

[A-1] 指数についての規則

$$x^0 = 1, \quad x^1 = x, \quad x^n x^m = x^{n+m},$$

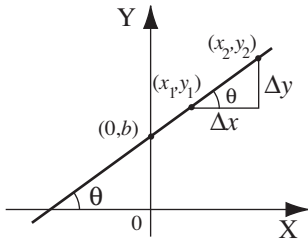
$$\frac{x^n}{x^m} = x^{n-m}, \quad x^{\frac{1}{n}} = \sqrt[n]{x}, \quad (x^n)^m = x^{nm}$$

[A-2] 式の展開

- $(x + y)^n = x^n + nx^{n-1}y + \dots + {}_n C_k x^k y^{n-k} + \dots + y^n$
- $\frac{1}{1-x} = 1 + x + x^2 + x^3 + \dots$ (等比級数の和)
- $(1 + \Delta)^n \simeq 1 + n\Delta$ ($\Delta \ll 1$ の場合、 \simeq は近似的に等しいという意味)

[A-3] 各種関数

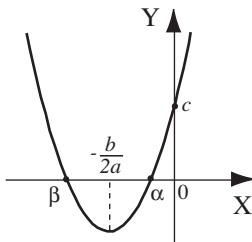
○ 1次関数



$$y = ax + b$$

傾き $a = \frac{y_2 - y_1}{x_2 - x_1} = \frac{\Delta y}{\Delta x} = \tan \theta$

○ 2次関数



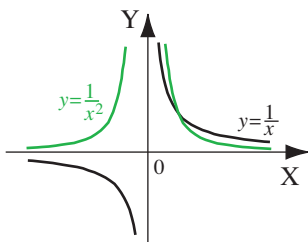
$$y = ax^2 + bx + c$$

$$= a \left(x + \frac{b}{2a} \right)^2 + c - \frac{b^2}{4a}$$

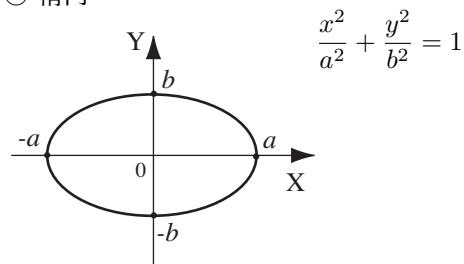
$$= (x - \alpha)(x - \beta)$$

2次方程式の解 $\alpha, \beta = \frac{-b \pm \sqrt{b^2 - 4ac}}{2a}$

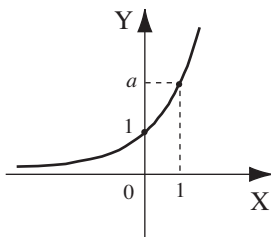
○ 双曲線



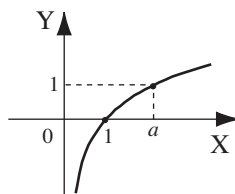
○ 楕円



○ 指数関数



○ 対数関数



対数の性質

- $\log_a(xy) = \log_a x + \log_a y$
- $\log_a \left(\frac{x}{y} \right) = \log_a x - \log_a y$
- $\log_a x^n = n \log_a x$
- $\log_a a = 1$
- $\log_a 1 = 0$

[A-4] 自然対数の底 e

$$e \stackrel{\text{定義}}{=} \lim_{n \rightarrow \infty} \left(1 + \frac{1}{n}\right)^n = 2.718281828\dots$$

$$\begin{aligned} e^x &= \lim_{n \rightarrow \infty} \left\{ \left(1 + \frac{1}{n}\right)^n \right\}^x \stackrel{m \equiv nx}{=} \lim_{m \rightarrow \infty} \left(1 + \frac{x}{m}\right)^m \\ &= \lim_{m \rightarrow \infty} \left(1 + x + \frac{m(m-1)}{2 \cdot 1} \left(\frac{x}{m}\right)^2 + \frac{m(m-1)(m-2)}{3 \cdot 2 \cdot 1} \left(\frac{x}{m}\right)^3 + \dots\right) \\ &= 1 + x + \frac{1}{2!}x^2 + \frac{1}{3!}x^3 + \dots \end{aligned}$$

[A-5] オイラーの式 (高等学校では学習しないが、便利で大切な公式です。)

ド・モアブル (De Moivre) の式

$$\cos(n\theta) + i \sin(n\theta) = (\cos \theta + i \sin \theta)^n$$

を使う。三角関数の和の公式を用いて証明できる。 i は虚数単位 $\sqrt{-1}$ である。

$\theta = x/n$ とすると、どんな値の n でも、ド・モアブルの式は成立するから

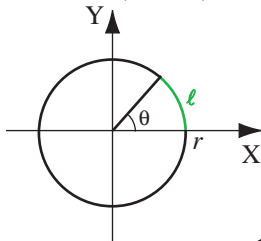
$$\cos x + i \sin x = \left(\cos \frac{x}{n} + i \sin \frac{x}{n}\right)^n = \lim_{n \rightarrow \infty} \left(\cos \frac{x}{n} + i \sin \frac{x}{n}\right)^n$$

$n \rightarrow \infty$ のとき、 $\cos(x/n) \rightarrow 1$ 、 $\sin(x/n) \rightarrow x/n$ なので、A-4 を用いて

$$\cos x + i \sin x = \lim_{n \rightarrow \infty} \left(1 + i \frac{x}{n}\right)^n = e^{ix}$$

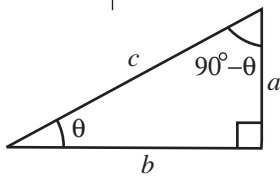
[A-6] 三角関数

○弧度法 (radian)



$$\theta \text{ [rad]} = \frac{l}{r}$$

度	0°	30°	60°	90°	180°	360°
ラジアン	0	$\pi/6$	$\pi/3$	$\pi/2$	π	2π



ピタゴラスの定理 $c = \sqrt{a^2 + b^2}$

$$\sin \theta = \frac{a}{c}, \quad \cos \theta = \frac{b}{c}, \quad \tan \theta = \frac{\sin \theta}{\cos \theta} = \frac{a}{b}$$

$$\sin^2 \theta + \cos^2 \theta = 1$$

$$\text{より一般には、} \quad \cos x = \frac{e^{ix} + e^{-ix}}{2}, \quad \sin x = \frac{e^{ix} - e^{-ix}}{2i}$$

○三角関数の公式

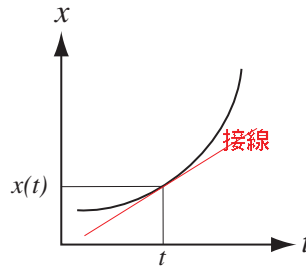
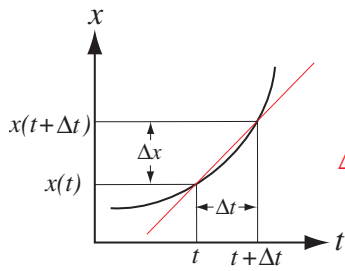
$$\begin{aligned} \cdot \sin(x \pm y) &= \frac{1}{2i} \left(e^{i(x \pm y)} - e^{-i(x \pm y)} \right) \\ &= \frac{1}{2i} \{ (\cos x + i \sin x)(\cos y \pm i \sin y) - (\cos x - i \sin x)(\cos y \mp i \sin y) \} \\ &= \sin x \cos y \pm \cos x \sin y \end{aligned}$$

$$\cdot \cos(x + y) = \cos x \cos y - \sin x \sin y$$

$$\cdot \sin x = x - \frac{x^3}{3!} + \frac{x^5}{5!} - \dots$$

$$\cdot \cos x = 1 - \frac{x^2}{2!} + \frac{x^4}{4!} - \dots$$

[A-7] 微分



$$\begin{aligned} & \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{x(t + \Delta t) - x(t)}{(t + \Delta t) - t} \\ &= \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{\Delta x}{\Delta t} \\ &= \frac{dx}{dt} \quad \text{微分} \end{aligned}$$

○ $x(t) = t^n$

$$\begin{aligned} \frac{dx(t)}{dt} &= \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{(t + \Delta t)^n - t^n}{\Delta t} = \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{\{t^n + nt^{n-1}\Delta t + \dots + {}_n C_k t^k (\Delta t)^{n-k} + \dots + (\Delta t)^n\} - t^n}{\Delta t} \\ &= \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \left(nt^{n-1} + \frac{n(n-1)}{2} t^{n-2} \Delta t + \dots + (\Delta t)^{n-1} \right) = nt^{n-1} \end{aligned}$$

○ $x(t) = e^{at}$

$$\begin{aligned} \frac{dx(t)}{dt} &= \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{e^{a(t+\Delta t)} - e^{at}}{\Delta t} = \lim_{\Delta t \rightarrow 0} e^{at} \frac{e^{a\Delta t} - 1}{\Delta t} = \lim_{\Delta t \rightarrow 0} e^{at} \frac{(1 + a\Delta t + \frac{1}{2}(a\Delta t)^2 + \dots) - 1}{\Delta t} \\ &= ae^{at} \end{aligned}$$

○ $x(t) = \log_e t$

$$\begin{aligned} \frac{dx(t)}{dt} &= \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{\log_e(t + \Delta t) - \log_e t}{\Delta t} = \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \log_e \left(1 + \frac{\Delta t}{t} \right)^{\frac{1}{\Delta t}} \stackrel{n=t/\Delta t}{=} \lim_{n \rightarrow \infty} \log_e \left\{ \left(1 + \frac{1}{n} \right)^n \right\}^{\frac{1}{t}} \\ &= \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{t} \log_e \left(1 + \frac{1}{n} \right)^n = \frac{1}{t} \log_e e = \frac{1}{t} \end{aligned}$$

○ $x(t) = \sin(at)$

$$\begin{aligned} \frac{dx(t)}{dt} &= \frac{d}{dt} \left(\frac{e^{iat} - e^{-iat}}{2i} \right) = \frac{1}{2i} \{iae^{iat} + iae^{-iat}\} = a \frac{e^{iat} + e^{-iat}}{2} \\ &= a \cos(at) \end{aligned}$$

○ $x(t) = \cos(at)$

$$\frac{dx(t)}{dt} = -a \sin(at)$$

○ $x(t) = f(t)g(t)$

$$\begin{aligned} \frac{dx(t)}{dt} &= \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{f(t + \Delta t)g(t + \Delta t) - f(t)g(t)}{\Delta t} \\ &= \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{\{f(t + \Delta t) - f(t)\}g(t + \Delta t) + f(t)\{g(t + \Delta t) - g(t)\}}{\Delta t} \\ &= \frac{df(t)}{dt} g(t) + f(t) \frac{dg(t)}{dt} \end{aligned}$$

○ $x = f(u)$, $u = g(t)$ のとき、合成関数 $x(t) = f(g(t))$ について

$$\begin{aligned} & g(t + \Delta t) - g(t) = \Delta u \quad \text{とおけば} & \Delta t \rightarrow 0 \text{ ならば } \Delta u \rightarrow 0 \text{ なので} \\ & \frac{f(g(t + \Delta t)) - f(g(t))}{\Delta t} = \frac{f(u + \Delta u) - f(u)}{\Delta u} \frac{g(t + \Delta t) - g(t)}{\Delta t} & \frac{dx}{dt} = \frac{dx}{du} \frac{du}{dt} \end{aligned}$$

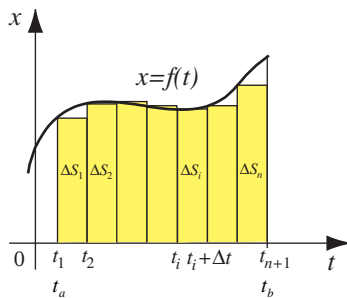
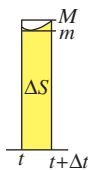
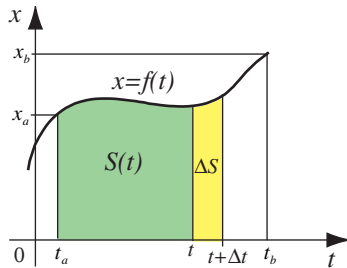
○ 不定積分

関数 $f(t)$ に対して、微分すると $f(t)$ になる関数、すなわち $\frac{dF(t)}{dt} = f(t)$ となる関数 $F(t)$ を $f(t)$ の不定積分という。そして

$$\int f(t)dt = F(t) + C$$

と表す。ここで、定数 C は積分定数という。

○ 面積と定積分



$S(t)$: $t_a \sim t$ の範囲で、曲線 $f(t)$ と t 軸に挟まれる面積

$S(t) + \Delta S$: $t_a \sim t + \Delta t$ の範囲で、曲線 $f(t)$ と t 軸に挟まれる面積
 $t \sim t + \Delta t$ の範囲で、関数 $f(t)$ の最大値を M 、最小値を m とすると

$$m \cdot \Delta t \leq \Delta S \leq M \cdot \Delta t \quad \text{したがって} \quad m \leq \frac{\Delta S}{\Delta t} \leq M$$

$\Delta t \rightarrow 0$ とすると、 m, M はともに $f(t)$ に限りなく近づくから

$$\lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{\Delta S}{\Delta t} = f(t) \quad \text{すなわち} \quad \frac{dS(t)}{dt} = f(t)$$

よって、 $S(t) = F(t) + C$ であり、 $f(t)$ の不定積分となることが分かる。
 $t = t_a$ とすると、 $S(t)$ の定義から $S(t_a) = 0$ なので、 $F(t_a) + C = 0$ 、
 よって、 $C = -F(t_a)$ となる。したがって、 $t_a \leq t \leq t_b$ の範囲の面積は
 $S(t_b) = F(t_b) + C = F(t_b) - F(t_a)$ となることが分かる。以上のことから、
 $F(t_b) - F(t_a)$ は定積分の定義であり、 $t_a \sim t_b$ の面積は

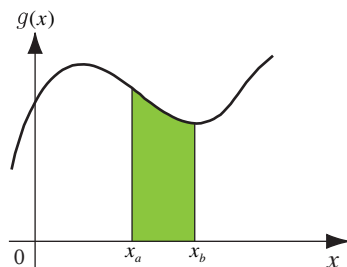
$$\int_{t_a}^{t_b} f(t)dt$$

である。また、 $t_a \sim t_b$ の範囲を n 等分して、微小面積 ΔS_i ($i = 1 \sim n$) を足し合わせることによって $t_a \sim t_b$ の面積を求めることができる。

$$\int_{t_a}^{t_b} f(t)dt = \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \sum_{i=1}^n f(t_i)\Delta t$$

これを、区分別求積法と呼ぶ。

○ 置換積分



変数 x についての関数 $g(x)$ に関する不定積分

$$G(x) = \int g(x) dx \tag{1}$$

について考える。不定積分の定義から、原始関数 $G(x)$ と被積分関数 $g(x)$ の間には

$$\frac{dG(x)}{dx} = g(x) \tag{2}$$

という関係が成立する。

変数 x が他の変数 t によって $x = f(t)$ のように変化することを考える。この関数を $x(t)$ のように表すことにして、変数 t の関数

$$G(x(t)) \stackrel{\text{定義}}{=} H(t) \tag{3}$$

を考える。微分の公式を用いると

$$\frac{dH(t)}{dt} = \frac{dG(x(t))}{dx(t)} \frac{dx(t)}{dt} \tag{4}$$

なり、式 (2) を用いると

$$\frac{dH(t)}{dt} = g(x(t)) \frac{dx(t)}{dt} \tag{5}$$

と表すことができる。この関係を積分で表すと

$$H(t) = \int g(x(t)) \frac{dx(t)}{dt} dt \tag{6}$$

となる。これは式 (1) と (2) の関係と同様なものである。

次に、区間 $x_a \sim x_b$ についての定積分を考える。式 (1) の不定積分を用いると

$$G(x_b) - G(x_a) = \int_{x_a}^{x_b} g(x) dx \quad (7)$$

となる。変数 x と t の関係が

$$x_a = x(t_a), \quad x_b = x(t_b) \quad (8)$$

であるとする、式 (3) から

$$G(x_b) - G(x_a) = H(t_b) - H(t_a) \quad (9)$$

という関係が成立する。また、不定積分 (式 (6)) を用いると

$$H(t_b) - H(t_a) = \int_{t_a}^{t_b} g(x(t)) \frac{dx(t)}{dt} dt \quad (10)$$

となる。よって、式 (7),(9),(10) から

$$\int_{t_a}^{t_b} g(x(t)) \frac{dx(t)}{dt} dt = \int_{x_a}^{x_b} g(x) dx \quad (11)$$

という関係が成立することが分かる。これを **置換積分** という。これは以下のような手続であると理解すると便利である。

○ 積分公式 (積分定数は省略)

<ul style="list-style-type: none"> ・微分 $\int \frac{df(t)}{dt} dt = f(t), \quad \frac{d}{dt} \int f(t) dt = f(t)$ ・部分積分 $\int \frac{df(t)}{dt} g(t) dt = f(t)g(t) - \int f(t) \frac{dg(t)}{dt} dt$ ・置換積分 $\int f(t) dt \stackrel{t=g(x)}{=} \int f(g(x)) \frac{dg(x)}{dx} dx$
--

・代表的な不定積分

$$\int x^n dx = \frac{x^{n+1}}{n+1}$$

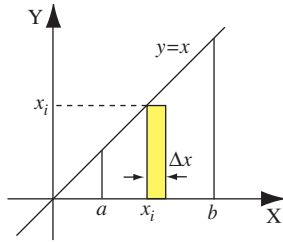
$$\int \frac{dx}{ax+b} = \frac{1}{a} \log_e |ax+b|$$

$$\int \frac{dx}{(ax+b)^2} = -\frac{1}{a(ax+b)}$$

$\int \frac{dx}{(x^2+a^2)} = \frac{1}{a} \tan^{-1} \frac{x}{a}$	$\int \sin(ax) dx = -\frac{1}{a} \cos(ax)$	$\int \frac{dx}{(x^2+a^2)^{3/2}} = -\frac{x}{a^2 \sqrt{x^2+a^2}}$
$\int \frac{dx}{\sqrt{a^2-x^2}} = \sin^{-1} \frac{x}{a} \quad (a^2-x^2 > 0)$	$\int \cos(ax) dx = \frac{1}{a} \sin(ax)$	$\int \frac{x dx}{(x^2+a^2)^{3/2}} = -\frac{1}{\sqrt{x^2+a^2}}$
$\int e^{ax} dx = \frac{1}{a} e^{ax}$	$\int \sin^2(ax) dx = \frac{x}{2} - \frac{\sin(2ax)}{4a}$	
$\int x e^{ax} dx = \frac{e^{ax}}{a^2} (ax-1)$	$\int \cos^2(ax) dx = \frac{x}{2} + \frac{\sin(2ax)}{4a}$	

[A-9] 区分別積法

○ $y = x$



$a \sim b$ の範囲で関数 $y = x$ と X 軸で囲まれる面積 S を区分別積法で求める。 $a \sim b$ の範囲を n 等分すると、

$$x_i = a + (\Delta x)i \quad , \quad \Delta x = \frac{b-a}{n} \quad , \quad x_0 = a \quad , \quad x_n = b$$

となる。また、 $\Delta x \rightarrow 0$ ならば $\Delta n \rightarrow \infty$ である。積分を使って面積 S の計算をしておくと、

$$S = \int_a^b x dx = \left[\frac{1}{2} x^2 \right]_a^b = \frac{1}{2} (b^2 - a^2)$$

区分別積法にしたがって、面積を計算すると

$$\begin{aligned} S &= \lim_{\Delta x \rightarrow 0} \sum_{i=0}^{n-1} f(x_i) \Delta x = \lim_{n \rightarrow \infty} \sum_{i=0}^{n-1} \left(a + \frac{b-a}{n} i \right) \frac{b-a}{n} \\ &= \lim_{n \rightarrow \infty} \sum_{i=0}^{n-1} \left\{ \frac{a(b-a)}{n} + \left(\frac{b-a}{n} \right)^2 i \right\} \end{aligned}$$

級数和の公式

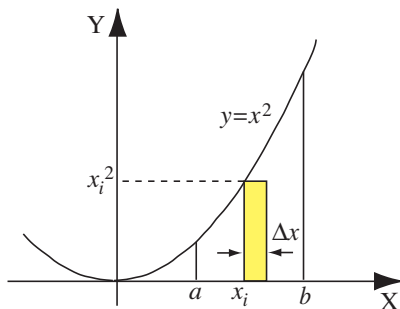
$$\sum_{i=0}^{n-1} 1 = n-1 \quad , \quad \sum_{i=0}^{n-1} i = \frac{n(n-1)}{2}$$

を用いて、

$$S = \lim_{n \rightarrow \infty} \left\{ a(b-a) \frac{n-1}{n} + \frac{(b-a)^2}{2} \frac{n(n-1)}{n^2} \right\} = a(b-a) + \frac{(b-a)^2}{2} = \frac{1}{2} (b^2 - a^2)$$

となり、積分の結果と一致する。

○ $y = x^2$



積分を用いて、面積 S を求めると

$$S = \int_a^b x^2 dx = \left[\frac{1}{3} x^3 \right]_a^b = \frac{1}{3} (b^3 - a^3)$$

区分別積法によると

$$\begin{aligned} S &= \lim_{n \rightarrow \infty} \sum_{i=0}^{n-1} \left(a + \frac{b-a}{n} i \right)^2 \frac{b-a}{n} \\ &= \lim_{n \rightarrow \infty} \sum_{i=0}^{n-1} \left\{ a^2 \frac{b-a}{n} + 2a \left(\frac{b-a}{n} \right)^2 i + \left(\frac{b-a}{n} \right)^3 i^2 \right\} \end{aligned}$$

級数の和の公式

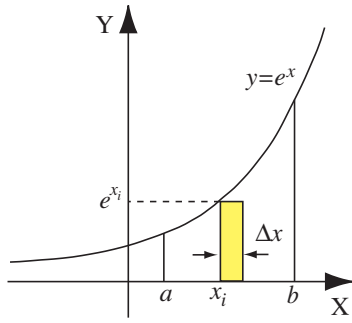
$$\sum_{i=0}^{n-1} i^2 = \frac{n(n-1)(2n-1)}{6}$$

を用いて、

$$\begin{aligned} S &= \lim_{n \rightarrow \infty} \left\{ a^2 (b-a) \frac{n-1}{n} + a(b-a)^2 \frac{n(n-1)}{n^2} + \frac{(b-a)^3}{6} \frac{n(n-1)(2n-1)}{n^3} \right\} \\ &= a^2 (b-a) + a(b-a)^2 + \frac{(b-a)^3}{3} = \frac{1}{3} (b^3 - a^3) \end{aligned}$$

となり、積分の結果と一致する。

○ $y = e^x$



積分を用いて、面積 S を求めると

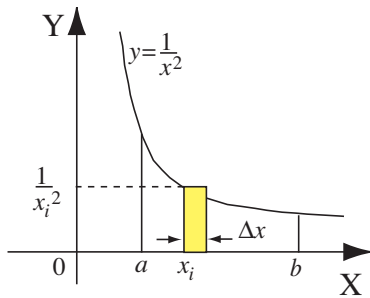
$$S = \int_a^b e^x dx = [e^x]_a^b = e^b - e^a$$

区分求積法によると

$$S = \lim_{n \rightarrow \infty} \sum_{i=0}^{n-1} e^{a + \frac{b-a}{n}i} \frac{b-a}{n} = \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{b-a}{n} e^a \sum_{i=0}^{n-1} \left(e^{\frac{b-a}{n}} \right)^i$$

$$\begin{aligned} S &= \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{b-a}{n} e^a \frac{\left(e^{\frac{b-a}{n}} \right)^{n-1} - 1}{e^{\frac{b-a}{n}} - 1} = e^a \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{\frac{b-a}{n}}{e^{\frac{b-a}{n}} - 1} \left\{ e^{\frac{n-1}{n}(b-a)} - 1 \right\} \\ &= e^a (e^{b-a} - 1) = e^b - e^a \end{aligned}$$

○ $y = \frac{1}{x^2}$



積分を用いて、面積 S を求めると

$$S = \int_a^b \frac{1}{x^2} dx = \left[-\frac{1}{x} \right]_a^b = \frac{1}{a} - \frac{1}{b}$$

区分求積法によると

$$S = \lim_{n \rightarrow \infty} \sum_{i=0}^{n-1} \frac{1}{\left(a + \frac{b-a}{n}i \right)^2} \frac{b-a}{n} = \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{n}{b-a} \sum_{i=0}^{n-1} \frac{1}{\left(i + \frac{a}{b-a}n \right)^2}$$

恒等式

$$\sum_{i=0}^{n-1} \frac{1}{(i+c)^2} = \sum_{i=0}^{n-1} \left\{ \frac{1}{i+c} - \frac{1}{i+1+c} \right\} + \sum_{i=0}^{n-1} \frac{1}{(i+c)^2(i+1+c)}$$

を用いると

$$S = \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{n}{b-a} \left\{ \frac{1}{\frac{a}{b-a}n} - \frac{1}{n + \frac{a}{b-a}n} \right\} + \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{n}{b-a} \sum_{i=0}^{n-1} \frac{1}{\left(i + \frac{a}{b-a}n \right)^2 \left(i + 1 + \frac{a}{b-a}n \right)}$$

$n \rightarrow \infty$ の極限をとると、上式の2項目はゼロとなるので (なぜか)

$$S = \frac{1}{a} - \frac{1}{b}$$

を得る。

右図に示した**元素周期表**は、左上から重さの順にさまざまな元素を一覧表にしたものである。この表において、縦の並びには化学的な性質が似ている元素が現れる。縦に並んでいる元素は、化合物を作るときも似た構造の物を作るし、水にとけて**イオン**になるときも同じ性質のイオンとなる。元素周期表の左端の列に表れる元素は **+1** のイオンとなりやすく、右端の元素は**不活性ガス**と呼ばれ、イオンになりにくい性質がある。

このような元素についての法則性は、原子の構造による。物質は原子から出来ており、原子は原子核と電子から出来ている。最も簡単な原子は水素原子（元素番号1）で、1つの電子が原子核の周囲をまわっている。電子が原子核を中心として円運動をするためには、電子に内向き（中心方向）の力が働いていなければならない。この力は**電気の性質**によるものである。**電子はマイナスの電気**を持っていて、その電気量は

$$-e = -1.6 \times 10^{-19} \text{ C}$$

という値である。電気量の単位は **C** と書いて **クーロン** と読む。クーロンという単位は電気の研究をした Coulomb の名前から付けられたもので、メートルやキログラムと同じように人間の都合で、電気量の測り方を決めたものである。電子に対して、**原子核は符号だけが異なるプラスの電気** (+e) を持っている。したがって、原子全体の電気量は

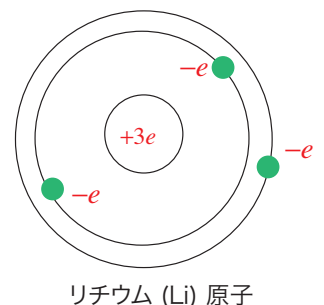
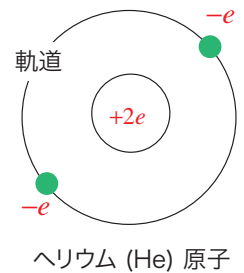
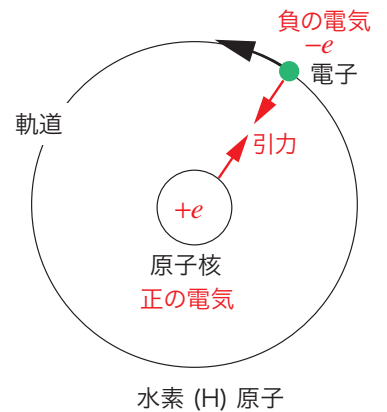
$$\text{電子の電気量} + \text{原子核の電気量} = -e + (+e) = 0$$

となっている。また、このような状態の原子は**中性**であるという。電子が水素原子から離れてしまうということが起きる。このとき、水素原子には原子核しか残されていない。したがって、この原子核だけの水素原子の電気量は +e となる。これが **H⁺ イオン**である。

元素番号2のヘリウムの場合、原子核の持つ電荷量は +2e であり、**2つの電子が同じ軌道をまわっている**。このヘリウムは元素周期表の右端（不活性ガス）に位置していて、**化学的に安定**（イオンになりにくい）である。

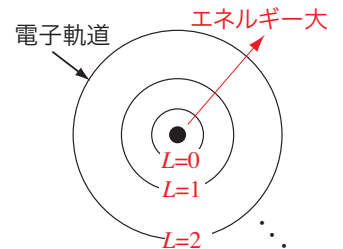
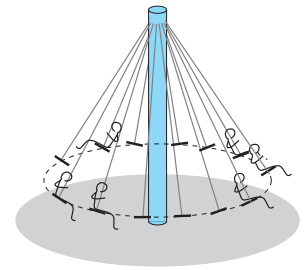
元素番号3のリチウムは**3つの電子**を持っている。このうちの**2つの電子は、ヘリウムと良く似た軌道を仲良くまわっている**。しかし、**3つ目の電子は2つの電子とは異なる外側の軌道を単独でまわっており**、この3番目の電子は原子から離れやすい性質をもっている。その結果、リチウム原子は1価の正イオン **Li⁺** になる傾向が強い。リチウムは元素周期表の左端に位置していてアルカリ金属と呼ばれる。

元素ごとの性質は、電子がどんなような軌道をまわっているかで決まる。電子は原子核にもっとも近い内側の軌道から外側の軌道へと順に入っていく。それぞれの軌道には収納できる電子の個数に上限があり、ある軌道が満杯になると、すぐ外側の軌道へと移っていく。このような原子の性質は**量子力学**という物理法則によって説明される。ニュートン力学は、宇宙の大きさから分子の大きさ程度まで使うことができる強力な道具である。しかし、原子の世界にはニュートン力学では説明できないことが沢山ある。極微の世界の正しい物理法則として登場したのが「**量子力学**」である。量子力学には不思議な現象がいっぱいあるが、原子の構造を理解するために必要な事を説明しておこう。



□ 電子がまわる速さ

電子は原子核の周囲を一定の速さで回っていると考えてよい。この電子の速さが大きくなると、電子の軌道は外側へと広がってゆく。円運動をしている物体には中心方向に引っ張られる力が働いていなければならないが、この力が一定のままでは物体の速さが大きくなると、物体の描く円軌道の半径は大きくなっていく。たとえば、遊園地でよく見かける回転ブランコを思い出してみるとよい。最初、機械がまわっていないときブランコは真下に垂れ下がっている。回転を始めて速度が上がっていくと、ブランコは外側へと広がっていくのを経験したことがあるだろう。電子の場合も同じである。電子が原子核のまわりを速く回ると、速度が大きくなるので運動エネルギーが大きくなる。つまり、電子の持つエネルギーが大きくなるのである。



原子の世界を支配する量子力学という法則は奇妙なものである。この法則によると、電子の回転の速さは、トビトビの値しか取ることができない。回転ブランコのようにどんな速さでも連続的にとることはできないのである。電子の回転の速さを L という記号で表すことがあるが、この L に当てはまる数値は $0, 1, 2, \dots$ というゼロを含む正の整数である。電子の軌道1つ1つには L が対応していて、 L が大きくなると軌道は外へ広がり、電子のエネルギーも大きくなる。

□ 電子スピン (自転)

電子は原子核を中心に回るだけでなく、自転をしている。まるで、太陽のまわりを公転しながら自転 (スピン) している地球のようである。ふたたび、量子力学によると、この自転の方向は右回りと左回りの2種類しかない。さらに不思議なことに、同じ向きに自転している電子はお互いに近くに存在することができない (仲が悪い)。



リチウム原子の3つ目の電子が外側の軌道に追いやられてしまったのは、このスピンに関する性質のためである。最も内側の軌道にはすでに2つ (右回りと左回りが1つずつ) の電子が入っている。この軌道に3つ目の電子を入れようとする、どうしてもスピンの向きが同じ電子ができてしまう。このために3つ目の電子が排除されたのである。

□ 軌道の定員

これもまた、量子力学の結論であるが、回転の速さが L の電子の軌道には

$$2 \times (2L + 1) \text{ 個}$$

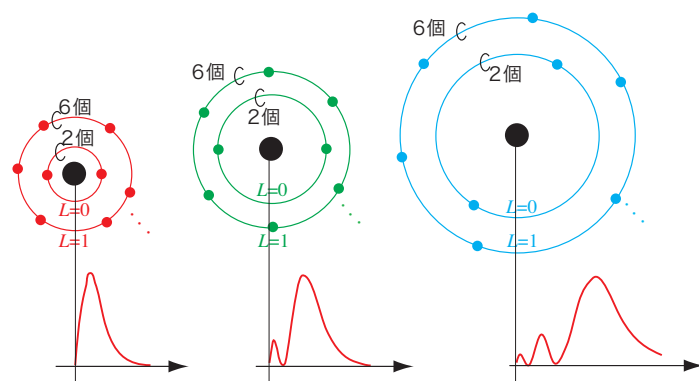
の電子を収納することができる、2が掛け算されているのは、電子のスピンに右回りと左回りの2種類があるからである。具体的に数値を求めてみると

$L = 0$	$L = 1$	$L = 2$	$L = 3$	\dots
2 個	6 個	10 個	14 個	\dots

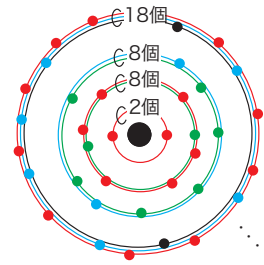
となっている。

□ 軌道の集まり

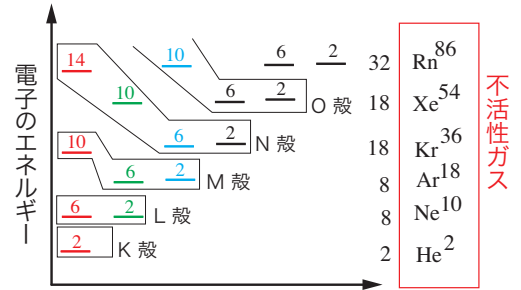
電子の軌道には $L = 0, 1, 2, \dots$ の数字で分類されるグループがある。このような軌道のグループは1つではなく、図のように軌道のグループが何度も繰り返し現れる。ただし、軌道全体が1つずつ外側へずれていく。このような軌道の組が存在するのは、半径方向の振動が原因である。右図の下に示したように、半径方向の振動をとまなう電子軌道はより外側へと広がる。



このような軌道のグループをまとめて描くと、右の図のようになる。ところで、軌道の半径が大きくなる程、電子は激しくまわっているの
で、電子の持つエネルギーは大きくなる。このような電子の持つエネルギーに注目してグラフに描くと下の図のようになる。2個、6個、10個、14個…の電子を取容できる軌道のグループが1段階ずつエネルギーが大きくなりながら繰り返されている様子を表している。



エネルギーが同じ軌道に入ることができる電子の個数をまとめてみると、下から順に2個、8個、8個、18個、18個、32個となっていることが分かる、このような軌道の集まりにエネルギーが小さいところから順に電子をつめていくと、最初のエネルギーの状態で電子が2個、次までで10個、その後18個、36個、54個、86個となることが分かる。原子において電子の個数は元素番号と同じである。したがって、電子2個の原子は元素番号が2のヘリウム (He)、電子が10個の原子はネオン (Ne)、18個はアルゴン (Ar)、36個はクリプトン (Kr)、54個はキセノン (Xe)、86個はラドン (Rn) に対応している。これらの元素は元素周期表において右端に現れる不活性ガスであり、化学的に安定な元素なのである。このことから、次のような法則を得ることができる。



エネルギーが同じ軌道がすべて電子で満たされた場合、その原子は化学的に安定である。

高等学校の化学で、原子には K 殻, L 殻, M 殻, N 殻…と名付けられた電子の収納場所があると学習しただろう。K 殻には 2 個, L 殻には 8 個, M 殻には 18 個, N 殻には 32 個の電子が入る。この話と上で述べた $L = 0, 1, 2, \dots$ という軌道のグループはどのような関係になっているのだろうか。実は

- K 殻: 2 個 ($L = 0$)
- L 殻: $2(L = 0) + 6(L = 1) = 8$ 個
- M 殻: $2(L = 0) + 6(L = 1) + 10(L = 2) = 18$ 個
- N 殻: $2(L = 0) + 6(L = 1) + 10(L = 2) + 14(L = 3) = 32$ 個

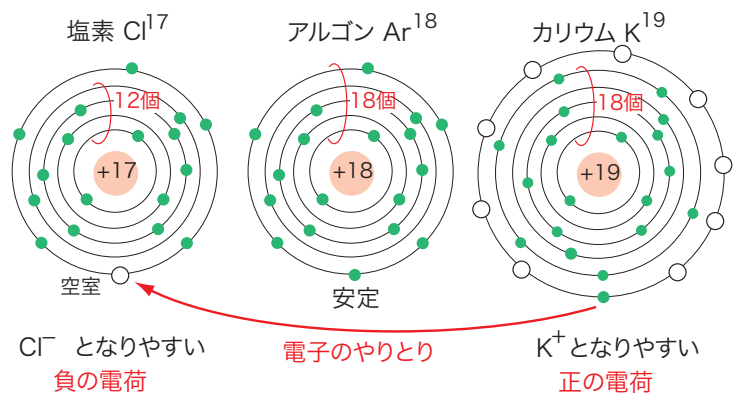
のような関係になっていて、K 殻に $n = 1$, L 殻に $n = 2$ と順に番号を割り当てると、番号が n となる殻には

$$2(2 \cdot 0 + 1) + 2(2 \cdot 1 + 1) + 2(2 \cdot 2 + 1) + \dots + 2\{(2(n - 1) + 1)\} = 4\{1 + 2 + \dots + (n - 1)\}$$

$$= 4 \cdot \frac{n(n - 1)}{2} + 2n = 2n^2$$

の個数の電子が入ることになる。しかし、上の図でも分かるように、殻に取容される電子の数は元素の性質と強くは関係していない。この意味で、殻という考え方はあまり有用ではない。

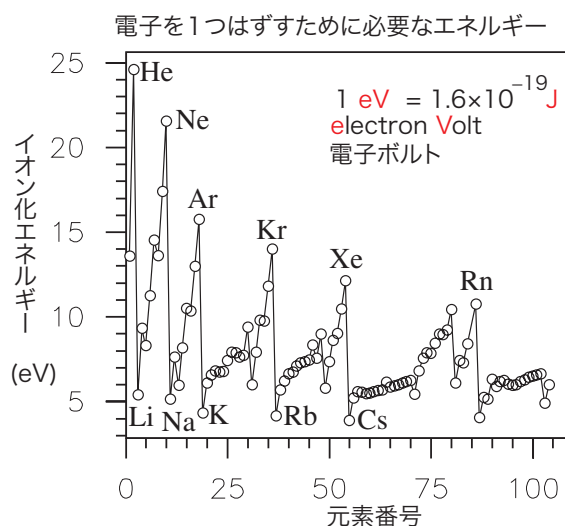
以上のことを基礎にして、元素番号 17 の塩素、18 のアルゴン、19 のカリウムについて考えてみよう。アルゴンは安定で、イオンになりにくい性質がある。これに対して、塩素はアルゴンより電子が 1 つ少なく、カリウムは 1 つ多い。この塩素とカリウムの間で電子をやり取りすると、両方ともにアルゴンと同じ電子の個数となることができる。原子が化学的に安定かどうかは、電子の個数だけで決まっているので、



塩素原子は電子を余分に 1 つもらって Cl^- イオンとなり、カリウムは電子を 1 つ失って K^+ イオンとなりやすい性質を持つことになる。このように電子を余分に持っている原子を正の電荷、電子が足りない原子を負の電荷と呼ぶ。また、元素 (物質) ごとに、正の電荷となりやすいものや、負の電荷になりやすいものがある。

右のグラフは、中性の原子から電子を1つはずして1価の正イオンとするために必要なエネルギー（**イオン化エネルギー**）を調べた結果である。不活性ガスの元素をイオンにするには大きなエネルギーが必要であるが、元素番号が1つ多くなると、イオン化エネルギーが急に小さくなっていることが分かる。つまり、不活性ガスの元素の電子配置を変化させるためには、大きなエネルギーが必要となることを示している。このことが、不活性ガスが化学的に安定であることの理由である。

以上のことから、原子構造を理解するためには、「自然がトビトビ」であるという法則と、「電子スピン」の性質が重要であることが分かる。これらの物理法則は「量子力学」として確立されており、原子がどのような構造をしているか、あるいは、分子はどのように作られているかなどは計算可能なものとなっている。

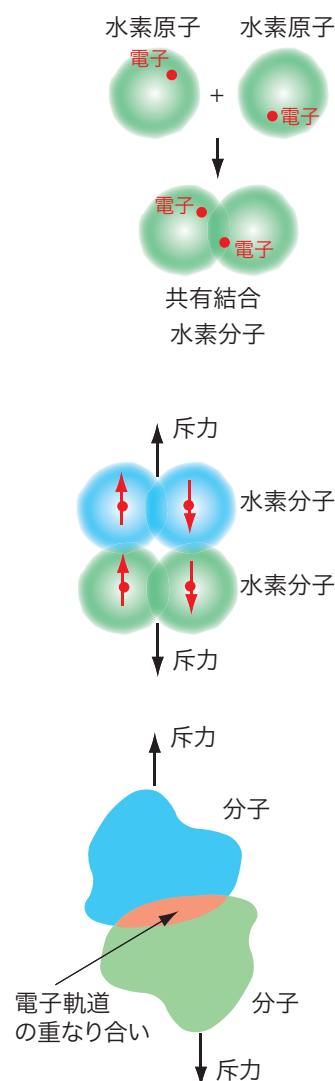


□ 分子間力の斥力

P18 の概略図で示したように、分子間力は、2つの分子間の距離が短くなったとき、互いに反発する力（斥力）となる。これは、電子スピンの性質によるものである。このことを説明するために、水素について考えてみよう。水素ガスは水素原子の集まりではなく、ほとんどは H_2 分子となっている。2つの水素原子を考えると、それぞれの原子には、定員が2の電子軌道に、電子が1つだけ存在している。このような2つの水素原子が近付くと、それぞれの水素原子が持っている電子を共有して、あたかも、半分だけヘリウム原子の電子配置のように振る舞うこととなる。これを共有結合と呼ぶ。このような、2つ水素原子の場合は、2つの原子が重なりあう距離まで互いに引き合う力（引力）が働くことになる。

では、2つ水素分子 (H_2) の場合はどうなるだろう。水素分子では、共有結合のために、定員が2の K 殻の電子軌道には2つの電子が収容されている。したがって、1つの電子のスピンの向きが右回りであれば、他方の電子は左回りのスピンを持っていなければならない。このような電子を持つ水素分子を2つ持って来て、互いの電子軌道が重なるところまで近付けると、同種のスピンを持つ電子が必ず相手の水素分子の中に存在することになる。同種のスピンを持つ電子は互いを排除しようとするので、結果として、2つの水素分子間には斥力が発生することになる。これが、分子間力に現れる斥力の原因である。

より一般の分子を考えてみても事情は同様である。分子のどこかに定員に満たない電子軌道があって、相手の分子の電子軌道がそれに符合するものであれば、水素分子のように共有結合を作るだろう。しかし、安定な分子の場合は、電子軌道はすべて電子によって埋められている。このような分子が互いに接近すると、必ず、相手には同種のスピンを持つ電子が存在していて、分子間には斥力が働くことになる。つまり、短距離での分子間力が斥力となるのは、電子スピンの性質によるものなのである。



ニュートンの運動方程式は

$$m \frac{d^2 x(t)}{dt^2} = F(t) \quad (1)$$

である。この方程式から $x(t)$ を求めるという作業する必要がある。運動方程式は時刻 t についての2階微分で書かれているので、数学の言葉では「2階微分方程式を解く」ということになる。講義では、「重力での自由落下の問題」(12ページ)、「抵抗力を受ける運動」(31ページ)について運動方程式を解いて $x(t)$ あるいは $v(t)$ を求める方法について説明した。簡単な運動方程式の場合(「抵抗力を受ける運動」でも簡単な場合である)、両辺を一度積分すると速度 $v(t)$ が求まり、もう一度積分すると速度 $x(t)$ を求めることができる。この方法はいつでも正しいのであるが、運動方程式が少し複雑になると、積分の作業はどんどん困難なものとなっていく。

1. 直接積分する方法

それでは、積分を順に実行することで、単振動の運動方程式

$$m \frac{d^2 x(t)}{dt^2} = -kx(t) \quad (2)$$

を解く方法について解説してみよう。まず、「抵抗力を受ける運動」と同じ方法で両辺の積分を実行することができるかを検討してみよう。いま、 $x(t)$ がどんな関数なのかが分かっていないので、式(2)の右辺を t で積分することはできない。では、関数 $x(t)$ を左辺に押しつけて

$$m \int_0^t \frac{1}{x(t)} \frac{d^2 x(t)}{dt^2} dt = -k \int_0^t dt \quad (3)$$

としてみると、右辺の積分は実行できるが、左辺は「抵抗力を受ける運動」でやったような置換積分ができる形ではないことが分かる。この状況を打破するためには、数学のトリックを使う必要がある。(私が始めてこの話を聞いたとき、賢い方法だなと関心した記憶がある。)

式(2)の両辺に $dx(t)/dt$ を掛けてみると

$$m \frac{dx(t)}{dt} \frac{d^2 x(t)}{dt^2} = -kx(t) \frac{dx(t)}{dt} \quad (4)$$

となる。ここで、微分についての公式

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{dx(t)}{dt} \right)^2 = 2 \frac{dx(t)}{dt} \frac{d^2 x(t)}{dt^2} \quad (5)$$

を使うと、式(4)は

$$\frac{m}{2} \frac{d}{dt} \left(\frac{dx(t)}{dt} \right)^2 = -kx(t) \frac{dx(t)}{dt} \quad (6)$$

と書くことができる。もちろん、式(6)は式(2)を変形しただけなので、同等のものである。この式(6)の両辺を時刻 t で積分すると

$$\frac{m}{2} \int_0^t \frac{d}{dt} \left(\frac{dx(t)}{dt} \right)^2 dt = -k \int_0^t x(t) \frac{dx(t)}{dt} dt \quad (7)$$

となり、左辺は全体が t の微分となっている関数を t で積分することができて、右辺は置換積分で実行可能となる。したがって、

$$\frac{m}{2} \left[\left(\frac{dx(t)}{dt} \right)^2 \right]_0^t = -k \int_{x_0}^{x(t)} x dx = -k \left[\frac{1}{2} x^2 \right]_{x_0}^{x(t)} \quad (8)$$

$$\rightarrow \frac{m}{2} \left\{ \left(\frac{dx(t)}{dt} \right)^2 - v_0^2 \right\} = -\frac{k}{2} \{ x(t)^2 - x_0^2 \} \quad (9)$$

ここで、時刻 $t = 0$ の物体の位置を x_0 、時刻 $t = 0$ の物体の速度を v_0 とした。この結果から

$$v(t) = \frac{dx(t)}{dt} = \pm \sqrt{\frac{k}{m}} \sqrt{\frac{m}{k} v_0^2 + x_0^2 - x(t)^2} \quad (10)$$

と書けることが分かる。ここで、 $v_0 > 0$ であるならば復号の内 $+$ を選ばば良く、 $v_0 < 0$ であるならば $-$ を選ぶことになる。ここでは $v_0 > 0$ であるとしておこう。式 (10) を変形して、両辺を t で積分すると

$$\int_0^t \frac{1}{\sqrt{\frac{m}{k} v_0^2 + x_0^2 - x(t)^2}} \frac{dx(t)}{dt} dt = \sqrt{\frac{k}{m}} \int_0^t dt \quad (11)$$

となる。左辺の積分は置換積分によって実行可能である。式が少々面倒なので、

$$A = \sqrt{\frac{m}{k} v_0^2 + x_0^2} \quad (12)$$

と書くことにして、置換積分を行なうと

$$\int_0^t \frac{1}{\sqrt{A^2 - x(t)^2}} \frac{dx(t)}{dt} dt = \int_{x_0}^{x(t)} \frac{1}{\sqrt{A^2 - x^2}} dx \quad (13)$$

となる。さらに、

$$x = A \sin \theta \quad (14)$$

とおいて x の積分を θ の積分に置き換える。このために

$$\frac{dx}{d\theta} = A \cos \theta \quad (15)$$

をもちいて、積分の上限が $\sin^{-1}(x(t)/A)$ 、下限が $\sin^{-1}(x_0/A)$ に変わることには注意すると (\sin^{-1} は \sin の逆関数を表す)

$$\int_{x_0}^{x(t)} \frac{1}{\sqrt{A^2 - x^2}} dx = \int_{\sin^{-1}(x_0/A)}^{\sin^{-1}(x(t)/A)} \frac{1}{\sqrt{A^2 - A^2 \sin^2 \theta}} A \cos \theta d\theta = \int_{\sin^{-1}(x_0/A)}^{\sin^{-1}(x(t)/A)} d\theta \quad (16)$$

となることが分かる。この結果と式 (11) から

$$\sin^{-1} \left(\frac{x(t)}{A} \right) - \sin^{-1} \left(\frac{x_0}{A} \right) = \sqrt{\frac{k}{m}} t \quad (17)$$

を得ることができる。左辺の第 2 項は初期条件で決定される「角度」を表しており

$$\sin \phi = \frac{x_0}{A} = \frac{x_0}{\sqrt{\frac{m}{k} v_0^2 + x_0^2}} \quad (18)$$

となるような角度である。また、これを書き直すと

$$\tan \phi = \frac{x_0}{v_0} \sqrt{\frac{k}{m}} \quad (19)$$

と表すことができる。以上のことから、物体の位置 $x(t)$ は

$$x(t) = \sqrt{\frac{m}{k} v_0^2 + x_0^2} \sin \left(\sqrt{\frac{k}{m}} t + \phi \right) \quad (20)$$

となることが分かる。この結果 (式 (19),(20)) は、36 ページの式 (1.10.32) と一致している。(あータイヘンだった)

2. 微分方程式を解く便利な方法

という訳で、直接積分をして答を求めることは大変である。微分方程式は数学の1つの重要な分野で、数々の有用な定理がある。ここでは、振動現象を分析するための有用な方法について紹介する。

定理1： a, b, c を定数とする微分方程式

$$a \frac{d^2 x(t)}{dt^2} + b \frac{dx(t)}{dt} + cx(t) = 0 \quad (21)$$

の解で、初期条件 $x(0) = x_0$ と $dx/dt|_{t=0} = v_0$ を満たすものは、ただ一つに決まる。

この定理のきちんとした証明は面倒であるが、微分方程式が運動方程式であると考えてみると、「時刻 $t = 0$ の位置と速度が与えられれば、以降の運動は一通りに決まる」ということを言っている。

定理2：独立な関数 $f(t)$ と $g(t)$ が微分方程式 (21) を満たすことが分かっているとすると、この微分方程式の一般的な解は

$$x(t) = Af(t) + Bg(t) \quad (22)$$

と表すことができる。 A と B は定数である。

関数 $x(t) = Af(t) + Bg(t)$ を微分方程式 (21) の左辺に代入してみると、

$$a \frac{d^2 x(t)}{dt^2} + b \frac{dx(t)}{dt} + cx(t) = A \left\{ a \frac{d^2 f(t)}{dt^2} + b \frac{df(t)}{dt} + cf(t) \right\} + B \left\{ a \frac{d^2 g(t)}{dt^2} + b \frac{dg(t)}{dt} + cg(t) \right\} \quad (23)$$

となる。ところで、関数 $f(t)$ と $g(t)$ は微分方程式 (21) を満たすことが分かっているので、式 (23) の右辺はゼロとなる。したがって、関数 $x(t) = Af(t) + Bg(t)$ は微分方程式 (21) の解となっている。

初期条件が $x(0) = x_0$ と $dx/dt|_{t=0} = v_0$ であるとする、

$$Af(0) + Bg(0) = x_0, \quad Af'(0) + Bg'(0) = v_0 \quad (24)$$

という条件を得る。ここで、関数 $f(x)$ と $g(x)$ は独立（早い話がゼンゼン別の関数）なので、連立方程式 (24) を解いて A と B を決定することができる。

以上の手続きは、どのような初期条件であっても実行することができるので、微分方程式 (21) の一般的な解は $x(t) = Af(t) + Bg(t)$ と表すことができる。

定理3： 微分方程式

$$a \frac{d^2 x(t)}{dt^2} + b \frac{dx(t)}{dt} + cx(t) = 0$$

の解は、

$$x(t) = e^{pt} \quad (25)$$

という関数で表すことができる。ただし、 p は一般に複素数である。

ようするに、式 (25) を微分方程式に代入して p を決定できればよいので、

$$\frac{dx(t)}{dt} = pe^{pt}, \quad \frac{d^2 x(t)}{dt^2} = p^2 e^{pt}$$

を使って、

$$(ap^2 + bp + c)e^{pt} = 0$$

という条件を得る。すなわち、 p は2次方程式 $ap^2 + bp + c = 0$ の2つの解

$$p_1 = \frac{-b + \sqrt{b^2 - 4ac}}{2a}, \quad p_2 = \frac{-b - \sqrt{b^2 - 4ac}}{2a}$$

となる。このことから、微分方程式の一般解は

$$x(t) = Ae^{p_1 t} + Be^{p_2 t} \quad (26)$$

と表すことができる。

以上の数学的方法を用いて、37 ページで説明した「減衰振動」について考えてみることにしよう。運動方程式は

$$m \frac{d^2 x(t)}{dt^2} + \alpha \frac{dx(t)}{dt} + kx(t) = 0 \quad (27)$$

であった。前ページで説明した方法にしたがって、 $x(t) = e^{pt}$ とおいて、 p についての条件を求めると

$$mp^2 + \alpha p + k = 0$$

となるので、 p は

$$p_1 = \frac{-\alpha + \sqrt{\alpha^2 - 4mk}}{2m} \quad p_2 = \frac{-\alpha - \sqrt{\alpha^2 - 4mk}}{2m} \quad (28)$$

となる。したがって、運動方程式の解は

$$x(t) = Ae^{p_1 t} + Be^{p_2 t} = e^{-\frac{\alpha}{2m} t} \left[Ae^{\left(\sqrt{\left(\frac{\alpha}{2m}\right)^2 - \frac{k}{m}}\right)t} + Be^{-\left(\sqrt{\left(\frac{\alpha}{2m}\right)^2 - \frac{k}{m}}\right)t} \right] \quad (29)$$

と表すことができる。残る作業は初期条件から A と B を決定することであるが、一般的な条件 $x(0) = x_0$, $v(0) = v_0$ について式を作ると大変複雑なものとなってしまう。複雑なだけで、あまり得るものがないので、

$$A = B = \frac{1}{2} x_0 \quad (30)$$

となるような初期条件が選んであるものとしよう（実は 36 ページの計算はこの場合に相当している）。

このような条件の場合、 $x(t)$ は

$$x(t) = x_0 e^{-\frac{\alpha}{2m} t} \times \frac{1}{2} \left[e^{\left(\sqrt{\left(\frac{\alpha}{2m}\right)^2 - \frac{k}{m}}\right)t} + e^{-\left(\sqrt{\left(\frac{\alpha}{2m}\right)^2 - \frac{k}{m}}\right)t} \right] \quad (31)$$

と書くことができる。

さて、式 (31) は振動を表しているのだろうか。式のなかには指数関数しかない。たしかに、

$$\frac{\alpha}{2m} > \sqrt{\frac{k}{m}}$$

の場合についてグラフを描いてみると右図のようになり、振動なんてまったくないことが分かる。この場合は、抵抗力 (αv) がバネの力 (kx) 大きくて、振動する前に減衰しまうような運動となっているのである。では、

$$\frac{\alpha}{2m} < \sqrt{\frac{k}{m}} \quad (32)$$

場合はどうだろうか。式 (31) で計算しようとするとうんざりすることになっている。平方根の中がマイナスになっていて、指数関数に虚数が入っていることになる。付録（数学ノート）[A-5] を見てほしい。「オイラーの式」という不思議な関係

$$e^{ix} = \cos x + i \sin x$$

がある。この関係を使うと、条件 (32) の場合、

$$x(t) = x_0 e^{-\frac{\alpha}{2m} t} \cos \left(\sqrt{\frac{k}{m} - \left(\frac{\alpha}{2m}\right)^2} t \right) \quad (33)$$

となることが分かる。この関数は振動しながら減衰していく。

