量子力学IIで使う数学のうち，説明を省くもの
—簡単な微積分—

類家の担当する量子力学IIで使う数学のうち，より初等的なものをまとめた。これよりも少しレベルの高いものは，拙著「詳解　初等量子化学」の付録にまとめた[1]。

1　x^n の微分

ここでは x^n の微分を求める。これには，具体例として x^3 の微分を求めると見通しがよくなる。微分の定義は，

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}f(x) = \lim_{h\to 0}\frac{f(x+h)-f(x)}{h} \tag{1}$$

であるから，この式で $f(x) = x^3$ とすると，

$$\begin{aligned}
\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}x^3 &= \lim_{h\to 0}\frac{(x+h)^3 - x^3}{h} && \text{定義どおり} \\
&= \lim_{h\to 0}\frac{x^3 + 3hx^2 + 3h^2x + h^3 - x^3}{h} && x^3\ \text{を展開した} \\
&= \lim_{h\to 0}\left(3x^2 + 3hx + h^2\right) && \text{整理した} \\
&= 3x^2 && (2)
\end{aligned}$$

この要領で x^n の微分を求めるが，その際に $(x+h)^n$ の展開が問題になる。これは，$(x+h)^2 = x^2+2hx+h^2$ と $(x+h)^3 = x^3+3hx^2+3h^2x+h^3$ の例から，$(x+h)^n = x^n+nx^{n-1}h+Ax^{n-2}h^2+\cdots$ となることが推測できる。ここで，A は不明な定数だが，すぐ後でわかるように，これを知る必要はない。では，x^n の微分を求めよう。

$$\begin{aligned}
\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}x^n &= \lim_{h\to 0}\frac{(x+h)^n - x^n}{h} && \text{定義どおり} \\
&= \lim_{h\to 0}\frac{x^n + nx^{n-1}h + Ax^{n-2}h^2 + \cdots - x^3}{h} && x^3\ \text{を展開した} \\
&= \lim_{h\to 0}\frac{nx^{n-1}h + Ax^{n-2}h^2 + \cdots}{h} && x^3\ \text{整理した} \\
&= \lim_{h\to 0}\left(nx^{n-1} + Ax^{n-2}h + \cdots\right) && \text{整理した} \\
&= nx^{n-1} && (3)
\end{aligned}$$

以上より，$\dfrac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}x^n = nx^{n-1}$ を得た。

[1] と言っても，出版はもう少し先です。

2　三角関数の微分

ここでは，$\sin\theta$ の微分を求める。$\cos\theta$ や $\tan\theta$ も同様に求められる。$\sin\theta$ の微分を求めるのは，

$$\lim_{\theta\to 0}\left(\frac{\sin\theta}{\theta}\right)=1 \tag{4}$$

という式を用いるから，まずはこれを証明する。そのため，図 1 に示した単位円，三角形，扇形を考える。具体的には，△OAB，△OCD，扇形 OAD の面積の大小関係を用いる。いわゆる，「はさみうち」の方法である。

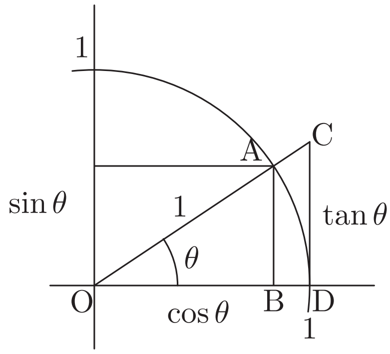

図 1: 単位円

$$\begin{aligned}
&\triangle\mathrm{OAB} < \text{扇形}\,\mathrm{OAD} < \triangle\mathrm{OCD} && \text{面積の大小関係}\\
&\frac{\sin\theta\cos\theta}{2} < \underbrace{\pi r^2\times\frac{\theta}{2\pi}}_{=\theta/2} < \underbrace{\frac{\tan\theta}{2}}_{=\sin\theta/(2\cos\theta)} && \text{面積を式で表した，}r=1\\
&\cos\theta < \frac{\theta}{\sin\theta} < \frac{1}{\cos\theta} && \frac{2}{\sin\theta}\text{をかけた}\\
&\frac{1}{\cos\theta} > \frac{\sin\theta}{\theta} > \cos\theta && \text{逆数にした，大小反転}\\
&\underbrace{\lim_{\theta\to 0}\left(\frac{1}{\cos\theta}\right)}_{1} > \lim_{\theta\to 0}\left(\frac{\sin\theta}{\theta}\right) > \underbrace{\lim_{\theta\to 0}(\cos\theta)}_{1} && \theta\to 0\text{の極限をとった}\\
&\xrightarrow{\text{以上より}} \lim_{\theta\to 0}\left(\frac{\sin\theta}{\theta}\right)=1 && (5)
\end{aligned}$$

これで (4) 式を証明できた。 □[2]

準備はできたから，$\sin\theta$ の微分を求めよう。(1) 式で $f(\theta)=\sin\theta$ とおこう。

$$\begin{aligned}
\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\theta}\sin\theta &= \lim_{h\to 0}\frac{\sin(\theta+h)-\sin\theta}{h} && \text{微分の定義}\\
&= \lim_{h\to 0}\frac{\sin\theta\cos h+\cos\theta\sin h-\sin\theta}{h} && \text{加法定理}\sin(A+B)=\sin A\cos B+\cos A\sin B\\
&= \lim_{h\to 0}\frac{\sin\theta(\cos h-1)}{h} - \underbrace{\lim_{h\to 0}\frac{\sin h}{h}}_{=1}\cos\theta && \text{項を 2 つに分けた}\\
&= \lim_{h\to 0}\frac{\sin\theta(\cos h-1)(\cos h+1)}{h(\cos h+1)}+\cos\theta && \text{第 1 項の分母分子に}(\cos h+1)\text{をかけた}\\
&= \lim_{h\to 0}\frac{\sin\theta(-\sin^2 h)}{h(\cos h+1)}+\cos\theta && \sin^2 h+\cos^2 h=1\text{より}\\
&= \lim_{h\to 0}\frac{\sin h}{h}\frac{\sin h}{(\cos h+1)}(-\sin\theta)+\cos\theta && \text{整理した}\\
&= \underbrace{\lim_{h\to 0}\frac{\sin h}{h}}_{=1}\underbrace{\lim_{h\to 0}\frac{\sin h}{(\cos h+1)}}_{=0}(-\sin\theta)+\cos\theta && \text{極限をとった}\\
&= \cos\theta && (6)
\end{aligned}$$

[2]「□」は証明終了を意味する記号です。

これと同じ手続きで，$\cos\theta$ の微分も求められる。結果だけを示す。

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\cos x = -\sin x \tag{7}$$

3　指数関数の微分

e^x の微分を求める。e はネイピア数で，次のように定義される。

$$\lim_{n\to\infty}\left(1+\frac{1}{n}\right)^n =: e \tag{8}$$

ここで，$t = 1/n$ として，e の定義を次のように書き換えておく。

$$\lim_{t\to 0}(1+t)^{1/t} = e \tag{9}$$

ここでは，より一般的な a^x の微分について考える。

$$\begin{aligned}
\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}a^x &= \lim_{h\to 0}\frac{a^{(x+h)}-a^x}{h} && \text{微分の定義}\\
&= \lim_{h\to 0}\frac{a^x a^h - a^x}{h} && \text{指数法則 } a^{(A+B)} = a^A a^B\\
&= a^x \lim_{h\to 0}\frac{(a^h-1)}{h} && a^x\text{でくくった}
\end{aligned} \tag{10}$$

ここで，$a^h - 1 = t$ とすると，$h \to 0$ のとき $t \to 0$ であり，

$$\begin{aligned}
a^h &= t+1 && \text{移項した}\\
\log_a a^h &= \log_a(t+1) && \text{両辺の対数をとった}\\
h &= \log_a(t+1)
\end{aligned} \tag{11}$$

であるから，これを (10) 式に代入すると，

$$\begin{aligned}
\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}a^x &= a^x \lim_{t\to 0}\frac{t}{\log_a(t+1)}\\
&= a^x \lim_{t\to 0}\frac{1}{(1/t)\log_a(t+1)} && \frac{A}{B} = \frac{1}{(1/A)B}\\
&= a^x \lim_{t\to 0}\frac{1}{\log_a(t+1)^{1/t}} && \frac{1}{C}\log_a A = \log_a A^{1/C}\\
&= a^x \frac{1}{\log_a \lim_{t\to 0}(t+1)^{1/t}} && \lim_{t\to 0}\text{ を }\log_a\text{ の中に入れた}\\
&= a^x \frac{1}{\log_a e} && \text{(9) 式より}\\
&= a^x \log_e a && \text{底の変換公式}\log_A B = \frac{1}{\log_B A}
\end{aligned} \tag{12}$$

ここで，底の変換公式

$$\log_A B = \frac{\log_C B}{\log_C A} \tag{13}$$

を用いた。これは次節で証明する。また，$\lim_{t\to 0}$ と $\log_a$ の順番を交換したが，これには関数の連続性が必要であるが，これに関する考察は省略する。以上より，指数の微分は次のように表される。

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}a^x = a^x \log_e a \tag{14}$$

ここで，$a \to e$ とすると次式を得る。

$$\begin{aligned}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}e^x &= e^x \underbrace{\log_e e}_{=1} \\ &= e^x \end{aligned} \tag{15}$$

3.0.1 底の変換公式

底の変換公式 $\log_A B = \log_C B / \log_C A$ は，

$$\log_A B = x \tag{16}$$
$$\log_C A = y \tag{17}$$
$$\log_C B = z \tag{18}$$

とおくと，$x = z/y$ であるから，これを示せばよい。(16) 式 $\sim$ (18) 式を指数で表すと，

$$A^x = B \tag{19}$$
$$C^y = A \tag{20}$$
$$C^z = B \tag{21}$$

となる。(20) 式と (21) 式を (19) 式に代入すると，

$$\begin{aligned}(C^y)^x &= C^z \\ C^x &= C^{z/y} && \text{両辺を } 1/y \text{ 乗した} \\ \log_C C^x &= \log_C C^{z/y} && \text{両辺の対数をとった} \\ x &= \frac{z}{y} && \text{整理した}\end{aligned} \tag{22}$$

これで底の変換公式 $\log_A B = \log_C B / \log_C A$ を証明できた。 $\square$

4 対数の微分

ここでは，$\log_a x$ の微分を求める。

$$
\begin{aligned}
\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\log_a x &= \lim_{h\to 0}\frac{\log_a(x+h)-\log_a x}{h} \\
&= \lim_{h\to 0}\frac{\log_a(1+h/x)}{h} && \log A-\log B=\log(A/B)\text{ より} \\
&= \frac{1}{x}\lim_{h\to 0}\frac{\log_a(1+h/x)}{h/x} && \text{分母分子を } x \text{ で割った} \\
&= \frac{1}{x}\lim_{t\to 0}\frac{\log_a(1+t)}{t} && t=\frac{h}{x}\text{ とした} \\
&= \frac{1}{x}\lim_{t\to 0}\log_a(1+t)^{1/t} && \frac{\log_a A}{C}=\frac{1}{C}\log_a A=\log_a A^{1/C} \\
&= \frac{1}{x}\log_a \underbrace{\lim_{t\to 0}(1+t)^{1/t}}_{=e} && \lim_{t\to 0}\text{ を }\log_a\text{ の中に入れた} \\
&= \frac{1}{x}\log_a e && \text{(9) 式より}
\end{aligned} \tag{23}
$$

以上より，対数の微分は次のように表される。

$$
\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\log_a x = \frac{\log_a e}{x} \tag{24}
$$

ここで，$a\to e$ とすると次式を得る。

$$
\begin{aligned}
\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\underbrace{\log_e x}_{=:\ln x} &= \frac{\overbrace{\log_e e}^{=1}}{x} \\
\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\ln x &= \frac{1}{x}
\end{aligned} \tag{25}
$$

4.1 合成関数の微分

これ以降，次に示す**合成関数の微分**をよく用いる。

$$
\frac{\mathrm{d}y}{\mathrm{d}x} = \frac{\mathrm{d}y}{\mathrm{d}u}\frac{\mathrm{d}u}{\mathrm{d}x} \tag{26}
$$

これは，y を x で直接微分することと，y を u で微分したものに，u を x で微分したものをかけた結果が同じであることを意味する。

4.1.1 $\sin(ax)$ の微分

$$
\begin{aligned}
\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\sin(ax) &= \underbrace{\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}(ax)}\sin(ax)}_{=\cos(ax)}\underbrace{\frac{\mathrm{d}(ax)}{\mathrm{d}x}}_{=a} && \text{合成関数の微分（連鎖法とも呼ばれる）} \\
&= a\cos(ax)
\end{aligned} \tag{27}
$$

4.1.2 $\cos(ax)$ の微分

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\cos(ax) = \underbrace{\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}(ax)}\cos(ax)}_{=-\sin(ax)}\underbrace{\frac{\mathrm{d}(ax)}{\mathrm{d}x}}_{=a} \qquad \text{合成関数の微分}$$
$$= -a\sin(ax) \tag{28}$$

4.1.3 e^{ax} の微分[3]

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}e^{ax} = \underbrace{\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}(ax)}e^{ax}}_{=e^{ax}}\underbrace{\frac{\mathrm{d}(ax)}{\mathrm{d}x}}_{=a} \qquad \text{合成関数の微分}$$
$$= ae^{ax} \tag{29}$$

a に虚数単位 $i=\sqrt{-1}$ が含まれていてもよい。

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}e^{-ibx} = \underbrace{\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}(-ibx)}e^{-ibx}}_{=e^{-ibx}}\underbrace{\frac{\mathrm{d}(-ibx)}{\mathrm{d}x}}_{=-ib} \qquad \text{合成関数の微分}$$
$$= -ibe^{-ibx} \tag{30}$$

4.1.4 $\ln(ax)$ の微分

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\ln(ax) = \underbrace{\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}(ax)}\ln(ax)}_{=1/(ax)}\underbrace{\frac{\mathrm{d}(ax)}{\mathrm{d}x}}_{=a} \qquad \text{合成関数の微分}$$
$$= \frac{1}{x} \tag{31}$$

微分公式のまとめ

以下の微分公式はよく使うから，暗記しておくのがよい。

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}x^n = nx^{n-1} \tag{32}$$

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\sin(ax) = a\cos(ax) \tag{33}$$

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\cos(ax) = -a\sin(ax) \tag{34}$$

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}e^{ax} = ae^{ax} \tag{35}$$

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\ln x = \frac{1}{x} \tag{36}$$

[3] e^{ax} は $\exp{(ax)}$ とも書く。とくに，肩に乗るものが $-\Delta E/k_{\mathrm{B}}T$ など分数になるなど大きなものを指数が肩に乗せる場合は，$e^{-\frac{\Delta E}{k_{\mathrm{B}}T}}$ ではなく，$\exp\left(-\frac{\Delta E}{k_{\mathrm{B}}T}\right)$ を用いるほうが普通である。

5　積分

5.1　三角関数の積分

5.1.1　$\sin(ax)$ の積分

$$
\begin{aligned}
&\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\cos(ax) = -a\sin(ax) && \\
&-\frac{1}{a}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\cos(ax) = \sin(ax) && \text{両辺を}-a\text{で割った} \\
&\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\left(-\frac{1}{a}\cos(ax)\right) = \sin(ax) && \text{定数}-\frac{1}{a}\text{を微分の中に入れた} \\
&-\frac{1}{a}\cos(ax) = \int\sin(ax)\mathrm{d}x && \text{両辺を積分した} \\
&\xrightarrow{\text{これより}}\quad \int\sin(ax)\mathrm{d}x = -\frac{1}{a}\cos(ax) && \text{左辺と右辺を入れかえた}
\end{aligned} \tag{37}
$$

5.1.2　$\cos(ax)$ の積分

$$
\begin{aligned}
&\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\sin(ax) = a\cos(ax) && \\
&\frac{1}{a}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\sin(ax) = \cos(ax) && \text{両辺を}a\text{で割った} \\
&\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\left(\frac{1}{a}\sin(ax)\right) = \cos(ax) && \text{定数}\frac{1}{a}\text{を微分の中に入れた} \\
&\frac{1}{a}\sin(ax) = \int\cos(ax)\mathrm{d}x && \text{両辺を積分した} \\
&\xrightarrow{\text{これより}}\quad \int\cos(ax)\mathrm{d}x = \frac{1}{a}\sin(ax) && \text{左辺と右辺を入れかえた}
\end{aligned} \tag{38}
$$

5.2　指数関数の積分

5.2.1　e^{ax} の積分

$$
\begin{aligned}
&\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}e^{ax} = ae^{ax} && \\
&\frac{1}{a}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}e^{ax} = e^{ax} && \text{両辺を}a\text{で割った} \\
&\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\left(\frac{1}{a}e^{ax}\right) = e^{ax} && \frac{1}{a}\text{を微分の中に入れた} \\
&\frac{1}{a}e^{ax} = \int e^{ax}\mathrm{d}x && \text{両辺を積分した} \\
&\xrightarrow{\text{これより}}\quad \int e^{ax}\mathrm{d}x = \frac{1}{a}e^{ax} && \text{左辺と右辺を入れかえた}
\end{aligned} \tag{39}
$$

積分公式のまとめ

以下の積分公式はよく使うから，暗記しておくのがよい。

$$\int \sin(ax)\mathrm{d}x = -\frac{1}{a}\cos(ax) \tag{40}$$

$$\int \cos(ax)\mathrm{d}x = \frac{1}{a}\sin(ax) \tag{41}$$

$$\int e^{ax}\mathrm{d}x = \frac{1}{a}e^{ax} \tag{42}$$