で与えられ、

$$\begin{pmatrix} \dfrac{\partial}{\partial x} \\ \dfrac{\partial}{\partial y} \\ \dfrac{\partial}{\partial z} \end{pmatrix} = U^{-1} \begin{pmatrix} \dfrac{\partial}{\partial r} \\ \dfrac{1}{r}\dfrac{\partial}{\partial \theta} \\ \dfrac{1}{r\sin\theta}\dfrac{\partial}{\partial \varphi} \end{pmatrix} \tag{H.13}$$

と求まる。3 次元運動量の微分演算子の式 (H.10) に式 (H.13) を代入し、さらに 3 次元角運動量の式 (H.9) に、式 (H.8), と (H.10) を代入することで

$$\begin{aligned} L_x^{\rm op} &= i\hbar\left[\sin\varphi\frac{\partial}{\partial\theta} + \cos\varphi\frac{\cos\theta}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\varphi}\right], \\ L_y^{\rm op} &= i\hbar\left[-\cos\varphi\frac{\partial}{\partial\theta} + \sin\varphi\frac{\cos\theta}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\varphi}\right], \\ L_z^{\rm op} &= -i\hbar\frac{\partial}{\partial\varphi} \end{aligned} \tag{H.14}$$

が得られる。

I 球面調和関数

球面調和関数 $Y_{\ell m}(\theta,\varphi)$ は、球座標系 (r,θ,φ)

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

における固有値方程式

$$(\vec{L}^{\rm op})^2 Y_{\ell m}(\theta,\varphi) = \hbar^2\ell(\ell+1)Y_{\ell m}(\theta,\varphi), \qquad (\ell \geq 0),$$

$$L_z^{\rm op} Y_{\ell m}(\theta,\varphi) = \hbar m Y_{\ell m}(\theta,\varphi),$$

の解である。この付録では球面調和関数の具体形の計算方法を説明する。

I.1 $(\vec{L}^{\rm op})^2$ の具体形

付録 §. H.2 において、球面調和関数の定義に現れる微分演算子 $L_z^{\rm op}$ の具体形はすでに求まっている。ここでは、球面調和関数を定義するのに用いられるもう一つの微分演算子である $(\vec{L}^{\rm op})^2$ の具体形を求めよう。

計算の方法はいくつかあるが、ここではふたつのやり方を紹介しよう。

最初の方法は、式 (H.14) の結果を愚直に使って

$$-\frac{1}{\hbar^2}(\vec{L}^{\rm op})^2 = \left[s_\varphi\frac{\partial}{\partial\theta} + c_\varphi\frac{c_\theta}{s_\theta}\frac{\partial}{\partial\varphi}\right]\left[s_\varphi\frac{\partial}{\partial\theta} + c_\varphi\frac{c_\theta}{s_\theta}\frac{\partial}{\partial\varphi}\right] + \left[-c_\varphi\frac{\partial}{\partial\theta} + s_\varphi\frac{c_\theta}{s_\theta}\frac{\partial}{\partial\varphi}\right]\left[-c_\varphi\frac{\partial}{\partial\theta} + s_\varphi\frac{c_\theta}{s_\theta}\frac{\partial}{\partial\varphi}\right] + \frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}$$

を計算するやり方である。ここでは、表記のスペースの節約のため、

$$s_\theta = \sin\theta, \quad c_\theta = \cos\theta, \quad s_\varphi = \sin\varphi, \quad c_\varphi = \cos\varphi$$

で定義される記号 $s_{\theta,\varphi}$, $c_{\theta,\varphi}$ を用いた。微分演算子 $\partial/\partial\theta$ や $\partial/\partial\varphi$ が、$s_{\theta,\varphi}$ や $c_{\theta,\varphi}$ にも作用することに注意し、この式を次のように計算して $(\vec{L}^{\mathrm{op}})^2$ の具体形を得ることができる。

$$
\begin{aligned}
&-\frac{1}{\hbar^2}(\vec{L}^{\mathrm{op}})^2 \\
&= \left[s_\varphi\frac{\partial}{\partial\theta}+c_\varphi\frac{c_\theta}{s_\theta}\frac{\partial}{\partial\varphi}\right]\left[s_\varphi\frac{\partial}{\partial\theta}+c_\varphi\frac{c_\theta}{s_\theta}\frac{\partial}{\partial\varphi}\right]+\left[-c_\varphi\frac{\partial}{\partial\theta}+s_\varphi\frac{c_\theta}{s_\theta}\frac{\partial}{\partial\varphi}\right]\left[-c_\varphi\frac{\partial}{\partial\theta}+s_\varphi\frac{c_\theta}{s_\theta}\frac{\partial}{\partial\varphi}\right]+\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2} \\
&= s_\varphi^2\frac{\partial^2}{\partial\theta^2}+s_\varphi c_\varphi\frac{c_\theta}{s_\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\frac{\partial}{\partial\varphi}+s_\varphi c_\varphi\left[\frac{\partial}{\partial\theta}\frac{c_\theta}{s_\theta}\right]\frac{\partial}{\partial\varphi} \\
&\quad +s_\varphi c_\varphi\frac{c_\theta}{s_\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\frac{\partial}{\partial\varphi}+c_\varphi^2\frac{c_\theta}{s_\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}+c_\varphi^2\frac{c_\theta^2}{s_\theta^2}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}-s_\varphi c_\varphi\frac{c_\theta^2}{s_\theta^2}\frac{\partial}{\partial\varphi} \\
&\quad +c_\varphi^2\frac{\partial^2}{\partial\theta^2}-s_\varphi c_\varphi\frac{c_\theta}{s_\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\frac{\partial}{\partial\varphi}-s_\varphi c_\varphi\left[\frac{\partial}{\partial\theta}\frac{c_\theta}{s_\theta}\right]\frac{\partial}{\partial\varphi} \\
&\quad -s_\varphi c_\varphi\frac{c_\theta}{s_\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\frac{\partial}{\partial\varphi}+s_\varphi^2\frac{c_\theta}{s_\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}+s_\varphi^2\frac{c_\theta^2}{s_\theta^2}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}+s_\varphi c_\varphi\frac{c_\theta^2}{s_\theta^2}\frac{\partial}{\partial\varphi}+\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2} \\
&= \frac{\partial^2}{\partial\theta^2}+\frac{c_\theta}{s_\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}+\frac{c_\theta}{s_\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}+\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2} \\
&= \frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}+\frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}. \qquad \text{(I.1)}
\end{aligned}
$$

もうひとつの方法は、演算子

$$\hat{D}=\hat{x}\hat{p}_x+\hat{y}\hat{p}_y+\hat{z}\hat{p}_z$$

とそのエルミート共軛

$$\hat{D}^\dagger=\hat{p}_x\hat{x}+\hat{p}_y\hat{y}+\hat{p}_z\hat{z}$$

を用いる方法である。この演算子を用いれば、

$$\hat{\vec{L}}^2=\left(\hat{x}^2+\hat{y}^2+\hat{z}^2\right)\left(\hat{p}_x^2+\hat{p}_y^2+\hat{p}_z^2\right)-\hat{D}^\dagger\hat{D}-2i\hbar\hat{D} \qquad \text{(I.2)}$$

であることを示すことができるので、$\hat{D}$ や $\hat{D}^\dagger$ に対応する微分演算子さえ求めることができれば、$(\vec{L}^{\mathrm{op}})^2$ をラプラシアン（$-(\hat{p}_x^2+\hat{p}_y^2+\hat{p}_z^2)/\hbar^2$ に対応する微分演算子）と関係づけることができる。

式 (H.10) と (H.13) を用いれば、$\hat{D}$ に対応する微分演算子は

$$
\begin{aligned}
D_{\mathrm{op}} &= -i\hbar x\frac{\partial}{\partial x}-i\hbar y\frac{\partial}{\partial y}-i\hbar z\frac{\partial}{\partial z} \\
&= -i\hbar\, r\sin\theta\cos\varphi(\sin\theta\cos\varphi\frac{\partial}{\partial r}+\cos\theta\cos\varphi\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial\theta}-\sin\varphi\frac{1}{r\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\varphi}) \\
&\quad -i\hbar\, r\sin\theta\sin\varphi(\sin\theta\sin\varphi\frac{\partial}{\partial r}+\cos\theta\sin\varphi\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial\theta}+\cos\varphi\frac{1}{r\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\varphi}) \\
&\quad -i\hbar\, r\cos\theta(\cos\theta\frac{\partial}{\partial r}-\sin\theta\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial\theta}) \\
&= -i\hbar r\frac{\partial}{\partial r} \qquad \text{(I.3)}
\end{aligned}
$$

のように計算できる。エルミート共軛な演算子 $\hat{D}^\dagger$ は、

$$
\begin{aligned}
\langle\psi_1|\,\hat{D}^\dagger\,|\psi_2\rangle &= (\langle\psi_2|\,\hat{D}\,|\psi_1\rangle)^*=\left(-i\hbar\int drr^2d\theta\sin\theta d\varphi\psi_2^*r\frac{\partial}{\partial r}\psi_1\right)^* \\
&= i\hbar\int drr^2d\theta\sin\theta d\varphi\left(r\frac{\partial}{\partial r}\psi_1^*\right)\psi_2 \\
&= -i\hbar\int drr^2d\theta\sin\theta d\varphi\psi_1^*\left(\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}r^3\right)\psi_2 \qquad \text{(I.4)}
\end{aligned}
$$

であることに注意すれば、

$$D_{\rm op}^{\dagger} = -i\hbar\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}r^3 \tag{I.5}$$

であることがわかる。式 (I.4) の 2 行目から 3 行目への変形には部分積分を用いた。

これで準備が整ったので、いよいよ (I.2) を用いた $(\vec{L}^{\rm op})^2$ の計算にはいろう。

$$\begin{aligned}
-\frac{1}{\hbar^2}(\vec{L}^{\rm op})^2 &= r^2\Delta + \frac{2i}{\hbar}D_{\rm op} + \frac{1}{\hbar^2}D_{\rm op}^{\dagger}D_{\rm op} \\
&= r^2\Delta + 2r\frac{\partial}{\partial r} - \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}r^4\frac{\partial}{\partial r} \\
&= r^2\Delta - \frac{\partial}{\partial r}r^2\frac{\partial}{\partial r} \qquad \text{(I.6)}
\end{aligned}$$

と式 (G.17) で与えられる球座標表示でのラプラシアンの結果を用いると

$$-\frac{1}{\hbar^2}(\vec{L}^{\rm op})^2 = \frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta} + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}. \tag{I.7}$$

が得られる。もちろん、この結果は式 (I.1) で愚直に計算した結果と同一のものである。

I.2　$Y_{\ell m}(\theta,\varphi)$ の具体形

前節の結果で、球面調和関数 $Y_{\ell m}$ が満たすべき微分方程式が

$$\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left[\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}Y_{\ell m}(\theta,\varphi)\right] + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}Y_{\ell m}(\theta,\varphi) + \ell(\ell+1)Y_{\ell m}(\theta,\varphi) = 0, \tag{I.8}$$

$$\frac{\partial}{\partial\varphi}Y_{\ell m}(\theta,\varphi) - imY_{\ell m}(\theta,\varphi) = 0 \tag{I.9}$$

であることがわかった。以下では $Y_{\ell m}(\theta,\varphi)$ の具体的な関数形を求めることにする。まず、

$$X_m(\varphi) = e^{im\varphi} \tag{I.10}$$

が式 (I.9) と同じ形の微分方程式

$$\frac{d}{d\varphi}X_m(\varphi) - imX_m(\varphi) = 0 \tag{I.11}$$

の解であることに着目する。微分方程式 (I.11) は 1 階の線形微分方程式なので、微分方程式 (I.9) の解は、$X_m(\varphi)$ に φ には依存しない θ だけの任意関数 $F_{\ell m}(\theta)$ を掛けた

$$Y_{\ell m}(\theta,\varphi) = F_{\ell m}(\theta)X_m(\varphi) \tag{I.12}$$

の形で表すことができる。球面調和関数は、φ について 2π の周期の周期関数であり、

$$Y_{\ell m}(\theta,\varphi+2\pi) = Y_{\ell m}(\theta,\varphi)$$

の周期的境界条件を満たさねばならない。このことから、固有値 m は整数でなければならないことがわかる。

次に、式 (I.12) を微分方程式 (I.8) に代入することで得られる $F_{\ell m}$ についての微分方程式

$$\frac{1}{\sin\theta}\frac{d}{d\theta}\left(\sin\theta\frac{d}{d\theta}F_{\ell m}\right) + \left[\ell(\ell+1) - \frac{m^2}{\sin^2\theta}\right]F_{\ell m} = 0 \tag{I.13}$$

を解いていこう。微分方程式 (I.13) は

$$\zeta = \cos\theta, \qquad (0 \le \theta \le \pi) \tag{I.14}$$

で定義される変数 ζ $(0 \le \zeta \le 1)$ を用いて

$$\frac{d}{d\zeta}\left[(1-\zeta^2)\frac{d}{d\zeta}F_{\ell m}\right] + \left[\ell(\ell+1) - \frac{m^2}{1-\zeta^2}\right]F_{\ell m} = 0 \tag{I.15}$$

と書き直すと解きやすくなる。この式変形では、

$$\frac{d}{d\theta} = \frac{d\zeta}{d\theta}\frac{d}{d\zeta} = -\sin\theta\frac{d}{d\zeta} \tag{I.16}$$

であることを用いた。

微分方程式 (I.15) は、$\zeta = \pm 1$ に確定特異点を持つ微分方程式である。まずは、確定特異点 $\zeta = 1$ の近傍での解のふるまいを調べよう。そのためには、フロベニウスの方法にしたがって、

$$F_{\ell m} = (1-\zeta)^s \sum_{n=0}^{\infty} a_n (1-\zeta)^n \tag{I.17}$$

と展開する。式 (I.17) を微分方程式 (I.15) に代入し、$(1-\zeta)$ の最低次の冪の係数を比較することで得られる決定方程式を解けば、式 (I.17) の s が $s = \pm|m|/2$ と求まり、$\zeta = 1$ の近傍において微分方程式の解の振る舞いが

$$F_{\ell m} \sim (1-\zeta)^{\pm|m|/2} \tag{I.18}$$

であることがわかる。ふたつの解のうち、$s = -|m|$ の解は $\zeta \to +1$ の極限で発散するため採用せず、以降では

$$F_{\ell m} \sim (1-\zeta)^{|m|/2} \tag{I.19}$$

となる解を探すことにする。

$\zeta = -1$ の近傍でも同様の解析を行うことによって、$\zeta = -1$ の特異点の近傍での解の振る舞いが

$$F_{\ell m} \sim (1+\zeta)^{|m|/2} \tag{I.20}$$

であることを得る。

以上の結果から、$\zeta = \pm 1$ において有限な関数 $G_{\ell m}$ を使って

$$F_{\ell m} = (1-\zeta^2)^{|m|/2} G_{\ell m}(\zeta) \tag{I.21}$$

と書き換えることにする。式 (I.21) を微分方程式 (I.13) に代入することによって、$G_{\ell m}$ の満たすべき微分方程式

$$\frac{d}{d\zeta}\left[(1-\zeta^2)\frac{d}{d\zeta}G_{\ell m}\right] - 2|m|\zeta\frac{d}{d\zeta}G_{\ell m} + \left[\ell(\ell+1) - |m|(|m|+1)\right]G_{\ell m} = 0 \tag{I.22}$$

が得られる。

微分方程式 (I.22) は、

$$\zeta \to \zeta' = -\zeta$$

と変数変換しても不変であることに着目しよう。このような場合、確定特異点 $\xi = 1$ あるいは $\xi = -1$ の近傍で解を級数展開するよりも、$\xi \to -\xi$ の対称性をもつ $\xi = 0$ の近傍で

$$G_{\ell m}(\zeta) = \sum_n a_n \zeta^n \tag{I.23}$$

と展開するほうが見通しを得やすい。微分方程式 (I.22) から得られる a_n の漸化式は

$$a_{n+2} = \frac{(n+|m|)(n+|m|+1) - \ell(\ell+1)}{(n+2)(n+1)} a_n, \qquad n = 0, 1, 2, \cdots \tag{I.24}$$

である。この漸化式によって級数 (I.23) が無限に続く場合は、級数 (I.23) が $\zeta \to \pm 1$ で収束せず採用できない。逆にいうと、我々が採用できる解は、漸化式 (I.24) によって $G_{\ell m}$ が有限次数の多項式になる場合、つまり、ℓ が $|m|$ 以上の整数の場合に限られることがわかる。

m がゼロのときの微分方程式 (I.22) は、付録 E.2 で考察するルジャンドルの微分方程式

$$\frac{d}{d\zeta}\left[(1-\zeta^2)\frac{d}{d\zeta}P_\ell\right] + \ell(\ell+1)P_\ell = 0 \tag{I.25}$$

そのものになっている。また、ルジャンドルの微分方程式 (I.25) を ζ で $|m|$ 回微分することによって

$$\frac{d}{d\zeta}\left[(1-\zeta^2)\frac{d}{d\zeta}\frac{d^{|m|}P_\ell}{d\zeta^{|m|}}\right] - 2|m|\zeta\frac{d}{d\zeta}\frac{d^{|m|}P_\ell}{d\zeta^{|m|}} + \left[\ell(\ell+1) - |m|(|m|+1)\right]\frac{d^{|m|}P_\ell}{d\zeta^{|m|}} = 0 \tag{I.26}$$

が得られる。式 (I.26) が、我々が解きたい微分方程式 (I.22) とほぼ同一の形になっていることに注意すると、ルジャンドル多項式 P_ℓ を使って、$G_{\ell m}$ の多項式解が

$$G_{\ell m}(\zeta) = N_{\ell m}\frac{d^{|m|}}{d\zeta^{|m|}}P_\ell(\zeta) \tag{I.27}$$

と書き表すことができることがわかる。ここで、$N_{\ell m}$ は適当な定数。つまり、球面調和関数 $Y_{\ell m}$ は、ルジャンドル陪関数

$$P_\ell^{|m|}(\zeta) = (1-\zeta^2)^{|m|/2}\frac{d^{|m|}}{d\zeta^{|m|}}P_\ell(\zeta) \tag{I.28}$$

を使って、

$$Y_{\ell m}(\theta,\varphi) = N_{\ell m}P_\ell^{|m|}(\cos\theta)e^{im\varphi} \tag{I.29}$$

と表すことができるのである。

異なる m のあいだの定数 $N_{\ell m}$ の関係は、式 (7.79) と式 (7.80) で与えられる角運動量の昇降演算子の微分演算子版を用いて

$$Y_{\ell,m+1}(\theta,\varphi) = \frac{1}{C_+(\ell,m)}L_+^{\mathrm{op}}Y_{\ell,m}(\theta,\varphi), \tag{I.30}$$

$$Y_{\ell,m-1}(\theta,\varphi) = \frac{1}{C_-(\ell,m)}L_-^{\mathrm{op}}Y_{\ell,m}(\theta,\varphi), \tag{I.31}$$

となるようにして決める。ここで、係数 C_+, C_- は式 (7.58) と式 (7.56) でそれぞれ与えられる係数である。

式 (I.30) を用いると、$m \geq 0$ での定数 $N_{\ell m}$ は $N_{\ell m=0}$ と関係づけることができ、その結果は

$$N_{\ell m} = (-1)^m\sqrt{\frac{(\ell-m)!}{(\ell+m)!}}N_{\ell 0}, \qquad \text{for } m \geq 0$$

である。同様に、式 (I.31) を用いると

$$N_{\ell m} = \sqrt{\frac{(\ell+m)!}{(\ell-m)!}}N_{\ell 0}, \qquad \text{for } m < 0$$

であることがわかる。定数 $N_{\ell 0}$ を求めるには、球面調和関数の規格化条件

$$\int_0^\pi d\theta \sin\theta \int_0^{2\pi} d\varphi Y^*_{\ell m}(\theta,\varphi) Y_{\ell' m'}(\theta,\varphi) = \delta_{\ell\ell'}\delta_{mm'} \tag{I.32}$$

を使えばよい。$m = m' = 0$ の場合についてこの規格化条件を適用し、

$$Y_{\ell,m=0}(\theta,\varphi) = N_{\ell,0} P_\ell(\cos\theta) \tag{I.33}$$

であることと、ルジャンドル多項式の規格化の式 (E.40) を用いれば、

$$|N_{\ell,m=0}|^2 = \frac{1}{2\pi \displaystyle\int_{-1}^{1} d\zeta\, |P_\ell(\zeta)|^2} = \frac{2\ell+1}{4\pi} \tag{I.34}$$

が得られる。ここでは、多くの文献に従い $N_{\ell,m=0}$ は正の実数になるように選ぶことする。その場合、定数 $N_{\ell m}$ は

$$N_{\ell m} = \begin{cases} (-1)^m \left[\dfrac{2\ell+1}{4\pi}\dfrac{(\ell-m)!}{(\ell+m)!}\right]^{1/2}, & \text{for} \quad m \geq 0, \\ \left[\dfrac{2\ell+1}{4\pi}\dfrac{(\ell+m)!}{(\ell-m)!}\right]^{1/2}, & \text{for} \quad m < 0, \end{cases} \tag{I.35}$$

のように求まる。

定数 $N_{\ell m}$ の絶対値を求めるだけであれば、球面調和関数の規格化条件 (I.32) をそのまま使ってもよい。$\ell = \ell'$, $m = m'$ のとき、この規格化条件から

$$|N_{\ell m}|^2 = \frac{1}{2\pi \displaystyle\int_{-1}^{1} d\zeta\, |P_\ell^{|m|}(\zeta)|^2} \tag{I.36}$$

が得られる。この式の右辺の積分は、ルジャンドル陪関数を式 (E.49) を用いてゲーゲンバウアー多項式に書き換え、さらにゲーゲンバウアー多項式の規格化の式 (E.53) を用いれば容易に計算でき、

$$|N_{\ell m}|^2 \quad = \frac{2\ell+1}{4\pi}\frac{(\ell-|m|)!}{(\ell+|m|)!} \tag{I.37}$$

が得られる。もちろんこの結果は、式 (I.35) で与えた結果と無矛盾である。

I.3 超球面調和関数

仮に、x, y, z の 3 方向以外にも空間次元が存在する場合、角運動量演算子や球面調和関数の議論はどのように拡張せねばならないだろうか。

この節ではそのような世界として、x, y, z に加えて 4 番目の独立な空間方向 w が存在する仮想世界を考察してみよう。このような洞察を行うことで、通常の 3 次元空間の角運動量演算子や球面調和関数の性質についてのより深い理解が可能になる。

通常の 3 次元空間の世界では位置ベクトル $\vec{x}$ と運動量ベクトル $\vec{p}$ の両者と垂直な方向をもつ（軸性）ベクトル量として角運動量が定義される。しかし、4 次元空間の仮想世界では、$\vec{x}$ にも $\vec{p}$ にも垂直な方向が複数存在する。したがって（軸性）ベクトル量としての角運動量の定義は不可能である。そこでふたつの添字をもつ 2 階反対称テンソル量として角運動量演算子を

$$\hat{L}_{ij} = \hat{x}_i \hat{p}_j - \hat{x}_j \hat{p}_i, \qquad i, j = x, y, z, w \tag{I.38}$$

と定義することにしよう。４次元空間での２階反対称テンソルの自由度 $4 \times (4-1)/2 = 6$ に対応して、４次元空間の角運動量の成分は６つあることに注意しよう。

愚直に計算すれば、角運動量演算子と位置演算子あるいは運動量演算子との交換関係は

$$[\hat{L}_{ij}, \hat{x}_k] = i\hbar \left(\delta_{ik}\hat{x}_j - \delta_{jk}\hat{x}_i\right), \tag{I.39}$$

$$[\hat{L}_{ij}, \hat{p}_k] = i\hbar \left(\delta_{ik}\hat{p}_j - \delta_{jk}\hat{p}_i\right), \tag{I.40}$$

であることがわかる。従って、角運動量演算子どうしの交換関係は

$$[\hat{L}_{ij}, \hat{L}_{kl}] = i\hbar \left(\delta_{ik}\hat{L}_{jl} + \delta_{il}\hat{L}_{kj} - \delta_{jk}\hat{L}_{il} - \delta_{jl}\hat{L}_{ki}\right) \tag{I.41}$$

と求められる。角運動量演算子は、このように非自明な交換関係をもつため、たとえば $\hat{L}_{xy}$ と $\hat{L}_{yz}$ の同時固有状態は一般には存在しない。量子力学での状態の量子数を指定するためには、互いに交換するひとくみの演算子の固有値を用いる必要がある。

そのような、互いに交換するひとくみの演算子として、ここでは

$$\hat{L}_{xy}, \qquad \hat{\mathbf{L}}^2_{(3)}, \qquad \hat{\mathbf{L}}^2_{(4)} \tag{I.42}$$

を採用する。ここで、$\hat{\mathbf{L}}^2_{(3)}$ は xyz ３次元部分空間内の角運動量の大きさ（の二乗）

$$\hat{\mathbf{L}}^2_{(3)} = \hat{L}^2_{xy} + \hat{L}^2_{yz} + \hat{L}^2_{zx}$$

であり、$\hat{\mathbf{L}}^2_{(4)}$ は４次元空間全体の角運動量の大きさ（の二乗）

$$\hat{\mathbf{L}}^2_{(4)} = \hat{L}^2_{xy} + \hat{L}^2_{yz} + \hat{L}^2_{zx} + \hat{L}^2_{xw} + \hat{L}^2_{yw} + \hat{L}^2_{zw}$$

である。$[\hat{L}_{xy}, \hat{\mathbf{L}}^2_{(3)}] = 0$ は３次元での角運動量の解析経験から明らかであろう。また、$\hat{\mathbf{L}}^2_{(4)}$ がすべての $\hat{L}_{ij}$ と交換すること（$[\hat{L}_{ij}, \hat{\mathbf{L}}^2_{(4)}] = 0$）をすぐに示すことができ、これから $[\hat{L}_{xy}, \hat{\mathbf{L}}^2_{(4)}] = 0$、$[\hat{\mathbf{L}}^2_{(3)}, \hat{\mathbf{L}}^2_{(4)}] = 0$ が得られる。

４次元仮想世界での球面調和関数対応物（超球面調和関数）を具体的に構成するにあたって、４次元空間を動径座標 r と角度座標 ω, θ, φ を用いて

$$w = r\cos\omega, \quad z = r\sin\omega\cos\theta, \quad x = r\sin\omega\sin\theta\cos\varphi, \quad y = r\sin\omega\sin\theta\sin\varphi \tag{I.43}$$

と極座標表示してみよう。極座標表示では、線素は

$$ds^2 = dr^2 + (r\,d\omega)^2 + (r\,\sin\omega\,d\theta)^2 + (r\,\sin\omega\,\sin\theta\,d\varphi)^2 \tag{I.44}$$

で与えられ、４次元体積要素 $dx\,dy\,dz\,dw$ は

$$dx\,dy\,dz\,dw = dr\,r^3\,d\omega\,\sin^2\omega\,d\theta\,\sin\theta\,d\varphi, \tag{I.45}$$

スカラー関数 f の微分は

$$\vec{\nabla} f = \vec{e}_r \frac{\partial}{\partial r} f + \vec{e}_\omega \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial \omega} f + \vec{e}_\theta \frac{1}{r\sin\omega}\frac{\partial}{\partial \theta} f + \vec{e}_\varphi \frac{1}{r\sin\omega\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\varphi} f \tag{I.46}$$

で与えられる。付録 G で説明した計算テクニックを使えば、この座標でのラプラシアンが

$$\begin{aligned} \Delta f \;=\; & \frac{1}{r^3}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^3 \frac{\partial}{\partial r} f\right) \\ & + \frac{1}{r^2}\left(\frac{1}{\sin^2\omega}\frac{\partial}{\partial\omega}\left(\sin^2\omega\frac{\partial}{\partial\omega} f\right) + \frac{1}{\sin^2\omega\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta} f\right) + \frac{1}{\sin^2\omega\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2} f\right) \end{aligned} \tag{I.47}$$

となることを示すのは簡単である。さらに付録 I.1 節で説明した方法を用いて、$\hat{\mathbf{L}}^2_{(4)}$ に対応する微分演算子 $(\mathbf{L}^{\rm op}_{(4)})^2$ を式 (I.47) のラプラシアンから抽出することができる。その結果は、式 (I.47) の２行目に r^2 をかけた

$$-\frac{1}{\hbar^2}(\mathbf{L}^{\rm op}_{(4)})^2 = \frac{1}{\sin^2\omega}\frac{\partial}{\partial\omega}\sin^2\omega\frac{\partial}{\partial\omega} + \frac{1}{\sin^2\omega\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta} + \frac{1}{\sin^2\omega\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2} \tag{I.48}$$

である。超球面調和関数を求めるには、このほか、$\hat{\mathbf{L}}^2_{(3)}$ に対応する微分演算子 $(\mathbf{L}^{\rm op}_{(3)})^2$ と $\hat{L}_{xy}$ に対応する微分演算子 $L^{\rm op}_{xy}$ の情報も必要になるが、それらは３次元角運動量での $(\vec{L}^{\rm op})^2$ や $L^{\rm op}_z$ の結果をそのまま流用すればよい。すなわち

$$-\frac{1}{\hbar^2}(\mathbf{L}^{\rm op}_{(3)})^2 = \frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta} + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}, \tag{I.49}$$

$$L^{\rm op}_{xy} = -i\hbar\frac{\partial}{\partial\varphi}. \tag{I.50}$$

である。

ここまでで概ね準備が整ったので、いよいよ超球面調和関数 $Z_{klm}(\omega,\theta,\varphi)$ を考えよう。超球面調和関数は、微分演算子 $(\mathbf{L}^{\rm op}_{(4)})^2$, $(\mathbf{L}^{\rm op}_{(3)})^2$, $L^{\rm op}_{xy}$ の固有関数であり、

$$\frac{1}{\hbar^2}(\mathbf{L}^{\rm op}_{(4)})^2 Z_{klm}(\omega,\theta,\varphi) = k(k+2)Z_{klm}(\omega,\theta,\varphi), \tag{I.51}$$

$$\frac{1}{\hbar^2}(\mathbf{L}^{\rm op}_{(3)})^2 Z_{klm}(\omega,\theta,\varphi) = l(l+1)Z_{klm}(\omega,\theta,\varphi), \tag{I.52}$$

$$\frac{1}{\hbar}L^{\rm op}_{xy}\, Z_{klm}(\omega,\theta,\varphi) = m\, Z_{klm}(\omega,\theta,\varphi) \tag{I.53}$$

を満たす。ここで、$\hbar^2 k(k+2)$, $\hbar^2 l(l+1)$, $\hbar m$ はそれぞれ、$\hat{\mathbf{L}}^2_{(4)}$, $\hat{\mathbf{L}}^2_{(3)}$, $\hat{L}_{xy}$ の固有値である。$\hat{\mathbf{L}}^2_{(3)}$ と $\hat{L}_{xy}$ については、通常の３次元空間の球面調和関数の議論が流用でき、量子数 l が非負の整数（ゼロまたは正の整数）に量子化されること、量子数 m は $-l, -l+1, \cdots, l-1, l$ のいずれかの値をとる整数に量子化されることがわかる。以降では、超球面調和関数 Z_{klm} の量子数 k も非負の整数に量子化されること、l のとりうる値の上限が k になることを学ぶ。

このことを見るためには、通常の球面調和関数 $Y_{lm}(\theta,\varphi)$ を使って、

$$Z_{klm}(\omega,\theta,\varphi) = G_{kl}(\omega)Y_{lm}(\theta,\varphi) \tag{I.54}$$

と変数分離すればよい。式 (I.54) が (I.52) と (I.53) を満たすことは、$Y_{lm}(\theta,\varphi)$ が球面調和関数であることから明らかである。一方、(I.51) からは

$$\frac{1}{\sin^2\omega}\frac{d}{d\omega}\sin^2\omega\frac{d}{d\omega}G_{kl} + \left[k(k+2) - \frac{l(l+1)}{\sin^2\omega}\right]G_{kl} = 0 \tag{I.55}$$

が得られ、さらに式 (I.55) を変数 $\zeta = \cos\omega$ を導入して書き直すと

$$\frac{1}{\sqrt{1-\zeta^2}}\frac{d}{d\zeta}\left[(1-\zeta^2)^{3/2}\frac{d}{d\zeta}G_{kl}\right] + \left[k(k+2) - \frac{l(l+1)}{1-\zeta^2}\right]G_{kl} = 0 \tag{I.56}$$

が得られる。このように、k の量子化の問題は、微分方程式 (I.56) を解く問題に最終的に帰着する。

$l=0$ の場合の微分方程式 (I.56) が、$\nu=1$, $n=k$ の場合のゲーゲンバウアー微分方程式 (E.52) に一致することに注意しよう。一般の l について微分方程式 (E.52) を解くにあたって、ゲーゲンバ

ウアー微分方程式 (E.52) の知識が使えそうである。そこで、微分方程式 (I.56) に含まれる $l(l+1)$ に比例する項を処理するよう

$$G_{kl} = (1-\zeta^2)^{l/2}\tilde{G}_{kl} \tag{I.57}$$

と置いてみる。実際、式 (I.56) に (I.57) を代入して変形すると

$$\frac{1}{(1-\zeta^2)^{l+1/2}}\frac{d}{d\zeta}\left[(1-\zeta^2)^{l+3/2}\frac{d}{d\zeta}\tilde{G}_{kl}\right] + [k(k+2) - l(l+2)]\,\tilde{G}_{kl} = 0 \tag{I.58}$$

が得られ、解くべき微分方程式 (I.58) が、ゲーゲンバウアー微分方程式 (E.52) の $\nu = l+1$, $n = k-l$ の場合に帰着できる。

ゲーゲンバウアー微分方程式 (E.52) は $\zeta = \pm 1$ で確定特異点を持つ微分方程式であり、フロベニウスの方法を用いて解くことができる。$\zeta = \pm 1$ で有限に留まる解が存在することを要求すると、$n = k - l$ が非負の整数であることがわかる。したがって、超球面調和関数 Z_{klm} では、k が非負の整数に量子化され、各 k に対して量子数 l は

$$l = 0, 1, 2, \cdots, k$$

の値のいずれかである。また、各 l について、量子数 m は

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

の $2l+1$ とおりの可能性があることになる。k をひとつ固定した場合、とりうる l, m の場合の数は

$$(k+1)^2 = \sum_{l=0}^{k}(2l+1) \tag{I.59}$$

であることがわかる。

超球面調和関数 $Z_{klm}(\omega,\theta,\varphi)$ の具体形は結局、$n = k-l$ が非負の整数の場合の微分方程式 (I.56) の解が付録 (E.3) で学んだゲーゲンバウアー多項式（超球多項式）$C_{n=k-l}^{(\nu=l+1)}$ を使って

$$G_{kl} = N_{kl}(1-\zeta^2)^{l/2}C_{n=k-1}^{(\nu=l+1)}(\zeta) \tag{I.60}$$

となることを用いて、

$$Z_{klm}(\omega,\theta,\varphi) = N_{kl}(1-\zeta^2)^{\ell/2}\, C_{n=k-l}^{(\nu=l+1)}(\zeta)\; Y_{lm}(\theta,\varphi), \qquad \zeta = \cos\omega \tag{I.61}$$

である。ここで N_{kl} は規格化の定数。

最後に、Z_{klm} の規格化

$$\int_0^{\pi} d\omega \sin^2\omega \int_0^{\pi} d\theta \sin\theta \int_0^{2\pi} d\varphi\, Z_{klm}^* Z_{k'l'm'} = \delta_{kk'}\delta_{ll'}\delta_{mm'} \tag{I.62}$$

を考える。Y_{lm} がすでに規格化されていることに注意し、ゲーゲンバウアー多項式 $C_n^{(\nu)}$ の直交性の式 (E.53) を用いると、規格化定数 N_{kl} は

$$N_{kl} = \frac{1}{2^{\ell}l!}\left[\frac{2}{\pi}(k+1)\frac{(k-l)!}{(k+l+1)!}\right]^{1/2} \tag{I.63}$$

と求められる。

I.4　4次元空間角運動量の量子化（演算子法）

前節の超球面調和関数を用いた4次元角運動量の議論で、演算子 $\hat{\mathbf{L}}^2_{(4)}$ の固有値が $\hbar^2 k(k+2)$ に量子化（k は非負の整数）されることが導かれた。また、k をひとつの値に固定すると、独立な角運動量の状態数（l, m の場合の数）が $(k+1)^2$ であることもわかった（式 (I.59)）。この節では演算子法を用いて、これらの結果を再現してみよう。

そのためには、4次元空間の6つの角運動量演算子 $\hat{L}_{ij}$ を直接取り扱うのではなく、線形結合を取り直して

$$\hat{A}_1 \equiv \frac{1}{2}\left(\hat{L}_{yz}+\hat{L}_{wx}\right), \quad \hat{A}_2 \equiv \frac{1}{2}\left(\hat{L}_{zx}+\hat{L}_{wy}\right), \quad \hat{A}_3 \equiv \frac{1}{2}\left(\hat{L}_{xy}+\hat{L}_{wz}\right), \tag{I.64}$$

$$\hat{B}_1 \equiv \frac{1}{2}\left(\hat{L}_{yz}-\hat{L}_{wx}\right), \quad \hat{B}_2 \equiv \frac{1}{2}\left(\hat{L}_{zx}-\hat{L}_{wy}\right), \quad \hat{B}_3 \equiv \frac{1}{2}\left(\hat{L}_{xy}-\hat{L}_{wz}\right) \tag{I.65}$$

で定義される演算子 $\hat{A}_i$ と $\hat{B}_i$ （$i=1,2,3$）を用いて考えるとよい。このようにすると、角運動量演算子 $\hat{A}_i$, $\hat{B}_i$ の交換関係が

$$[\hat{A}_i, \hat{B}_j] = 0 \tag{I.66}$$

となり、演算子 $\hat{A}_i$ と演算子 $\hat{B}_i$ がそれぞれで閉じた交換関係を持つからである。さらに、$\hat{A}_i$ どうしの交換関係と、$\hat{B}_i$ どうしの交換関係が

$$[\hat{A}_1, \hat{A}_2] = i\hbar\hat{A}_3, \quad [\hat{A}_2, \hat{A}_3] = i\hbar\hat{A}_1, \quad [\hat{A}_3, \hat{A}_1] = i\hbar\hat{A}_2, \tag{I.67}$$

$$[\hat{B}_1, \hat{B}_2] = i\hbar\hat{B}_3, \quad [\hat{B}_2, \hat{B}_3] = i\hbar\hat{B}_1, \quad [\hat{B}_3, \hat{B}_1] = i\hbar\hat{B}_2, \tag{I.68}$$

となり、それぞれが3次元角運動量の交換関係 (7.25) と同型であることもわかる。したがって、角運動量 $\hat{A}_i$, $\hat{B}_i$ の量子化には、本文7.1節と7.2節で説明した3次元角運動量の演算子法による量子化の方法がそのまま適用できる。つまり、演算子 $\hat{\mathbf{A}}^2$ と $\hat{\mathbf{B}}^2$ を

$$\hat{\mathbf{A}}^2 \equiv \sum_{i=1,2,3} \hat{A}_i^2, \qquad \hat{\mathbf{B}}^2 \equiv \sum_{i=1,2,3} \hat{B}_i^2 \tag{I.69}$$

と定義し、それらの固有値を

$$\hbar^2 \ell_A(\ell_A+1), \quad \hbar^2 \ell_B(\ell_B+1), \tag{I.70}$$

とすると、ℓ_A, ℓ_B は、$0, 1/2, 1, 3/2, 2, \cdots$ に量子化される。また、$\hat{A}_3$, $\hat{B}_3$ の固有値を m_A, m_B とするとそれらの取りうる値は

$$m_A = -\ell_A, -\ell_A+1, \cdots, \ell_A-1, \ell_A, \tag{I.71}$$

$$m_B = -\ell_B, -\ell_B+1, \cdots, \ell_B-1, \ell_B, \tag{I.72}$$

であることがわかる。

定義に基いて $\hat{\mathbf{A}}^2$, $\hat{\mathbf{B}}^2$ を具体的に計算すると

$$\hat{\mathbf{A}}^2 = \hat{\mathbf{B}}^2 = \frac{1}{4}\hat{\mathbf{L}}^2_{(4)} \tag{I.73}$$

が得られることに注意しよう。したがって、$\hat{\mathbf{L}}^2_{(4)}$ の固有値を $\hbar^2 k(k+2)$ とすると

$$\ell_A(\ell_A+1) = \ell_B(\ell_B+1) = \frac{1}{4}k(k+2) \tag{I.74}$$

となり
$$\ell_A = \ell_B = \frac{1}{2}k \tag{I.75}$$
が得られ、$k = 2\ell_A = 2\ell_B$ が非負の整数に量子化されることが見て取れる。また、k を固定したときの独立な状態の数は
$$(2\ell_A + 1)(2\ell_B + 1) = (k+1)^2 \tag{I.76}$$
と計算され、前節の結果とたしかに一致している。

J　球ベッセル関数と３次元井戸型ポテンシャル

J.1　球ベッセル関数

３次元自由粒子の波動関数を球座標で表示することを考える。このときに表れる動径波動関数が満たす微分方程式（動径方程式）
$$\left[\frac{d^2}{d\rho^2} + \frac{2}{\rho}\frac{d}{d\rho} - \frac{\ell(\ell+1)}{\rho^2} + 1\right]R_\ell = 0 \tag{J.1}$$
を考えよう。ここで ℓ はゼロまたは正の整数。式 (J.1) の導出については、本文の式 (8.43) の直前の議論を参照のこと。

まず、この微分方程式の解の $\rho \ll 1$ の領域を級数展開で調べる。微分方程式 (J.1) は、$\rho = 0$ で確定特異点を持つので
$$R_\ell(\rho) = \rho^s \sum_{k=0}^{\infty} a_k \rho^k \tag{J.2}$$
と展開可能である。フロベニウスの方法での決定方程式を解くことで冪 s は求められ、その結果は
$$s = \ell, -\ell - 1 \tag{J.3}$$
である。つまり、$\rho = 0$ $(r = 0)$ 近傍で、
$$R_\ell \sim \rho^\ell, \tag{J.4}$$
と
$$R_\ell \sim \frac{1}{\rho^{\ell+1}} \tag{J.5}$$
の２種の解が存在している。式 (J.4) の解を原点で正則な解、式 (J.5) の解を正則でない解と呼ぶ。平面波の場合と同様、自由粒子を取り扱う場合は、（系を適当な有限領域に限って定義しないかぎり）波動関数の二乗可積分条件を課すことができないことに注意しておく。

動径波動関数 R_ℓ のふるまいをより精密に決定するためには、級数展開 (J.2) での係数 a_k の漸化式を解けばよい。微分方程式 (J.1) は、$\rho = 0$ の確定特異点を除いて ρ の有限領域には特異点が存在していない。このような場合の２階微分方程式の解は、合流型超幾何関数の理論を使って記述できることが知られている。ただ、球面波の微分方程式 (J.1) の場合は、初等関数の知識だけを使って解を得ることも可能である。この節では、超幾何関数や合流型超幾何関数の議論は省略し、初等関数の知識だけを使った解の導出方法を紹介する。

そのために
$$R_\ell(\rho) = (-\rho)^\ell \chi_\ell(\rho) \tag{J.6}$$