§3　Legendre（ルジャンドル）の微分方程式と $Y_{l,0}$

(2-7)で見たように，$Y_{l,m}$ で m＝０とした場合の $Y_{l,0}=f_{l,0}(\cos\theta)$　が $\hat{l}^2$ の固有関数であることから，$z\equiv\cos\theta$　とすると，Legendre（ルジャンドル）の微分方程式が得られる．　$Y_{l,0}=f_{l,0}(\cos\theta)$ はその解である．ここでは，まず，２電子の静電反発相互作用のポテンシャルエネルギーが Legendre の多項式で表現されることを確認し，Legendre の多項式が Legendre（ルジャンドル）の微分方程式の解であること，従って，　$Y_{l,0}=f_{l,0}(\cos\theta)$ は Legendre の多項式を用いて表現されることを述べる．

（3-1）Legendre の多項式と電子間の静電反発エネルギー

２電子の静電相互作用のポテンシャルエネルギーは，(1-1-5)，(1-1-8)から，電子の電荷の絶対値をｅ，二つの電子の距離を r_{12} とすると，

$$E_{rep}=\frac{e^2}{r_{12}}\geq 0 \tag{3-1-1}$$

である．電子の距離 r_{12} が小さくなると２電子の静電相互作用のポテンシャルエネルギーは大きくなり，r_{12} が無限大でゼロとなる．このポテンシャルエネルギーを，以後は単に，２電子間の静電反発エネルギーと呼ぶことにする．

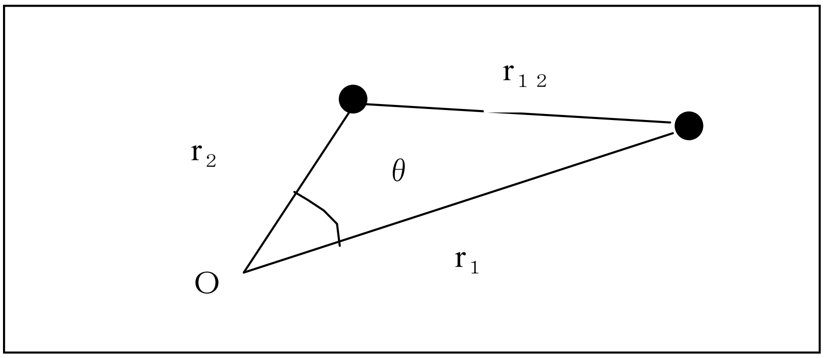

図 3-1.　２電子の静電相互作用

図 3-1 での余弦定理から，$(r_{12})^2=(r_1)^2+(r_2)^2-2r_1r_2\cos\theta$　であるので，

$$E_{rep}=\frac{e^2}{r_{12}}=\frac{e^2}{\sqrt{(r_1)^2+(r_2)^2-2r_1r_2\cos\theta}}=\frac{(e^2/r_1)}{\sqrt{1-2(r_2/r_1)\cos\theta^2+(r_2/r_1)^2}} \tag{3-1-2}$$

である．(r_2/r_1) で右辺をテーラー展開するが，その為には $(r_2/r_1)<1$ でなければな

らない．r_{12} は r_1, r_2 に関して対称であるので，大きい方を r_+，小さい方を r_- として，

$$E_{rep} = \frac{(e^2/r_+)}{\sqrt{1-2(r_-/r_+)\cos\theta^2 + (r_-/r_+)^2}} \tag{3-1-3}$$

と書ける．さらに，$(r_-/r_+) = r$，$\cos\theta = z$ とすると，

$$E_{rep} = \frac{(e^2/r_+)}{\sqrt{1-2rz^2+r^2}}$$

となる．$(1-2rz^2+r^2)^{-1/2}$ を r の関数を考え，$r=0$ でこれをテーラー展開する，

$$\begin{aligned}(1-2rz+r^2)^{-\frac{1}{2}} &= 1 + zr + \frac{1}{2}\cdot(3z^2-1)r^2 + \cdots \\ &= \sum_{l=0}^{\infty}\{\frac{1}{l!}\cdot\frac{\partial^l}{\partial r^l}(1-2rz+r^2)^{-\frac{1}{2}}\}_{r=0}\cdot r^l \\ &= \sum_{l=0}^{\infty} P_l(z)\cdot r^l\end{aligned} \tag{3-1-4}$$

r^l の係数である $P_l(z)$ は，ルジャンドルの多項式と呼ばれ，$(1-2rz^2+r^2)^{-1/2}$ はルジャンドルの多項式の母関数（generating function）と呼ばれる．

(3-1-4)から，

$$(1-2rz+r^2)^{-\frac{1}{2}} = \sum_{l=0}^{\infty} P_l(z)\cdot r^l$$

であるので，この両辺を，r で微分して，$(1-2rz^2+r^2)$を掛けると．

$$\frac{(z-r)}{\sqrt{1-2rz+r^2}} = (1-2rz+r^2)\cdot\sum_{l=0}^{\infty} l\cdot P_l(z)\cdot r^{l-1}$$

である．この左辺もルジャンドルの多項式で書けるから，

$$(z-r)\sum_{l=0}^{\infty} P_l(z)\cdot r^l = (1-2rz+r^2)\cdot\sum_{l=0}^{\infty} l\cdot P_l(z)\cdot r^{l-1} \tag{3-1-5}$$

となる．さらに，右辺を移項して一つの Σ にまとめると，

$$\sum_{l=0}^{\infty}\{(l+1)P_l(z)\cdot r^{l+1} - (2l+1)z\cdot P_l(z)\cdot r^l + l\cdot P_l(z)\cdot r^{l-1}\} = 0 \tag{3-1-6}$$

ここで，（r^l の係数）＝０を考えてみると，第１項では $l \to l-1$，第２項では $l \to l$，第３項では $l \to l+1$，に関する係数の和がゼロでなければならない．即ち，

$$l\cdot P_{l-1}(z) - (2l+1)z\cdot P_l(z) + (l+1)\cdot P_{l+1}(z) = 0 \tag{3-1-7}$$

との漸化式が得られる．(A3-1-4)より，$P_0(z)=1, P_1(z)=z$　は明らかであるから，(A2-9-7)で $l = 1,2,3,\cdots$ とすれば，この漸化式から $P_l(z)$ は以下の様に求められる，

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

また，

$$P_l(1) = 1 \qquad\qquad (3\text{-}1\text{-}9)$$

であることに注意しよう．(3-1-7)の漸化式で z＝１とすると，

$$l \cdot P_{l-1}(1) - (2l+1)\cdot P_l(1) + (l+1)\cdot P_{l+1}(1) = 0$$

であるから，これを書き直せば，

$$(l+1)\cdot P_{l+1}(1) = (2l+1)\cdot P_l(1) - l \cdot P_{l-1}(1)$$

である．これは，$P_l(1) = 1, P_{l-1}(1) = 1 \rightarrow P_{l+1}(1) = 1$であること意味している．$z = 1$の時，確かに$P_0(1) = 1,\ P_1(1) = 1$であるから，$P_2(1) = 1$であり，$P_l(1) = 1$となる．

$P_l(z)$はｚのl次の多項式であり，lの奇・偶に対応して$P_l(z)$も奇関数，偶関数となる．母関数による定義式(3-1-4),

$$(1 - 2rz + r^2)^{-\frac{1}{2}} = \sum_{l=0}^{\infty} P_l(z)\cdot r^l \qquad\qquad (3\text{-}1\text{-}4)$$

で，$r \rightarrow -r,\ z \rightarrow -z$　の置き換えを行っても，明らかに左辺は変化しないので，

$$(1 - 2rz + r^2)^{-\frac{1}{2}} = \sum_{l=0}^{\infty} P_l(z)\cdot r^l = \sum_{l=0}^{\infty} P_l(-z)\cdot(-r)^l = \sum_{l=0}^{\infty} (-)^l P_l(-z)\cdot r^l$$

が成り立つ，r^lの係数を比べれば，

$$P_l(z) = (-1)^l \cdot P_l(-z) \qquad\qquad (3\text{-}1\text{-}10)$$

叉は，逆に書いて

$$P_l(-z) = (-1)^l \cdot P_l(z) \qquad\qquad (3\text{-}1\text{-}10')$$

となる．従って，　$P_l(1) = 1$であるので，$P_l(-1) = (-1)^l \cdot P_l(1) = (-1)^l$　である．

以上のように，ルジャンドルの多項式とその母関数が判った．そして，２電子間の静電反発エネルギーは，ルジャンドルの多項式を用いて，

$$E_{rep} = (e^2 / r_+) \sum_{l=0}^{\infty} P_l(\cos\theta) \cdot (r_- / r_+)^l \qquad (3\text{-}1\text{-}10)$$

と表現できる．この結果は，多電子系の電子反発エネルギーを考える際に重要となる．次に，ルジャンドルの多項式がルジャンドルの微分方程式の解であることを確認する．

（3-2）Legendre の微分方程式と Legendre の多項式

前節では，母関数を級数展開した両辺

$$(1-2rz+r^2)^{-\frac{1}{2}} = \sum_{l=0}^{\infty} P_l(z)\cdot r^l \tag{3-2-1}$$

を r で微分して，（r^l の係数）を比べ， Legendre の多項式に関する漸化式(3-1-7)を得た．

$$l\cdot P_{l-1}(z)-(2l+1)z\cdot P_l(z)+(l+1)\cdot P_{l+1}(z)=0 \tag{3-1-7}$$

ここでは，(3-2-1)の両辺を z で微分し，$(1-2rz+r^2)$を掛けてみる，

$$r\sum_{l=0}^{\infty} P_l(z)\cdot r^l = \sum_{l=0}^{\infty}\{\frac{d}{dz}P_l(z)\cdot r^l - 2z\frac{d}{dz}P_l(z)\cdot r^{l+1}+\frac{d}{dz}P_l(z)\cdot r^{l+2}\}$$

ここで， r^{l+1} の係数を比べてみると，

$$P_l(z)-\frac{d}{dz}P_{l+1}(z)+2z\frac{d}{dz}P_l(z)-\frac{d}{dz}P_{l-1}(z)=0 \tag{3-2-2}$$

が得られる．これに対応するように，(3-1-7)の漸化式も z で微分すると，

$$l\cdot\frac{d}{dz}P_{l-1}(z)-(2l+1)P_l(z)-(2l+1)z\frac{d}{dz}P_l(z)+(l+1)\frac{d}{dz}P_{l+1}(z)=0 \tag{3-2-3}$$

が得られる．この(3-2-2)と(3-2-3)の二つを基に関係式を得て，それをもう一回 z で微分した結果が，

$$\begin{aligned}&(1-z^2)\frac{d^2}{dz^2}P_l(z)-2z\frac{d}{dz}P_l(z)+l(l+1)P_l(z)\\&=\{\frac{d}{dz}(1-z^2)\frac{d}{dz}+l(l+1)\}P_l(z)=0\end{aligned} \tag{3-2-4}$$

となることを示せば，Legendre の多項式は Legendre の微分方程式の解であることことを示したことになる．以下の手順でこれをを確認する．

１）(3-2-2)と(3-2-3)から $z\frac{d}{dz}P_l(z)$ の項を消去すると，

$$\frac{d}{dz}P_{l+1}(z)-\frac{d}{dz}P_{l-1}(z)=(2l+1)P_l(z) \tag{3-2-5}$$

２）(3-2-3)と(3-2-5)から $\frac{d}{dz}P_{l-1}(z)$ の項を消去すると

$$\frac{d}{dz}P_{l+1}(z)=(l+1)P_l(z)+z\frac{d}{dz}P_l(z) \tag{3-2-6}$$

$\frac{d}{dz}P_{l+1}(z)$ が $z,\ P_l(z),\ \frac{d}{dz}P_l(z)$ で表現されている．

３） $\frac{d}{dz}P_{l-1}(z)$ も $z,\ P_l(z),\ \frac{d}{dz}P_l(z)$ で表現するために，(3-2-6)を(3-2-5)に代入すると，

$$\frac{d}{dz}P_{l-1}(z) = -l \cdot P_l(z) + z\frac{d}{dz}P_l(z) \qquad (3\text{-}2\text{-}7)$$

４）(3-2-6)で $l \to (l-1)$ とすると，

$$\frac{d}{dz}P_l(z) = l \cdot P_{l-1}(z) + z\frac{d}{dz}P_{l-1}(z) \qquad (3\text{-}2\text{-}8)$$

５） $\frac{d}{dz}P_{l-1}(z)$ を消去するために，(3-2-8) と(3-2-7)を用いて，

$$(1-z^2)\frac{d}{dz}P_l(z) = l\{P_{l-1}(z) - zP_l(z)\} \qquad (3\text{-}2\text{-}9)$$

６）(3-2-9)の両辺を z で微分する． $P_{l-1}(z)$ の微分が残るが，これは(3-2-7)により， $z,\ P_l(z),\ \frac{d}{dz}P_l(z)$ で表すことができるから，これらを整理して

$$(1-z^2)\frac{d^2}{dz^2}P_l(z) - 2z\frac{d}{dz}P_l(z) + l(l+1)P_l(z) = 0 \qquad (3\text{-}2\text{-}4)$$

が得られる．これらをまとめて書けば，Legendre の微分方程式

$$\{\frac{d}{dz}(1-z^2)\frac{d}{dz} + l(l+1)\}P_l(z) = 0$$

となる． 以上のように，(3-2-2)と(3-2-3)から (3-2-4)が得られる．Legendre の多項式は Legendre の微分方程式の解である．

Legendre の微分方程式は２階の微分方程式であるから，Legendre の多項式の解の他にもう一つの解が存在する．Legendre の微分方程式の一般解は，この二つの解の１次結合である．しかし，このもう一つの解は，角度方程式の解としては採用できないものであるので，ここでは議論しない．関心のある方は，物理数学のテキスト（例えば，寺沢寛一「自然科学者のための数学概論（増訂版)，１９５４，岩波」）の「Legendre の微分方程式の項」を参照されたい．

（3-3） Rodrigues の公式

Legendre の多項式$P_l(z)$は，(3-1-8)で見たように，z の l 次の多項式である．

$\dfrac{d^l}{dz^l}(z^2-1)^l$ も z の l 次の多項式であるが，これも Legendre の微分方程式の一つの解であり，係数定数を除き Legendre の多項式$P_l(z)$に一致する．係数まで考慮すると，

$$P_l(z) = \frac{1}{2^l \cdot l!} \cdot \frac{d^l}{dz^l}(z^2-1)^l \qquad (3\text{-}3\text{-}1)$$

となる．これは Rodrigues の公式と呼ばれる．これを導くのがこの節の目的.

まず,

$$\frac{d^n}{dz^n}(z^2-1)^l \equiv \mathrm{v}^{(n)} \qquad (3\text{-}3\text{-}2)$$

と定義すると,

$$(z^2-1)\mathrm{v}^{(n+2)} + 2(n-l+1)z\mathrm{v}^{(n+1)} + (n-2l)(n+1)\mathrm{v}^{(n)} = 0 \qquad (3\text{-}3\text{-}3)$$

が成立することを確認しよう.

(3-3-2)の定義より,

$$\mathrm{v}^{(n+1)} = \frac{d}{dz}\mathrm{v}^{(n)} = \frac{d^{n+1}}{dz^{n+1}}(z^2-1)^l = \frac{d^n}{dz^n}\{\frac{d}{dz}(z^2-1)^l\} = \frac{d^n}{dz^n}\{2lz(z^2-1)^{l-1}\} \qquad (3\text{-}3\text{-}4)$$

同様にして,

$$\begin{aligned} \mathrm{v}^{(n+2)} &= \frac{d}{dz}\mathrm{v}^{(n+1)} \\ &= \frac{d^n}{dz^n}[\frac{d}{dz}\{2lz(z^2-1)^{l-1}\}] = \frac{d^n}{dz^n}\{2l(z^2-1)^{l-1} + 4l(l-1)z(z^2-1)^{l-2}\} \end{aligned} \qquad (3\text{-}3\text{-}5)$$

(3-3-3)でｎ＝０の時,

$$(z^2-1)\mathrm{v}^{(2)} + 2(n-l+1)z\mathrm{v}^{(1)} - 2l\mathrm{v}^{(0)} = 0 \qquad (3\text{-}3\text{-}6)$$

である．これが成立することは，(3-3-2)，(3-3-3)，(3-3-5)で n=0 とすると,

$$\begin{aligned} \mathrm{v}^{(0)} &= (z^2-1)^l, \\ \mathrm{v}^{(1)} &= 2lz((z^2-1)^{l-1} \\ \mathrm{v}^{(2)} &= 2l(z^2-1)^{l-1} + 4l(l-1)z^2(z^2-1)^{l-2} \end{aligned} \qquad (3\text{-}3\text{-}7)$$

が得られるから，これらを(3-3-6)の左辺に代入して確認できる．

次に，n≧１の場合を考える．(3-3-3)の左辺を z で微分し，その結果を整理すると,

$$(z^2-1)\mathrm{v}^{(n+3)}+2(n-l+2)z\mathrm{v}^{(n+2)}+(n+2)(n+1-2l)\mathrm{v}^{(n+1)}=0 \qquad (3\text{-}3\text{-}8)$$

これは，(3-3-3)左辺で n→(n+1)とした形になっている．従って，n=0 の時(3-3-3)が成立するので，n≧１の場合も(3-3-3)が成立することが判る．

ところで，(3-3-3)で n=l　と置くと，

$$(z^2-1)\mathrm{v}^{(l+2)}+2z\mathrm{v}^{(l+1)}+l(l+1)v^{(l)}=0$$

両辺に(-1)を掛けてみると，

$$(1-z^2)\frac{d^2}{dz^2}\mathrm{v}^{(l+2)}-2z\frac{d}{d}\mathrm{v}^{(l+1)}+l(l+1)\mathrm{v}^{(l)}=0 \qquad (3\text{-}3\text{-}9)$$

これは Legendre の微分方程式であるから，

$$\mathrm{v}^{(l)}\equiv\frac{d^l}{dz^l}(z^2-1)^l \qquad (3\text{-}3\text{-}10)$$

も，その一つの解であることがわかる．Legendre の多項式 $P_l(z)$ は，(3-1-8)にあるように， z の l 次の多項式であり，$\dfrac{d^l}{dz^l}(z^2-1)^l$　も z の l 次の多項式であるから，両者は定数係数を除き一致していなければならない．即ち，

$$P_l(z)=C\cdot\frac{d^l}{dz^l}(z^2-1)^l \qquad (3\text{-}3\text{-}11)$$

$P_l(z)$ では，(3-1-9)のように $P_l(1)=1$ であった．これから係数 C の値を決める．

$$P_l(1)=C\cdot\left[\frac{d^l}{dz^l}(z^2-1)^l\right]_{z=1}=1 \qquad (3\text{-}3\text{-}12)$$

ここでは，$(z^2-1)^l=(z+1)^l(z-1)^l$ であること，積の微分に関するライプニッツの定理を用いる．ライプニッツの定理は，

$$\frac{d^n}{dx^n}\{a(x)b(x)\}=\sum_{\lambda=0}^{n}\frac{n!}{\lambda!(n-\lambda)!}\cdot\frac{d^\lambda}{dx^\lambda}a(x)\cdot\frac{d^{n-\lambda}}{dx^{n-\lambda}}b(x)$$

である．従って，

$$\begin{aligned}\frac{d^l}{dz^l}(z^2-1)^l&=\frac{d^l}{dz^l}\{(z+1)^l(z-1)^l\}\\&=\sum_{\lambda=0}^{l}\frac{l!}{\lambda!(l-\lambda)!}\cdot\frac{d^\lambda}{dx^\lambda}(z+1)^l\cdot\frac{d^{l-\lambda}}{dx^{l-\lambda}}(z-1)^l\end{aligned} \qquad (3\text{-}3\text{-}13)$$

(3-3-12)にあるように，問題になるのは，z＝１の場合であるから，考えねばならないのは，$\dfrac{d^{l-\lambda}}{dz^{l-\lambda}}(z-1)^l$ の項である．$l-(l-\lambda)=\lambda\geq1$ の場合は，

$(z-1)^{l-(l-\lambda)} = (z-1)^{\lambda}$ の項が残る．これらは z＝１で全て０となる．０とならないのは $l-(l-\lambda)=\lambda=0$ の項である．

$$[\frac{d^l}{dz^l}(z^2-1)^l]_{z=1} = [(z+1)^l \frac{d^l}{dx^l}(z-1)^l]_{z=1} = (2)^l \cdot l(l-1)\cdots 2\cdot 1 = (2)^l \cdot l! \qquad (3\text{-}3\text{-}14)$$

従って，Rodrigues の公式

$$P_l(z) = \frac{1}{2^l \cdot l!} \cdot \frac{d^l}{dz^l}(z^2-1)^l \qquad (3\text{-}3\text{-}1)$$

が得られる．

（3-4）Legendre 多項式の直交性と $Y_{l,0}$

ある l で指定される Legendre 多項式と l' で指定される Legendre 多項式の積を区間［－ １，１］で定積分したものを考える．

$$\int_{-1}^{1} P_l(z)P_{l'}(z)dz \qquad (3\text{-}4\text{-}1)$$

両者が同一（$l = l'$）の場合は，

$$\int_{-1}^{1} P_l(z)P_l(z)\,dz = \int_{-1}^{1}\{P_l(z)\}^2\,dz$$

である．$z = \cos\theta$ であるから，［－ １，１］は z の全変数域である．この全変域にわたる定積分が，$l \neq l'$ で 0，$l = l'$ で定数となる時，$P_l(z)$ は直交性があると言う．

「$P_l(z)$ の直交性」

$a(z), b(z)$ を任意の z の関数として，次の定積分を考える．

$$\int_{-1}^{1}\{(1-z^2)a'(z)\}'\,b(z)dz = [(1-z^2)a'(z)b(z)]_{-1}^{+1} - \int_{-1}^{1}(1-z^2)a'(z)b'(z)\,dz$$

これは部分積分に過ぎないが，右辺第一項は０であるので，

$$\int_{-1}^{1}\{(1-z^2)a'(z)\}'\,b(z)dz = -\int_{-1}^{1}(1-z^2)a'(z)b'(z)dz \qquad (3\text{-}4\text{-}2)$$

この結果は，(3-4-2)の左辺側で，$a(z)$ と $b(z)$ を入れ替えても，結果は同じであることを意味している．そこで，$a(z) = P_l(z)$，$b(z) = P_{l'}(z)$　として，(3-4-2)の左辺側をつくれば，これらを入れ替えたものは等しいから，

$$\int_{-1}^{1}\frac{d}{dz}\{(1-z^2)\frac{d}{dz}P_l(z)\}\cdot P_{l'}(z)dz = \int_{-1}^{1}\frac{d}{dz}\{(1-z^2)\frac{d}{dz}P_{l'}(z)\}\cdot P_l(z)dz \qquad (3\text{-}4\text{-}3)$$

である．$P_l(z)$, $P_{l'}(z)$ は共に Legendre の微分方程式の解であるから，(3-2-4)で見たように

$$\begin{aligned}&(1-z^2)\frac{d^2}{dz^2}P_l(z) - 2z\frac{d}{dz}P_l(z) + l(l+1)P_l(z)\\&= \{\frac{d}{dz}(1-z^2)\frac{d}{dz} + l(l+1)\}P_l(z) = 0\end{aligned} \qquad (3\text{-}2\text{-}4)$$

を満たしている．従って，l，l' に関して

$$\frac{d}{dz}(1-z^2)\frac{d}{dz}P_l(z) = -l(l+1)\}P_l(z)$$

が成立しているので，(A3-4-3)は，

$$l(l+1)\int_{-1}^{1} P_l(z)\cdot P_{l'}(z)dz = l'(l'+1)\int_{-1}^{1} P_{l'}(z)\cdot P_l(z)dz$$

となる．移項すれば，

$$\{l(l+1)-l'(l'+1)\}\int_{-1}^{1} P_l(z)\cdot P_{l'}(z)dz = 0 \tag{3-4-4}$$

である．これは，$l \neq l'$であるなら，

$$\int_{-1}^{1} P_l(z)\cdot P_{l'}(z)\,dz = 0 \tag{3-4-5}$$

であること，即ち，Legendre 多項式は直交することを意味している．

「$P_l(z)$の直交性：$l = l'$の場合」

$l = l'$の場合は，Rodrigues の公式(3-3-1)をそのまま使う．

$$P_l(z) = \frac{1}{2^l\cdot l!}\cdot\frac{d^l}{dz^l}(z^2-1)^l \tag{3-3-1}$$

であるから，係数を除いた部分の積分は，部分積分により，

$$\int_{-1}^{1}\frac{d^l}{dz^l}(z^2-1)^l\cdot\frac{d^l}{dz^l}(z^2-1)^l dz = \int_{-1}^{1}\{\frac{d^{l-1}}{dz^{l-1}}(z^2-1)^l\}'\cdot\frac{d^l}{dz^l}(z^2-1)^l dz$$

$$= [\frac{d^{l-1}}{dz^{l-1}}(z^2-1)^l\cdot\frac{d^l}{dz^l}(z^2-1)^l]_{-1}^{1} - \int_{-1}^{1}\frac{d^{l-1}}{dz^{l-1}}(z^2-1)^l\cdot\frac{d^{l+1}}{dz^{l+1}}(z^2-1)^l dz \tag{3-4-6}$$

この右辺第一項の定積分は０である．$\frac{d^{l-1}}{dz^{l-1}}(z^2-1)^l$では，$(z^2-1)$が残るからである．従って，

$$\int_{-1}^{1}\frac{d^l}{dz^l}(z^2-1)^l\cdot\frac{d^l}{dz^l}(z^2-1)^l dz = -\int_{-1}^{1}\frac{d^{l-1}}{dz^{l-1}}(z^2-1)^l\,\frac{d^{l+1}}{dz^{l+1}}(z^2-1)^l dz \tag{3-4-7}$$

このような部分積分はl回繰り返すことができることがわかる．その結果は，

$$\int_{-1}^{1}\frac{d^l}{dz^l}(z^2-1)^l\cdot\frac{d^l}{dz^l}(z^2-1)^l dz = (-1)^l\cdot\int_{-1}^{1}(z^2-1)^l\cdot\frac{d^{2l}}{dz^{2l}}(z^2-1)^l dz$$

右辺の微分項はｚの２l次の多項式を２l回微分するのであるから，次のような定数となる．

$$\frac{d^{2l}}{d^{2l}}(z^2-1)^l = 2l\cdot(2l-1)\cdot\cdots\cdot 2\cdot 1 = (2l)!$$

従って，結局，次のような結果が得られる．$(z^2-1)^l = (-1)^l\cdot(1-z^2)^l$ に注意して，

$$\int_{-1}^{1}\frac{d^l}{dz^l}(z^2-1)^l\cdot\frac{d^l}{dz^l}(z^2-1)^l dz = (-1)^l\cdot(2l)!\cdot\int_{-1}^{1}(z^2-1)^l dz = (-1)^{2l}\cdot(2l)!\cdot\int_{-1}^{1}(1-z^2)^l dz$$

$$= (2l)!\cdot\int_{-1}^{1}(1-z^2)^l dz \qquad (3\text{-}4\text{-}8)$$

$\int_{-1}^{1}(1-z^2)^l dz$ の値を求めねばならない．やはり部分積分から，

$$\int_{-1}^{1}(1-z^2)^l dz = \int_{-1}^{1}(1+z)^l\cdot(1-z)^l dz = \int_{-1}^{1}\{\frac{1}{(l+1)}(1+z)^{l+1}\}'\cdot(1-z)^l dz$$

$$= \frac{1}{(l+1)}[(1+z)^{l+1}\cdot(1-z)^l]_{-1}^{1} - \int_{-1}^{1}\frac{1}{(l+1)}(1+z)^{l+1}\cdot\{(1-z)^l\}' dz$$

である．ここでも，第一項は 0 であるので，部分積分の結果は

$$\int_{-1}^{1}(1-z^2)^l dz = \int_{-1}^{1}(1+z)^l\cdot(1-z)^l dz = (\frac{l}{l+1})\int_{-1}^{1}(1+z)^{l+1}\cdot(1-z)^{l-1} dz \qquad (3\text{-}4\text{-}9)$$

であり，l 回繰り返すことができるから，(3-4-9)は，

$$\int_{-1}^{1}(1-z^2)^l dz = \int_{-1}^{1}(1+z)^l\cdot(1-z)^l dz$$

$$= (\frac{l}{l+1})\int_{-1}^{1}(1+z)^{l+1}\cdot(1-z)^{l-1} dz = \frac{l\cdot(l-1)}{(l+1)(l+2)}\int_{-1}^{1}(1+z)^{l+2}\cdot(1-z)^{l-2} dz$$

$$= \frac{l(l-1)(l-2)\cdots 2\cdot 1}{(l+1)(l+2)\cdots(2l-1)(2l)}\int_{-1}^{1}(1+z)^{2l} dz = \frac{(l!)}{(2l)!/(l!)}\int_{-1}^{1}(1+z)^{2l} dz$$

最後の定積分は，（1+z）→ u　に直せば，

$$\int_{-1}^{1}(1+z)^{2l} dz = \int_{0}^{2}(u)^{2l} du = (\frac{1}{2l+1})[u^{2l+1}]_0^2 = \frac{2^{(2l+1)}}{(2l+1)}$$

となる．このように，

$$\int_{-1}^{1}(1-z^2)^l dz = \frac{(l!)^2\cdot 2^{(2l+1)}}{(2l+1)!} \qquad (3\text{-}4\text{-}10)$$

である．この結果を(3-4-8)に代入すれば，

$$\int_{-1}^{1}\frac{d^l}{dz^l}(z^2-1)^l\cdot\frac{d^l}{dz^l}(z^2-1)^l dz = (2l)!\cdot\frac{(l!)^2\cdot 2^{(2l+1)}}{(2l+1)!} = \frac{(l!)^2\cdot 2^{(2l+1)}}{(2l+1)} \qquad (3\text{-}4\text{-}11)$$

であることがわかる． Rodrigues の公式(3-3-1)にあった係数を含めると，

$$\int_{-1}^{1} P_l(z)\cdot P_l(z)dz = \frac{1}{(2^l)^2\cdot(l!)^2}\cdot\frac{(l!)^2\cdot 2^{(2l+1)}}{(2l+1)} = \frac{2}{2l+1} \qquad (3\text{-}4\text{-}12)$$

となる．クロネッカーの$\delta_{l,l'}=1\ (l=l')$，$\delta_{l,l'}=0\ (l\neq l')$を使えば，Legendre 多項式の直交性は次のように書ける．

$$\int_{-1}^{1} P_l(z)\cdot P_{l'}(z)\,dz = (\frac{2}{2l+1})\delta_{l,l'} \qquad (3\text{-}4\text{-}13)$$

Legendre 多項式は直交性はあるが規格化されていないことに注意しよう．規格化するためには，(3-4-13)右辺の係数の平方根の逆数を，各 Legendre 多項式に掛けておけば良い．

$$\int_{-1}^{1}\{\sqrt{\frac{2l+1}{2}}P_l(z)\}\cdot\{\sqrt{\frac{2l'+1}{2}}P_{l'}(z)\}dz = \delta_{l,l'} \qquad (3\text{-}4\text{-}14)$$

「$Y_{l,0}(\theta,\phi)$と$P_l(\cos\theta)$の関係」

ところで，そもそも，$P_l(z)$を求めた目的は，これが$Y_{l,0}$に定数係数を除き一致するからであった．

$$Y_{l,0}(\theta,\phi) = c\cdot P_l(\cos\theta) \qquad (3\text{-}4\text{-}15)$$

とおける．$Y_{l,0}$は規格化条件(1-4-15)を満足しなければならないので，係数 c はこの条件から定められる．

$$\int_{\theta=0}^{\pi}\int_{\phi=0}^{2\pi}\left|Y_{l,0}(\theta,\phi)\right|^2\sin\theta d\theta d\phi = 1 \qquad (3\text{-}4\text{-}16)$$

$Y_{l,0}$の規格化はここで考慮されるので，Legendre 多項式自体が規格化されていないことは重要ではない．

(3-4-15)の右辺には，変数ϕはないので，(3-4-16)の規格化積分は

$$\int_{\phi=0}^{2\pi}d\phi\int_{\theta=0}^{\pi}c^2\cdot P_l(\cos\theta)P_l(\cos\theta)\sin\theta d\theta = 2\pi c^2\int_{-1}^{+1}P_l(\cos\theta)P_l(\cos\theta)\,d(\cos\theta)$$

$$= 2\pi c^2\cdot(\frac{2}{2l+1}) = 1 \qquad (3\text{-}4\text{-}17)$$

となる．変数を$\cos\theta$に変えると，$d(\cos\theta) = -\sin\theta d\theta$である．しかし，この負の符号は積分域を逆転させねばならないので正符号となる．これから，

$$c = \pm\sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}} \qquad (3\text{-}4\text{-}18)$$

である．正負どちらの定数でも良い訳だが，通常は．次の条件

$$Y_{l,0}(0,0) = \text{正の実数} \tag{3-4-19}$$

を仮定する．$\theta = 0$, $\phi = 0$ $\rightarrow \cos\theta = 1$,　$P_l(1) = 1$であるから，

$c = +\sqrt{\dfrac{2l+1}{4\pi}}$　を選択することになる．従って，

$$Y_{l,0}(\theta,\phi) = \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}} \cdot P_l(\cos\theta) \tag{3-4-20}$$

が，目的の$Y_{l,0}(\theta,\phi)$である．

$\theta = 0 \rightarrow \cos\theta = 1$であるから，　$\phi \neq 0$ であっても，

$$Y_{l,0}(0,\phi) = \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}} \cdot P_l(1) = \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}} \tag{3-4-21}$$

である．