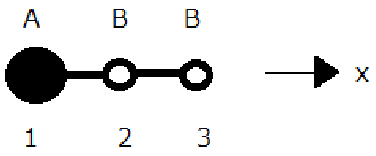
化学数学 2011 年度

問 1.（微分方程式と行列）

下図のような直線分子 AB_2 に対し,分子軸(x 軸)内での振動のみを考える。A,B の質量を M,m とし,A-B,B-B 間のばね定数を k_1,k_2 とすると,運動方程式は以下のようになる。ただし,u_1,u_2,u_3 は平衡位置を原点とした時の,それぞれの原子の位置(変位)である。

$$
\begin{cases}
M\dfrac{d^2u_1}{dt^2} = k_1(u_2 - u_1) \\
m\dfrac{d^2u_2}{dt^2} = -k_1(u_2 - u_1) + k_2(u_3 - u_2) \\
m\dfrac{d^2u_3}{dt^2} = -k_2(u_3 - u_2)
\end{cases}
\quad (1.1)
$$



$\underline{k_1 = 1, k_2 = 2, M = 1/2, m = 1}$ の場合に,この運動方程式(1.1)を満たす解 $u_1(t)$,$u_2(t)$,$u_3(t)$を求めよ。

(1)ベクトル $\mathbf{u} = \begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \\ u_3 \end{pmatrix}$ を用いて,式(1.1)を $\dfrac{d^2}{dt^2}\mathbf{u} = \mathbf{Au}$　(1.2)の形で示せ(**A** は行列)。

(2)上で求めた行列 **A** を対角化せよ。ここで,対角化とは,ある正方行列 **Q** を用いて,

$\mathbf{Q}^{-1}\mathbf{AQ} = \begin{pmatrix} a_1 & 0 & 0 \\ 0 & a_2 & 0 \\ 0 & 0 & a_3 \end{pmatrix}$ とすることである。なお,解答において $\mathbf{Q}^{-1}$ は求める必要がなく,

Q および $\mathbf{Q}^{-1}\mathbf{AQ}$ のみを求めればよい。

(3)式(1.2)において,新たにベクトル **v** を導入して **u=Qv** の置き換えを行い,左から $\mathbf{Q}^{-1}$ をかけることによって **v** に対する微分方程式を導け。なお,(3)-(5)の解答においては,具体的な値を使わずに,a_1,a_2,a_3 を用いたり,$\mathbf{Q}=(x_1,x_2,x_3)$(x_i は 3 次元の縦ベクトル)とおいたりしてもかまわない。

(4)(3)で導いた方程式を解いて,**v**(t)を求めよ。

(5)(4)で求めた **v**(t)から,最終的な解 **u**(t)を求めよ。

問 2.（多変数関数の積分）

$\int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty} e^{-\left(x^2+y^2\right)}dxdy$ を求めよ。

(1) $x=\cos\theta, y=\sin\theta$ と変換した場合のヤコビアン $\dfrac{\partial(x,y)}{\partial(r,\theta)}=\begin{vmatrix} \partial x/\partial r & \partial x/\partial\theta \\ \partial y/\partial r & \partial y/\partial\theta \end{vmatrix}$ を求めよ。

(2) $\iint f(x,y)dxdy=\iint f\left(x(r,\theta),y(r,\theta)\right)\left|\dfrac{\partial(x,y)}{\partial(r,\theta)}\right|drd\theta$ を用いて，$\int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty} e^{-\left(x^2+y^2\right)}dxdy$ を $\int_{\theta_1}^{\theta_2}\int_{r_1}^{r_2} g(r,\theta)drd\theta$ の形に変換せよ。なお,$\left|\dfrac{\partial(x,y)}{\partial(r,\theta)}\right|$ はヤコビアンの絶対値を意味する。

(3)(2)の積分を実行せよ。

問 3.（フーリエ展開）

$F(x)$は周期 2π をもつ周期的関数であり,$-\pi\le x<\pi$ の範囲で

$F(x)=-1(-\pi\le x<0)$

$F(x)=1(0\le x<\pi)$

と表せるとする。この関数をフーリエ展開せよ。必要ならば以下と手順に従ってもよい。

(1)1 次元の運動量演算子 $p_x=-i\dfrac{d}{dx}$ の固有値と固有関数を求めよ。

つまり, $p_x f(x)=qf(x)$ となるような q (固有値)と $f(x)$(固有関数)を求めればよい。

(2) $f(x)=f(x+l)$ という周期境界条件と,$\int_{-1/2}^{1//2} f_n{}^*(x)f_n(x)=1$ という規格化条件を満たすような q と $f(x)$ の組み合わせ $\{q_n, f_n(x)\}$ を求めよ。($f^*(x)$ は $f(x)$ の複素共役を意味する)。

(3) p_x はエルミート演算子なので,(2)の周期境界条件を満たす任意の関数 $F(x)$ は(2)で求めた固有関数の組 $f_n(x)$ を用いて,以下のように展開できる。

$F(x)=\sum_n c_n f_n(x)$　(3.1)　　　　ただし,$c_n=\int_{1/2}^{1/2} f_n{}^*(x)F(x)dx$　(3.2)

これを用いて,$F(x)(-\pi\le x<\pi)$を(3.1)の形であらわせ。

問 4.（計算問題）

(1)内部エネルギーUの全微分は$dU = TdS - PdV$と書ける。一方,

$dU = \left(\frac{\partial U}{\partial S}\right)_V dS - \left(\frac{\partial U}{\partial V}\right)_S dV$なので,これらを比べることで$T = \left(\frac{\partial H}{\partial S}\right)_P, V\left(\frac{\partial H}{\partial P}\right)_S$を示せ。同様にしてエンタルピー:$H = U + PV$を用いて,$T = \left(\frac{\partial H}{\partial S}\right)_P, V = \left(\frac{\partial H}{\partial P}\right)_S$を示せ。

(2)極座標(r, θ, ϕ)は直交座標(x, y, z)と以下の関係にある。

$$x = r\sin\theta\cos\phi, y = r\sin\theta\cos\phi, z = r\cos\theta$$

この時,$\frac{\partial r}{\partial y}$および$\frac{\partial r}{\partial z}$を求めよ。

(3)微分方程式$\frac{d^2x}{dt^2} + 6\frac{dx}{dt} + 9x = 0$の一般解を求めよ。その際,必要ならば解を$x(t) = e^{\lambda t}$と予想したり,$x(t) = te^{\lambda t}$が解になっているかどうかを調べてみたりしてもよい。

(4) $2x^2 + 6xy + 2y^2$上で原点に最も近い点と,その原点からの距離を求めよ。その際,以下に示すラグランジェの未定係数法を用いてもよい。

条件$g_1(x_1, x_2, \cdots, x_n) = 0, \cdots, g_m(x_1, x_2, \cdots, x_n) = 0$のもとで,

$f(x_1, x_2, \cdots, x_n)$の極致を求めるには,

$F = f(x_1, x_2, \cdots, x_n) - \lambda g_1(x_1, x_2, \cdots, x_n) \cdots - \lambda_m g_m(x_1, x_2, \cdots, x_n)$とおいて,

$\partial F / \partial x_1 = \partial F / \partial x_2 = \cdots = \partial F / \partial x_n = 0$を解けばよい。

(5) $\int_C \mathbf{r} \times d\mathbf{r}$ (経路 C は xy 平面上における半径 a の円を左回りに一周)を求めよ。

なお,$d\mathbf{r} = \mathbf{i}dx + \mathbf{j}dy + \mathbf{k}dz$である($\mathbf{i}, \mathbf{j}, \mathbf{k}$はそれぞれ$x, y, z$方向の単位ベクトル)。

また,経路 C は媒介変数$t(0 \le t \le 2\pi)$を用いると$x = a\cos t, y = \sin t, z = 0$とかけ,

$dx = \frac{dx}{dt}dt$などのように変換できる。

(6) $\mathbf{F} = y\mathbf{i} + z\mathbf{j} + x\mathbf{k}$に対して$\mathrm{div}\mathbf{F}(= \nabla \cdot \mathbf{F}), \mathrm{rot}\mathbf{F}(= \nabla \times \mathbf{F})$を求めよ。

なお,$\nabla = \mathbf{i}\frac{\partial}{\partial x} + \mathbf{j}\frac{\partial}{\partial y} + \mathbf{k}\frac{\partial}{\partial z}$である。

(7) $f(x) = \exp(tx)$を$x = 0$のまわりでxのべき級数に展開せよ。

なお,以下に示すテーラー展開の式を用いてもよい。

$$f(x) = f(x_0) + (x - x_0) \cdot \left.\frac{df(x)}{dx}\right|_{x-x_0} + \frac{1}{2!}(x - x_0)^2 \cdot \left.\frac{d^2 f(x)}{dx^2}\right|_{x=x_0} + \cdots$$

$$= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!}(x - x_0)^n \left.\frac{d^n f(x)}{dx^n}\right|_{x=x_0}$$