オンデマンド回：シュレディンガー方程式と直交多項式

理学部　齊藤国靖

2026 年 2 月 5 日

これまで学んだ直交多項式が物理学の中でどの様に利用されるか紹介する．特に，ルジャンドル多項式，エルミート多項式，ラゲール多項式は量子力学において重要であり，時間に依存しないシュレディンガー方程式の解を構成するために必要であることを示す．また，ベッセル関数や球面調和関数などは球対称な中心力ポテンシャルを伴うシュレディンガー方程式の解を構成するために不可欠であることを説明する．

1　シュレディンガー方程式

量子力学において，粒子の状態は**波動関数**によって記述される．波動関数を位置 $\boldsymbol{r} = (x, y, z)$ と時間 t の関数として $\psi(\boldsymbol{r}, t)$ と表せば，その時間発展の様子は

シュレディンガー方程式

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi + V(\boldsymbol{r})\psi \tag{1}$$

によって記述される [1]．但し，プランク定数を h として $\hbar = h/2\pi$ であり，m は粒子の質量である．また，上式の右辺の $V(\boldsymbol{r})$ は位置 $\boldsymbol{r}$ におけるポテンシャルエネルギーであり，

$$\nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$$

はラプラシアンである．式 (1) は左辺に時間微分を含むため，波動関数の時間発展を記述するが，波動関数の $\boldsymbol{r}$ と t を変数分離して

$$\psi(\boldsymbol{r}, t) = \varphi(\boldsymbol{r}) f(t) \tag{2}$$

とすると，式 (1) は

$$i\hbar\varphi(\boldsymbol{r})\frac{\partial f}{\partial t} = f(t)\left\{-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(\boldsymbol{r})\right\}\varphi(\boldsymbol{r})$$

$$\therefore \frac{i\hbar}{f(t)}\frac{\partial f}{\partial t} = \frac{1}{\varphi(\boldsymbol{r})}\left\{-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(\boldsymbol{r})\right\}\varphi(\boldsymbol{r})$$

となる．上式の左辺は t のみ，右辺は $\boldsymbol{r}$ のみを含むから，いずれも $\boldsymbol{r}$ と t に依らない定数でなければならない[*1]．この定数を E とすると，

$$\frac{i\hbar}{f(t)}\frac{df}{dt} = \frac{1}{\varphi(\boldsymbol{r})}\left\{-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(\boldsymbol{r})\right\}\varphi(\boldsymbol{r}) = E$$

である．なお，$f(t)$ は t のみの関数なので，$\partial f/\partial t = df/dt$ とした．上式の時間に関する式より

$$\frac{i\hbar}{f(t)}\frac{df}{dt} = E\ , \qquad \therefore \frac{df}{dt} = -i\frac{E}{\hbar}f(t)$$

が得られる．この 1 階微分方程式は直ちに解くことができ，積分定数を除いて

$$f(t) = e^{-i(E/\hbar)t} \tag{3}$$

となる．一方，位置に関する式から

時間に依存しないシュレディンガー方程式

$$\boxed{\left\{-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(\boldsymbol{r})\right\}\varphi(\boldsymbol{r}) = E\varphi(\boldsymbol{r})} \tag{4}$$

が得られる．従って，式 (4) を解いて $\varphi(\boldsymbol{r})$ を求めれば，式 (2), (3) より，式 (1) の解は

$$\psi(\boldsymbol{r}, t) = \varphi(\boldsymbol{r})e^{-i(E/\hbar)t}$$

となる．つまり，波動関数 $\psi(\boldsymbol{r}, t)$ を求める計算は式 (4) を解くことに帰着し，式 (4) は $\varphi(\boldsymbol{r})$ に関する 2 階線型微分方程式である．さらに，ポテンシャルエネルギー $V(\boldsymbol{r})$ は一般には $\boldsymbol{r}$ の関数なので，式 (4) は<u>変数係数の 2 階線型微分方程式</u>であり，まさに微分積分学 D の授業で扱ってきたタイプの微分方程式であることが解る[*2]．

2　調和ポテンシャルの問題

系が 1 次元であれば，$\varphi(\boldsymbol{r})$ は x のみの 1 変数関数 $\varphi(x)$ であり，式 (4) は 2 階常微分方程式

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\varphi}{dx^2} + V(x)\varphi(x) = E\varphi(x) \tag{5}$$

になる．左辺のポテンシャルエネルギーが区間毎に一定である**井戸型ポテンシャル**

$$V(x) = \begin{cases} V_0 & (x < -a) \\ 0 & (-a \leq x \leq a) \\ V_0 & (x > a) \end{cases}$$

[*1] 偏微分方程式を解くための**変数分離法**と呼ばれる手順である．

[*2] 式 (4) は 3 変数 $\boldsymbol{r} = (x, y, z)$ の偏微分方程式であるから，常微分方程式として扱うにはもう少し工夫が必要である．

の場合，式 (5) の解は境界条件を満たす三角関数や指数関数の組み合わせで与えられる [1]．一方，ポテンシャルエネルギーが原点 $x = 0$ を中心とする**調和ポテンシャル**

$$V(x) = \frac{m\omega^2}{2}x^2$$

の場合，式 (5) は

$$\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\varphi}{dx^2} + \left(E - \frac{m\omega^2}{2}x^2\right)\varphi(x) = 0 \tag{6}$$

と変形でき，$\varphi(x)$ に関する変数係数の 2 階線型常微分方程式となる．調和ポテンシャルは粒子が平衡位置 $x = 0$ の周りで束縛される（振動する）様子を表しており，ω は角振動数である．

2.1 変数変換

式 (6) を解くために，新しい変数

$$\xi \equiv \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x$$

を導入する．このとき，x に関する微分は

$$\frac{d}{dx} = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\frac{d}{d\xi}\ , \qquad \frac{d^2}{dx^2} = \frac{m\omega}{\hbar}\frac{d^2}{d\xi^2}$$

と変換されるから，式 (6) は

$$\frac{\hbar\omega}{2}\frac{d^2\varphi}{d\xi^2} + \left(E - \frac{\hbar\omega}{2}\xi^2\right)\varphi(\xi) = 0$$

$$\therefore\ \frac{d^2\varphi}{d\xi^2} + \left(\lambda - \xi^2\right)\varphi(\xi) = 0 \tag{7}$$

となる．但し，定数 λ を次式で定義した．

$$\lambda \equiv \frac{2E}{\hbar\omega}$$

2.2 解の関数形

$\varphi(x)$ の関数形をある程度限定するため，$|\xi|$ が十分大きく，

$$\xi^2 \gg \lambda$$

となる場合を考えよう．このとき，式 (7) の λ は無視することができ，

$$\frac{d^2\varphi}{d\xi^2} - \xi^2\varphi(\xi) \simeq 0\ , \qquad \therefore\ \frac{d^2\varphi}{d\xi^2} \simeq \xi^2\varphi(\xi)$$

が成り立つ．つまり，$|\xi|$ が十分大きければ，解は

$$\varphi(\xi) \propto e^{\pm\xi^2/2}$$

を満たす[*3]．また，粒子は調和ポテンシャルによって平衡位置 $x=0$（つまり $\xi=0$）の周りに束縛されているため，$|\xi|\to\infty$ で発散する解は非物理的であり，$\varphi(\xi)\propto e^{-\xi^2/2}$ だけが考えられる．さらに，多項式は指数関数より発散が遅いため，ξ の大きさに制限のない式 (7) の解の関数形を

$$\varphi(\xi)=H(\xi)e^{-\xi^2/2} \tag{8}$$

と仮定することができる．但し，$H(\xi)$ は ξ の多項式である．式 (8) の 2 階導関数を計算すると

$$\begin{aligned}
\frac{d\varphi}{d\xi}&=\frac{dH}{d\xi}e^{-\xi^2/2}-\xi H(\xi)e^{-\xi^2/2}\\
&=\left\{\frac{dH}{d\xi}-\xi H(\xi)\right\}e^{-\xi^2/2}\\
\therefore\ \frac{d^2\varphi}{d\xi^2}&=\left\{\frac{d^2H}{d\xi^2}-H(\xi)-\xi\frac{dH}{d\xi}\right\}e^{-\xi^2/2}-\xi\left\{\frac{dH}{d\xi}-\xi H(\xi)\right\}e^{-\xi^2/2}\\
&=\left\{\frac{d^2H}{d\xi^2}-2\xi\frac{dH}{d\xi}-H(\xi)+\xi^2H(\xi)\right\}e^{-\xi^2/2}
\end{aligned}$$

となるから，式 (8) を (7) に代入し，両辺を $e^{-\xi^2/2}$ で割ると

$$\frac{d^2H}{d\xi^2}-2\xi\frac{dH}{d\xi}-H(\xi)+\xi^2H(\xi)+\left(\lambda-\xi^2\right)H(\xi)=0$$

$$\therefore\ \frac{d^2H}{d\xi^2}-2\xi\frac{dH}{d\xi}+(\lambda-1)\,H(\xi)=0$$

が得られる．上式で $\lambda\equiv 2n+1$ としたものが

エルミートの微分方程式

$$\frac{d^2H}{d\xi^2}-2\xi\frac{dH}{d\xi}+2nH(\xi)=0$$

であり，$n=0,1,2,\cdots$ の値に応じた**エルミート多項式** $H_n(\xi)$ が解である．従って，式 (7) の解は

$$\varphi(\xi)=H_n(\xi)e^{-\xi^2/2}$$

で与えられる．

[*3] 実際，

$$\frac{d}{d\xi}e^{\pm\xi^2/2}=\pm\xi e^{\pm\xi^2/2}\,,\qquad \frac{d^2}{d\xi^2}e^{\pm\xi^2/2}=\frac{d}{d\xi}\left(\pm\xi e^{\pm\xi^2/2}\right)=\left(\xi^2\pm1\right)e^{\pm\xi^2/2}$$

なので，$|\xi|\gg1$ であれば

$$\frac{d^2}{d\xi^2}e^{\pm\xi^2/2}\simeq\xi^2e^{\pm\xi^2/2}$$

が成り立つ．よって，$\varphi(\xi)\propto e^{\pm\xi^2/2}$ は $d^2\varphi/d\xi^2\simeq\xi^2\varphi(\xi)$ を満たす．

3 中心力ポテンシャルの問題

系が 3 次元であり，式 (4) のポテンシャルエネルギーが**中心力ポテンシャル**

$$V(\boldsymbol{r}) = V(r)$$

で与えられる場合を考える．但し，$r = |\boldsymbol{r}|$ は原点から測った動径距離である．このとき，系は原点を中心として球対称であるから，デカルト座標より球座標を用いた方が便利である．そこで，

球座標におけるラプラシアン

$$\nabla^2 = \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right) + \frac{1}{r^2}\Lambda$$

を用いる．但し，

$$\Lambda \equiv \frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2} \tag{9}$$

は2 つの角度 θ, ϕ にのみ作用する微分演算子である．このとき，式 (4) は

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left\{\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right) + \frac{1}{r^2}\Lambda\right\}\varphi(\boldsymbol{r}) + V(r)\varphi(\boldsymbol{r}) = E\varphi(\boldsymbol{r})$$

$$\therefore \frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right)\varphi(\boldsymbol{r}) + \frac{2mr^2}{\hbar^2}\left\{E - V(r)\right\}\varphi(\boldsymbol{r}) + \Lambda\varphi(\boldsymbol{r}) = 0$$

と変形でき，解を動径距離 r と 2 つの角度 θ, ϕ に変数分離して

$$\varphi(\boldsymbol{r}) = R(r)Y(\theta,\phi)$$

とすると，上式は

$$Y(\theta,\phi)\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right)R(r) + \frac{2mr^2}{\hbar^2}\left\{E - V(r)\right\}R(r)Y(\theta,\phi) + R(r)\Lambda Y(\theta,\phi) = 0$$

となる．さらに，両辺を $R(r)Y(\theta,\phi)$ で割って式を整理すると

$$\frac{1}{R(r)}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right)R(r) + \frac{2mr^2}{\hbar^2}\left\{E - V(r)\right\} = -\frac{1}{Y(\theta,\phi)}\Lambda Y(\theta,\phi)$$

となる．上式の左辺は r のみ，右辺は θ, ϕ のみ含むから，いずれも r, θ, ϕ に依らない定数である．この定数を $l(l+1)$ とすると，左辺からは

$$\frac{1}{R(r)}\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{d}{dr}\right)R(r) + \frac{2mr^2}{\hbar^2}\left\{E - V(r)\right\} = l(l+1) \tag{10}$$

が得られ，右辺からは

$$-\frac{1}{Y(\theta,\phi)}\Lambda Y(\theta,\phi) = l(l+1) \tag{11}$$

が得られる．

3.1　動径方向の方程式

式 (10) を解くには，$V(r)$ の関数形を具体的に与えなければならない．そこで，図 1 の様に $V(r)$ が井戸型ポテンシャルの場合とクーロンポテンシャルの場合に分けて説明しよう．

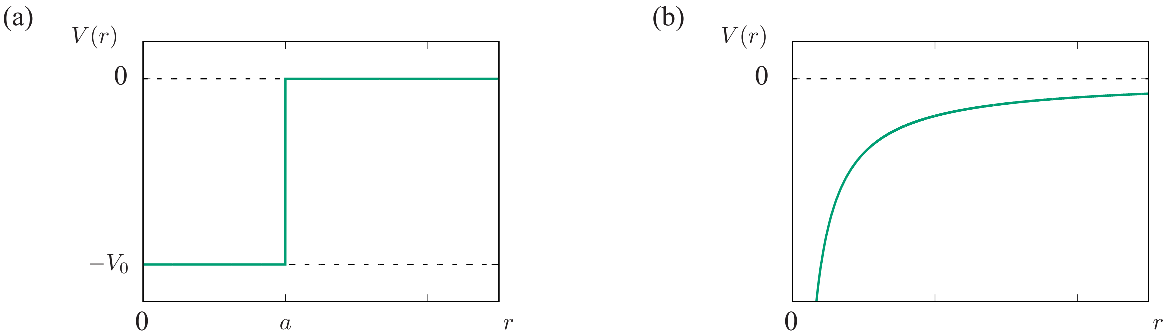

図 1：(a) 井戸型ポテンシャルと (b) クーロンポテンシャル．

3.1.1　井戸型ポテンシャルの場合

図 1(a) の様に，中心力ポテンシャルが井戸型ポテンシャル

$$V(r) = \begin{cases} -V_0 & (0 \leq r \leq a) \\ 0 & (a < r) \end{cases} \tag{12}$$

で与えられる場合を考える．まず，式 (10) を整理して

$$\frac{1}{r^2}\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{dR}{dr}\right) + \frac{2m}{\hbar^2}\left\{E - V(r)\right\}R(r) - \frac{l(l+1)}{r^2}R(r) = 0 \tag{13}$$

とする．上式の左辺第 1 項を

$$\begin{aligned} \frac{1}{r^2}\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{dR}{dr}\right) &= \frac{1}{r^2}\left(2r\frac{dR}{dr} + r^2\frac{d^2R}{dr^2}\right) \\ &= \frac{d^2R}{dr^2} + \frac{2}{r}\frac{dR}{dr} \end{aligned}$$

と変形すると，式 (13) は

$$\frac{d^2R}{dr^2} + \frac{2}{r}\frac{dR}{dr} + \frac{2m}{\hbar^2}\left\{E - V(r)\right\}R(r) - \frac{l(l+1)}{r^2}R(r) = 0$$

となる．これに式 (12) を代入すると，$0 \leq r \leq a$ のとき

$$\frac{d^2R}{dr^2} + \frac{2}{r}\frac{dR}{dr} + \frac{2m}{\hbar^2}(E + V_0)R(r) - \frac{l(l+1)}{r^2}R(r) = 0 \tag{14}$$

となる．ここで，$E + V_0 > 0$ であることに注意して

$$k^2 \equiv \frac{2m}{\hbar^2}(E + V_0)$$

と置く．また，新しい変数

$$\rho \equiv kr$$

を導入すると

$$\frac{d^2}{dr^2} = k^2 \frac{d^2}{d\rho^2}\ , \qquad \frac{2}{r}\frac{d}{dr} = \frac{2k^2}{\rho}\frac{d}{d\rho}$$

となるので，式 (14) は

$$k^2 \frac{d^2 R}{d\rho^2} + \frac{2k^2}{\rho}\frac{dR}{d\rho} + k^2 R - k^2 \frac{l(l+1)}{\rho^2} R(\rho) = 0$$

となる．従って，両辺を k^2 で割ると

球ベッセルの微分方程式

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

となり，$l = 0, 1, 2, \cdots$ の値に応じた**球ベッセル関数**

$$j_l(\rho) = \left(\frac{\pi}{2\rho}\right)^{1/2} J_{l+1/2}(\rho)$$

が解である[*4]．但し，$J_\nu(\rho)$ は通常の**ベッセル関数**であり，

ベッセルの微分方程式

$$\frac{d^2 J_\nu}{d\rho^2} + \frac{1}{\rho}\frac{dJ_\nu}{d\rho} + \left(1 - \frac{\nu^2}{\rho^2}\right) J_\nu(\rho) = 0$$

の解である[*5]．以上より，井戸型ポテンシャルの場合の波動関数は（規格化定数を除いて）次式で与えられる．

$$R(r) = j_l(kr)\ , \qquad \therefore \varphi(\boldsymbol{r}) = j_l(kr) Y(\theta, \phi)$$

3.1.2　クーロンポテンシャルの場合

式 (10) の解を

$$R(r) \equiv \frac{\chi(r)}{r} \tag{15}$$

[*4] これ以外に**球ノイマン関数**

$$n_l(\rho) = (-1)^{l+1} \left(\frac{\pi}{2\rho}\right)^{1/2} J_{-l-1/2}(\rho)$$

も解となるが，$\rho = 0$（つまり $r = 0$）で特異的なので，ここでは省略する．

[*5] ベッセルの微分方程式はラプラス方程式やヘルムホルツ方程式などを円筒座標系で解く場合に現れる．

として，動径距離の関数 $\chi(r)$ を導入すると

$$\begin{aligned}
r^2\frac{dR}{dr} &= r^2\frac{d}{dr}\left(\frac{\chi}{r}\right)\\
&= \chi' r - \chi\\
\therefore \frac{d}{dr}\left(r^2\frac{dR}{dr}\right) &= \frac{d}{dr}\left(\chi' r - \chi\right)\\
&= \chi'' r + \chi' - \chi'\\
&= \chi'' r
\end{aligned}$$

である．但し，$\chi' = d\chi/dr$, $\chi'' = d^2\chi/dr^2$ とした．従って，式 (10) は

$$\begin{aligned}
\chi'' r + \frac{2mr^2}{\hbar^2}\left\{E - V(r)\right\}\frac{\chi(r)}{r} &= l(l+1)\frac{\chi(r)}{r}\\
\therefore \frac{d^2\chi}{dr^2} + \left[\frac{2m}{\hbar^2}\left\{E - V(r)\right\} - \frac{l(l+1)}{r^2}\right]\chi(r) &= 0 \qquad (16)
\end{aligned}$$

となる．これは $\chi(r)$ に関する変数係数の 2 階線形常微分方程式である．

図 1(b) の様に，中心力ポテンシャルが**クーロンポテンシャル**

$$V(r) = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r}$$

で与えられる場合を考えると，式 (16) は

$$\frac{d^2\chi}{dr^2} + \left\{\frac{2m}{\hbar^2}\left(E + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r}\right) - \frac{l(l+1)}{r^2}\right\}\chi(r) = 0 \qquad (17)$$

となる．$E < 0$ なので，

$$\beta^2 \equiv -\frac{8mE}{\hbar^2}\ , \qquad n \equiv \frac{me^2}{2\pi\epsilon_0\beta\hbar^2}$$

を導入する．また，新しい変数

$$\rho \equiv \beta r$$

を用いると

$$\frac{d^2}{dr^2} = \beta^2\frac{d^2}{d\rho^2}$$

なので，式 (17) は

$$\begin{aligned}
\beta^2\frac{d^2\chi}{d\rho^2} + \left\{\frac{2mE}{\hbar^2} + \frac{me^2}{2\pi\epsilon_0\hbar^2 r} - \frac{l(l+1)}{r^2}\right\}\chi(\rho) &= 0\\
\therefore \beta^2\frac{d^2\chi}{d\rho^2} + \left\{-\frac{\beta^2}{4} + \frac{\beta^2 n}{\rho} - \beta^2\frac{l(l+1)}{\rho^2}\right\}\chi(\rho) &= 0\\
\therefore \frac{d^2\chi}{d\rho^2} + \left\{\frac{n}{\rho} - \frac{1}{4} - \frac{l(l+1)}{\rho^2}\right\}\chi(\rho) &= 0 \qquad (18)
\end{aligned}$$

と変形できる．ここで，解の関数形を

$$\chi(\rho) = e^{-\rho/2} L(\rho) \tag{19}$$

と仮定すると*6，

$$\begin{aligned}
\frac{d^2\chi}{d\rho^2} &= \frac{d^2}{d\rho^2}\left(e^{-\rho/2}L\right) \\
&= \frac{d}{d\rho}\left(-\frac{1}{2}e^{-\rho/2}L + e^{-\rho/2}L'\right) \\
&= \left(-\frac{1}{2}\right)^2 e^{-\rho/2}L - \frac{1}{2}e^{-\rho/2}L' - \frac{1}{2}e^{-\rho/2}L' + e^{-\rho/2}L'' \\
&= \left(L'' - L' + \frac{L}{4}\right)e^{-\rho/2}
\end{aligned}$$

となる．但し，$L(\rho)$ は ρ の多項式であり，$L' = dL/d\rho$, $L'' = d^2L/d\rho^2$ とした．上式を式 (18) に代入し，両辺を $e^{-\rho/2}$ で割ると

$$L'' - L' + \frac{L}{4} + \left\{\frac{n}{\rho} - \frac{1}{4} - \frac{l(l+1)}{\rho^2}\right\} L = 0$$

$$\therefore \rho^2 L'' - \rho^2 L' + \{n\rho - l(l+1)\} L = 0 \tag{20}$$

となる．さらに，$L(\rho)$ に対して

$$L(\rho) \equiv \rho^{l+1} f(\rho) \tag{21}$$

を導入すると，

$$\begin{aligned}
L' &= \frac{d}{d\rho}\left(\rho^{l+1}f\right) \\
&= (l+1)\rho^l f + \rho^{l+1}f' \ , \\
L'' &= \frac{d}{d\rho}\left\{(l+1)\rho^l f + \rho^{l+1}f'\right\} \\
&= l(l+1)\rho^{l-1}f + (l+1)\rho^l f' + (l+1)\rho^l f' + \rho^{l+1}f'' \\
&= \rho^{l+1}f'' + 2(l+1)\rho^l f' + l(l+1)\rho^{l-1}f
\end{aligned}$$

---

*6 先程と同様，$\chi(\rho)$ の関数形をある程度限定するため，ρ が十分大きい場合を考える．$\rho \gg 1$ のとき，式 (18) は

$$\frac{d^2\chi}{d\rho^2} - \frac{1}{4}\chi(\rho) \simeq 0 \ , \qquad \therefore \frac{d^2\chi}{d\rho^2} \simeq \frac{1}{4}\chi(\rho)$$

となり，

$$\chi(\rho) \propto e^{\pm\rho/2}$$

が成り立つ．従って，$\rho \to \infty$ で発散しない解として

$$\chi(\rho) = e^{-\rho/2} L(\rho)$$

を仮定できる．但し，$L(\rho)$ は ρ の多項式である．

となるので，式 (20) の左辺は

$$\begin{aligned}\text{l.h.s.} &= \rho^{l+3} f'' + 2(l+1)\rho^{l+2} f' + l(l+1)\rho^{l+1} f \\ &\quad - \left\{(l+1)\rho^{l+2} f + \rho^{l+3} f'\right\} + \{n\rho - l(l+1)\}\, \rho^{l+1} f \\ &= \rho^{l+3} f'' + \rho^{l+2}\{2(l+1) - \rho\} f' + \rho^{l+2}\{n - (l+1)\} f\end{aligned}$$

と変形できる．よって，式 (20) の両辺を ρ^{l+2} で割って

$$\rho f'' + \{2(l+1) - \rho\} f' + \{n - (l+1)\} f = 0 \tag{22}$$

が得られる．ここで，

$$p \equiv 2l + 1\ , \qquad q \equiv n + l$$

を定義すると，式 (22) は

ラゲールの陪微分方程式

$$\rho \frac{d^2 f}{d\rho^2} + (p + 1 - \rho)\frac{df}{d\rho} + (q - p) f(\rho) = 0 \tag{23}$$

となり，p, q の値に応じた**ラゲール陪多項式**

$$L_q^p(\rho) = \frac{d^p}{d\rho^p} L_q(\rho)$$

が解となる [2]．但し，$L_q(\rho)$ は通常の**ラゲール多項式**であり，式 (23) で $p = 0$ とした

ラゲールの微分方程式

$$\rho \frac{d^2 L_q}{d\rho^2} + (1 - \rho)\frac{dL_q}{d\rho} + qL_q(\rho) = 0$$

の解である．以上より，

$$\begin{aligned}f(\rho) &= L_q^p(\rho) \\ &= L_{n+l}^{2l+1}(\rho)\end{aligned}$$

であるから，式 (15), (19), (21) によって，クーロンポテンシャルの場合の波動関数は（規格化定数を除いて）次式で与えられる．

$$\begin{aligned}R(r) &= \frac{e^{-\rho/2}}{r}\rho^{l+1} f(\rho) \\ &= \beta e^{-\rho/2}\rho^l L_{n+l}^{2l+1}(\rho)\end{aligned}$$

$$\therefore \varphi(\boldsymbol{r}) \propto e^{-\rho/2}\rho^l L_{n+l}^{2l+1}(\rho) Y(\theta, \phi)$$

3.2 角度方向の方程式

式 (11) の解 $Y(\theta,\phi)$ を求める前に，その物理的な意味を考える．まず，式 (11) を

$$\Lambda Y(\theta,\phi) = -l(l+1)Y(\theta,\phi) \tag{24}$$

と変形すると，$Y(\theta,\phi)$ は微分演算子 Λ の**固有関数**であり，$-l(l+1)$ が**固有値**になることが解る．ところで，（演算子としての）角運動量を $\boldsymbol{l}$ とすると，その 2 乗は

$$\boldsymbol{l}^2 = -\hbar^2\left\{\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right)+\frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}\right\}$$

で与えられる [3]．上式を式 (9) と比べると

$$\boldsymbol{l}^2 = -\hbar^2\Lambda$$

であるから，式 (24) の両辺に $-\hbar^2$ を掛けて

$$\boldsymbol{l}^2 Y(\theta,\phi) = \hbar^2 l(l+1)Y(\theta,\phi)$$

となる．つまり，$Y(\theta,\phi)$ は角運動量の 2 乗 $\boldsymbol{l}^2$ の固有関数であり，固有値は $\hbar^2 l(l+1)$ である．同様に，$\boldsymbol{l}=(l_x,l_y,l_z)$ とすれば，

$$l_z Y(\theta,\phi) = \hbar m Y(\theta,\phi)$$

が成り立ち [3]，$Y(\theta,\phi)$ は角運動量の z 成分 l_z の固有関数でもあり，固有値は $\hbar m$ であることが解る．但し，m は次式で与えらえる整数である．

$$m = -l, -l+1, -l+2, \cdots, l-2, l-1, l$$

また，式 (11) あるいは (24) は中心力ポテンシャル $V(r)$ を含んでいないため，$Y(\theta,\phi)$ の関数形は $V(r)$ に依らず，球対称な系に普遍的に用いられる関数となる．

3.2.1 角度変数の分離

式 (11) または (24) を解くため，解を θ と ϕ に変数分離して

$$Y(\theta,\phi) = \Theta(\theta)\Phi(\phi) \tag{25}$$

とする．このとき，式 (24) に (9) を代入すると，

$$\frac{\Phi(\phi)}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial\Theta}{\partial\theta}\right)+\frac{\Theta(\theta)}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2\Phi}{\partial\phi^2} = -l(l+1)\Theta(\theta)\Phi(\phi)$$

$$\therefore \frac{\sin\theta}{\Theta(\theta)}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial\Theta}{\partial\theta}\right)+l(l+1)\sin^2\theta = -\frac{1}{\Phi(\phi)}\frac{\partial^2\Phi}{\partial\phi^2}$$

と変形できる．上式の左辺は θ のみ，右辺は ϕ のみ含むから，いずれも θ と ϕ に依らない定数である．この定数を m^2 とすると，左辺からは

$$\frac{\sin\theta}{\Theta(\theta)}\frac{d}{d\theta}\left(\sin\theta\frac{d\Theta}{d\theta}\right)+l(l+1)\sin^2\theta=m^2$$

$$\therefore\ \frac{1}{\sin\theta}\frac{d}{d\theta}\left(\sin\theta\frac{d\Theta}{d\theta}\right)+\left\{l(l+1)-\frac{m^2}{\sin^2\theta}\right\}\Theta(\theta)=0 \tag{26}$$

が得られ，右辺からは

$$-\frac{1}{\Phi(\phi)}\frac{d^2\Phi}{d\phi^2}=m^2\ ,\qquad \therefore\ \frac{\partial^2\Phi}{\partial\phi^2}=-m^2\Phi(\phi) \tag{27}$$

が得られる．

3.2.2　ϕ 方向の解

式 (27) は直ちに解くことができ，m の値に応じて

$$\Phi_m(\phi)=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{im\phi} \tag{28}$$

が解となる．ここで，定数 $1/\sqrt{2\pi}$ は $\Phi_m(\phi)$ の規格化条件

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

を満たすための規格化定数である．

3.2.3　θ 方向の解

式 (26) を解くため，新しい変数

$$\zeta\equiv\cos\theta$$

を導入する．このとき

$$\frac{d}{d\theta}=\frac{d\zeta}{d\theta}\frac{d}{d\zeta}=-\sin\theta\frac{d}{d\zeta}$$

なので，式 (26) は

$$-\frac{d}{d\zeta}\left(-\sin^2\theta\frac{d\Theta}{d\zeta}\right)+\left\{l(l+1)-\frac{m^2}{\sin^2\theta}\right\}\Theta(\zeta)=0$$

$$\therefore\ \frac{d}{d\zeta}\left\{\left(1-\zeta^2\right)\frac{d\Theta}{d\zeta}\right\}+\left\{l(l+1)-\frac{m^2}{1-\zeta^2}\right\}\Theta(\zeta)=0$$

となる．上式の左辺第 1 項を少し計算すると

ルジャンドルの陪微分方程式

$$\left(1-\zeta^2\right)\frac{d^2\Theta}{d\zeta^2}-2\zeta\frac{d\Theta}{d\zeta}+\left\{l(l+1)-\frac{m^2}{1-\zeta^2}\right\}\Theta(\zeta)=0 \tag{29}$$

となり，l, m の値に応じた**ルジャンドル陪関数**

$$P_l^m(\zeta)=\left(1-\zeta^2\right)^{|m|/2}\frac{d^{|m|}}{d\zeta^{|m|}}P_l(\zeta)$$

が解となる[*7]．但し，$P_l(\zeta)$ は通常の**ルジャンドル多項式**であり，式 (29) で $m=0$ とした

ルジャンドルの微分方程式

$$\left(1-\zeta^2\right)\frac{d^2P_l}{d\zeta^2}-2\zeta\frac{dP_l}{d\zeta}+l(l+1)P_l(\zeta)=0$$

の解である．以上より，次式が得られる．

$$\begin{aligned}\Theta(\theta)&=P_l^m(\zeta)\\&=P_l^m(\cos\theta)\end{aligned} \tag{30}$$

3.2.4 球面調和関数

式 (25) に式 (28), (30) を代入すると $Y(\theta,\phi)$ が求められる．但し，式 (28) は m，式 (30) は l, m に依存するため，$Y(\theta,\phi)$ も $Y_l^m(\theta,\phi)$ と表すことにすると，適切な規格化定数を含めて

球面調和関数

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

となる．ここで，右辺のルジャンドル陪関数は

$$P_l^m(\cos\theta)=P_l^{-m}(\cos\theta)=P_l^{|m|}(\cos\theta)$$

を満たすので，m の絶対値を用いて表した．

参考文献

[1] 原康夫．量子力学．岩波基礎物理シリーズ．岩波書店, 2021.

[2] 猪木慶治・川合光．量子力学 I．講談社, 2000.

[3] 小出昭一郎．量子力学 (I)．基礎物理学選書．裳華房, 1990.

[*7] m が負になる可能性もあるため，指数には絶対値 $|m|$ を用いた．