軌道角運動量：対称性と保存量 （続き）

軌道角運動量の保存 (中心力場中の 1 粒子の運動の場合)

中心力は保存力であって、位置のエネルギーというものが定義できる。力のベクトルを $\boldsymbol{F}(\boldsymbol{r})$ と書いた時、

$$F_x = -\frac{\partial V}{\partial x}, \quad F_y = -\frac{\partial V}{\partial y}, \quad F_z = -\frac{\partial V}{\partial z} \tag{12}$$

と表される位置 $\boldsymbol{r}$ についての一価のスカラー関数 $V(\boldsymbol{r})$（ポテンシャル関数、位置のエネルギー）が定義できるからである。中心力の場合にはさらに、$V(\boldsymbol{r})$ は中心からの距離 $r = |\boldsymbol{r}|$ のみの関数で、$V(\boldsymbol{r}) = V(r)$ である。この時、粒子のハミルトニアンは

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(r) \tag{13}$$

である。

さて、関係式 (6a∼b)(11a∼b) を用いると、ハミルトニアン (13) に対しては

$$[\hat{\ell}_\alpha, H] = 0, \quad [\hat{\ell}^2, H] = 0 \quad (\alpha = x, y, z) \tag{14}$$

が成立することが分かる。(11a∼b) から $\hat{\ell}_\alpha$ は運動エネルギーの項 $-(\hbar^2/2m)\Delta$ と交換するし、(6a∼b) より $\hat{\ell}_\alpha$ は球対称ポテンシャル項 $V(r)$ と交換するからである。

(14) によって軌道角運動量演算子の各成分 $\hat{\ell}_x, \hat{\ell}_y, \hat{\ell}_z$ がそれぞれハミルトニアン演算子と交換するから、ポイント 4 の (4.9) によれば、ハミルトニアン（エネルギー）の固有関数を、軌道角運動量演算子 $\hat{\ell}^2$ および $\hat{\ell}_x$ または $\hat{\ell}_y$ または $\hat{\ell}_z$ の固有関数となるように定めることができる。これが、量子力学的な観点からの「軌道角運動量保存の法則」である。(10) で見たように、軌道角運動量の各成分 $\hat{\ell}_x$、$\hat{\ell}_y$、$\hat{\ell}_z$ 同士は交換しないから、エネルギー

固有関数を同時に$\hat{\ell}^2$と$\hat{\ell}_z$の固有関数となるように選んだならば、さらに$\hat{\ell}_x$や$\hat{\ell}_y$の固有関数となるようにすることはできない。普通はエネルギー固有関数を同時に$\hat{\ell}^2$と$\hat{\ell}_z$の固有関数となるように選ぶ。

//

//

/////////図 6-1(極座標：省略)////////////////

//

//

//

極座標を用いた軌道角運動量演算子

軌道角運動量演算子を、θ, ϕであからさまに書いた形を全く用いないで、議論を進めることもできるが、ここではθ, ϕで書いた結果のみ書き下しておくことにしよう。極座標 r, θ, ϕは図 6.1 の様に定義される。式で書くと

$$\begin{aligned} x &= r\sin\theta\cos\phi \\ y &= r\sin\theta\sin\phi \\ z &= r\cos\theta \end{aligned} \tag{15}$$

である。あるいは逆に

$$\begin{aligned} r &= \sqrt{x^2+y^2+z^2}, \\ \cos\theta &= z/\sqrt{x^2+y^2+z^2}, \\ \tan\phi &= y/x, \\ 0 \le \theta &\le \pi, \quad 0 \le \phi < 2\pi \end{aligned} \tag{15$'$}$$

と書いてもよい。これらを用いて (5) に対して座標変換を行えば

$$\begin{aligned}\hat{\ell}_x &= i\hbar(\sin\phi\frac{\partial}{\partial\theta} + \cot\theta\cos\phi\frac{\partial}{\partial\phi}),\\ \hat{\ell}_y &= i\hbar(-\cos\phi\frac{\partial}{\partial\theta} + \cot\theta\sin\phi\frac{\partial}{\partial\phi}),\\ \hat{\ell}_z &= -i\hbar\frac{\partial}{\partial\phi},\\ \hat{\ell}^2 &= -\hbar^2[\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}) + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}]\end{aligned} \tag{16}$$

であることを示すことができる。この変数変換の計算は読者にゆだねることにしよう。量子力学的軌道角運動量は波動関数の対称性を特徴づけるのであるがそれについては後で学ぶことにしよう。

軌道角運動量演算子$\hat{\ell}^2$および$\hat{\ell}_z$の固有関数

まず$\hat{\ell}^2$の固有関数を求めることにしよう。$\varphi_\ell(x,y,z)$ を、x, y, zの ℓ 次同次多項式である調和関数（これを調和多項式という。）とする。調和関数とは

$$\Delta\varphi = 0 \tag{17}$$

を満たす関数のことである。この時 φ_ℓは次の様に書くことができる。

$$\varphi_\ell(x,y,z) = \sum_{n_x,n_y,n_z\geq 0 \quad (n_x+n_y+n_z=\ell)}^{\ell} a_{n_x n_y n_z} x^{n_x} y^{n_y} z^{n_z}. \tag{18}$$

極座標を用て書きなおせば

$$\varphi_\ell(x,y,z) = r^\ell \psi_\ell(\theta,\phi) \tag{19}$$

である。さて (19) にラプラシアンΔを作用させると、$(9')$ の表式とφ_ℓが調和関数であることを使って

$$\Delta\varphi_\ell(x,y,z) = \frac{\ell(\ell+1)}{r^2}\varphi_\ell - \frac{1}{r^2\hbar^2}\hat{\ell}^2\varphi_\ell = 0 \tag{20}$$

となる。したがって調和多項式が$\hat{\ell}^2$の固有値$\hbar^2\ell(\ell+1)$をもった固有関数になっていることが分かる。

$$\hat{\ell}^2\varphi_\ell(x,y,z) = \hbar^2\ell(\ell+1)\varphi_\ell(x,y,z). \tag{21}$$

$\hat{\ell}^2$は$(\partial/\partial r)$を含まないことをもう一度強調しておこう。

一方、(16) のように$\hat{\ell}_z = -i\hbar(\partial/\partial\phi)$であるから、$\hat{\ell}_z$の固有値$\hbar m$を持つ固有関数を$\varphi_{\ell m}$とすると

$$\hat{\ell}_z\varphi_{\ell m}(x,y,z) = -i\hbar\frac{\partial}{\partial\phi}\varphi_{\ell m}(x,y,z) = \hbar m\varphi_{\ell m}(x,y,z) \tag{22}$$

である。微分方程式 (22) はϕの関数としては簡単に解けて$\varphi_{\ell m}\sim e^{im\phi}$であるから、(19) を参考にすれば

$$\varphi_{\ell m}(x,y,z) = r^\ell N_{\ell m}\frac{e^{im\phi}}{\sqrt{2\pi}}P_{\ell m}(\cos\theta) \tag{23}$$

と書くことができる。ただし$N_{\ell m}$は適当な定数で、$P_{\ell m}(\cos\theta)$はℓとmに依存して定まる角度θのみの関数である。θは$\pi\geq\theta\geq 0$の範囲に限られているから、θと書いても或いは$\cos\theta$と書いても１体１対応していて混乱は生じない。

それでは、同次多項式$\varphi_{\ell m}(x,y,z)$とは具体的にどのような関数なのであろうか、少し考えてみよう。定数倍は別にして、0 次多項式は明らかに

$$\varphi_{00}(x,y,z) = \frac{1}{\sqrt{4\pi}} \tag{24}$$

のみである。1 次同次式は

$$\begin{aligned} \varphi_{1x} &= \frac{\sqrt{3}}{2\sqrt{\pi}}x, \\ \varphi_{1y} &= \frac{\sqrt{3}}{2\sqrt{\pi}}y, \\ \varphi_{1z} &= \frac{\sqrt{3}}{2\sqrt{\pi}}z \end{aligned} \tag{25}$$

の 3 つである。このそれぞれはラプラス方程式$\Delta\varphi = 0$ の解であることはすぐに分かるから、これが $\ell = 1$ に対して求めるものになっている。これらのうちφ_{1z} だけは

$$\hat{\ell}_z \varphi_{1z} = 0$$

と$\hat{\ell}_z$の$\hbar m = 0$ を満たす固有関数になっている。一方、φ_{1x}とφ_{1y}は

$$\hat{\ell}_z \varphi_{1x} = -\frac{\hbar}{i}\varphi_{1y}, \quad \hat{\ell}_z \varphi_{1y} = \frac{\hbar}{i}\varphi_{1x}$$

となって、$\hat{\ell}_z$の固有関数にはなっていない。しかし上の 2 つを組み合わせてみると

$$\hat{\ell}_z(\varphi_{1x} \pm i\varphi_{1y}) = (\pm\hbar)(\varphi_{1x} \pm i\varphi_{1y})$$

であり、それぞれが$\hat{\ell}_z$の固有値$\pm\hbar$ を持った固有関数になっていることを示している。このようにして

$$\begin{aligned}
\varphi_{11} &= -\frac{1}{\sqrt{2}}(\varphi_{1x} + i\varphi_y) = -\sqrt{\frac{3}{8\pi}}(x + iy) = -\sqrt{\frac{3}{8\pi}}r\sin\theta e^{i\phi}, \\
\varphi_{10} &= \varphi_{1z} = \sqrt{\frac{3}{4\pi}}z = \sqrt{\frac{3}{4\pi}}r\cos\theta, \qquad (25') \\
\varphi_{1-1} &= \frac{1}{\sqrt{2}}(\varphi_{1x} - i\varphi_{1y}) = \sqrt{\frac{3}{8\pi}}(x - iy) = \sqrt{\frac{3}{8\pi}}r\sin\theta e^{-i\phi}
\end{aligned}$$

がそれぞれ、固有値 $\ell = 1$、$m = +1, 0, -1,$ の固有関数となる。ただし、φ_{11}を定義する時、全体に-1 をかけているのは今のところ意味はない。

さらに $\ell = 2$ の場合を考えてみよう。2 次の同次多項式は x^2, y^2, z^2, yz, zx, xyの 6 つであるが、そのすべてがラプラス方程式の解ではない。$x^2 + y^2 + z^2 = r^2$であるから、この 6 つの 2 次多項式の内で 5 つの線型結合が $\ell = 2$ の独立な固有関数になる。普通は次の 5 つの線型結合を採用し

ている。

$$\begin{aligned}
\varphi_{2,3z^2-r^2} &= \sqrt{\frac{5}{16\pi}}(3z^2-r^2) = \sqrt{\frac{5}{16\pi}}r^2(3\cos^2\theta-1),\\
\varphi_{2,x^2-y^2} &= \sqrt{\frac{15}{16\pi}}(x^2-y^2) = \sqrt{\frac{15}{16\pi}}r^2\sin^2\theta\cos 2\phi,\\
\varphi_{2,yz} &= \sqrt{\frac{15}{4\pi}}yz = \sqrt{\frac{15}{4\pi}}r^2\sin\theta\cos\theta\sin\phi, \qquad (26)\\
\varphi_{2,zx} &= \sqrt{\frac{15}{4\pi}}zx = \sqrt{\frac{15}{4\pi}}r^2\sin\theta\cos\theta\cos\phi,\\
\varphi_{2,xy} &= \sqrt{\frac{15}{4\pi}}xy = \sqrt{\frac{15}{4\pi}}r^2\sin^2\theta\sin 2\phi.
\end{aligned}$$

これらがラプラス方程式の解で $\ell=2$ に対応する$\hat{\ell}^2$の固有関数になっていることを確かめることは容易であろう。一方 $\ell=1$ の場合と同様に、これらは$\hat{\ell}_z$の固有関数になっていない。しかしφ_{2,x^2-y^2}と$\varphi_{2,xy}$, $\varphi_{2,yz}$と$\varphi_{2,zx}$の線型結合を作ることにより、それぞれ $m=\pm 2$ および $m=\pm 1$ の固有関数を作ることができる。実際$\hat{\ell}_z$の固有関数の形に書きなおすと

$$\begin{aligned}
\varphi_{22} &= \frac{1}{\sqrt{2}}(\varphi_{2,x^2-y^2}+i\varphi_{2,xy}) = \frac{\sqrt{15}}{4\sqrt{2\pi}}r^2\sin^2\theta e^{2i\phi},\\
\varphi_{21} &= -\frac{1}{\sqrt{2}}(\varphi_{2,zx}+i\varphi_{2,yz}) = -\frac{\sqrt{15}}{2\sqrt{2\pi}}r^2\sin\theta\cos\theta e^{i\phi},\\
\varphi_{20} &= \varphi_{2,3z^2-r^2} = \frac{\sqrt{5}}{2\sqrt{4\pi}}r^2(3\cos^2\theta-1), \qquad (26')\\
\varphi_{2-1} &= \frac{1}{\sqrt{2}}(\varphi_{2,zx}-i\varphi_{2,yz}) = \frac{\sqrt{15}}{2\sqrt{2\pi}}r^2\sin\theta\cos\theta e^{-i\phi},\\
\varphi_{2-2} &= \frac{1}{\sqrt{2}}(\varphi_{2,x^2-y^2}-i\varphi_{2,xy}) = \frac{\sqrt{15}}{4\sqrt{2\pi}}r^2\sin^2\theta e^{-2i\phi}
\end{aligned}$$

となる。以上の結果、$\ell=0,1,2$ の場合には角運動量$\hbar\ell$の固有関数は $2\ell+1$ 個あることおよびそれらはそれぞれ $m=\ell,\ell-1,\cdots,-\ell+1,-\ell$に対応していることが分かる。実はこれは一般の ℓについて成り立っている事であり、$\ell\geq|m|$ という事は次のようにして示すことができる。

恒等的に成立している$\hat{\ell}^2-\hat{\ell}_z^2=\hat{\ell}_x^2+\hat{\ell}_y^2$ と$\hat{\ell}_x$, $\hat{\ell}_y$のエルミート性

$$\int\{\varphi_{\ell m}^*\hat{\ell}_\alpha^2\varphi_{\ell m}\}\sin\theta d\theta d\phi = \int\{|\hat{\ell}_\alpha\varphi_{\ell m}|^2\}\sin\theta d\theta d\phi \geq 0$$

を用いると

$$\int \{\varphi_{\ell m}^*(\hat{\ell}^2 - \hat{\ell}_z^2)\varphi_{\ell m}\} \sin\theta d\theta d\phi$$
$$= (\ell(\ell+1) - m^2)\hbar^2 \int |\varphi_{\ell m}|^2 \sin\theta d\theta d\phi \geq 0$$

が導かれる。したがって、$\ell(\ell+1) \geq m^2$でなくてはならない。m が整数ならばその値は

$$\ell \geq m \geq -\ell \tag{27}$$

の範囲に限られる事が分かる。

(25) ~ (26′) の先頭に出ている定数、あるいは (24) の定数 $N_{\ell m}$ はどのように決めるのが適当であろうか。一般に 2 乗可積分の波動関数は 1 に規格化しておくのが便利だった。ここでも同様にしておくべきだろう。つまり

$$\int |\varphi_{\ell m}(x,y,z)|^2 \sin\theta d\theta d\phi = N_{\ell m}^2 r^{2\ell} \int_0^\pi \sin\theta d\theta |P_{\ell m}(\cos\theta)|^2 = r^{2\ell} \tag{28}$$

とする。(25) ~ (26′) の定数はこうして定められている。

球関数（講義ではほぼ省略）

角運動量演算子$\hat{\ell}^2$および$\hat{\ell}_z$の固有関数$\varphi_{\ell m}$がおおよそどんなものであるかということは、(25) ~ (26′) から知ることができた。もう少し一般的に考えるならば (21) をθに関する微分方程式だと思って解けばよい。(16) に与えられた$\hat{\ell}^2$の表示と (23) を用いれば、$P_{\ell m}(\cos\theta)$ は次の様な微分方程式を満たさねばならないことがわかる。

$$\frac{1}{\sin\theta}\frac{d}{d\theta}(\sin\theta\frac{dP_{\ell m}(\cos\theta)}{d\theta}) + (\ell(\ell+1) - \frac{m^2}{\sin^2\theta})P_{\ell m}(\cos\theta) = 0. \tag{29}$$

あるいは$\omega = \cos\theta$と変数変換すると

$$\frac{d}{d\omega} = -\frac{1}{\sin\theta}\frac{d}{d\theta}$$

であるから

$$\frac{d}{d\omega}[(1-\omega^2)\frac{dP_{\ell m}(\omega)}{d\omega}] + (\ell(\ell+1) - \frac{m^2}{1-\omega^2})P_{\ell m}(\omega) = 0 \qquad (29')$$

と書いてもよい。この微分方程式はよく調べられていて、ルジャンドル(Legendre) の陪微分方程式という名前まで付いている。その解 $P_{\ell m}(\omega)$ はルジャンドルの陪関数という。すでに、(27) で調べたように、ℓは 0 又は正整数であり、また m は $\ell \geq m \geq -\ell$である 0 又は正又は負の整数でなくてはならない。

(29′) で $m=0$ とするとこの微分方程式は

$$\frac{d}{d\omega}[(1-\omega^2)\frac{dP_{\ell}(\omega)}{d\omega}] + \ell(\ell+1)P_{\ell}(\omega) = 0 \qquad (30)$$

となる。この微分方程式にも名前が付いていてルジャンドルの微分方程式といい、その解をルジャンドル関数という。$P_\ell(\omega)$ は (ℓが整数又は 0 なら)ω について ℓ次の多項式であり、

$$P_\ell(\omega) = \frac{1}{2^\ell \ell!}\frac{d^\ell}{d\omega^\ell}(\omega^2-1)^\ell = \frac{(-1)^\ell}{2^\ell \ell!}\frac{d^\ell}{d\omega^\ell}(1-\omega^2)^\ell \qquad (31)$$

と書くことができる。$\ell = 0, 1, 2, 3$ の場合の形を具体的に示しておこう。

$$P_0(\omega) = 1$$

$$P_1(\omega) = \omega$$

$$P_2(\omega) = (1/2)(3\omega^2 - 1)$$

$$P_3(\omega) = (1/2)(5\omega^3 - 2\omega)$$

係数 $(-1)^\ell/(2^\ell \ell!)$ は適当に決められたものである。

一般に $m \neq 0$ の場合のルジャンドル陪関数 $P_{\ell m}(\omega)$ はルジャンドル関数 $P_\ell(\omega)$ を用いて

$$P_{\ell m}(\omega) = (1-\omega^2)^{|m|/2}\frac{d^{|m|}}{d\omega^{|m|}}P_\ell(\omega) \qquad (32)$$

と表される。定数 $N_{\ell m}$ についても、$P_{\ell m}$ の一般的表式から次のように定められる。

$$N_{\ell m}=\sqrt{\frac{2\ell+1}{2}\frac{(\ell-|m|)!}{(\ell+|m|)!}} \tag{33}$$

$\ell=0,1,2$ については、すでに求められた式 (25) ～ (26′) が (31) ～ (33) を満たしていることを確かめることはそれほど難しいことではないだろう。これらのことを一般的に示すにはライプニッツの公式を何度も使えばよい。（犬井鉄郎著「特殊関数」（岩波全書）参照）

以上をまとめると次の様になる。軌道角運動量 $\hat{\ell}^2$ および $\hat{\ell}_z$ の固有関数は

$$Y_{\ell m}(\theta,\phi)=\Theta_{\ell m}(\theta)\Phi_m(\phi), \tag{34a}$$

$$\Theta_{\ell m}(\theta)=(-1)^{\frac{m+|m|}{2}}[\frac{2\ell+1}{2}\frac{(\ell-|m|)!}{(\ell+|m|)!}]^{1/2}P_{\ell m}(\cos\theta) \tag{34b}$$

$$\Phi_m(\phi)=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{im\phi} \tag{34c}$$

である。$Y_{\ell m}(\theta,\phi)$ は球関数あるいは球面調和関数と呼ばれ、$\hat{\ell}^2,\hat{\ell}_z$ を演算した結果は

$$\hat{\ell}^2Y_{\ell m}=\hbar^2\ell(\ell+1)Y_{\ell m} \tag{35a}$$

$$\hat{\ell}_zY_{\ell m}=\hbar mY_{\ell m} \tag{35b}$$

となる。(34b) の因子 $(-1)^{\frac{m+|m|}{2}}$ は通常採用されているもので、何故それが必要なのかは後で分かるが、今のところは慣用的なものであると考えておこう。(24) ～ (25′) で $\varphi_{\ell m}$ と書いたものは球関数で書くと

$$\varphi_{\ell m}(r,\theta,\phi)=r^\ell Y_{\ell m}(\theta,\phi)$$

である。

球関数 $Y_{\ell m}(\theta,\phi)$ はエルミート演算子 $\hat{\ell}^2$ および $\hat{\ell}_z$ の固有値 $\hbar^2\ell(\ell+1)$、$\hbar m$ を持つ固有関数である。一般にエルミート演算子の異なる固有値を持

つ固有関数は互いに直交する。したがって

$$\int_0^{2\pi} d\phi \int_0^{\pi} \sin\theta d\theta Y_{\ell' m'}(\theta,\phi)^* Y_{\ell m}(\theta,\phi) = \delta_{\ell'\ell}\delta_{m'm} \tag{36}$$

という規格直交関係が成立している。もちろん球関数の具体的な形を用いて (36) を示すこともできるが、むしろ大変な手間がいる。

球関数の空間的イメージ

波動関数の形を頭に思い描くことができるかどうかということは、今後たいへん重要な事である。その助けとするため、図 6.2 に球関数の空間的な振る舞いを示しておこう。図から或いは (24),(25),(26) から分かるように、ℓの値は球面上での波動関数の節面の数を表している。(運動量/$\hbar$) が単位長さ当たりの平面波の節の数（波数）に対応するように、(角運動量/$\hbar$) が球面状の振動体の節面の数に対応する。また $|m|$ の値は、z軸を固定してその周りに回転したときの波動関数の形を特徴づける。したがって ℓの偶奇性 $(-1)^\ell$は空間反転 $\boldsymbol{r} \to -\boldsymbol{r}$ に対する波動関数の符号の変化を与える。ハミルトニアンや空間には z軸を特別視する理由もないのに、波動関数や$\hat{\ell}_z$の固有値にして特別の意味が出てくるのは不思議に思えるかも知れない。しかしそれは単なる基底の選び方の問題であってそれ以外の問題ではない。

//
////図 6-2 (WEB 上別の pdf ファイル参照）////
//

上昇演算子および下降演算子（講義では省略）

ルジャンドルの陪関数 $P_{\ell m}(\omega)$ をもう少しながめてみよう。$m \geq 0$ として (32) をωで微分して$\sqrt{1-\omega^2}$をかけると

$$\sqrt{1-\omega^2}\frac{d}{d\omega}P_{\ell m} = -\frac{m\omega}{\sqrt{1-\omega^2}}P_{\ell m} + P_{\ell m+1} \tag{37a}$$

となる。一方、ルジャンドルの陪微分方程式 $(29')$ は

$$\{\sqrt{1-\omega^2}\frac{d}{d\omega}-\frac{(m+1)\omega}{\sqrt{1-\omega^2}}\}\{\sqrt{1-\omega^2}\frac{d}{d\omega}+\frac{m\omega}{\sqrt{1-\omega^2}}\}P_{\ell m} + (\ell(\ell+1)-m(m+1))P_{\ell m}=0$$

と変形できる。第１項に (37a) を用いさらに $m+1\to m$ とすると

$$\sqrt{1-\omega^2}\frac{d}{d\omega}P_{\ell m}=\frac{m\omega}{\sqrt{1-\omega^2}}P_{\ell m}-(\ell+m)(\ell-m+1)P_{\ell m-1} \quad (37b)$$

となる。(37b) では $m\geq 1$ であること注意しておこう。$\omega=\cos\theta$によって変数をωからθに戻すと

$$\frac{d}{d\theta}=-\sin\theta\frac{d}{d(\cos\theta)}=-\sqrt{1-\omega^2}\frac{d}{d\omega}$$

であるから、$(37a\sim b)$ は各々

$$m\geq 0: \quad \frac{dP_{\ell m}}{d\theta}=m\cot\theta P_{\ell m}-P_{\ell m+1}, \quad (37a')$$

$$m\geq 1: \quad \frac{dP_{\ell m}}{d\theta}=-m\cot\theta P_{\ell m}+(\ell+m)(\ell-m+1)P_{\ell m-1} \quad (37b')$$

と変形される。次に (34b) を用いて $P_{\ell m}$から$\Theta_{\ell m}$に書き換えると

$$m\geq 0: \quad \frac{d\Theta_{\ell m}}{d\theta}=m\cot\theta\Theta_{\ell m}+\sqrt{(\ell-m)(\ell+m+1)}\Theta_{\ell m+1},$$
$$m\geq 1: \quad \frac{d\Theta_{\ell m}}{d\theta}=-m\cot\theta\Theta_{\ell m}-\sqrt{(\ell+m)(\ell-m+1)}\Theta_{\ell m-1}$$

となる。ところで$\Theta_{\ell 1}=-\Theta_{\ell -1}$であるから、第１式で $m=0$ とすれば第２式の形に変形できる。したがって第２式の制限 $m\geq 1$ は $m\geq 0$ としてしまってよい。さらに$\Theta_{\ell|m|}=(-1)^m\Theta_{\ell-|m|}$を第１式に代入すると

$$\frac{d\Theta_{\ell-|m|}}{d\theta}=|m|\cot\theta\Theta_{\ell-|m|}+(-1)^m\sqrt{(\ell-|m|)(\ell+|m|+1)}\Theta_{\ell|m|+1}$$

となる。$m<0$ とすると $|m|=-m$, $|m|+1=-m+1=-(m-1)$,

$$\Theta_{\ell|m|+1}=\Theta_{\ell-(m-1)}=(-1)^{m-1}\Theta_{\ell m-1}$$

であるから、結局第１式は

$$\frac{d\Theta_{\ell m}}{d\theta} = -m\cot\theta\Theta_{\ell m} - \sqrt{(\ell+m)(\ell-m+1)}\Theta_{\ell m-1}, \quad (m<0)$$

と書き直す事ができる。これは第２式が $m<0$ でも成立していることを示している。第２式からも同様にして第１式が $m<0$ で成立していることを示すことができる。こうして一般的に m の正負にかかわらずに

$$\begin{aligned}\frac{d\Theta_{\ell m}(\theta)}{d\theta} &= +m\cot\theta\Theta_{\ell m}(\theta) + \sqrt{(\ell-m)(\ell+m+1)}\Theta_{\ell m+1}(\theta) \\ &= -m\cot\theta\Theta_{\ell m}(\theta) - \sqrt{(\ell+m)(\ell-m+1)}\Theta_{\ell m-1}(\theta)\end{aligned} \tag{38}$$

という漸化式が得られる。

新しい角運動量演算子$\hat{\ell}_+$, $\hat{\ell}_-$を次のように定義しよう。

$$\begin{aligned}\hat{\ell}_+ &= \hat{\ell}_x + i\hat{\ell}_y = \hbar e^{i\phi}(\frac{\partial}{\partial\theta} + i\cot\theta\frac{\partial}{\partial\phi}), \\ \hat{\ell}_- &= \hat{\ell}_x - i\hat{\ell}_y = \hbar e^{-i\phi}(-\frac{\partial}{\partial\theta} + i\cot\theta\frac{\partial}{\partial\phi}).\end{aligned} \tag{39}$$

$\frac{\partial}{\partial\phi}Y_{\ell m} = i\hbar m Y_{\ell m}$ を考慮すると (38) の２つの式は球関数に対する$\hat{\ell}_\pm$の作用

$$\hat{\ell}_\pm Y_{\ell m}(\theta,\phi) = \hbar\sqrt{(\ell\mp m)(\ell\pm m+1)}Y_{\ell m\pm1}(\theta,\phi) \tag{40}$$

を示している。つまり、新しい演算子$\hat{\ell}_\pm$は角運動量の固有状態 (ℓ, m) を $(\ell, m\pm1)$ に換える働きをしている。(25) $\sim$ (26$'$) において適当に選んだ符号は実は、(40) で符号の変化があらわれないように選んだのである。この$\hat{\ell}_+$, $\hat{\ell}_-$をそれぞれ上昇演算子, 下降演算子と呼ぶ事もある。$\hat{\ell}_\pm$の交換関係は定義式 (39) と (10) を用いて次のように求められる：

$$[\hat{\ell}_+, \hat{\ell}_-] = 2\hbar\hat{\ell}_z, \tag{41a}$$

$$[\hat{\ell}_\pm, \hat{\ell}_z] = \mp\hbar\hat{\ell}_\pm. \tag{41b}$$

ついでに$\hat{\ell}^2$を$\hat{\ell}_\pm$および$\hat{\ell}_z$で書き換えた式を書き下しておこう。

$$\hat{\ell}^2 = \frac{1}{2}(\hat{\ell}_+\hat{\ell}_- + \hat{\ell}_-\hat{\ell}_+) + \hat{\ell}_z^2 = \hat{\ell}_+\hat{\ell}_- + \hat{\ell}_z^2 - \hbar\hat{\ell}_z = \hat{\ell}_-\hat{\ell}_+ + \hat{\ell}_z^2 + \hbar\hat{\ell}_z. \tag{41c}$$

（続く）