

数学・物理通信

5卷4号 2015年6月

編集 新関章三・矢野 忠

2015年6月1日

目次 (Contents)

| | | |
|----------------------------------|------|----|
| 1. 自由度の導入 | 武藤 徹 | 2 |
| 2. 量子力学における Rosen-Morse ポテンシャル問題 | 世戸憲治 | 9 |
| 3. 三角関数の冪乗の有限和 | 中西 襄 | 20 |
| 4. 編集後記 | 新関章三 | 31 |

| | | |
|---|------------------|----|
| 1. The Increase of Degrees of Freedom | Tohru MUTOH | 2 |
| 2. Rosen-Morse Potential Problem in Quantum Mechanics | Kenji SETO | 9 |
| 3. Finite Sums of Powers of Trigonometrical Functions | Noboru NAKANISHI | 20 |
| 4. Editorial Comments | Shozo NIIZEKI | 31 |

自由度の導入

武藤 徹¹

The Increase of Degrees of Freedom

Tohru MUTOH²

目次

1. はじめに
2. 3次方程式の解法
3. 1階線形微分方程式
4. 1次分数関数の合成
5. おわりに
6. 補遺 1 自由度とは
7. 補遺 2 自由度を増やす
8. 補遺 3 定数変化法
9. 補遺 4 一次分数変換

1 はじめに

『数学・物理通信』5巻3号の矢野氏のエッセイ「虚数とカルダノの公式」を読んで私の年来の所見を述べてみたいと考えました。

それはカルダノの解の公式を導くときに $x = y + z$ とおいて解くのが一般的ですが³、これは「自由度の導入」と私が呼んでいる方法の一つの例であると思っています⁴。

詳しい説明をする前に自由度の導入をすることによって数学の課題を解くという例をまず項目だけ上げておきます。その後にそれらの項目の少し詳細な説明を私の著書の該当箇所を引用しながら述べます。

まず、今回の問題になった3次方程式のカルダノの公式です。 $x = y + z$ とおくのはフォンタナの思いつきだそうですが、これが私のいう自由度の導入の第1の例です。また1階の線形微分方程式で解 y を $y = uv$ とおくのが第2の例です。1次分数変換の合成をすれば、その係数が行列の積で表されるのは第3の例です。

では以下の節においてこれらを取りあげて説明します（なお、補遺1は武藤が、補遺2-4は編集者（矢野）がつけました）。

2 3次方程式の解法

私は小著『数学読本』[1]で次のように述べました。

3次方程式は、すべて

$$x^3 = px + q$$

の形に変形できます。具体例で考えてみましょう。

¹数学思想史家

²mutoh.ab@wine.ocn.ne.jp

³矢野氏は $x = -(y + z)$ とおいている。

⁴自由度について補遺1で説明をした。

(例) $x^3 + 6x^2 + 6x + 1 = 0$ を解くことを考えます. $x = t + a$ とおくと

$$(t + a)^3 + 6(t + a)^2 + 6(t + a) + 1 = 0$$
$$t^3 + (3a + 6)t^2 + (3a^2 + 12a + 6)t + (a^3 + 6a^2 + 6a + 1) = 0$$

$a = -2$ とすると

$$t^3 - 6t + 5 = 0 \quad \text{あるいは} \quad t^3 = 6t - 5$$

となります.

こうして, 任意の 3 次方程式を解く課題は, $x^3 = px + q$ を解く課題に帰着します.

それでは $x^3 = px + q$ を解きましょう.

ここで, この 3 次方程式の解を $x = u + v$ とおきますと, u を自由に決めたり v を自由に決めたり, あるいは u, v の間に, ある関係を決めたりできるようになります. このことを **自由度が生みだされた**ということにしましょう⁵. このとき, 方程式は

$$u^3 + v^3 + 3uv(u + v) = p(u + v) + q$$

となります. ここで, 自由度を使って

$$3uv = p$$

とおくと, 自動的に $u^3 + v^3 = q$ となります. そこで,

$$u^3 + v^3 = q$$
$$u^3 v^3 = \left(\frac{p}{3}\right)^3$$

となりますから, 2 次方程式の根と係数との関係から, u^3, v^3 は,

$$t^2 - qt + \left(\frac{p}{3}\right)^3 = 0$$

の 2 根であることがわかります. そこで, 2 次方程式の根の公式から

$$u^3 = \frac{q}{2} + \sqrt{\left(\frac{q}{2}\right)^2 - \left(\frac{p}{3}\right)^3}$$
$$v^3 = \frac{q}{2} - \sqrt{\left(\frac{q}{2}\right)^2 - \left(\frac{p}{3}\right)^3}$$

それぞれの 3 乗根のうちの 1 つを u_0, v_0 とすると,

$$u = u_0, \quad u_0\omega, \quad u_0\omega^2$$
$$v = v_0, \quad v_0\omega, \quad v_0\omega^2$$

となります. このうち, $3uv = p$ となる組をとると,

$$x = u_0 + v_0, \quad u_0\omega + v_0\omega^2, \quad u_0\omega^2 + v_0\omega$$

となります. ここで, $\omega = \frac{-1 + \sqrt{3}i}{2}$ で, また $\omega^2 = \frac{-1 - \sqrt{3}i}{2}$, $\omega^3 = 1$ です.

⁵この場合に自由度が増えたことについては数学者はみなその意義を理解している. 補遺 2 にその一端を説明した.

3 1 階線形微分方程式

これについては小著『数学読本』III [2] につきのように書きました.

$$y' + P(x)y + R(x) = 0$$

の形の微分方程式を, 1 階線形微分方程式という. ここで, $y' = \frac{dy}{dx}$ です.

これを解くにはいく通りもの方法がありますが, ここでは, 自由度を利用する方法を考えましょう. 微分方程式の解を

$$y = uv$$

とおくと, 自由度が 1 つ生じます. u, v の一方を自由に決めるとか, u, v の間に 1 つの条件を設けることができます.

このとき, $y' = u'v + uv'$, そこで

$$u'v + uv' + P(x)uv + R(x) = 0$$

$$u'v + u[v' + P(x)v] + R(x) = 0$$

となります.

ここで, 自由度を使って上の微分方程式の [] 中の式が 0 となるように

$$v' + P(x)v = 0$$

とします. $v \neq 0$ としても一般性を失いませんから,

$$\frac{dv}{v} = -P(x)dx$$

$$\log |v| = -\int P(x)dx$$

$P(x)$ の原始関数の 1 つを $p(x)$ と表すことにすれば⁶,

$$\log |v| = -p(x) + C$$

$$|v| = e^C e^{-p(x)}$$

$$v = \pm e^C e^{-p(x)}$$

ここで, $v = e^{-p(x)}$ としても一般性を失いません. そこで

$$u' e^{-p(x)} = -R(x)$$

$$u' = -R(x) e^{p(x)}$$

$$u = C - \int R(x) e^{p(x)} dx$$

そこで

$$y = uv = e^{-p(x)} \left[C - \int R(x) e^{p(x)} dx \right]$$

となります.

⁶すなわち $\int P(x)dx = p(x) + C$, $C =$ 積分定数 である.

4 1次分数関数の合成

1次分数関数とは

$$y = \frac{ax+b}{cx+d}$$
$$z = \frac{ey+f}{gy+h}$$

のような分子と分母が1次関数で表される関数をいいます。このときつぎのような関数の合成の例を考えてみましょう [3]⁷。

(例) 上に挙げた分数関数 y は x の関数であり、分数関数 z は y の関数です。分数関数 z の y に x の関数としての y を代入してみます。すなわち、関数の合成をおこないます。

$$z = \frac{e \frac{ax+b}{cx+d} + f}{g \frac{ax+b}{cx+d} + h}$$
$$= \frac{e(ax+b) + f(cx+d)}{g(ax+b) + h(cx+d)}$$
$$= \frac{(ae+cf)x + (be+df)}{(ag+ch)x + (bg+dh)}$$

となります。

おもしろいことに、上の例の合成関数の係数は

$$\begin{pmatrix} e & f \\ g & h \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} ae+cf & be+df \\ ag+ch & bg+dh \end{pmatrix}$$

と計算されます。

このわけを考えてみましょう。

$x = \frac{z_1}{x_2}, y = \frac{y_1}{y_2}, z = \frac{z_1}{z_2}$ と表せば自由度が生まれます。

このとき、

$$\frac{y_1}{y_2} = \frac{\frac{ax_1}{x_2} + b}{\frac{cx_1}{x_2} + d} = \frac{ax_1 + bx_2}{cx_1 + dx_2}$$

ここで、自由度を生かして、 $y_1 = ax_1 + bx_2$ とすれば、

$$y_2 = cx_1 + dx_2$$

が成り立ちます。そこで

$$\begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix}$$

がいえます。同様に

$$\begin{pmatrix} z_1 \\ z_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} e & f \\ g & h \end{pmatrix} \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \end{pmatrix}$$

もいえますから、

$$\begin{pmatrix} z_1 \\ z_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} e & f \\ g & h \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix}$$
$$= \begin{pmatrix} ae+cf & be+df \\ ag+ch & bg+dh \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix}$$

となるのです。1次分数関数の合成がこのように行列の積として表せるのは意外です。

⁷1次分数変換がどのような分野で現れるかを補遺3に述べた。

5 おわりに

このような自由度の導入のヒントは1階線形微分方程式の解法で「定数変化法」にあります⁸。三省堂から「体系が見えてくる『数学読本』 [1] [2] [3]」を出版したとき、数学は「美しいシンフォニー」と表現して、数学によくでてくる共通の概念を『主題』としてその繰り返しに注目しました。

自由度の導入だけではなく、『測定値の公理』、『加法定理』などが繰り返し、現れることに気づいたのです。コルモゴロフの『確率論の公理』も、測定値の公理の拡張でした。「確率の加法定理」は「真理値の加法定理」の拡張であって、これも「面積の加法定理」の拡張にあたります⁹。

(2015. 4. 13)

6 補遺1 自由度とは

本文で挙げた3つの例では、すべて自由度は1でした。

例えば、2次関数を

$$f(x) = ax^2 + bx + c, \quad (a \neq 0)$$

とすると、 a, b, c は自由に選べます。このときは自由度は3です。

a, b, c を相異なる実数の定数とし、 p, q, r を未定の定数として2次関数 $f(x)$ をつぎのように定義します。

$$f(x) = p(x-b)(x-c) + q(x-c)(x-a) + r(x-a)(x-b)$$

いまこの2次関数 $f(x)$ が点 $(a, f(a)), (b, f(b)), (c, f(c))$ を通るように p, q, r を決定すれば

$$f(a) = p(a-b)(a-c) = A$$

$$f(b) = q(b-c)(b-a) = B$$

$$f(c) = r(c-a)(c-b) = C$$

が成り立ちますので、 p, q, r を決めることができます。この場合にはやはりパラメータ p, q, r が3つありますので、自由度は3です。または3つの A, B, C を自由に選ぶと考えることもできます。このとき

$$f(x) = \frac{A(x-b)(x-c)}{(a-b)(a-c)} + \frac{B(x-c)(x-a)}{(b-c)(b-a)} + \frac{C(x-a)(x-b)}{(c-a)(c-b)}$$

となります。これは2次のラグランジュの補間公式となっています。

$n+1$ 個のパラメータがあるときは n 次のラグランジュの補間公式に一般化できますが、それは参考文献に譲ることにしましょう [5]. (武藤 徹)

7 補遺2 自由度を増やす

前著「虚数とカルダノの公式」の補遺で述べたことだが、[4]では未知数 x を $x = y + z$ とおいて、 $y + z$ を求めることによって

$$x^3 + px + q = 0$$

⁸定数変化法の説明を補遺3で述べる。

⁹編集者(矢野)による注: 武藤先生のここで述べられている『主題』は多岐にわたるので、ここでは自由度の導入だけについて述べられているが、この多岐にわたる『主題』に関心をもたれた方々は武藤先生の『数学読本』を参照されたい。なお、補遺1は武藤によるが、その他の補遺はすべて編集者(矢野)がつけた。

を解くというこのアイディアは自由度を増やしたものだという点については著者（小島）も『一つしかなかった未知数 x を，二つの未知数 y と z との和で表すという奇抜なアイディアであり，「フォンタナが考えつかなければ，あと数百年は誰も気がつかなかったかもしれません』と述べている。

ただ，武藤先生の「数学の他の分野でも自由度を導入するという手法が数学でよく行われている」という所見は優れている。（矢野 忠）

8 補遺3 一次分数変換

一次分数変換のことを知ったのは四元数のことを調べていたときに *Rotations, Quaternions, and Double Groups* [7] の第6章の冒頭に双一次変換 (bilinear transformation) という節があり，そこに説明があった¹⁰。

そのときになぜこの変換の係数が行列の積の演算と同じになるのが不思議であったので，その理由を調べたいと思って複素解析（関数論）の本や射影幾何学の本を調べたが，十分に理解できたとは思わないうちに関心が薄れてしまっていた。

それが武藤先生とのメールの交換から自由度の導入の一例となることを知った次第である。

なお，射影幾何学のことを述べたインターネットのサイトでは，

$$k \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix}$$

と左辺の列行列の前に定数 k を残しているものもある。これはこの定数だけの自由度が残っていると考えるからであろう。 $k = 1$ とおけば，4節の結果となる。

話が1次分数変換から外れるが，行列の積をどういう風に導入するかについてはいろいろのやり方がある。

その導入のしかたとして1次変換をひき続けて行うことで導入する方法がある。この方法ははじめて行列の積の演算を学んだときに矢野健太郎先生 [8] が使われていたやり方であった。

そのときにはなぜこんな面倒くさい手続きで行列の積の演算を教えるのか疑問に思ったものだったが，行列の積の演算が天下りで出てくるわけではないので，このプロセスは学生ときには冗長に思えたけれども欠くことのできない説明であったのだといまにしてわかる。（矢野 忠）

9 補遺4 定数変化法

武藤先生の先生であった矢野健太郎先生の著書『微分方程式』 [6] にしたがって定数変化法を見ておこう。1階線形常微分方程式

$$y' + P(x)y = Q(x)$$

を解くことを考えよう。

この微分方程式の特殊な場合，右辺の $Q(x) = 0$ のとき，をまず考えよう。このとき解くべき微分方程式は

$$y' + P(x)y = 0$$

となる。

¹⁰Altman [7] によれば，この双一次変換は一次分数変換 (linear fractional transformation) とか Möbius 変換または射影変換という名前でも呼ばれている。

この場合には微分方程式が変数分離できて

$$\begin{aligned}\frac{dy}{y} &= -P(x)dx \\ \int \frac{dy}{y} &= - \int P(x)dx \\ \ln y &= - \int P(x)dx \\ y &= Ae^{-\int P(x)dx}, \quad A = \text{定数}\end{aligned}$$

つぎに、一般の $Q(x) \neq 0$ の場合を考えよう。この場合には A はもはや定数ではありえない。それで $A = A(x)$ と A は変数 x の関数とみることとする（自由度の導入）。すなわち

$$y = A(x) e^{-\int P(x)dx}$$

と仮定しよう。そうすると

$$y' = (A' - AP) e^{-\int P dx}$$

ここで、 A, P はすべて x の関数であるが、その変数 x を省略している。

これらを元の微分方程式に代入すれば、

$$\begin{aligned}(A' - AP) e^{-\int P dx} + AP e^{-\int P dx} &= Q \\ (A' - AP + AP) &= Q e^{\int P dx} \\ A' &= Q e^{\int P dx} \\ A &= \int Q e^{\int P dx} dx + C\end{aligned}$$

したがって、微分方程式の解として

$$y = e^{-\int P dx} \left[\int Q e^{\int P dx} dx + C \right]$$

が得られる。(矢野 忠)

参考文献

- [1] 武藤 徹,『数学読本』I (三省堂, 1998) 50-51
- [2] 武藤 徹,『数学読本』III (三省堂, 1998) 119-120
- [3] 武藤 徹,『数学読本』II (三省堂, 1998) 96
- [4] 小島寛之,『天才ガロアの発想力』(技術評論社, 2010) 140-148
- [5] 森口繁一,『数値計算工学』(岩波書店, 1989) 74-75
- [6] 矢野 健太郎,『微分方程式』(裳華房, 1959) 17-18
- [7] S. L. Altman, *Rotations, Quaternions, and Double Groups* (Dover, 2005) 110-111, この書の初版は1986年である。
- [8] 矢野 健太郎,『代数学と幾何学』(裳華房, 1958) 100-102

量子力学における Rosen-Morse ポテンシャル問題

世戸 憲治 *1

Rosen-Morse Potential Problem in Quantum Mechanics

Kenji SETO*2

1 はじめに

ここでは、量子力学における Rosen-Morse ポテンシャル問題について解説する。このポテンシャルは古くから知られたものであるが、近年になって、量子色力学 (QCD) における quark-gluon 間のポテンシャルの 1 つの候補として一躍有名になったものである。このポテンシャル $V(x)$ は、エネルギーの次元を持つ 2 個の正定数 V_1, V_2 , および、長さの次元を持つ正定数 x_0 を用いて

$$V(x) = V_1 \tanh(x/x_0) - \frac{V_2}{\cosh^2(x/x_0)} \quad (1.1)$$

と定義される。この右辺 2 項目は、現著者の「Legendre 関数と量子力学のポテンシャル問題 (1)」(「数学・物理通信」4 巻 8 号) で扱ったものであるが、これに新たに 1 項目が付け加わったものである。

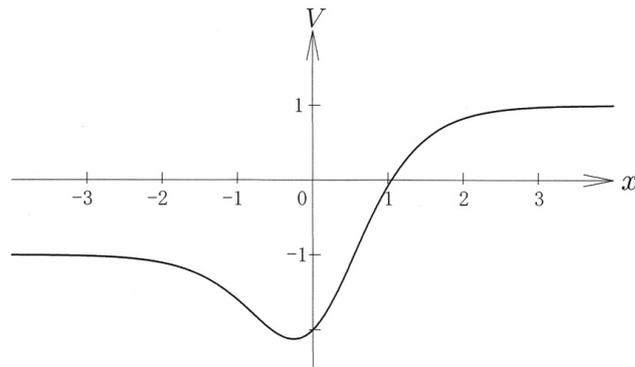


図 1 Rosen-Morse ポテンシャル ((1.1) 式で無次元化し, $V_1 = 1, V_2 = 2$ とした場合)

図 1 に示すように、このポテンシャルは、 $x \rightarrow \pm\infty$ で、 $V(x) \rightarrow \pm V_1$ となり、また、 $2V_2 > V_1$ のとき、 $x = -x_0 \operatorname{arctanh}(V_1/2V_2)$ で、 $-V_1$ より小さい最小値 $V_{\min} = -V_2 - (V_1^2/4V_2)$ をとる。

このときの Schrödinger 方程式は、電子の質量、エネルギーを、それぞれ、 m, E として、

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V_1 \tanh(x/x_0) - \frac{V_2}{\cosh^2(x/x_0)} \right] \Psi = E \Psi \quad (1.2)$$

と書かれる。以下、数式簡素化のため、座標変数 x , および、ポテンシャルの大きさ V_1, V_2 , エネルギー E を無次元化し、改めて、

$$\frac{x}{x_0} \rightarrow x, \quad \frac{2mx_0^2}{\hbar^2} V_1 \rightarrow V_1, \quad \frac{2mx_0^2}{\hbar^2} V_2 \rightarrow V_2, \quad \frac{2mx_0^2}{\hbar^2} E \rightarrow E \quad (1.3)$$

*1 北海学園大学名誉教授

*2 seto@pony.ocn.ne.jp

と置き直すことにする。このときの方程式は、

$$\left[\frac{d^2}{dx^2} + E - V_1 \tanh(x) + \frac{V_2}{\cosh^2(x)} \right] \Psi = 0 \quad (1.4)$$

となる。この方程式を解くにあたり、エネルギー E の場合分けが必要になる。第1に、 $V_{\min} < E < -V_1$ の束縛状態のとき、第2に、 $-V_1 < E < V_1$ の散乱状態のとき、最後に、 $V_1 < E$ の散乱状態のときと分けて、以下の節で解いていくことにする。

2 $V_{\min} < E < -V_1$ の束縛状態のとき

2.1 固有値と固有関数

初めに、定数 a を用いて、波動関数を Ψ から Φ に

$$\Psi = e^{ax} \Phi \quad (2.1)$$

と変換し、方程式 (1.4) を

$$\left[\frac{d^2}{dx^2} + 2a \frac{d}{dx} + a^2 + E - V_1 \tanh(x) + \frac{V_2}{\cosh^2(x)} \right] \Phi = 0 \quad (2.2)$$

の形にする。この上で、独立変数を x から ξ に、

$$\xi = \tanh(x) \quad (2.3)$$

と変換すると、方程式は、

$$\left[(1 - \xi^2) \frac{d^2}{d\xi^2} + 2(a - \xi) \frac{d}{d\xi} + V_2 + \frac{a^2 + E - V_1 \xi}{1 - \xi^2} \right] \Phi = 0 \quad (2.4)$$

となる。ここで、さらに、定数 b を用いて、 Φ から φ に

$$\Phi = (1 - \xi^2)^{b/2} \varphi \quad (2.5)$$

と変換すると、方程式は、

$$\left[(1 - \xi^2) \frac{d^2}{d\xi^2} + 2(a - \xi - b\xi) \frac{d}{d\xi} + V_2 - b + \frac{b^2 \xi^2 - (2ab + V_1) \xi + a^2 + E}{1 - \xi^2} \right] \varphi = 0 \quad (2.6)$$

となる。これまで、定数 a , b について何も述べてこなかったが、ここで、この式の大括弧中の最後の項が整式になるように、

$$2ab = -V_1, \quad a^2 + b^2 = -E \quad (2.7)$$

を要請すると、この式は、

$$\left[(1 - \xi^2) \frac{d^2}{d\xi^2} + 2(a - \xi - b\xi) \frac{d}{d\xi} + V_2 - b(b + 1) \right] \varphi = 0 \quad (2.8)$$

となる。ここでさらに独立変数を

$$\zeta = \frac{1 - \xi}{2} \quad (2.9)$$

と変換すると,

$$\left[\zeta(1-\zeta) \frac{d^2}{d\zeta^2} + [-a+b+1-2(b+1)\zeta] \frac{d}{d\zeta} + V_2 - b(b+1) \right] \varphi = 0 \quad (2.10)$$

となり, これは超幾何関数が満たす微分方程式になる. ちなみに, 超幾何関数 $u = F(\alpha, \beta, \gamma; \zeta)$ が満たす方程式は,

$$\left[\zeta(1-\zeta) \frac{d^2}{d\zeta^2} + [\gamma - (\alpha + \beta + 1)\zeta] \frac{d}{d\zeta} - \alpha\beta \right] u = 0 \quad (2.11)$$

であるので, これら変数の間には,

$$\alpha + \beta = 2b + 1, \quad \alpha\beta = b(b+1) - V_2, \quad \gamma = -a + b + 1 \quad (2.12)$$

の関係があるとよい.

以上をまとめると, 波動関数 Ψ は, 規格化定数を除いて,

$$\Psi = 2^{-b} e^{ax} \cosh^{-b}(x) F(\alpha, \beta, \gamma; \frac{1}{2}(1 - \tanh x)) \quad (2.13)$$

と解けたことになる^{*3}. ここで, $a, b, \alpha, \beta, \gamma$ は, (2.7) (2.12) 式から求められるが, その前に, 波動関数に対する境界条件を調べておく. 波動関数 Ψ は $x \rightarrow \pm\infty$ でゼロでなければならず, すなわち,

$$\Psi \xrightarrow{x \rightarrow \pm\infty} 0 \quad (2.14)$$

を満たす必要がある.

初めに, $x \rightarrow \infty$ の方から, このときは, 超幾何関数の部分が 1 となるので, その漸近形は,

$$\Psi \sim e^{(a-b)x} \quad (2.15)$$

となる. これが $x \rightarrow \infty$ でゼロとなるためには,

$$a - b < 0 \quad (2.16)$$

であるとよい. (2.7) 式から a と b は異符号であるが, この結果から $a < 0 < b$ となる.

つぎに, $x \rightarrow -\infty$ の方であるが, (2.13) 式のままでは見積もれないので, 超幾何関数の部分を Gauss の変換式を用いて

$$\begin{aligned} \Psi = 2^{-b} e^{ax} \cosh^{-b}(x) & \left[\frac{\Gamma(\gamma)\Gamma(\alpha + \beta - \gamma)}{\Gamma(\alpha)\Gamma(\beta)} \left(\frac{1 + \tanh(x)}{2} \right)^{\gamma - \alpha - \beta} F(\gamma - \alpha, \gamma - \beta, \gamma - \alpha - \beta + 1; \frac{1}{2}(1 + \tanh x)) \right. \\ & \left. + \frac{\Gamma(\gamma)\Gamma(\gamma - \alpha - \beta)}{\Gamma(\gamma - \alpha)\Gamma(\gamma - \beta)} F(\alpha, \beta, \alpha + \beta - \gamma + 1; \frac{1}{2}(1 + \tanh x)) \right] \end{aligned} \quad (2.17)$$

の形にしておく. この式で, $x \rightarrow -\infty$ の漸近形を作ると, 超幾何関数の部分は 1 となり, また, (2.12) 式より, $\gamma - \alpha - \beta = -(a + b)$ となるので,

$$\Psi \sim \frac{\Gamma(\gamma)\Gamma(a+b)}{\Gamma(\alpha)\Gamma(\beta)} e^{-(a+b)x} + \frac{\Gamma(\gamma)\Gamma(-a-b)}{\Gamma(\gamma-\alpha)\Gamma(\gamma-\beta)} e^{(a+b)x} \quad (2.18)$$

となる. ここで, $a + b$ の符号が問題になる. (2.7) 式から $(a + b)^2 = -E - V_1$ となり, $a + b$ の符号自体は決まらないが, ここでは正の方をとることにする^{*4}. このとき, (2.18) 式の 2 項目は, $x \rightarrow -\infty$ でゼロに収束す

^{*3} 超幾何関数の微分方程式 (2.11) にはもう 1 つの独立解が存在する. これについては「付録 1」で述べることにする.

^{*4} 負の方を採用した場合を「付録 2」に示すが, 結果的にはまったく同じものになる.

るが、1項目は発散してしまう。これを防ぐには、 $\Gamma(\alpha)$ あるいは、 $\Gamma(\beta)$ のどちらかが極の位置にあればよい。(2.11) (2.13) 式に現れる超幾何関数は、 α と β の入れ替えに對し対称なので、ここでは、 $\Gamma(\alpha)$ が極の位置にあるものとし、

$$\alpha = -n, \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (2.19)$$

とおくことにする。

これまでの結果から、 $a, b, \alpha, \beta, \gamma$ を決めることにするが、その前に数式簡素化のため、

$$V_2 = \nu(\nu + 1) \quad (2.20)$$

とおいたときの正の方の ν を

$$\nu = \sqrt{V_2 + \frac{1}{4}} - \frac{1}{2} \quad (2.21)$$

と定義し、また、

$$\mu = V_1/2 \quad (2.22)$$

と定義しておく。

α は (2.19) 式ですでに決まっているので、(2.12) の第1式、第2式から β を消去して、 b を決めると、 $b > 0$ に注意して、

$$b = \nu - n \quad (2.23)$$

となり、 β は同じ (2.12) の第1式から、

$$\beta = 2\nu + 1 - n \quad (2.24)$$

となり、 a は (2.7) の第1式から、

$$a = -\frac{\mu}{\nu - n} \quad (2.25)$$

となり、最後に γ は、(2.12) の第3式より、

$$\gamma = \frac{\mu}{\nu - n} + \nu - n + 1 \quad (2.26)$$

となる。また、このときの量子化されたエネルギー E_n は (2.7) の第2式より、

$$E_n = -\frac{\mu^2}{(\nu - n)^2} - (\nu - n)^2 \quad (2.27)$$

となる。この E_n は、[相加平均] \geq [相乗平均] の関係を使うと、 $-V_1$ 以下であることが証明される。

なお、これらの式に含まれる非負整数 n の値は、(2.23) 式の b が正なので、 $n < \nu$ であるが、さらにここでは、 $a + b > 0$ としているので、

$$a + b = -\frac{\mu}{\nu - n} + \nu - n > 0 \quad (2.28)$$

の関係を満たさなければならず、

$$n < \nu - \sqrt{\mu} \quad (2.29)$$

と、その最大値はこの式で決められる。

これらの結果を (2.13) 式に代入し、エネルギー固有値 E_n に属する固有関数を Ψ_n と記すことにして、

$$\Psi_n = 2^{-(\nu-n)} e^{-\mu/(\nu-n)x} \cosh^{-(\nu-n)}(x) F\left(-n, 2\nu + 1 - n, \frac{\mu}{\nu - n} + \nu - n + 1; \frac{1}{2}(1 - \tanh x)\right) \quad (2.30)$$

となる。特にこの超幾何関数の部分は、 n 次の多項式となり、これは、Jacobi の多項式で表すこともできる。

2.2 固有関数の直交性

以下、固有関数の直交性について述べる。一般に異なる2個の固有値 $E_n, E_{n'}$ に属する固有関数 $\Psi_n, \Psi_{n'}$ が満たす (1.4) の方程式を、

$$\begin{aligned} \left[\frac{d^2}{dx^2} + E_n - V_1 \tanh(x) + \frac{V_2}{\cosh^2(x)} \right] \Psi_n &= 0 \\ \left[\frac{d^2}{dx^2} + E_{n'} - V_1 \tanh(x) + \frac{V_2}{\cosh^2(x)} \right] \Psi_{n'} &= 0 \end{aligned} \quad (2.31)$$

と書いておき、この第1式に $\Psi_{n'}$ を、第2式に Ψ_n を掛けて辺々を引き算すると、

$$\frac{d}{dx} \left(\Psi_{n'} \frac{d\Psi_n}{dx} - \Psi_n \frac{d\Psi_{n'}}{dx} \right) + (E_n - E_{n'}) \Psi_n \Psi_{n'} = 0 \quad (2.32)$$

となり、これを x で積分すると、

$$\int_{-\infty}^{\infty} \Psi_n \Psi_{n'} dx = \frac{1}{E_n - E_{n'}} \left(\Psi_n \frac{d\Psi_{n'}}{dx} - \Psi_{n'} \frac{d\Psi_n}{dx} \right) \Big|_{-\infty}^{\infty} \quad (2.33)$$

となる。 $\Psi_n, \Psi_{n'}$ は $x \rightarrow \pm\infty$ で指数関数的にゼロとなるので、その微係数もゼロとなり、 $E_n \neq E_{n'}$ のときは右辺はゼロとなり、異なる固有値に属する固有関数同士の直交性が示される。しかし、同じ固有値 $E_n = E_{n'}$ のとき、この積分を実行することは困難が予想される。例え、 Ψ_n を Jacobi の多項式で表したとしても、Jacobi 多項式の直交性の式とは結び付かないため、ここではこれ以上触れないことにする。

3 散乱状態の場合

(2.7) 式から a, b を求めると、

$$\begin{cases} a = \frac{1}{2}(k_1 - k_2) \\ b = \frac{1}{2}(k_1 + k_2) \end{cases} \quad \text{or} \quad \begin{cases} a = \frac{1}{2}(k_1 + k_2) \\ b = \frac{1}{2}(k_1 - k_2) \end{cases} \quad (3.1)$$

およびこれらの式で a, b の符号を同時に変えた4通りとなる。ここに、

$$k_1 = \sqrt{-E - V_1}, \quad k_2 = \sqrt{-E + V_1} \quad (3.2)$$

と定義する。

3.1 $-V_1 < E < V_1$ の場合

この場合、 k_2 は実数となるが、 k_1 は虚数となるので、

$$k_1 = i\kappa_1, \quad \kappa_1 = \sqrt{E + V_1} \quad (3.3)$$

とおくことにする。また、(3.1) 式の a, b については、第1式を採用することにして、(2.12) 式から α, β, γ を求めると、

$$\alpha = \frac{1}{2}(i\kappa_1 + k_2 + 1 + \lambda), \quad \beta = \frac{1}{2}(i\kappa_1 + k_2 + 1 - \lambda), \quad \gamma = k_2 + 1 \quad (3.4)$$

となる。ここで、

$$\lambda = \sqrt{1 + 4V_2} \quad (= 2\nu + 1) \quad (3.5)$$

と定義する. このときの波動関数を $\Psi(x, E)$ と書くことにすると, (2.13) 式より,

$$\begin{aligned} \Psi(x, E) = & 2^{-(i\kappa_1+k_2)/2} e^{(i\kappa_1-k_2)x/2} \cosh^{-(i\kappa_1+k_2)/2}(x) \\ & \times F\left(\frac{1}{2}(i\kappa_1+k_2+1+\lambda), \frac{1}{2}(i\kappa_1+k_2+1-\lambda), k_2+1; \frac{1}{2}(1-\tanh x)\right) \end{aligned} \quad (3.6)$$

となる. この式から, 波動関数の $x \rightarrow \infty$ における漸近形は,

$$\Psi \sim e^{-k_2 x} \quad (3.7)$$

となり, また, $x \rightarrow -\infty$ での漸近形は, (2.18) 式と同様にして,

$$\Psi \sim f(\kappa_1, k_2) e^{i\kappa_1 x} + \overline{f(\kappa_1, k_2)} e^{-i\kappa_1 x} \quad (3.8)$$

となる. ここに,

$$f(\kappa_1, k_2) = \frac{\Gamma(k_2+1)\Gamma(-i\kappa_1)}{\Gamma(\frac{1}{2}(-i\kappa_1+k_2+1-\lambda))\Gamma(\frac{1}{2}(-i\kappa_1+k_2+1+\lambda))} \quad (3.9)$$

と定義する. この式の右辺 1 項目が, $x \rightarrow -\infty$ から正方向に進行する入射波, 2 項目がその反射波であることがわかる. また, (3.7) 式は透過波であるが, これはエネルギー E がポテンシャル V_1 より小さいためにすぐに衰退してしまい, その結果この散乱は全反射となる. 入射波と反射波の係数はちょうど複素共役になっており, 当然のことながら, その絶対値は等しい.

3.2 $V_1 < E$ の場合

この場合は, k_2 も虚数となることと, k_2 の符号を変えた (3.1) の第 2 式を採用し, これまでの k_2 を,

$$k_2 = -i\kappa_2, \quad \kappa_2 = \sqrt{E - V_1} \quad (3.10)$$

とし, α, β, γ を

$$\alpha = \frac{1}{2}(i\kappa_1 - i\kappa_2 + 1 + \lambda), \quad \beta = \frac{1}{2}(i\kappa_1 - i\kappa_2 + 1 - \lambda), \quad \gamma = -i\kappa_2 + 1 \quad (3.11)$$

とおくことにする. このときの波動関数は,

$$\begin{aligned} \Psi(x, E) = & 2^{-i(\kappa_1-\kappa_2)/2} e^{i(\kappa_1+\kappa_2)x/2} \cosh^{-i(\kappa_1-\kappa_2)/2}(x) \\ & \times F\left(\frac{1}{2}(i\kappa_1 - i\kappa_2 + 1 + \lambda), \frac{1}{2}(i\kappa_1 - i\kappa_2 + 1 - \lambda), -i\kappa_2 + 1; \frac{1}{2}(1 - \tanh x)\right) \end{aligned} \quad (3.12)$$

となり, また, (3.7) (3.8) 式に相当する式は, $x \rightarrow \infty$ で,

$$\Psi \sim e^{i\kappa_2 x} \quad (3.13)$$

また, $x \rightarrow -\infty$ で,

$$\Psi \sim g_1(\kappa_1, \kappa_2) e^{i\kappa_1 x} + g_2(\kappa_1, \kappa_2) e^{-i\kappa_1 x} \quad (3.14)$$

となる. ここに,

$$\begin{aligned} g_1(\kappa_1, \kappa_2) &= \frac{\Gamma(-i\kappa_2+1)\Gamma(-i\kappa_1)}{\Gamma(\frac{1}{2}(-i\kappa_1 - i\kappa_2 + 1 - \lambda))\Gamma(\frac{1}{2}(-i\kappa_1 - i\kappa_2 + 1 + \lambda))} \\ g_2(\kappa_1, \kappa_2) &= \frac{\Gamma(-i\kappa_2+1)\Gamma(i\kappa_1)}{\Gamma(\frac{1}{2}(i\kappa_1 - i\kappa_2 + 1 + \lambda))\Gamma(\frac{1}{2}(i\kappa_1 - i\kappa_2 + 1 - \lambda))} \end{aligned} \quad (3.15)$$

と定義する. この (3.14) 式の右辺 1 項目が x 軸の負方向から正方向に進む入射波, 2 項目がその反射波, (3.13) 式が透過波となる. ここで, 入射波に対する反射波, 透過波の係数比を, それぞれ, R, T とすると,

$$R = \frac{g_2(\kappa_1, \kappa_2)}{g_1(\kappa_1, \kappa_2)} = \frac{\Gamma(\frac{1}{2}(-i\kappa_1 - i\kappa_2 + 1 - \lambda))\Gamma(\frac{1}{2}(-i\kappa_1 - i\kappa_2 + 1 + \lambda))\Gamma(i\kappa_1)}{\Gamma(\frac{1}{2}(i\kappa_1 - i\kappa_2 + 1 + \lambda))\Gamma(\frac{1}{2}(i\kappa_1 - i\kappa_2 + 1 - \lambda))\Gamma(-i\kappa_1)} \quad (3.16)$$

$$T = \frac{1}{g_1(\kappa_1, \kappa_2)} = \frac{\Gamma(\frac{1}{2}(-i\kappa_1 - i\kappa_2 + 1 - \lambda))\Gamma(\frac{1}{2}(-i\kappa_1 - i\kappa_2 + 1 + \lambda))}{\Gamma(-i\kappa_2 + 1)\Gamma(-i\kappa_1)}$$

となる. これらの式から, $|R|^2, |T|^2$ を求めると,

$$|R|^2 = \frac{\cosh^2(\frac{\pi}{2}(\kappa_1 - \kappa_2)) - \sin^2(\frac{\pi}{2}\lambda)}{\cosh^2(\frac{\pi}{2}(\kappa_1 + \kappa_2)) - \sin^2(\frac{\pi}{2}\lambda)} \quad (3.17)$$

$$|T|^2 = \frac{\kappa_1}{\kappa_2} \cdot \frac{\sinh(\pi\kappa_1)\sinh(\pi\kappa_2)}{\cosh^2(\frac{\pi}{2}(\kappa_1 + \kappa_2)) - \sin^2(\frac{\pi}{2}\lambda)}$$

となる. ここで, 公式

$$\cosh^2(\frac{1}{2}(x - y)) + \sinh(x)\sinh(y) = \cosh^2(\frac{1}{2}(x + y)) \quad (3.18)$$

を用いると,

$$\kappa_1|R|^2 + \kappa_2|T|^2 = \kappa_1 \quad (3.19)$$

という関係式を得る. これは, $x \rightarrow \pm\infty$ における波動伝播速度の違いを考慮した粒子数保存の式になっている.

3.3 波動関数の規格化

ここで, (3.6) (3.12) 式で得た波動関数を規格化する. 方法は前節の (2.31) - (2.33) と同じであるが, 記号が違ってくるので, もう 1 度繰り返す. 一般に異なる 2 個のエネルギー E, E' に対する波動関数を $\Psi(x, E), \overline{\Psi}(x, E')$ とする. これらが満たす (1.4) の形の方程式を,

$$\left[\frac{d^2}{dx^2} + E - V_1 \tanh(x) + \frac{V_2}{\cosh^2(x)} \right] \overline{\Psi}(x, E) = 0 \quad (3.20)$$

$$\left[\frac{d^2}{dx^2} + E' - V_1 \tanh(x) + \frac{V_2}{\cosh^2(x)} \right] \Psi(x, E') = 0$$

と書いておく. ただし, $\overline{\Psi}(x, E)$ に関しては複素共役をとった $\overline{\Psi}(x, E)$ にしておく. この第 1 式に $\Psi(x, E')$ を, 第 2 式に $\overline{\Psi}(x, E)$ を掛けて辺々を引き算すると,

$$\frac{d}{dx} \left(\Psi(x, E') \frac{d\overline{\Psi}(x, E)}{dx} - \overline{\Psi}(x, E) \frac{d\Psi(x, E')}{dx} \right) + (E - E') \overline{\Psi}(x, E) \Psi(x, E') = 0 \quad (3.21)$$

となり, これを x で積分すると,

$$\int_{-\infty}^{\infty} \overline{\Psi}(x, E) \Psi(x, E') dx = \frac{1}{E - E'} [F(x)]_{-\infty}^{\infty} \quad (3.22)$$

となる. ここに, 関数 $F(x)$ は

$$F(x) = \overline{\Psi}(x, E) \frac{d\Psi(x, E')}{dx} - \Psi(x, E') \frac{d\overline{\Psi}(x, E)}{dx} \quad (3.23)$$

と定義する. 以下, E' に属する $k_1, k_2, \kappa_1, \kappa_2$ をそれぞれ, プライム付の $k'_1, k'_2, \kappa'_1, \kappa'_2$ と記すことにし, エネルギーの大きさによる場合分けをしながら, この関数 $F(x)$ を調べることにする.

3.3.1 $-V_1 < E < V_1$ の場合

初めに, (3.7) 式から, 波動関数 Ψ は $x \rightarrow \infty$ で指数関数的にゼロとなるので, その微係数もゼロとなり, $F(x)$ の $x \rightarrow \infty$ での極限は,

$$F(x) \xrightarrow{x \rightarrow \infty} 0 \quad (3.24)$$

となる. つぎに, $x \rightarrow -\infty$ ではどうなるかであるが, これは, (3.8) 式を用いて, その漸近形を求めると, ただし, ここでは数式簡略化のため, $f(\kappa_1, k_2)$, $f(\kappa'_1, k'_2)$ を, それぞれ, f , f' と書くことにして,

$$\begin{aligned} F(x) &\sim i\kappa'_1 [f e^{i\kappa_1 x} + \bar{f} e^{-i\kappa_1 x}] [f' e^{i\kappa'_1 x} - \bar{f}' e^{-i\kappa'_1 x}] - i\kappa_1 [f' e^{i\kappa'_1 x} + \bar{f}' e^{-i\kappa'_1 x}] [f e^{i\kappa_1 x} - \bar{f} e^{-i\kappa_1 x}] \\ &= i(\kappa_1 + \kappa'_1) [\bar{f} f' e^{-i(\kappa_1 - \kappa'_1)x} - f \bar{f}' e^{i(\kappa_1 - \kappa'_1)x}] + i(\kappa_1 - \kappa'_1) [f \bar{f}' e^{-i(\kappa_1 + \kappa'_1)x} - \bar{f} f' e^{i(\kappa_1 + \kappa'_1)x}] \end{aligned} \quad (3.25)$$

と得られる. この $F(x)$ を (3.22) 式に代入したときは, 2 項目の $e^{\pm i(\kappa_1 + \kappa'_1)x}$ に比例する項は, $x \rightarrow -\infty$ で, 超関数的にゼロと見做せるので無視してよく,

$$\int_{-\infty}^{\infty} \overline{\Psi(x, E)} \Psi(x, E') dx = - \lim_{x \rightarrow -\infty} \frac{i(\kappa_1 + \kappa'_1)}{E - E'} [\bar{f} f' e^{-i(\kappa_1 - \kappa'_1)x} - f \bar{f}' e^{i(\kappa_1 - \kappa'_1)x}] \quad (3.26)$$

となる. ここで, (3.3) 式 $\kappa_1 = \sqrt{E + V_1}$ を用いて,

$$\frac{\kappa_1^2 - \kappa'_1{}^2}{E - E'} = 1 \quad (3.27)$$

なることと, デルタ関数に関する超関数公式

$$\lim_{M \rightarrow \infty} \frac{e^{\pm iM\kappa}}{\pi\kappa} = \pm i\delta(\kappa) \quad (3.28)$$

を用いると, 結果は,

$$\int_{-\infty}^{\infty} \overline{\Psi(x, E)} \Psi(x, E') dx = 2\pi |f(\kappa_1, k_2)|^2 \delta(\kappa_1 - \kappa'_1) \quad (3.29)$$

あるいは,

$$\int_{-\infty}^{\infty} \overline{\Psi(x, E)} \Psi(x, E') dx = 4\pi\kappa_1 |f(\kappa_1, k_2)|^2 \delta(E - E') \quad (3.30)$$

と波動関数の直交式が得られる.

3.3.2 $V_1 < E$ の場合

$F(x)$ の $x \rightarrow \infty$ での漸近形は, (3.13) 式から,

$$F(x) \sim i(\kappa_2 + \kappa'_2) e^{-i(\kappa_2 - \kappa'_2)x} \quad (3.31)$$

となる. また, $x \rightarrow -\infty$ での漸近形は, (3.14) 式より,

$$\begin{aligned} F(x) &\sim i\kappa'_1 [\bar{g}_1 e^{-i\kappa_1 x} + \bar{g}_2 e^{i\kappa_1 x}] [g'_1 e^{i\kappa'_1 x} - g'_2 e^{-i\kappa'_1 x}] + i\kappa_1 [g'_1 e^{i\kappa'_1 x} + g'_2 e^{-i\kappa'_1 x}] [\bar{g}_1 e^{-i\kappa_1 x} - \bar{g}_2 e^{i\kappa_1 x}] \\ &= i(\kappa_1 + \kappa'_1) [\bar{g}_1 g'_1 e^{-i(\kappa_1 - \kappa'_1)x} - \bar{g}_2 g'_2 e^{i(\kappa_1 - \kappa'_1)x}] - i(\kappa_1 - \kappa'_1) [\bar{g}_2 g'_1 e^{i(\kappa_1 + \kappa'_1)x} - \bar{g}_1 g'_2 e^{-i(\kappa_1 + \kappa'_1)x}] \end{aligned} \quad (3.32)$$

となる．これらの結果を (3.22) 式に代入したときは，前と同じく，(3.32) 式の 2 項目の $e^{\pm i(\kappa_1 + \kappa'_1)x}$ に比例する項は， $x \rightarrow -\infty$ で，超関数的にゼロと見做せるので無視してよく，

$$\int_{-\infty}^{\infty} \overline{\Psi(x, E)} \Psi(x, E') dx = \lim_{x \rightarrow \infty} \frac{i(\kappa_2 + \kappa'_2)}{E - E'} e^{-i(\kappa_2 - \kappa'_2)x} - \lim_{x \rightarrow -\infty} \frac{i(\kappa_1 + \kappa'_1)}{E - E'} [g_1 g'_1 e^{-i(\kappa_1 - \kappa'_1)x} - \overline{g_2} g'_2 e^{i(\kappa_1 - \kappa'_1)x}] \quad (3.33)$$

となる．ここで，(3.10) 式 $\kappa_2 = \sqrt{E - V_1}$ から出る

$$\frac{\kappa_2^2 - \kappa'_2{}^2}{E - E'} = 1 \quad (3.34)$$

と (3.27) (3.28) 式を用いると，

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} \overline{\Psi(x, E)} \Psi(x, E') dx &= \pi \delta(\kappa_2 - \kappa'_2) + \pi (|g_1|^2 + |g_2|^2) \delta(\kappa_1 - \kappa'_1) \\ &= 2\pi [\kappa_2 + \kappa_1 (|g_1|^2 + |g_2|^2)] \delta(E - E') \end{aligned} \quad (3.35)$$

となるが，ここで，(3.16) (3.17) (3.18) 式を用いて， $|g_1|^2 + |g_2|^2$ を求めると，波動関数の直交式

$$\int_{-\infty}^{\infty} \overline{\Psi(x, E)} \Psi(x, E') dx = 4\pi \kappa_2 \frac{\cosh^2\left(\frac{\pi}{2}(\kappa_1 + \kappa_2)\right) - \sin^2\left(\frac{\pi}{2}\lambda\right)}{\sinh(\pi \kappa_1) \sinh(\pi \kappa_2)} \delta(E - E') \quad (3.36)$$

が得られる．

3.4 x 軸の正方向から入射した場合

3.2 節では， x 軸の負方向から正方向に向かって粒子が入射した場合を扱ったが， $V_1 < E$ のときは，逆に，正方向から負方向に粒子を入射する場合もある．ここでは，この場合について簡単に触れておく．このときは，座標 x の符号を替えて， x を $-x$ と置き換えるとよいが，これだけでは，方程式 (1.4) が成立しなくなるので，これを不変にするために， V_1 の符号も変えて， V_1 を $-V_1$ と置き換えなくてはならない．このとき，解の導き方として，2 つの方法がありえる．すなわち，

- (1) κ_1, κ_2 の定義 (3.3) (3.10) 式において， V_1 の符号を変えた新しい定義にする方法．
- (2) κ_1, κ_2 の定義はそのままにしておいて， κ_1 と κ_2 を入れ替える方法．

があるが，途中で変数の定義を変えると混乱の基になりかねないので，ここでは (2) の方法， κ_1 と κ_2 を入れ替える方法をとることにする．このときの波動関数を $\hat{\Psi}(x, E)$ として，(3.12) (3.13) (3.14) 式から，

$$\begin{aligned} \hat{\Psi}(x, E) &= 2^{-i(\kappa_2 - \kappa_1)/2} e^{-i(\kappa_1 + \kappa_2)x/2} \cosh^{-i(\kappa_2 - \kappa_1)/2}(x) \\ &\quad \times F\left(\frac{1}{2}(i\kappa_2 - i\kappa_1 + 1 + \lambda), \frac{1}{2}(i\kappa_2 - i\kappa_1 + 1 - \lambda), -i\kappa_1 + 1; \frac{1}{2}(1 + \tanh x)\right) \end{aligned} \quad (3.37)$$

となり，この解は， $x \rightarrow -\infty$ で，

$$\hat{\Psi} \sim e^{-i\kappa_1 x} \quad (3.38)$$

また， $x \rightarrow \infty$ で，

$$\hat{\Psi} \sim g_1(\kappa_2, \kappa_1) e^{-i\kappa_2 x} + g_2(\kappa_2, \kappa_1) e^{i\kappa_2 x} \quad (3.39)$$

となる．この式の右辺 1 項目が， x 軸の正方向から負方向に向かって進む入射波，2 項目がその反射波，また，(3.38) 式が負方向に進む透過波となる．また，このときの反射係数，透過係数を，それぞれ， \hat{R} ， \hat{T} とすると，

$$\hat{R} = \frac{g_2(\kappa_2, \kappa_1)}{g_1(\kappa_2, \kappa_1)}, \quad \hat{T} = \frac{1}{g_1(\kappa_2, \kappa_1)} \quad (3.40)$$

となり, (3.19) 式に相当する粒子数保存の式は,

$$\kappa_2|\hat{R}|^2 + \kappa_1|\hat{T}|^2 = \kappa_2 \quad (3.41)$$

となる. さらに, (3.36) の規格化の式は,

$$\int_{-\infty}^{\infty} \overline{\hat{\Psi}(x, E)} \hat{\Psi}(x, E') dx = 4\pi\kappa_1 \frac{\cosh^2\left(\frac{\pi}{2}(\kappa_1 + \kappa_2)\right) - \sin^2\left(\frac{\pi}{2}\lambda\right)}{\sinh(\pi\kappa_1) \sinh(\pi\kappa_2)} \delta(E - E') \quad (3.42)$$

となる.

4 おわりに

ここでは, 量子力学における Rosen-Morse ポテンシャル問題を紹介した. この問題に関して, 束縛状態の解について書かれた書物はあるが, 散乱状態について書かれたものがなかったので, ここでは, 主として散乱状態の解に力点をおいて書くことにした. ここでも, やはり, 解析的にできることには限界があるということを痛感せざるを得ない.

5 付録 1. もう 1 つの独立解について

超幾何関数の微分方程式 (2.11) にはもう 1 つの独立解

$$u = \zeta^{1-\gamma} F(\alpha - \gamma + 1, \beta - \gamma + 1, 2 - \gamma; \zeta) \quad (5.1)$$

が存在する. ここで, もし, この解を採用したときはどうなるかを考えてみる. $\zeta = \frac{1}{2}(1 - \tanh x)$ として, これを (2.13) 式に代入すると, (2.12) の第 3 式から $1 - \gamma = a - b$ を用いて,

$$\Psi = 2^{-a} e^{bx} \cosh^{-a}(x) F(\alpha - \gamma + 1, \beta - \gamma + 1, 2 - \gamma; \frac{1}{2}(1 - \tanh x)) \quad (5.2)$$

となる. これは, (2.13) 式と比べると, 超幾何関数の部分を除いて, a と b が入れ替わった式になっているが, 実は, 超幾何関数の部分も a と b が入れ替わることが証明される. そのためには,

$$\alpha' = \alpha - \gamma + 1, \quad \beta' = \beta - \gamma + 1, \quad \gamma' = 2 - \gamma \quad (5.3)$$

と置き換えて, (2.12) 式を用いると,

$$\alpha' + \beta' = 2a + 1, \quad \alpha'\beta' = a(a + 1) - V_2, \quad \gamma' = a - b + 1 \quad (5.4)$$

となる. これは, (2.13) 式で α, β, γ を α', β', γ' と置き換えたとき, ちょうど, a と b が入れ替わった式になることを意味する. これは, a, b を決める方程式 (2.7) が, a, b の入れ替えに対し対称になっていることを反映したものである.

このように, 方程式 (1.4) には 2 つの独立解が存在し, その一般解はこれら 2 つの解を線形結合したものになる. その上で, この解が, $x \rightarrow \infty$ でゼロに収束することを要請すると, (2.13) 式からは, (2.16) 式で求めたように $a < b$ となり, 一方, (5.2) 式からは a と b が入れ替わって, $a > b$ となる. もちろん, これら 2 つの条件は相反するものなので, 同時には満たされず, この解としては, (2.13) 式, および, (5.2) 式のどちらか一方を採用することになる. ここでは, (2.13) 式を用いた議論を展開したが, この (5.2) 式を採用した場合は, a と b の役割が入れ替わるだけで同じ結論に到達する.

6 付録 2. (2.18) 式で, $a + b < 0$ の場合

(2.18) 式で, $a + b < 0$ の場合を考える. このときは, 右辺 2 項目の指数関数が発散するので, これを防ぐには, $\Gamma(\gamma - \alpha)$ か $\Gamma(\gamma - \beta)$ のどちらかが極の位置にあるとよい. どちらが極の位置にあっても同じことになるので, ここでは, $\Gamma(\gamma - \alpha)$ が極になるものとして,

$$\gamma - \alpha = -n, \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (6.1)$$

とおく. (2.12) の 3 本の式から,

$$(\gamma - \alpha) + (\gamma - \beta) = -2a + 1, \quad (\gamma - \alpha)(\gamma - \beta) = a(a - 1) - V_2 \quad (6.2)$$

となるので, これらの式から $\gamma - \beta$ を消去し, (6.1) 式を用いると,

$$a^2 - (2n + 1)a + n(n + 1) - V_2 = 0 \quad (6.3)$$

となる. (2.16) 式で示したように, a は負であったことに注意して, これを解くと

$$a = n - \nu \quad (6.4)$$

となる. ここに, ν は (2.21) 式で定義したものである. a が求まったので, b は (2.7) 式から, (2.22) 式の μ を用いて,

$$b = -\frac{\mu}{n - \nu} \quad (6.5)$$

と求まる. この a, b を (2.7) の第 2 式に代入すると, エネルギー E が,

$$E_n = -(n - \nu)^2 - \frac{\mu^2}{(n - \nu)^2} \quad (6.6)$$

と求まるが, これは (2.27) 式で与えたものとまったく同じである. 残る α, β, γ は (2.12) 式, および, (6.1) 式から,

$$\gamma = \nu - n - \frac{\mu}{n - \nu} + 1, \quad \alpha = \nu - \frac{\mu}{n - \nu} + 1, \quad \beta = -\nu - \frac{\mu}{n - \nu} \quad (6.7)$$

と求められる. これらを (2.13) 式に代入すると,

$$\Psi_n = 2^{\mu/(n-\nu)} e^{(n-\nu)x} \cosh^{\mu/(n-\nu)}(x) F\left(\nu - \frac{\mu}{n-\nu} + 1, -\nu - \frac{\mu}{n-\nu}, \nu - n - \frac{\mu}{n-\nu} + 1; \frac{1}{2}(1 - \tanh x)\right) \quad (6.8)$$

となる. これは, (2.30) 式で求めたものと形の上では異なっているが, 超幾何関数の Kummer の変換式

$$F(\alpha, \beta, \gamma; \zeta) = (1 - \zeta)^{\gamma - \alpha - \beta} F(\gamma - \alpha, \gamma - \beta, \gamma; \zeta) \quad (6.9)$$

を用いると, 係数も含めまったく同じものになる. 結果的に, $a + b$ の符号は正負どちらを採用しても同じ結果になることが理解される.

[謝辞]

今回もこの原稿を書くにあたって, 京都大学名誉教授の中西襄先生にご精読いただき, たくさんのコメントをいただきました. 特に, ここで挙げた付録 1,2 は先生のご意見によって追加したものです. これがなければ, 不完全なまま提出するところでした. ここに, 謹んで感謝いたします.

三角関数の冪乗の有限和

中西 襄^{*1}

Finite Sums of Powers of Trigonometrical Functions

Noboru NAKANISHI^{*2}

1 はじめに

筆者の愛用している公式集 森口・宇多川・一松著「数学公式 II 一級数・フーリエ解析」の p.14 に、三角関数の冪乗の有限級数の和を与えるいくつかの公式が掲載されている。まずそれらを引用しておく。

$$\sum_{r=1}^n \cot^2 \left(\frac{r\pi}{2n+1} \right) = \frac{1}{3}n(2n-1), \quad (1.1)$$

$$\sum_{r=1}^n \cot^2 \left(\frac{(2r-1)\pi}{4n} \right) = n(2n-1), \quad (1.2)$$

$$\sum_{r=1}^n \sec^2 \left(\frac{(4r-3)\pi}{4n} \right) = 2n^2, \quad (1.3)$$

$$\begin{aligned} \sum_{r=1}^{[(n+1)/2]-1} \csc^2 \left(\frac{r\pi}{n} \right) &= \frac{n^2-1}{6} \quad (n: \text{奇数}) \\ &= \frac{n^2-4}{6} \quad (n: \text{偶数}), \end{aligned} \quad (1.4)$$

$$\begin{aligned} \sum_{r=1}^{[n/2]} \csc^2 \left(\frac{(2r-1)\pi}{2n} \right) &= \frac{n^2-1}{2} \quad (n: \text{奇数}) \\ &= \frac{n^2}{2} \quad (n: \text{偶数}), \end{aligned} \quad (1.5)$$

$$\sum_{r=1}^{2n} \csc^2 \left(\frac{r\pi}{2n+1} \right) = \frac{4}{3}n(n+1), \quad (1.6)$$

$$\sum_{r=1}^n \tan^4 \left(\frac{r\pi}{2n+1} \right) = \frac{1}{3}n(2n+1)(4n^2+6n-1), \quad (1.7)$$

$$\sum_{r=1}^n \cot^4 \left(\frac{r\pi}{2n+1} \right) = \frac{1}{45}n(2n-1)(4n^2+10n-9). \quad (1.8)$$

筆者は以前、世戸憲治氏と共著で、「弾丸衝突により弾性棒に発生する波動の数学的解析」(数学・物理通信 2-3)において現れた三角関数を含む複雑な級数の総和を解析的に求めるのに、複素積分の留数計算を用いた。同様な方法を用いて、上記 (1.1)~(1.8) の公式が統一的に証明できることを示そう。ただし、(1.1) と (1.8) については、より初等的で簡単な別解法があるので、それも紹介する。またゼータ関数との関連についても言及する。

^{*1} 京都大学名誉教授

^{*2} nbr-nak@trio.plala.or.jp

2 公式の整理

前節に挙げた公式の提示の仕方は、あちこちの文献から寄せ集められたのだろうか、あまりシステマチックではないように思える。何はともあれ、和をとるのをすべて $r = 1$ から $r = n$ に統一した方が見通しがよいであろう。

まず、 $\sec^2 \theta = 1 + \tan^2 \theta$ および $\csc^2 \theta = 1 + \cot^2 \theta$ を用いて、 \tan と \cot でもって書き直そう。そうすると、(1.3) は

$$\sum_{r=1}^n \tan^2 \left(\frac{(4r-3)\pi}{4n} \right) = n(2n-1) \quad (2.1)$$

に、(1.4) は2つの式

$$\sum_{r=1}^n \cot^2 \left(\frac{r\pi}{2n+1} \right) = \frac{1}{3}n(2n-1), \quad (2.2)$$

$$\sum_{r=1}^n \cot^2 \left(\frac{r\pi}{2(n+1)} \right) = \frac{1}{3}n(2n+1) \quad (2.3)$$

に、(1.5) は2つの式

$$\sum_{r=1}^n \cot^2 \left(\frac{(2r-1)\pi}{2(2n+1)} \right) = n(2n+1), \quad (2.4)$$

$$\sum_{r=1}^n \cot^2 \left(\frac{(2r-1)\pi}{4n} \right) = n(2n-1) \quad (2.5)$$

に、(1.6) は $\cot^2(\pi - \theta) = \cot^2 \theta$ に注意すると、

$$2 \sum_{r=1}^n \cot^2 \left(\frac{r\pi}{2n+1} \right) = \frac{2}{3}n(2n-1) \quad (2.6)$$

に書き直せる。

また、 $\tan \theta = \cot((\pi/2) - \theta)$ を用いると、任意の自然数 k について関係式

$$\sum_{r=1}^n \tan^{2k} \left(\frac{r\pi}{2n+1} \right) = \sum_{r=1}^n \tan^{2k} \left(\frac{(n-r+1)\pi}{2n+1} \right) = \sum_{r=1}^n \cot^{2k} \left(\frac{(2r-1)\pi}{2(2n+1)} \right), \quad (2.7)$$

$$\sum_{r=1}^n \tan^{2k} \left(\frac{(2r-1)\pi}{4n} \right) = \sum_{r=1}^n \tan^{2k} \left(\frac{(2n-2r+1)\pi}{4n} \right) = \sum_{r=1}^n \cot^{2k} \left(\frac{(2r-1)\pi}{4n} \right) \quad (2.8)$$

が得られる。

さらに、 $\tan^{2k}(\pi - \theta) = \tan^{2k} \theta$ を使うと、一見パラドキシカルな恒等式

$$\sum_{r=1}^n \tan^{2k} \left(\frac{(2r-1)\pi}{4n} \right) = \sum_{r=1}^n \tan^{2k} \left(\frac{(4r-3)\pi}{4n} \right) \quad (2.9)$$

が成立することが分かる。両辺は足し算の順序を変えただけのものである。 \tan の代わりに \cot としてもよい。

[証明] 右辺の $r (= 1, 2, \dots, n)$ を、奇数の場合 $r = 2m - 1$ ($m = 1, 2, \dots, [\frac{1}{2}(n+1)]$) と偶数の場合 $r = 2m$ ($m = 1, 2, \dots, [\frac{1}{2}n]$) とに分ける。右辺の r を r' で表し、 r と r' の対応を次のようにつける：奇数の場合は $m = r'$ 、偶数の場合は $m = n - r' + 1$ 。前者の場合 $2r - 1 = 4r' - 3$ 、後者の場合 $2r - 1 = 4n - (4r' - 3)$ となるが、これは上の \tan^{2k} の恒等式を使うと、 $4r' - 3$ と同じになる。また r' のとる値は、後者を逆順で並べると、 $1, 2, \dots, [\frac{1}{2}(n+1)]; n - [\frac{1}{2}n] + 1, n - [\frac{1}{2}n] + 2, \dots, n$ だが、 $[\frac{1}{2}(n+1)] = n - [\frac{1}{2}n]$ に注意すると、ちょうど1から n になっていることが分かる。□

(1.7) は \tan についての 4 乗和の式だが, (1.1) に相当する 2 乗和の式が載っていないのは片手落ちだ. これは

$$\sum_{r=1}^n \tan^2 \left(\frac{r\pi}{2n+1} \right) = n(2n+1) \quad (2.10)$$

となる.

以上を整理すると, 証明すべき式は次のようになる.

(1.1) と (1.8) はまとめて,

$$\begin{aligned} S_k(n) &\equiv \sum_{r=1}^n \cot^{2k} \left(\frac{r\pi}{2n+1} \right) = \frac{1}{3}n(2n-1) \quad (k=1 \text{ のとき}), \\ &= \frac{1}{45}n(2n-1)(4n^2+10n-9) \quad (k=2 \text{ のとき}) \end{aligned} \quad (2.11)$$

となる. (2.10) と (1.7) はまとめて, また (2.7) を参照して,

$$\begin{aligned} \tilde{S}_k(n) &\equiv \sum_{r=1}^n \tan^{2k} \left(\frac{r\pi}{2n+1} \right) = \sum_{r=1}^n \cot^{2k} \left(\frac{(2r-1)\pi}{2(2n+1)} \right) \\ &= n(2n+1) \quad (k=1 \text{ のとき}), \\ &= \frac{1}{3}n(2n+1)(4n^2+6n-1) \quad (k=2 \text{ のとき}) \end{aligned} \quad (2.12)$$

となる. (1.3) は (2.1), (2.9), (2.8) を使うと,

$$U_k(n) \equiv \sum_{r=1}^n \cot^{2k} \left(\frac{(2r-1)\pi}{4n} \right) = n(2n-1) \quad (k=1 \text{ のとき}) \quad (2.13)$$

となる. (1.4) の第 1 式は (2.2) により (2.11) の $k=1$ の場合に帰着する.

(1.4) の第 2 式は (2.3) により,

$$T_k(n) \equiv \sum_{r=1}^n \cot^{2k} \left(\frac{r\pi}{2(n+1)} \right) = \frac{1}{3}n(2n+1) \quad (k=1 \text{ のとき}) \quad (2.14)$$

と書ける. そこで $T_k(2n)$ を考えると, そのうち r が偶数の部分の和は $S_k(n)$ に等しく, r が奇数の和の部分は $\tilde{S}_k(n)$ に等しいから,

$$T_k(2n) = S_k(n) + \tilde{S}_k(n) \quad (2.15)$$

と表せる. この関係式は n の多項式として非整数の n に対しても成立する. つまり

$$\sum_{r=1}^n \cot^{2k} \left(\frac{r\pi}{2(n+1)} \right) = S_k \left(\frac{n}{2} \right) + \tilde{S}_k \left(\frac{n}{2} \right) \quad (2.16)$$

となる. とくに $k=1$ の場合は, (2.14) を再生する.

(1.5) の第 1 式は, (2.4) により (2.12) の $k=1$ の場合に帰着する. (1.5) の第 2 式は (2.5) により, (2.13) に帰着する. (1.6) は (2.6) により (2.11) の $k=1$ の場合に帰着する.

したがって, (2.11)~(2.13) を証明すればよい. これらの証明はそれぞれ第 3 節~第 5 節で与える. また (2.16) を n が奇数の場合に適用するのは納得できないという人のために, 第 6 節に (2.14) の直接証明を与える.

なお, $n=1, 2$ については任意の k について直接計算できる. これらは結果の式のチェックに使えるので, 参考のため掲げておく:

$$\begin{aligned} S_k(1) &= \frac{1}{3^k}, & S_k(2) &= \frac{(5+2\sqrt{5})^k + (5-2\sqrt{5})^k}{5^k} = 2, \frac{18}{5}, \frac{34}{5}, \dots, \\ \tilde{S}_k(1) &= 3^k, & \tilde{S}_k(2) &= (5+2\sqrt{5})^k + (5-2\sqrt{5})^k = 10, 90, 850, \dots, \\ U_k(1) &= 1, & U_k(2) &= (3+2\sqrt{2})^k + (3-2\sqrt{2})^k = 6, 34, 198, \dots \end{aligned} \quad (2.17)$$

3 (2.11) の証明

この節では、 $S_k(n)$ を留数定理を用いて計算する。オイラーの公式から

$$\cot(r\theta) = i \frac{e^{2ir\theta} + 1}{e^{2ir\theta} - 1} \quad (3.1)$$

なるゆえ、 $\theta_n \equiv \pi/(2n+1)$ と書けば、留数定理により

$$S_k(n) = \frac{1}{2\pi i} \int_{C^{(+)}} dz (-1)^k \left(\frac{z+1}{z-1}\right)^{2k} \sum_{r=1}^n \frac{1}{z - e^{2ir\theta_n}} \quad (3.2)$$

と表示できる。ここに積分路 $C^{(+)}$ は、原点を中心とし上半面内を正方向に廻る半径 $R (> 1)$ の半円である。この式の複素共役をとると、

$$S_k(n) = \frac{1}{2\pi i} \int_{C^{(-)}} dz (-1)^k \left(\frac{z+1}{z-1}\right)^{2k} \sum_{r=1}^n \frac{1}{z - e^{-2ir\theta_n}} \quad (3.3)$$

である。 $C^{(+)}$ の複素共役は下半面内を負方向に廻ることになるが、 $1/(2\pi i)$ の符号が変わるから、*3 両者合わせて $C^{(-)}$ は下半面内を正方向に廻る積分路となる。(3.2) と (3.3) を足して 2 で割り、被積分関数が実軸上 $z=1$ に極をもっていることを考慮すると、

$$S_k(n) = \frac{(-1)^k}{2} \cdot \frac{1}{2\pi i} \left(\int_C - \int_{C(1)} \right) dz \left(\frac{z+1}{z-1}\right)^{2k} F_n(z) \quad (3.4)$$

となる。ここに、 C は原点を中心とし正方向に一周する半径 R の円、 $C(a)$ は $z=a$ の周りを正方向に廻る微小円、また

$$F_n(z) \equiv \sum_{r=1}^n \left(\frac{1}{z - e^{2ir\theta_n}} + \frac{1}{z - e^{-2ir\theta_n}} \right) \quad (3.5)$$

である。 $F_n(z)$ の極の位置は $z=1$ を除く円分方程式 $z^{2n+1} - 1 = 0$ の解すべてにわたるから、通分すると *4

$$F_n(z) = \frac{f'_n(z)}{f_n(z)} \quad (3.6)$$

となる。ただし

$$f_n(z) \equiv \sum_{r=0}^{2n} z^r \quad (3.7)$$

とおいた。第 1 の積分

$$I_C \equiv \frac{1}{2\pi i} \int_C dz \left(\frac{z+1}{z-1}\right)^{2k} F_n(z) \quad (3.8)$$

は、 $R \rightarrow \infty$ とすれば、

$$I_C = \lim_{R \rightarrow \infty} \frac{1}{2\pi i} \int_C dz \frac{f'_n(z)}{f_n(z)} = \lim_{R \rightarrow \infty} \frac{1}{2\pi i} \left[\log z^{2n} \right]_R^{Re^{2\pi i}} = 2n \quad (3.9)$$

と求まる。

第 2 の積分は、 $z=1$ における留数であるから、

$$I_{C(1)} \equiv \frac{1}{2\pi i} \int_{C(1)} \frac{dz}{(z-1)^{2k}} (z+1)^{2k} F_n(z) = (2k-1)! \left(\frac{d}{dz}\right)^{2k-1} \left[(z+1)^{2k} F_n(z) \right]_{z=1} \quad (3.10)$$

*3 奇数幂だったら、 i^k があるため符号が変わらないので。以下の考察ができない。

*4 $\sum_r 1/(z-a_r) = \sum_r (d/dz) \log(z-a_r) = (d/dz) \log \prod_r (z-a_r) = [(d/dz) \prod_r (z-a_r)] / \prod_r (z-a_r)$.

となる. この式は和公式

$$f_n^{(m)}(1) = \sum_{r=m}^{2n} r(r-1)\cdots(r-m+1) = \frac{1}{m+1} \cdot \frac{(2n+1)!}{(2n-m)!} \quad (3.11)$$

を使って計算できる.

まず $k=1$ の場合を考える. このときは

$$\frac{d}{dz} \left[(z+1)^2 F_n(z) \right]_{z=1} = 4F_n(1) + 4F_n'(1) \quad (3.12)$$

を計算すればよい. (3.11) から

$$\begin{aligned} f_n(1) &= 2n+1, \\ f_n'(1) &= \sum_{r=1}^{2n} r = n(2n+1), \\ f_n''(1) &= \sum_{r=1}^{2n} r(r-1) = \frac{1}{3}(2n-1)(2n)(2n+1) \end{aligned} \quad (3.13)$$

であるから,

$$F_n(1) = n, \quad (3.14)$$

および

$$F_n'(z) = \frac{f_n''(z)}{f_n(z)} - \frac{[f_n'(z)]^2}{[f_n(z)]^2}, \quad (3.15)$$

から得られる

$$F_n'(1) = \frac{1}{3}n(n-2) \quad (3.16)$$

により,

$$I_{C(1)}^{k=1} = 4n + \frac{4}{3}n(n-2) \quad (3.17)$$

と求まる. したがって

$$S_1(n) = -\frac{1}{2}(I_C - I_{C(1)}^{k=1}) = \frac{1}{3}n(2n-1) \quad (3.18)$$

が証明された.

$k=2$ の場合は

$$I_{C(1)}^{k=2} \equiv \frac{1}{3!} \left(\frac{d}{dz} \right)^3 \left[(z+1)^4 F_n(z) \right]_{z=1} = 8F_n(1) + 24F_n'(1) + 16F_n''(1) + \frac{8}{3}F_n'''(1) \quad (3.19)$$

を計算すればよい. $F_n(1)$ と $F_n'(1)$ はそれぞれ (3.14) と (3.16) で与えられているから, $F_n''(1)$ と $F_n'''(1)$ を計算する. (3.15) を微分すれば,

$$\begin{aligned} F_n''(z) &= \frac{f_n'''(z)}{f_n(z)} - \frac{3f_n'(z)f_n''(z)}{[f_n(z)]^2} + \frac{2[f_n'(z)]^3}{[f_n(z)]^3}, \\ F_n'''(z) &= \frac{f_n^{(4)}(z)}{f_n(z)} - \frac{4f_n'(z)f_n'''(z)}{[f_n(z)]^2} - \frac{3[f_n''(z)]^2}{[f_n(z)]^2} + \frac{12[f_n'(z)]^2 f_n''(z)}{[f_n(z)]^3} - \frac{6[f_n'(z)]^4}{[f_n(z)]^4} \end{aligned} \quad (3.20)$$

を得る. これに (3.11) から得られる

$$\begin{aligned}
\frac{f'_n(1)}{f_n(1)} &= n, \\
\frac{f''_n(1)}{f_n(1)} &= \frac{2}{3}n(2n-1), \\
\frac{f'''_n(1)}{f_n(1)} &= \frac{1}{4}n(n-1)(2n-1), \\
\frac{f_n^{(4)}(1)}{f_n(1)} &= \frac{4}{5}n(n-1)(2n-1)(2n-3)
\end{aligned} \tag{3.21}$$

を代入すれば,

$$\begin{aligned}
F''_n(1) &= -n(n-1), \\
F'''_n(1) &= \frac{4}{15}n(2n-1)(11n^2+5n+9) - 6n^4
\end{aligned} \tag{3.22}$$

を得る. したがって, (3.19) から

$$\begin{aligned}
S_2(n) &= \frac{1}{2}[2n - I_{C(1)}^{k=2}] \\
&= n(2n-1)(4n^2+2n+3) - \frac{16}{45}n(2n-1)(11n^2+5n+9) \\
&= \frac{1}{45}n(2n-1)(4n^2+10n-9)
\end{aligned} \tag{3.23}$$

となって, (2.11) が証明された.

4 (2.12) の証明

この節では, $\tilde{S}_k(n)$ を留数定理を用いて計算する. 前節の計算との違いは, $(z+1)/(z-1)$ が $(z-1)/(z+1)$ に変わるだけである. つまり, $z = -1$ における留数 $\tilde{I}_{C(-1)}$ を計算すればよい. すなわち

$$\tilde{S}_{2k}(n) = \frac{1}{2}(2n - \tilde{I}_{C(-1)}). \tag{4.1}$$

極の位置が $z = -1$ だから, $f_n^{(m)}(1)$ の代わりに $f_n^{(m)}(-1)$ が必要となる. (3.7) から

$$f_n^{(m)}(-1) = \sum_{r=m}^{2n} (-1)^{r-m} r(r-1)\cdots(r-m+1) \tag{4.2}$$

である. これから, n に関する数学的帰納法を用いて

$$\begin{aligned}
f_n(-1) &= 1, \\
f'_n(-1) &= -n, \\
f''_n(-1) &= 2n^2, \\
f'''_n(-1) &= -n(n-1)(4n+1), \\
f_n^{(4)}(-1) &= 4n(n-1)(2n^2-2n-1)
\end{aligned} \tag{4.3}$$

が証明できる. これらを (3.6), (3.15), (3.20) に代入すれば,

$$\begin{aligned}
F_n(-1) &= -n, \\
F'_n(-1) &= n^2, \\
F''_n(-1) &= n(3n+1), \\
F'''_n(-1) &= -2n(n^3+2n^2-4n-2)
\end{aligned} \tag{4.4}$$

を得る.

$k = 1$ の場合は,

$$\tilde{I}_{C(-1)}^{k=1} = (-4)F_n(-1) + (-2)^2 F_n'(-1) = 4n(n+1) \quad (4.5)$$

となる. したがって

$$\tilde{S}_1(n) = -\frac{1}{2}(2n - \tilde{I}_{C(-1)}^{k=1}) = n(2n+1) \quad (4.6)$$

を得る.

$k = 2$ の場合は,

$$\tilde{I}_{C(-1)}^{k=2} = -8F_n(-1) + 24F_n'(-1) - 16F_n''(-1) + \frac{8}{3}F_n'''(-1) \quad (4.7)$$

なので, (4.4) を代入して計算すれば,

$$\tilde{S}_2(n) = \frac{1}{2}(2n - \tilde{I}_{C(-1)}^{k=2}) = \frac{1}{3}n(2n+1)(4n^2 + 6n - 1) \quad (4.8)$$

を得る. これで (2.12) が証明された.

5 (2.13) の証明

この節では, $U_k(n)$ を留数定理を用いて計算する. それは

$$U_k(n) = \frac{(-1)^k}{2} \cdot \frac{1}{2\pi i} \left(\int_C - \int_{C(1)} \right) dz \left(\frac{z+1}{z-1} \right)^{2k} H_n(z) \quad (5.1)$$

と書ける. ただし

$$H_n(z) \equiv \sum_{r=1}^n \left(\frac{1}{z - e^{i(2r-1)\pi/4n}} + \frac{1}{z - e^{-i(2r-1)\pi/4n}} \right) \quad (5.2)$$

とおいた. $H_n(z)$ の極の位置は, 円分方程式 $z^{4n} - 1 = 0$ の解のうちで $z^{2n} - 1 = 0$ の解でないものすべて, すなわち $z^{2n} + 1 = 0$ の解すべてにわたるから, 通分すると

$$H_n(z) = \frac{2nz^{2n-1}}{z^{2n} + 1} \quad (5.3)$$

となる. C の積分は明らかに $2n$ になる.

$k = 1$ の場合の $z = 1$ における留数は,

$$H_n(1) = n, \quad (5.4)$$

および

$$H_n'(z) = \frac{2n(2n-1)z^{2n-2}}{z^{2n} + 1} - \frac{(2nz^{2n-1})^2}{(z^{2n} + 1)^2} \quad (5.5)$$

から得られる

$$H_n'(1) = n(n-1) \quad (5.6)$$

により計算できる. したがって,

$$U_1(n) = -\frac{1}{2}[2n - 4H_n(1) - 4H_n'(1)] = n(2n-1) \quad (5.7)$$

を得る. これで (2.13) が証明された.

ついでに $k = 2$ の場合も計算しておこう. (3.20) において, $f_n(z)$ の代わりに $z^{2n} + 1$ をいれて $z = 1$ とおくと,

$$\begin{aligned} H_n''(1) &= -n(3n - 2), \\ H_n'''(1) &= n(2n - 1)(2n^2 + n + 6) - 6n^4 \end{aligned} \quad (5.8)$$

を得る. したがって,

$$\begin{aligned} U_2(n) &= \frac{1}{2} \left(2n - 8H_n(1) - 24H_n'(1) - 16H_n''(1) - \frac{8}{3}H_n'''(1) \right) \\ &= n(2n - 1)(4n^2 + 2n + 7) - \frac{4}{3}n(2n - 1)(2n^2 + n + 6) \\ &= \frac{1}{3}n(2n - 1)(4n^2 + 2n - 3) \end{aligned} \quad (5.9)$$

という結果が得られる.

6 (2.14) の証明

この節では, $T_k(n)$ を留数定理を用いて計算する. それは

$$T_k(n) = \frac{(-1)^k}{2} \cdot \frac{1}{2\pi i} \left(\int_C - \int_{C(1)} \right) dz \left(\frac{z+1}{z-1} \right)^{2k} G_n(z) \quad (6.1)$$

と書ける. ただし

$$G_n(z) \equiv \sum_{r=1}^n \left(\frac{1}{z - e^{ir\pi/(n+1)}} + \frac{1}{z - e^{-ir\pi/(n+1)}} \right) \quad (6.2)$$

とおいた. $G_n(z)$ の極の位置は, 円分方程式 $z^{2(n+1)} - 1 = 0$ の解のうちで $z^2 - 1 = 0$ の解でないものすべてにわたるから, 通分すると, (3.7) の f_n を用いて,

$$G_n(z) = \frac{2zf_{n/2}'(z^2)}{f_{n/2}(z^2)} \quad (6.3)$$

となる. C の積分は明らかに $2n$ になる.

$f_{n/2}^{(m)}(1)/f_{n/2}(1)$ はもちろん (3.21) の n を $\frac{1}{2}n$ に置き換えれば得られる.

$k = 1$ の場合の $z = 1$ における留数は,

$$G_n(1) = n, \quad (6.4)$$

および

$$G_n'(z) = \frac{2f_{n/2}'(z^2) + (2z)^2 f_{n/2}''(z^2)}{f_{n/2}(z^2)} - \frac{[f_{n/2}'(z^2)]^2}{[f_{n/2}(z^2)]^2} \quad (6.5)$$

から得られる

$$G_n'(1) = \frac{1}{3}n(n-1) \quad (6.6)$$

により計算できる. したがって,

$$T_1(n) = -\frac{1}{2}[2n - 4G_n(1) - 4G_n'(1)] = \frac{1}{3}n(2n+1) \quad (6.7)$$

を得る. これで (2.14) が証明された.

7 (2.11) の別証

$S_k(n)$ については、非常に初等的で簡単な証明ができる。

ド・モアブルの公式の虚部から

$$\begin{aligned}\sin(N\theta) &= \Im(\cos\theta + i\sin\theta)^N \\ &= \sin^N\theta \Im(\cot\theta + i)^N \\ &= \sin^N\theta \Im \sum_{m=0}^N {}_N C_m i^m \cot^{N-m}\theta\end{aligned}\tag{7.1}$$

$N = 2n + 1$, ^{*5} $m = 2j + 1$, $\theta = r\theta_n$ (ただし $\theta_n \equiv \pi/(2n + 1)$) とおけば, $\sin((2n + 1)r\theta_n) = 0$, $\sin(r\theta_n) \neq 0$ (ただし $1 \leq r \leq 2n$) であるから,

$$\sum_{j=0}^n (-1)^j {}_{2n+1} C_{2j+1} \cot^{2n-2j}(r\theta_n) = 0\tag{7.2}$$

であることが分かる。したがって, n 次代数方程式

$$\sum_{j=0}^n (-1)^j {}_{2n+1} C_{2j+1} x^{n-j} = 0\tag{7.3}$$

は n 個の相異なる解 $x = \alpha_r(n) \equiv \cot^2(r\theta_n)$ ($r = 1, 2, \dots, n$) をもつことになる。 $\alpha_r(n)$ の m 次基本対称式を $\sigma_m(n)$ と書けば, 解と係数との関係により,

$$\sigma_m(n) = \frac{{}_{2n+1} C_{2m+1}}{{}_{2n+1} C_1}\tag{7.4}$$

が成り立つ。

対称式の基本定理により, 冪和 $\sum_{r=1}^n x_r^k$ は x_r の基本対称式で表される。具体的には ^{*6}

$$\begin{aligned}S_1(n) &= \sigma_1(n), \\ S_2(n) &= [\sigma_1(n)]^2 - 2\sigma_2(n), \\ S_3(n) &= [\sigma_1(n)]^3 - 3\sigma_1(n)\sigma_2(n) + 3\sigma_3(n), \\ S_4(n) &= [\sigma_1(n)]^4 - 4[\sigma_1(n)]^2\sigma_2(n) + 2[\sigma_2(n)]^2 + 4\sigma_1(n)\sigma_3(n) - 4\sigma_4(n)\end{aligned}\tag{7.5}$$

のようになる。したがって容易に

$$\begin{aligned}S_1(n) &= \frac{{}_{2n+1} C_3}{{}_{2n+1} C_1} = \frac{1}{3}n(2n-1), \\ S_2(n) &= \left(\frac{{}_{2n+1} C_3}{{}_{2n+1} C_1}\right)^2 - 2 \cdot \frac{{}_{2n+1} C_5}{{}_{2n+1} C_1} = \frac{1}{45}n(2n-1)(4n^2 + 10n - 9)\end{aligned}\tag{7.6}$$

が得られる。そのみならず,

$$\begin{aligned}S_3(n) &= \left(\frac{{}_{2n+1} C_3}{{}_{2n+1} C_1}\right)^3 - 3 \cdot \frac{{}_{2n+1} C_3 \cdot {}_{2n+1} C_5}{{}_{2n+1} C_1^2} + 3 \cdot \frac{{}_{2n+1} C_7}{{}_{2n+1} C_1} \\ &= \frac{1}{945}n(2n-1)(32n^4 + 112n^3 + 8n^2 - 252n + 135)\end{aligned}\tag{7.7}$$

^{*5} N が偶数であると, \cot の奇数冪のみがでて, 以下の議論はうまくいかない。

^{*6} 係数を求めるには, 変数 x_r に適当に特殊値 $0, 1, -1$ を代入した式を立て, 連立方程式を解けばよい。

もあまり面倒な計算をせずに遂行できた。さらに

$$S_4(n) = \left(\frac{2n+1C_3}{2n+1C_1}\right)^4 - 4 \cdot \frac{[2n+1C_3]^2 \cdot 2n+1C_5}{(2n+1C_1)^3} + 2 \cdot \left(\frac{2n+1C_5}{2n+1C_1}\right)^2 + 4 \cdot \frac{2n+1C_3 \cdot 2n+1C_7}{(2n+1C_1)^2} - 4 \cdot \frac{2n+1C_9}{2n+1C_1} \quad (7.8)$$

であるが、この計算には数式処理のソフトを使うのが賢明だろう。

8 ゼータ関数との関係

よく知られた不等式 $\sin \theta < \theta < \tan \theta$ ($0 < \theta < \pi/2$) の $-s$ 乗を考えると、任意の $s > 0$ に対し

$$\cot^s \theta < \theta^{-s} < \csc^s \theta \quad (8.1)$$

が成立する。したがって

$$0 < \theta^{-s} - \cot^s \theta < (\cot^2 \theta + 1)^{s/2} - \cot^s \theta \quad (8.2)$$

を得る。 $\theta = r\pi/(2n+1)$ とおいて全体に $[\pi/(2n+1)]^s$ を掛ければ、

$$0 < \frac{1}{r^s} - \left(\frac{\pi}{2n+1}\right)^s \cot^s \left(\frac{r\pi}{2n+1}\right) < O(n^{-2}) \quad (8.3)$$

を得る。 r について 1 から n まで (8.3) の和をとると、

$$0 < \sum_{r=1}^n \frac{1}{r^s} - \left(\frac{\pi}{2n+1}\right)^s S_{s/2}(n) < O(n^{-1}) \quad (8.4)$$

となるので、 $s > 1$ について $n \rightarrow \infty$ の極限をとると、

$$\zeta(s) \equiv \sum_{r=1}^{\infty} \frac{1}{r^s} = \left(\frac{\pi}{2}\right)^s \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{S_{s/2}(n)}{n^s} \quad (8.5)$$

という関係式が得られる。したがって、 $S_k(n)$ の最高次 n^{2k} の係数を計算すれば、 $\zeta(2k)$ が計算できることになる。具体的には (7.6)~(7.8) から

$$\begin{aligned} \zeta(2) &= \left(\frac{\pi}{2}\right)^2 2^2 \cdot \frac{1}{3!} = \frac{\pi^2}{6}, \\ \zeta(4) &= \left(\frac{\pi}{2}\right)^4 2^4 \left(\frac{1}{(3!)^2} - 2 \cdot \frac{1}{5!}\right) = \frac{\pi^4}{90}, \\ \zeta(6) &= \left(\frac{\pi}{2}\right)^6 2^6 \left(\frac{1}{(3!)^3} - 3 \cdot \frac{1}{3! 5!} + 3 \cdot \frac{1}{7!}\right) = \frac{\pi^6}{945}, \\ \zeta(8) &= \left(\frac{\pi}{2}\right)^8 2^8 \left(\frac{1}{(3!)^4} - 4 \cdot \frac{1}{(3!)^2 5!} + 2 \cdot \frac{1}{(5!)^2} + 4 \cdot \frac{1}{3! 7!} - 4 \cdot \frac{1}{9!}\right) = \frac{\pi^8}{9450} \end{aligned} \quad (8.6)$$

である。

(8.6) は有名な「パーゼル問題」のオイラーの解法と密接に関連する。 $(\sin x)/x$ のマクローリン展開

$$\frac{\sin x}{x} = \sum_{k=0}^{\infty} (-1)^k \frac{x^{2k}}{(2k+1)!} \quad (8.7)$$

と、その無限乗積表示

$$\frac{\sin x}{x} = \prod_{r=1}^{\infty} \left(1 - \frac{x^2}{r^2 \pi^2}\right) \quad (8.8)$$

の冪展開とを比較する. 両者の x^{2k} の係数は相等しいはずだから, 無限個の変数 x_r ($r = 1, 2, \dots$) の k 次基本対称式において $x_r = 1/r^2$ とおいたものは, $\pi^{2k}/(2k+1)!$ に等しい. したがって, $\zeta(2k)$ を $1, 2, \dots, k$ 次基本対称式で表せば, バーゼル問題が解けたことになる. つまり, (8.6) と本質的に同じ計算になる.

なお,

$$\sum_{r=1}^{\infty} \frac{1}{(2r-1)^s} = \left(1 - \frac{1}{2^s}\right) \zeta(s) \quad (8.9)$$

であるから,

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \frac{S_k(n)}{n^{2k}} = \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{T_k(n)}{n^{2k}} = \frac{1}{2^{2k}-1} \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{\tilde{S}_k(n)}{n^{2k}} = \frac{1}{2^{2k}-1} \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{U_k(n)}{n^{2k}} \quad (8.10)$$

という関係式が成り立つ.

編集後記

道後公園の桜が満開とテレビが伝えていたのもつい先日、こちら伊予路は新緑の眩しい初夏の候となって参りました。皆様方も相変わらずお元気でお過ごしのことと存じます。

さて、今回も『数学・物理通信』を配信することが出来て非常に嬉しい限りです。そして、いずれの論文も力作揃いで興味深い内容だと思います。正直のところ、もう既に第5巻までに達したのかといった思いです。

本巻4号に掲載された武藤徹氏の自由度の導入について考えてみたい。一般に自由度と言う用語は色々な場面で使われる。特に、統計学では例えば、自由度 n の t 分布とか自由度 m, n の F 分布のように使われる。しかし、本稿の自由度の導入のような形で自由度に接したことは今までなかった。よい勉強になりました。

最後に、“継続は力なり”を忘れないようにしたい。

(新関章三)