

球面調和関数

S

2021 年 1 月 29 日

概要

量子力学 II 演習のプリントを参考にしました.

目次

1	球座標での角運動量演算子	1
2	球面調和関数	3
2.1	$Y_l^l(\theta, \varphi)$ の計算	3
2.2	$Y_l^m(\theta, \varphi)$ の計算	5

1 球座標での角運動量演算子

1 粒子の空間運動に由来する角運動量演算子 \hat{l} は直交座標系で次のように表される:

$$\hat{l} = \sum_{\alpha=x,y,z} \hat{l}_\alpha \mathbf{e}_\alpha = \sum_{\alpha,\beta,\gamma=x,y,z} \epsilon_{\alpha\beta\gamma} \hat{r}_\beta \hat{p}_\gamma \mathbf{e}_\alpha \quad (1)$$

任意の状態 $|\Psi\rangle$ に対して

$$\begin{aligned} \langle x, y, z | \hat{l}_x | \Psi \rangle &= \langle x, y, z | (\hat{r}_y \hat{p}_z - \hat{r}_z \hat{p}_y) | \Psi \rangle \\ &= y \langle x, y, z | \hat{p}_z | \Psi \rangle - z \langle x, y, z | \hat{p}_y | \Psi \rangle \\ &= y \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial z} \langle x, y, z | \Psi \rangle - z \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial y} \langle x, y, z | \Psi \rangle \\ &= \frac{\hbar}{i} \left(y \frac{\partial}{\partial z} - z \frac{\partial}{\partial y} \right) \langle x, y, z | \Psi \rangle \end{aligned} \quad (2)$$

が成り立つ. y, z 成分も同様に計算でき, まとめると

$$\begin{cases} \langle x, y, z | \hat{l}_x | \Psi \rangle = \frac{\hbar}{i} \left(y \frac{\partial}{\partial z} - z \frac{\partial}{\partial y} \right) \langle x, y, z | \Psi \rangle \\ \langle x, y, z | \hat{l}_y | \Psi \rangle = \frac{\hbar}{i} \left(z \frac{\partial}{\partial x} - x \frac{\partial}{\partial z} \right) \langle x, y, z | \Psi \rangle \\ \langle x, y, z | \hat{l}_z | \Psi \rangle = \frac{\hbar}{i} \left(x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right) \langle x, y, z | \Psi \rangle \end{cases} \quad (3)$$

となる. ここで $x = r \sin \theta \cos \varphi, y = r \sin \theta \sin \varphi, z = r \cos \theta$ によって球座標系に変換する.

$$\begin{cases} \frac{\partial}{\partial x} = \sin \theta \cos \varphi \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r} \cos \theta \cos \varphi \frac{\partial}{\partial \theta} - \frac{\sin \varphi}{r \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \varphi} \\ \frac{\partial}{\partial y} = \sin \theta \sin \varphi \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r} \cos \theta \sin \varphi \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{1}{r \sin \theta} \frac{\cos \varphi}{\partial \varphi} \\ \frac{\partial}{\partial z} = \cos \theta \frac{\partial}{\partial r} - \frac{1}{r} \sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \end{cases} \quad (4)$$

(導出略) を用いると

$$\begin{aligned}
\langle r, \theta, \varphi | \hat{l}_x | \Psi \rangle &= \frac{\hbar}{i} \left(y \frac{\partial}{\partial z} - z \frac{\partial}{\partial y} \right) \langle r, \theta, \varphi | \Psi \rangle \\
&= \frac{\hbar}{i} \left\{ r \sin \theta \sin \varphi \left(\cos \theta \frac{\partial}{\partial r} - \frac{1}{r} \sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) \right. \\
&\quad \left. - r \cos \theta \left(\sin \theta \sin \varphi \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r} \cos \theta \sin \varphi \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{1}{r} \frac{\cos \varphi}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) \right\} \langle r, \theta, \varphi | \Psi \rangle \\
&= \frac{\hbar}{i} \left(-\sin \varphi \frac{\partial}{\partial \theta} - \cot \theta \cos \varphi \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) \langle r, \theta, \varphi | \Psi \rangle
\end{aligned} \tag{5}$$

同様に y, z 成分も計算でき、まとめると

$$\begin{cases} \langle r, \theta, \varphi | \hat{l}_x | \Psi \rangle = \frac{\hbar}{i} \left(-\sin \varphi \frac{\partial}{\partial \theta} - \cot \theta \cos \varphi \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) \langle r, \theta, \varphi | \Psi \rangle \\ \langle r, \theta, \varphi | \hat{l}_y | \Psi \rangle = \frac{\hbar}{i} \left(+\cos \varphi \frac{\partial}{\partial \theta} - \cot \theta \sin \varphi \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) \langle r, \theta, \varphi | \Psi \rangle \\ \langle r, \theta, \varphi | \hat{l}_z | \Psi \rangle = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \varphi} \langle r, \theta, \varphi | \Psi \rangle \end{cases} \tag{6}$$

となる。角運動量の昇降演算子 \hat{l}_{\pm} 、大きさの演算子 \hat{l}^2 を次のように定義する：

$$\begin{cases} \hat{l}_{\pm} := \hat{l}_x \pm i \hat{l}_y \\ \hat{l}^2 := \hat{l}_x^2 + \hat{l}_y^2 + \hat{l}_z^2 \end{cases} \tag{7}$$

すると

$$\begin{aligned}
\langle r, \theta, \varphi | \hat{l}_{\pm} | \Psi \rangle &= \langle r, \theta, \varphi | \hat{l}_x | \Psi \rangle \pm i \langle r, \theta, \varphi | \hat{l}_y | \Psi \rangle \\
&= \frac{\hbar}{i} \left(-\sin \varphi \frac{\partial}{\partial \theta} - \cot \theta \cos \varphi \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) \langle r, \theta, \varphi | \Psi \rangle \pm i \frac{\hbar}{i} \left(+\cos \varphi \frac{\partial}{\partial \theta} - \cot \theta \sin \varphi \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) \langle r, \theta, \varphi | \Psi \rangle \\
&= \pm \hbar e^{\pm i \varphi} \left(\frac{\partial}{\partial \theta} \pm i \cot \theta \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) \langle r, \theta, \varphi | \Psi \rangle
\end{aligned} \tag{8}$$

$$\begin{aligned}
\langle r, \theta, \varphi | \hat{l}^2 | \Psi \rangle &= \langle r, \theta, \varphi | \hat{l}_x^2 | \Psi \rangle + \langle r, \theta, \varphi | \hat{l}_y^2 | \Psi \rangle + \langle r, \theta, \varphi | \hat{l}_z^2 | \Psi \rangle \\
&= \left[\left\{ \frac{\hbar}{i} \left(-\sin \varphi \frac{\partial}{\partial \theta} - \cot \theta \cos \varphi \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) \right\}^2 + \left\{ \frac{\hbar}{i} \left(+\cos \varphi \frac{\partial}{\partial \theta} - \cot \theta \sin \varphi \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) \right\}^2 \right. \\
&\quad \left. + \left(\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \varphi} \right)^2 \right] \langle r, \theta, \varphi | \Psi \rangle \\
&= -\hbar^2 \left\{ \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right\} \langle r, \theta, \varphi | \Psi \rangle
\end{aligned} \tag{9}$$

となる。(6), (8), (9) から角運動量演算子を球座標で表現すると動径方向に関する微分演算がまったく現れないことがわかる。よって球座標を用いた角運動量の取り扱いにおいては動径方向 r と角度方向 (θ, φ) の2つの物理系の座標であるかのように分解することができる。すると考えている粒子の Hilbert 空間 \mathcal{H} は動径部分の Hilbert 空間 $\mathcal{H}_{\text{radial}}$ と角度部分の Hilbert 空間 $\mathcal{H}_{\text{angle}}$ のテンソル積になる：

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_{\text{radial}} \otimes \mathcal{H}_{\text{angle}} \tag{10}$$

したがって球座標で表した位置座標の固有状態 $|r, \theta, \varphi\rangle \in \mathcal{H}$ は $|r\rangle \in \mathcal{H}_{\text{radial}}$ と $|\theta, \varphi\rangle \in \mathcal{H}_{\text{angle}}$ の直積である：

$$|r, \theta, \varphi\rangle = |r\rangle \otimes |\theta, \varphi\rangle \tag{11}$$

また、角運動量演算子 \hat{l} は $\mathcal{H}_{\text{angle}}$ 上の演算子と考えることができる。よって上で導いた $\hat{l}_x, \hat{l}_y, \hat{l}_z, \hat{l}_{\pm}, \hat{l}^2$ に関する式は任意の角度部分の状態 $|\Psi_{\text{angle}}\rangle \in \mathcal{H}_{\text{angle}}$ に関する次の等式に書き直せる：

$$\begin{cases} \langle \theta, \varphi | \hat{l}_x | \Psi_{\text{angle}} \rangle = \frac{\hbar}{i} \left(-\sin \varphi \frac{\partial}{\partial \theta} - \cot \theta \cos \varphi \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) \langle \theta, \varphi | \Psi_{\text{angle}} \rangle \\ \langle \theta, \varphi | \hat{l}_y | \Psi_{\text{angle}} \rangle = \frac{\hbar}{i} \left(+\cos \varphi \frac{\partial}{\partial \theta} - \cot \theta \sin \varphi \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) \langle \theta, \varphi | \Psi_{\text{angle}} \rangle \\ \langle \theta, \varphi | \hat{l}_z | \Psi_{\text{angle}} \rangle = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \varphi} \langle \theta, \varphi | \Psi_{\text{angle}} \rangle \end{cases} \quad (12)$$

$$\begin{cases} \langle \theta, \varphi | \hat{l}_{\pm} | \Psi_{\text{angle}} \rangle = \pm \hbar e^{\pm i\varphi} \left(\frac{\partial}{\partial \theta} \pm i \cot \theta \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) \langle \theta, \varphi | \Psi_{\text{angle}} \rangle \end{cases} \quad (13)$$

$$\begin{cases} \langle \theta, \varphi | \hat{l}^2 | \Psi_{\text{angle}} \rangle = -\hbar^2 \left\{ \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right\} \langle \theta, \varphi | \Psi_{\text{angle}} \rangle \end{cases} \quad (14)$$

2 球面調和関数

定義（球面調和関数）

球面調和関数 $Y_l^m(\theta, \varphi)$ は角運動量の同時固有状態 $|l, m\rangle$ を角度座標 (θ, φ) を用いて座標表示した関数である。つまり

$$Y_l^m(\theta, \varphi) := \langle \theta, \varphi | l, m \rangle \quad (15)$$

以下でこの具体的表式を計算する。方針としては、まず最高ウェイトの状態 $|l, l\rangle$ に対する球面調和関数 $Y_l^l(\theta, \varphi)$ の表式を求め、そこに下降演算子を作用させることで $Y_l^m(\theta, \varphi)$ を求める。

2.1 $Y_l^l(\theta, \varphi)$ の計算

最高ウェイトの状態に上昇演算子 \hat{l}_+ を作用させると

$$\hat{l}_{\pm} |l, m\rangle = \sqrt{(l \mp m)(l \pm m + 1)} \hbar |l, m \pm 1\rangle \quad (16)$$

より

$$\hat{l}_+ |l, l\rangle = 0 \quad (17)$$

がわかる。(13) の上昇演算子の方の等式で $|\Psi_{\text{angle}}\rangle$ を $|l, l\rangle$ とすると (17) から左辺は 0 となり、右辺に $Y_l^l(\theta, \varphi)$ が現れる。この等式から $Y_l^l(\theta, \varphi)$ は

$$\left(\frac{\partial}{\partial \theta} + i \cot \theta \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) Y_l^l(\theta, \varphi) = 0 \quad (18)$$

を満たすことがわかる。(12) の 3 つ目の等式で $|\Psi_{\text{angle}}\rangle$ を $|l, l\rangle$ とすると $\hat{l}_z |l, l\rangle = l\hbar |l, l\rangle$ から

$$\left(\frac{1}{i} \frac{\partial}{\partial \varphi} - l \right) Y_l^l(\theta, \varphi) = 0 \quad (19)$$

が成り立つことがわかる。この微分方程式の解は θ の関数 $\Theta(\theta)$ を用いて

$$Y_l^l(\theta, \varphi) = \Theta(\theta) e^{il\varphi} \quad (20)$$

と表せる。これを (18) に代入すると $\Theta(\theta)$ が満たす微分方程式

$$\Theta'(\theta) - l \cot \theta = 0 \quad (21)$$

が得られる．この解は定数 c_l を用いて

$$\Theta(\theta) = c_l \sin^l \theta \quad (22)$$

と表せるから

$$Y_l^l(\theta, \varphi) = c_l \sin^l \theta e^{il\varphi} \quad (23)$$

がわかる．球面調和関数 $Y_l^l(\theta, \varphi)$ は角運動量の同時固有状態 $|l, l\rangle$ を角度座標表示した波動関数だった．どんな波動関数は一価関数でなければならないから $Y_l^l(\theta, \varphi + 2\pi) = Y_l^l(\theta, \varphi)$ が成り立たなければならない．(23) に代入すると $e^{i2\pi l} = 1$ ．量子数 l が取ることのできる値は非負の整数または半整数だったが，この式から半整数は許されないことがわかる．次に規格化条件 $\langle l, l | l, l \rangle = 1$ から定数 c_l を決定する． $\mathcal{H}_{\text{angle}}$ 上の単位演算子 $\hat{1}_{\text{angle}}$ の分解は

$$\hat{1}_{\text{angle}} = \int_0^\pi d\theta \int_0^{2\pi} d\varphi \sin \theta |\theta, \varphi\rangle \langle \theta, \varphi| \quad (24)$$

だから規格化条件は

$$\begin{aligned} 1 &= \langle l, l | l, l \rangle = \langle l, l | \hat{1}_{\text{angle}} | l, l \rangle \\ &= \langle l, l | \left(\int_0^\pi d\theta \int_0^{2\pi} d\varphi \sin \theta |\theta, \varphi\rangle \langle \theta, \varphi| \right) | l, l \rangle \\ &= \int_0^\pi d\theta \int_0^{2\pi} d\varphi \sin \theta \langle l, l | \theta, \varphi \rangle \langle \theta, \varphi | l, l \rangle \\ &= \int_0^\pi d\theta \int_0^{2\pi} d\varphi \sin \theta |Y_l^l(\theta, \varphi)|^2 \end{aligned} \quad (25)$$

となる．実際に (23) を代入すると

$$\begin{aligned} 1 &= |c_l|^2 \int_0^\pi d\theta \int_0^{2\pi} d\varphi \sin^{2l+1} \theta \\ &= 2\pi |c_l|^2 \int_0^\pi d\theta \sin^{2l+1} \theta \\ &= 2\pi |c_l|^2 \left(\int_0^{\pi/2} d\theta \sin^{2l+1} \theta + \int_0^{\pi/2} d\theta \cos^{2l+1} \theta \right) \\ &= 2\pi |c_l|^2 \left(\frac{1}{2} B(l+1, 1/2) + \frac{1}{2} B(1/2, l+1) \right) \\ &= 2\pi |c_l|^2 B(l+1, 1/2) \\ &= 2\pi |c_l|^2 \frac{\Gamma(l+1)\Gamma(1/2)}{\Gamma(l+3/2)} \\ &= 2\pi |c_l|^2 \frac{l! \Gamma(1/2)}{(l+3/2)(l+1/2) \cdots (1/2) \Gamma(1/2)} \\ &= 4\pi |c_l|^2 \frac{2^{2l} (l!)^2}{(2l+1)!} \end{aligned} \quad (26)$$

となるから c_l は実定数 γ_l を用いて

$$c_l = e^{i\gamma_l} \left\{ \frac{1}{4\pi} \frac{(2l+1)!}{2^{2l} (l!)^2} \right\}^{1/2} \quad (27)$$

と表せる． $\gamma_l = \pi l$ と選ぶと

$$c_l = (-1)^l \left\{ \frac{1}{4\pi} \frac{(2l+1)!}{2^{2l} (l!)^2} \right\}^{1/2} \quad (28)$$

となり，球面調和関数 $Y_l^l(\theta, \varphi)$ は

$$Y_l^l(\theta, \varphi) = (-1)^l \left\{ \frac{1}{4\pi} \frac{(2l+1)!}{2^{2l} (l!)^2} \right\}^{1/2} \sin^l \theta e^{il\varphi} \quad (29)$$

と表されることがわかった．

2.2 $Y_l^m(\theta, \varphi)$ の計算

前節の結果を用いて $Y_l^m(\theta, \varphi)$ の表式を求める。最高ウェイトの状態 $|l, l\rangle$ に下降演算子を $l - m$ 回作用させると (16) から

$$\begin{aligned}
\hat{j}_-^{l-m} |l, l\rangle &= \sqrt{(l+l)(l-l+1)} \hbar \hat{j}_-^{l-m-1} |l, l-1\rangle \\
&= \sqrt{2l \cdot 1} \sqrt{\{l+(l-1)\}\{l-(l-1)+1\}} \hbar^2 \hat{j}_-^{l-m-2} |l, l-2\rangle \\
&= \sqrt{2l(2l-1) \cdot 1(1+1)} \hbar^2 \hat{j}_-^{l-m-2} |l, l-2\rangle \\
&\vdots \\
&= \sqrt{2l(2l-1) \cdots (l+m+1)} \sqrt{(l-m)!} \hbar^{l-m} |l, m\rangle \\
&= \left\{ \frac{(2l)!(l-m)!}{(l+m)!} \right\}^{1/2} \hbar^{l-m} |l, m\rangle
\end{aligned} \tag{30}$$

となる。つまり

$$|l, m\rangle = \left\{ \frac{1}{(2l)!} \frac{(l+m)!}{(l-m)!} \right\}^{1/2} \left(\frac{\hat{l}_-}{\hbar} \right)^{l-m} |l, l\rangle \tag{31}$$

が成り立つ。左から $\langle \theta, \varphi |$ をかけると左辺は球面調和関数 $Y_l^m(\theta, \varphi)$ になり、右辺は (13) から計算でき

$$\begin{aligned}
Y_l^m(\theta, \varphi) &= \left\{ \frac{1}{(2l)!} \frac{(l+m)!}{(l-m)!} \right\}^{1/2} \frac{1}{\hbar^{l-m}} \langle \theta, \varphi | \hat{l}_-^{l-m} |l, l\rangle \\
&= \left\{ \frac{1}{(2l)!} \frac{(l+m)!}{(l-m)!} \right\}^{1/2} \left\{ -e^{-i\varphi} \left(\frac{\partial}{\partial \theta} - i \cot \theta \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) \right\}^{l-m} Y_l^l(\theta, \varphi)
\end{aligned} \tag{32}$$

となる。ここに (29) を代入すると

$$\begin{aligned}
Y_l^m(\theta, \varphi) &= \left\{ \frac{1}{(2l)!} \frac{(l+m)!}{(l-m)!} \right\}^{1/2} \left\{ -e^{-i\varphi} \left(\frac{\partial}{\partial \theta} - i \cot \theta \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) \right\}^{l-m} (-1)^l \left\{ \frac{1}{4\pi} \frac{(2l+1)!}{2^{2l}(l!)^2} \right\}^{1/2} \sin^l \theta e^{il\varphi} \\
&= (-1)^m \left\{ \frac{2l+1}{4\pi} \frac{(l+m)!}{(l-m)!} \right\}^{1/2} \frac{1}{2^l l!} \left\{ e^{-i\varphi} \left(\frac{\partial}{\partial \theta} - i \cot \theta \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) \right\}^{l-m} \sin^l \theta e^{il\varphi}
\end{aligned} \tag{33}$$

となる。この右辺の微分について

$$\begin{aligned}
e^{-i\varphi} \left(\frac{\partial}{\partial \theta} - i \cot \theta \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) \sin^l \theta e^{il\varphi} &= e^{i(l-1)\varphi} \left(\frac{\partial}{\partial \theta} + l \cot \theta \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) \sin^l \theta \\
\left\{ e^{-i\varphi} \left(\frac{\partial}{\partial \theta} - i \cot \theta \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) \right\}^2 \sin^l \theta e^{il\varphi} &= e^{-i\varphi} \left(\frac{\partial}{\partial \theta} - i \cot \theta \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) e^{i(l-1)\varphi} \left(\frac{\partial}{\partial \theta} + l \cot \theta \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) \sin^l \theta \\
&= e^{i(l-2)\varphi} \left(\frac{\partial}{\partial \theta} + (l-1) \cot \theta \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) \left(\frac{\partial}{\partial \theta} + l \cot \theta \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) \sin^l \theta
\end{aligned} \tag{34}$$

と順番に考えていくと

$$\begin{aligned}
\left\{ e^{-i\varphi} \left(\frac{\partial}{\partial \theta} - i \cot \theta \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) \right\}^{l-m} \sin^l \theta e^{il\varphi} &= \\
e^{im\varphi} \left(\frac{\partial}{\partial \theta} + (m+1) \cot \theta \right) \left(\frac{\partial}{\partial \theta} + (m+2) \cot \theta \right) \cdots \left(\frac{\partial}{\partial \theta} + l \cot \theta \right) \sin^l \theta
\end{aligned} \tag{35}$$

が成り立つことがわかる。この右辺に次の恒等式を用いる：

$$\left(\frac{\partial}{\partial \theta} + k \cot \theta \right) f(\theta) = \frac{1}{\sin^k \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} (\sin^k \theta f(\theta)) \tag{36}$$

この恒等式は右辺の微分を実行することで示すことができる：

$$\begin{aligned}
\frac{1}{\sin^k \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} (\sin^k \theta f(\theta)) &= \frac{1}{\sin^k \theta} (k \sin^{k-1} \theta \cos \theta f(\theta) + \sin^k \theta f'(\theta)) \\
&= f'(\theta) + k \cot \theta f(\theta) \\
&= \left(\frac{\partial}{\partial \theta} + k \cot \theta \right) f(\theta)
\end{aligned} \tag{37}$$

(35) に用いると

$$\begin{aligned}
&e^{im\varphi} \left(\frac{\partial}{\partial \theta} + (m+1) \cot \theta \right) \left(\frac{\partial}{\partial \theta} + (m+2) \cot \theta \right) \cdots \left(\frac{\partial}{\partial \theta} + l \cot \theta \right) \sin^l \theta \\
&= e^{im\varphi} \left(\frac{\partial}{\partial \theta} + (m+1) \cot \theta \right) \cdots \left(\frac{\partial}{\partial \theta} + (l-1) \cot \theta \right) \frac{1}{\sin^l \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \sin^{2l} \theta \\
&= e^{im\varphi} \left(\frac{\partial}{\partial \theta} + (m+1) \cot \theta \right) \cdots \left(\frac{\partial}{\partial \theta} + (l-2) \cot \theta \right) \frac{1}{\sin^{l-1} \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin^{l-1} \theta \frac{1}{\sin^l \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \sin^{2l} \theta \right) \\
&= e^{im\varphi} \left(\frac{\partial}{\partial \theta} + (m+1) \cot \theta \right) \cdots \left(\frac{\partial}{\partial \theta} + (l-2) \cot \theta \right) \frac{1}{\sin^{l-1} \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \sin^{2l} \theta \right) \\
&= e^{im\varphi} \left(\frac{\partial}{\partial \theta} + (m+1) \cot \theta \right) \cdots \left(\frac{\partial}{\partial \theta} + (l-3) \cot \theta \right) \frac{1}{\sin^{l-2} \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left\{ \sin^{l-2} \theta \frac{1}{\sin^{l-1} \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \sin^{2l} \theta \right) \right\} \\
&= e^{im\varphi} \left(\frac{\partial}{\partial \theta} + (m+1) \cot \theta \right) \cdots \left(\frac{\partial}{\partial \theta} + (l-3) \cot \theta \right) \frac{1}{\sin^{l-2} \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left\{ \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \sin^{2l} \theta \right) \right\} \\
&\quad \vdots \\
&= e^{im\varphi} \frac{1}{\sin^m \theta} \left(\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \right)^{l-m} \sin^{2l} \theta \\
&= e^{im\varphi} \frac{1}{\sin^m \theta} \frac{1}{\sin^m \theta} \left(\frac{1}{\sin \theta} \frac{d(\cos \theta)}{d\theta} \frac{\partial}{\partial(\cos \theta)} \right)^{l-m} \sin^{2l} \theta \\
&= (-1)^{l-m} e^{im\varphi} \frac{1}{\sin^m \theta} \left(\frac{\partial}{\partial(\cos \theta)} \right)^{l-m} \sin^{2l} \theta \\
&= (-1)^{l-m} e^{im\varphi} (1 - \cos^2 \theta)^{-m/2} \left(\frac{\partial}{\partial(\cos \theta)} \right)^{l-m} (1 - \cos^2 \theta)^l \\
&= (-1)^m e^{im\varphi} 2^l l! P_l^{-m}(\cos \theta)
\end{aligned} \tag{38}$$

となる．ここで $P_l^{-m}(x)$ は Legendre 陪関数である：

$$P_l^{-m}(x) := \frac{1}{2^l l!} (1 - x^2)^{-m/2} \left(\frac{d}{dx} \right)^{l-m} (x^2 - 1)^l \tag{39}$$

よって (33) に代入すると

$$Y_l^m(\theta, \varphi) = \left\{ \frac{2l+1}{4\pi} \frac{(l+m)!}{(l-m)!} \right\}^{1/2} P_l^{-m}(\cos \theta) e^{im\varphi} \tag{40}$$

を得る．また Legendre 陪関数に関する等式

$$P_l^{-m}(x) = (-1)^m \frac{(l-m)!}{(l+m)!} P_l^m(x) \tag{41}$$

を用いると球面調和関数は次のように表せる．

$$Y_l^m(\theta, \varphi) = \left\{ \frac{2l+1}{4\pi} \frac{(l+m)!}{(l-m)!} \right\}^{1/2} P_l^{-m}(\cos \theta) e^{im\varphi} \quad (42)$$

$$= (-1)^m \left\{ \frac{2l+1}{4\pi} \frac{(l-m)!}{(l+m)!} \right\}^{1/2} P_l^m(\cos \theta) e^{im\varphi} \quad (43)$$