $|x| \geq 1$ では発散する。一方、級数の収束半径の中 $|x| < 1$ では、上に述べたように $Q_n(x)$ が対数関数を用いて厳密に表現できる。複素関数における解析接続という考え方をを用いると、級数の収束半径の外では、級数の代わりに対数関数を用いた表現を $Q_n(x)$ とすることができる。そのようにすることで、第2種ルジャンドル関数の定義域を複素数全体に拡張することができる。解析接続による定義域の拡張は、第1で階乗をガンマ関数として拡張する際にも用いた。定義域を拡張した第2種ルジャンドル関数 $Q_n(x)$ を $x > 1$ についてプロットすると図 4.9 のようになる。ただし、 $x > 1$ では対数関数の変数が負になるので、 $Q_n(x)$ は複素数となる⁸。図 4.9 はその複素関数値の実

図 4.9: 遠方 ($x > 1$) における第2種ルジャンドル関数の実部

部をプロットしたグラフである。グラフに示すように関数の実部は x の増加とともに減少し、無限遠ではゼロになる。

⁸負の数の対数関数を考えるには、 $-x = xe^{\pm\pi i}$ に注意すればよい。すなわち、 $\log(-x) = \log x \pm \pi i$ である。ただし、この関係式にも現れているように、対数関数は多価関数であるので、主値を定義しなければならないが、ここではその言及はしないことにする。

4.8.3 第1種ルジャンドル多項式との関係

第2種ルジャンドル関数 $Q_n(x)$ は、第1種ルジャンドル関数 $P_n(x)$ を用いて関数の定義ができる。それら2つの関数はルジャンドル微分方程式の独立な解とはいえ、密接な関係があるのだ。その関係とは、

$$Q_n(x) = -\frac{1}{2} \int_{-1}^1 \frac{P_n(t)}{t-x} dt, \quad (4.44)$$

なる関係式である。この関係式はノイマン表現と呼ばれる。

ノイマン表現 (4.44) を数学的帰納法によって証明しよう。まず、 $P_0(t) = 1$, $P_1(t) = t$ に注意して (4.44) の右辺を計算すると、

$$Q_0(x) = \frac{1}{2} \log \frac{1+x}{1-x}, \quad Q_1(x) = \frac{x}{2} \log \frac{1+x}{1-x} - 1,$$

が得られ、確かに、前項で計算した第2種ルジャンドル関数と一致している。続いて、任意の次数 $n-1$ と n について (4.44) が成立すると仮定し、 $n+1$ でも関係式が成立することを示す。そのためには $Q_n(x)$ に関する漸化式を利用する。計算をすると、

$$\begin{aligned} & (2n+1)xQ_n(x) - nQ_{n-1}(x) \\ &= -\frac{2n+1}{2} x \int_{-1}^1 \frac{P_n(t)}{t-x} dt + \frac{n}{2} \int_{-1}^1 \frac{P_{n-1}(t)}{t-x} dt \\ &= -\frac{1}{2} \int_{-1}^1 \frac{(2n+1)xP_n(t) - nP_{n-1}(t)}{t-x} dt \\ &= -\frac{1}{2} \int_{-1}^1 \frac{(2n+1)tP_n(t) - nP_{n-1}(t)}{t-x} dt + \int_{-1}^1 (2n+1)P_n(x) dt \\ &= -\frac{1}{2} \int_{-1}^1 \frac{(n+1)P_{n+1}(t)}{t-x} dx = (n+1)Q_{n+1}(x), \end{aligned} \quad (4.45)$$

が得られる。この計算の第4行目から第5行目への数式変形ではルジャンドル関数 $P_n(x)$ に関する漸化式を適用した。また、この数式変形は、

$$\int_{-1}^1 P_n(t) dt = 0,$$

が成立することを利用している。次数 n が奇数であれば $P_n(x)$ が奇関数であるのでこの等式は成立する。それが偶関数のときにもこの等式は成立するのか？ 成立することは後に証明する。数式変形 (4.45) によって $Q_n(x)$ の漸化式が得られるので、次数 $n+1$ に対しても関係式 (4.44) が成立することが示せた。したがって、関係式 (4.44) は任意の次数について成立する。◻

ルジャンドル多項式 $P_n(t)$ を t について区間 $[-1, 1]$ で積分した結果がゼロになることを示そう。その証明には、ルジャンドル関数の母関数表示:

$$\sum_{k=0}^{\infty} P_n(t) \xi^k = (1 - 2\xi t + t^2)^{-1/2},$$

を利用する。この数式の両辺を個別に区間 $[-1, 1]$ で積分し、それらの結果を等号で結ぶと、

$$\sum_{k=0}^{\infty} \int_{-1}^1 \frac{P_n(t)}{k+1} \xi^k dt = 2,$$

となる。この結果によって、

$$\int_{-1}^1 P_0(t) dt = 2, \quad \int_{-1}^1 P_k(t) dt = 0 \quad (k \geq 1),$$

が導かれた。偶関数が区間 $[-1, 1]$ での積分でゼロになるのは不思議に思うかもしれない。実は、偶数次のルジャンドル多項式 $P_{2m}(t)$ は区間 $[0, 1]$ で積分するとゼロになる⁹のだ。それが、偶関数である偶数次のルジャンドル多項式を区間 $[-1, 1]$ で積分するとゼロになる理由である。

ノイマン表示は $Q_n(x)$ と $P_n(x)$ の具体的な関係式を得るのに有用である。それを示すため、ノイマン表示に含まれる積分を計算してみると、

$$\begin{aligned} Q_n(x) &= -\frac{1}{2} \int_{-1}^1 \frac{P_n(x)}{t-x} dt \\ &= -\frac{1}{2} \int_{-1}^1 \frac{P_n(x)}{t-x} dt - \frac{1}{2} \int_{-1}^1 \frac{(P_n(t) - P_n(x))}{t-x} dt \\ &= \frac{P(x)}{2} \log \frac{1+x}{1-x} - \frac{1}{2} \int_{-1}^1 \frac{P_n(t) - P_n(x)}{t-x} dt, \end{aligned}$$

が得られる。この計算結果は、前項で示したように対数関数を含む関係式となっている。対数関数に付随する係数が $P_n(x)/2$ であることは前項で示した $Q_0(x)$ から $Q_3(x)$ に現れている。上で計算した $Q_n(x)$ の表記を簡略化すると、

$$Q_n(x) = \frac{P_n(x)}{2} \log \frac{1+x}{1-x} - W_{n-1}(x), \quad (4.46)$$

のように書くことができる。ここで、第2項を $W_{n-1}(x)$ なる記号で記述した。添え字として与えた $n-1$ は、 $W_{n-1}(x)$ が x についての $n-1$ 次の多項式という意味である。引き続き、 $W_{n-1}(x)$ を計算しよう。この計算にあたり、ルジャンドル多項式が、

$$P_n(x) = \sum_{m=0}^{\lfloor n/2 \rfloor} c_{n-2m} x^{n-2m},$$

⁹母関数表示を区間 $[0, 1]$ で積分すれば証明できる。

のように書けることに注意する。すると、多項式 $W_{n-1}(x)$ は、

$$\begin{aligned} W_{n-1}(x) &= \frac{1}{2} \int_{-1}^1 \sum_{m=0}^{\lfloor n/2 \rfloor} c_{n-2m} \frac{t^{n-2m} - x^{n-2m}}{t-x} dt \\ &= \frac{1}{2} \int_{-1}^1 \sum_{m=0}^{\lfloor n/2 \rfloor} c_{n-2m} \sum_{k=0}^{n-2m-1} t^k x^{n-2m-k-1} dt \\ &= \frac{1}{2} \left[\sum_{m=0}^{\lfloor n/2 \rfloor} c_{n-2m} \sum_{k=0}^{n-2m-1} \frac{t^{k+1}}{k+1} x^{n-2m-k-1} \right]_{-1}^1, \end{aligned}$$

のように計算できる。この数式は、 t の次数が偶数である項が相殺されるので、 k が偶数である場合のみが残る。そこで、この数式は、

$$W_{n-1}(x) = \sum_{m=0}^{\lfloor n/2 \rfloor} c_{n-2m} \sum_{k=0}^{\lfloor (n-1)/2-m \rfloor} \frac{x^{n-2m-2k-1}}{2k+1},$$

のように変形できる。ルジャンドル多項式 $P_n(x)$ の展開係数 c_{n-2m} は既に与えられているので、その係数を正確に書くと、

$$W_{n-1}(x) = \sum_{m=0}^{\lfloor n/2 \rfloor} \frac{(-1)^m (2n-2m)!}{2^n m! (n-2m)! (n-m)!} \sum_{k=0}^{\lfloor (n-1)/2-m \rfloor} \frac{x^{n-2m-2k-1}}{2k+1}, \quad (4.47)$$

が得られる。この結果に $n=1, 2$ を代入すると $W_0(x) = 1$, $W_1(x) = 3x/2$ が得られるので、その2つに関しては既に導いた $Q_n(x)$ の展開式 (4.43a), (4.43b) と合致する。しかし、(4.47) を用いて $W_{n-1}(x)$ を計算するのは煩雑であるので、漸化式:

$$(n+1)W_n(x) = (2n+1)xW_{n-1} - nW_{n-2}(x), \quad (4.48)$$

を用いるほうが計算が容易である。この漸化式がどうやって導かれたか? それは、 $Q_n(x)$ の漸化式から容易に導かれるはずであるので、証明は読者に任せることにする。