科　目　名	学年	番号	学 籍 番 号	氏　　　名
量子化学　第１回（数学）	3			

全問解答し，答え合わせ（自己採点）をして提出せよ。　　　　　授業時間外の学習時間：________時間________分

[1] 数学　部分積分[1]を用いて，次の式が正しいことを確認せよ。

$$\int xe^{ax}\mathrm{d}x = \frac{e^{ax}}{a}\left(x - \frac{1}{a}\right) \tag{1}$$

[1] $\int f(x)g'(x)\mathrm{d}x = f(x)g(x) - \int f'(x)g(x)\mathrm{d}x$

[2] $\boxed{\text{数学}}$ 前問と全く同じように部分積分を用いて，次の式が正しいことを確認せよ。

$$\int x^2 e^{ax} \mathrm{d}x = \frac{e^{ax}}{a}\left(x^2 - \frac{2x}{a} + \frac{2}{a^2}\right) \tag{2}$$

[3] $\boxed{\text{数学}}$ 前の 2 問を解くとわかるように，$x^n e^{ax}$ の積分を考えた場合，n 回部分積分を繰り返せば，次の結果を得る。

$$\int x^n e^{ax} \mathrm{d}x \quad = \quad \frac{e^{ax}}{a}\left(x^n - \frac{nx^{n-1}}{a} + \frac{n(n-1)x^{n-2}}{a^2} - \cdots + \frac{(-1)^n n!}{a^n}\right) \tag{3}$$

同じことであるが，(3) 式で $a \to -a$ とすれば次式を得る。

$$\int x^n e^{-ax} \mathrm{d}x = -\frac{e^{-ax}}{a}\left(x^n + \frac{nx^{n-1}}{a} + \frac{n(n-1)x^{n-2}}{a^2} + \cdots + \frac{n!}{a^n}\right) \tag{4}$$

ここで，(4) で $0 \leq x < \infty$ の定積分は次の結果を得る。これを確認せよ。

$$\int_0^{\infty} x^n e^{-ax} \mathrm{d}x = \frac{n!}{a^{n+1}} \tag{5}$$

[4] 数学 （この講義では使わないが，次の問題で使うので）ついでに，有名な積分公式について証明する。

次の積分を**Gauss 積分**（ガウス せきぶん）という。証明せよ[2]。

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-ax^2}\mathrm{d}x \quad = \quad \sqrt{\frac{\pi}{a}} \tag{6}$$

[2] といっても，この積分には少々テクニックが必要だから，解答を見て納得すればよい。

[5] $\boxed{\text{数学}}$ 次式を証明せよ。

$$\int_0^\infty x^{2n} e^{-ax^2} \mathrm{d}x = \frac{1 \cdot 3 \cdot 5 \cdots (2n-1)}{2^{n+1} a^n} \sqrt{\frac{\pi}{a}} \tag{7}$$

$$\int_0^\infty x e^{-ax^2} \mathrm{d}x = \frac{1}{2a} \tag{8}$$

[6] $\boxed{\text{数学}}$ 次の連立同次方程式を解け。

$$\begin{cases} 2x + 3y = 0 \\ 5x + 4y = 0 \end{cases} \tag{9}$$

[7] $b = \dfrac{15}{2}$ とおいたとき，次の連立方程式を解け。

$$\begin{cases} 2x + 3y = 0 \\ 5x + by = 0 \end{cases} \tag{10}$$

解答

[1]　部分積分を 1 回だけすればよい。

$$\begin{aligned}
\int xe^{ax}\mathrm{d}x &= \int x\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\left(\frac{e^{ax}}{a}\right)\mathrm{d}x && \text{部分積分の準備をした}\\
&= x\frac{e^{ax}}{a} - \int \frac{e^{ax}}{a}\mathrm{d}x && \text{部分積分をした}\\
&= x\frac{e^{ax}}{a} - \frac{1}{a}\int e^{ax}\mathrm{d}x && \text{少し書き直した}\\
&= x\frac{e^{ax}}{a} - \frac{1}{a}\left(\frac{e^{ax}}{a}\right) = \frac{e^{ax}}{a}\left(x-\frac{1}{a}\right) && \text{積分して，整理した}
\end{aligned}$$

[2]　2 回部分積分すればよい（ただし，2 回目の部分積分は [1] と全く同じ）。

$$\begin{aligned}
\int x^2e^{ax}\mathrm{d}x &= \int x^2\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\left(\frac{e^{ax}}{a}\right)\mathrm{d}x && \text{部分積分の準備をした}\\
&= x^2\frac{e^{ax}}{a} - \int 2x\frac{e^{ax}}{a}\mathrm{d}x && \text{部分積分をした}\\
&= x^2\frac{e^{ax}}{a} - \frac{2}{a}\underbrace{\int xe^{ax}\mathrm{d}x}_{=[1]\text{ の問題}} && \text{少し書き直した}\\
&= x^2\frac{e^{ax}}{a} - \frac{2}{a}\underbrace{\left[\frac{e^{ax}}{a}\left(x-\frac{1}{a}\right)\right]}_{=[1]\text{ の結果}} && \text{[1] の結果を代入した}\\
&= \frac{e^{ax}}{a}\left(x^2-\frac{2x}{a}+\frac{2}{a^2}\right) && \text{整理した}
\end{aligned}$$

[3]　(4) 式をまずは展開し，上限と下限を代入すればよい。

$$\int_o^\infty x^n e^{-ax}\mathrm{d}x = \left[-\frac{x^n}{ae^{ax}} - \frac{nx^{n-1}}{a^2e^{ax}} - \frac{n(n-1)x^{n-2}}{a^3e^{ax}} - \cdots - \frac{n!}{a^{n+1}e^{ax}}\right]_0^\infty$$

まずは，上限 ∞ を代入する。ただし，上限である ∞ を代入すると，例えば第 1 項は，$-\infty/\infty$ で不定となる。そこで，l'Hôpital の定理を用いると第 1 項目の値は，

$$\lim_{x\to\infty}\frac{x^n}{ae^{ax}} = \lim_{x\to\infty}\frac{(x^n)'}{(ae^{ax})'} = \lim_{x\to\infty}\frac{nx^{n-1}}{a^2e^{ax}}$$

と評価できるが，これは第 2 項そのものである。さらに，l'Hôpital の定理をもう一度適用すれば第 3 項と同じになる。同様に，l'Hôpital の定理を n 回繰り返せば，第 n 項と同じ形になるが，n 項目は分子に x を含まないから上限 ∞ を代入すれば 0 になる。

$$\begin{aligned}
\lim_{x\to\infty}\frac{x^n}{ae^{ax}} &= \lim_{x\to\infty}\frac{nx^{n-1}}{a^2e^{ax}}\\
&= \lim_{x\to\infty}\frac{n(n-1)x^{n-2}}{a^3e^{ax}}\\
&\vdots\\
&= \lim_{x\to\infty}\frac{n!}{a^{n+1}e^{ax}}\\
&= 0
\end{aligned}$$

これは第 1 項目に限ったことではないのは明らかである。すなわち，上限 ∞ を代入すると，全ての項は 0 となる。

次に下限 0 を代入する。これは簡単で，第 1 項から第 $n-1$ 項は明らかに 0 となる。最後の第 n 項は分子に x を含まないから，$-n!/(a^{n+1}e^0) = -n!/a^{n+1}$ となる。結局は，これが唯一 0 でない項であるから，積分結果は $n!/a^{n+1}$ となる。

l'Hôpital の定理

関数 $f(x)$ と $g(x)$ を考える。$\lim_{x\to c} f(x)$ と $\lim_{x\to c} g(x)$ の値が等しく，これが 0 もしくは $\pm\infty$ である場合，すなわち，$\lim_{x\to c} f(x) = \lim_{x\to c} g(x) = 0$ もしくは $\lim_{x\to c} f(x) = \lim_{x\to c} g(x) = \pm\infty$ である場合，$\lim_{x\to c} \dfrac{f'(x)}{g'(x)}$ が存在する場合にかぎり，$\lim_{x\to c} \dfrac{f(x)}{g(x)} = \lim_{x\to c} \dfrac{f'(x)}{g'(x)}$ である。これを**l'Hôpital（ロピタル）の定理（ていり）**という。

[4]　以下のとおり，まずは左辺の二乗について計算する。

$$
\begin{aligned}
&\left(\int_{-\infty}^{\infty} e^{-ax^2}\mathrm{d}x\right)^2 \\
&\quad = \int_{-\infty}^{\infty} e^{-ax^2}\mathrm{d}x \times \int_{-\infty}^{\infty} e^{-ay^2}\mathrm{d}y && \text{自乗を } xy \text{ 平面での二重積分に書き換えた} \\
&\quad = \int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty} e^{-a(x^2+y^2)}\mathrm{d}x\mathrm{d}y && \text{まとめた} \\
&\quad = \int_0^{\infty} re^{-ar^2}\mathrm{d}r \underbrace{\int_0^{2\pi}\mathrm{d}\phi}_{=2\pi} && \text{極座標（二次元）に書き換えた} \\
&\qquad\quad x = r\cos\phi, \qquad y = r\sin\phi \quad \to x^2 + y^2 = r^2 \\
&\qquad\quad \mathrm{d}x\mathrm{d}y = r\mathrm{d}\phi\mathrm{d}r \quad \text{右図参照} \\
&\quad = \pi\int_0^{\infty} 2re^{-ar^2}\mathrm{d}r && \text{整理した} \\
&\quad = \pi\int_0^{\infty} e^{-at}\mathrm{d}t && r^2 = t \text{ と変数変換した} \\
&\qquad\quad r^2 = t \text{ の両辺を } t \text{ で微分すると（ただし，左辺は連鎖法で），} \\
&\qquad\quad \frac{\mathrm{d}r^2}{\mathrm{d}r}\frac{\mathrm{d}r}{\mathrm{d}t} = 1 \to 2r\frac{\mathrm{d}r}{\mathrm{d}t} = 1 \to 2r\mathrm{d}r = \mathrm{d}t \\
&\quad = \frac{\pi}{-a}\Big[e^{-at}\Big]_0^{\infty} = \frac{\pi}{a} && \text{積分計算した}
\end{aligned}
$$

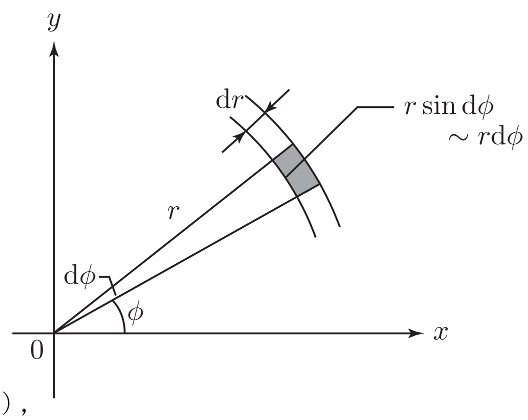

図 1: 2 次元極座標における面積素片

二乗が π/a だから，$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-ax^2}\mathrm{d}x = \sqrt{\dfrac{\pi}{a}}$ を証明できた。また，被積分関数 e^{-ax^2} は偶関数（$x=0$ に対して対称）だから，積分区間が半分の場合，$\int_0^{\infty} e^{-ax^2}\mathrm{d}x = \dfrac{1}{2}\sqrt{\dfrac{\pi}{a}}$ となる。

[5]　準備として，次の積分を考える。

$$I_1 = \int_0^{\infty} xe^{-ax^2}\mathrm{d}x$$

これは，置換積分によって簡単に計算できる。

$$
\begin{aligned}
& t = ax^2 \\
& \xrightarrow{\text{とおくと}} \frac{\mathrm{d}t}{\mathrm{d}x} = 2ax \xrightarrow{\text{ただちに}} x\mathrm{d}x = \frac{\mathrm{d}t}{2a}
\end{aligned}
$$

これを代入すれば，次の結果を得る。

$$\begin{aligned} I_1 &= \frac{1}{2a}\int_0^\infty e^{-t}\mathrm{d}t \\ &= -\frac{1}{2a}\left[e^{-t}\right]_0^\infty = \frac{1}{2a} \end{aligned}$$

ここで，前問でやった Gauss 積分（ただし，積分区間は 0〜∞）を使う。

$$\begin{aligned} I_0 &= \int_0^\infty e^{-ax^2}\mathrm{d}x \\ &= \frac{1}{2}\sqrt{\frac{\pi}{a}} \end{aligned}$$

以上で準備は終了。ここで，次の積分を考える。

$$I_n = \int_0^\infty x^n e^{-ax^2}\mathrm{d}x$$

ここで，$\dfrac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\left(e^{-ax^2}\right) = -2axe^{-ax^2}$ であることに注意すると，上の積分は以下のように書き換えられる。

$$\begin{aligned} I_n &= \int_0^\infty x^n e^{-ax^2}\mathrm{d}x \\ &= \int_0^\infty x^n \frac{1}{(-2ax)}\underbrace{\left(-2axe^{-ax^2}\right)}_{\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}e^{-ax^2}}\mathrm{d}x \\ &= -\frac{1}{2a}\int_0^\infty x^{n-1}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}e^{-ax^2}\mathrm{d}x \end{aligned}$$

準備はできたから，一度部分を積分をすると次の結果を得る。

$$\begin{aligned} I_n &= -\frac{1}{2a}\int_0^\infty x^{n-1}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}e^{-ax^2}\mathrm{d}x \\ &= -\frac{1}{2a}\underbrace{\left[x^{n-1}e^{-ax^2}\right]_0^\infty}_{=0\text{：ロピタルの定理}} + \frac{n-1}{2a}\int_0^\infty x^{n-2}e^{-ax^2}\mathrm{d}x \\ &= \frac{n-1}{2a}\int_0^\infty x^{n-2}e^{-ax^2}\mathrm{d}x \\ &= \frac{n-1}{2a}I_{n-2} \end{aligned}$$

これより，I_n は部分積分を繰り返すことによって，n が偶数のときは I_0 に帰着し，n が奇数のときは I_1 に帰着することがわかる。

$n = 10$ の場合で具体的な例で見る。

$$\begin{aligned} I_{10} &= \frac{9}{2a}I_8 \\ &= \frac{9}{2a}\cdot\frac{7}{2a}I_6 \\ &= \frac{9}{2a}\cdot\frac{7}{2a}\cdot\frac{5}{2a}I_4 \\ &= \frac{9}{2a}\cdot\frac{7}{2a}\cdot\frac{5}{2a}\cdot\frac{3}{2a}I_2 \\ &= \frac{9}{2a}\cdot\frac{7}{2a}\cdot\frac{5}{2a}\cdot\frac{3}{2a}\cdot\frac{1}{2a}I_0 \\ &= \frac{9}{2a}\cdot\frac{7}{2a}\cdot\frac{5}{2a}\cdot\frac{3}{2a}\cdot\frac{1}{2a}\cdot\frac{1}{2}\sqrt{\frac{\pi}{a}} \\ &= \frac{9\cdot7\cdot5\cdot3\cdot1}{2^{5+1}a^5}\sqrt{\frac{\pi}{a}} \end{aligned}$$

ここで，偶数である 10 を新たに $2n$ と書き直せば，以下の結果を得る。

$$I_{2n} = \frac{(2n-1)\cdot 7\cdot 5\cdot 3\cdot 1}{2^{n+1}a^n}\sqrt{\frac{\pi}{a}}$$

これを一般化すれば，次のように書ける。

$$\int_0^\infty x^{2n}e^{-ax^2}\mathrm{d}x = \frac{1\cdot 3\cdot 5\cdots(2n+1)}{2^{n+1}a^n}\sqrt{\frac{\pi}{a}} \qquad \text{ただし}, n=1,2,\cdots$$

これで (7) 式を導けた。

次に $n=9$ の場合で具体的な例で見る。

$$\begin{aligned} I_9 &= \frac{8}{2a}I_7 \\ &= \frac{8}{2a}\cdot\frac{6}{2a}I_5 \\ &= \frac{8}{2a}\cdot\frac{6}{2a}\cdot\frac{4}{2a}I_3 \\ &= \frac{8}{2a}\cdot\frac{6}{2a}\cdot\frac{4}{2a}\cdot\frac{2}{2a}I_1 \\ &= \frac{4}{a}\cdot\frac{3}{a}\cdot\frac{2}{a}\cdot\frac{1}{a}\cdot\frac{1}{2a} \\ &= \frac{4\cdot 3\cdot 2\cdot 1}{2a^{4+1}} \end{aligned}$$

ここで，奇数である 9 を新たに $2n+1$ と書き直せば，以下の結果を得る。

$$I_{2n+1} = \frac{n\cdot 3\cdot 2\cdot 1}{2a^{n+1}}$$

これを一般化すれば，次のように書ける。

$$\int_0^\infty x^{2n+1}e^{-ax^2}\mathrm{d}x = \frac{n!}{2a^{n+1}} \qquad \text{ただし}, n=0,1,2\cdots$$

$n=0$ とすれば，(8) 式となる。これで (8) 式を導けた。

[6] 上式より $x=-(3/2)y$ を得て，下式に代入すれば $-(7/2)y=0$ を得るから，$x=0,\ y=0$ となる。

言うまでもないが，$x=0,\ y=0$ が連立方程式の唯一の解である。

[7] $b=\dfrac{15}{2}$ とおくと，下式は $5x+\dfrac{15}{2}y=0$ となる。容易にわかるように，この式は，

$$5x+\frac{15}{2}y=0 \xrightarrow{\text{両辺に 2 をかける}} 10x+15y=0 \xrightarrow{\text{両辺を 5 で割る}} 2x+3y=0$$

と変形できるから，上の式と同じ式である。すなわち，変数が x と y の 2 個で，関係式が 1 個であるため，x と y は一意には決まらず，$x=-3t,\ y=2t$ (t は任意) を満たすあらゆる x と y が連立方程式の解となる。

ここでは，[6] とは違って「$x=0,\ y=0$ でない解を持つ」ということに注目する。この違いは，$b=\dfrac{15}{2}$ にあることは明らかであるが，この値は，

$$D = \begin{vmatrix} 2 & 3 \\ 5 & b \end{vmatrix} = 2b-15=0 \tag{11}$$

より定まる。では，なぜ行列式 $D=0$ が決め手になるのだろうか。最後にこの点について説明する。これには，[6] に戻って考える。まずは，連立方程式を行列を使って書き直すと，

$$\begin{cases} 2x+3y=0 \\ 5x+4y=0 \end{cases} \xrightarrow{\text{これは，次のように書ける}} \underbrace{\begin{pmatrix} 2 & 3 \\ 5 & 4 \end{pmatrix}}_{=:A} \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix} \xrightarrow{\text{ただの書き換え}} A \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix} \tag{12}$$

と書ける。ここで，行列 A を次のように定めた。

$$A = \begin{pmatrix} 2 & 3 \\ 5 & 4 \end{pmatrix} \tag{13}$$

行列 A の逆行列を A^{-1} と書くと，A^{-1} の具体的な形は，

$$A^{-1} = \frac{1}{7} \begin{pmatrix} -4 & 3 \\ 5 & -2 \end{pmatrix} \tag{14}$$

である。(12) 式の両辺に左から A^{-1} をかけると，

$$\underbrace{\frac{1}{7} \begin{pmatrix} -4 & 3 \\ 5 & -2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 2 & 3 \\ 5 & 4 \end{pmatrix}}_{=I=\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}} \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} = \underbrace{\frac{1}{7} \begin{pmatrix} -4 & 3 \\ 5 & -2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}}_{=0\text{ : 0 行列に何をかけても 0}} \tag{15}$$

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix} \tag{16}$$

$$\begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix} \tag{17}$$

を得る。すなわち，連立方程式の係数で作る行列を A，この逆行列を A^{-1} と書けば，斉次方程式は，

$$A \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix} \xrightarrow{\text{両辺に } A^{-1} \text{をかけると}} A^{-1}A \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} = A^{-1} \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix} \xrightarrow{\text{計算すると}} \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix} \tag{18}$$

と計算でき，$(x,y)=(0,0)$ が解となることがわかる。逆に考えれば，連立方程式が $(x,y)=(0,0)$ でない解を持つためには逆行列が存在しなければいいわけで，逆行列が，

$$A = \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix} \xrightarrow{\text{これの逆行列は}} A^{-1} = \frac{\begin{pmatrix} d & -b \\ -c & a \end{pmatrix}}{\begin{vmatrix} a & b \\ c & d \end{vmatrix}} = \frac{\begin{pmatrix} d & -b \\ -c & a \end{pmatrix}}{D} \tag{19}$$

で表されることを思い出せば，逆行列の分母に現れる行列式が 0，すなわち $D=0$ であることが，連立方程式の係数で作る行列が逆行列を持たない条件であることがわかる。

今日の講義やこの宿題でわからないことがあれば，お伝えください。また，講義に対する要望があればお書きください。感想などでも結構です。もちろん，成績等には一切関係ありません。

✎ 記述欄