半導体デバイスの物理 (基礎編)
数学準備 (2):線形同次 2 階微分方程式

次回から Schrödinger の波動方程式が登場する予定です。これを解いて結果を解釈するには、定数係数の線形同次 2 階微分方程式に関する知識が必要とされます。今回は、このための数学準備を行います。

1　導関数の基本公式

1.1　$y = f(x) + g(x)$ の導関数

関数 $y = f(x) + g(x)$ の導関数は

$$y' = f'(x) + g'(x) \tag{1}$$

(証明)

$$\begin{aligned} y' &= \lim_{\Delta x \to 0} \frac{f(x+\Delta x) + f(x+\Delta x) - \{f(x) + g(x)\}}{\Delta x} \\ &= \lim_{\Delta x \to 0} \frac{f(x+\Delta x) - f(x)}{\Delta x} + \lim_{\Delta x \to 0} \frac{g(x+\Delta x) - g(x)}{\Delta x} \\ &= f'(x) + g'(x) \end{aligned}$$

1.2　$y = f(x) \cdot g(x)$ の導関数

関数 $y = f(x) \cdot g(x)$ の導関数は

$$y' = f'(x) \cdot g(x) + f(x) \cdot g'(x) \tag{2}$$

(証明)

$$\begin{aligned} f'(x) &= \lim_{\Delta x \to 0} \frac{f(x+\Delta x) \cdot g(x+\Delta x) - f(x) \cdot g(x)}{\Delta x} \\ &= \lim_{\Delta x \to 0} \frac{\{f(x+\Delta x) \cdot g(x+\Delta x) - f(x) \cdot g(x+\Delta x)\} + \{f(x) \cdot g(x+\Delta x) - f(x) \cdot g(x)\}}{\Delta x} \\ &= \lim_{\Delta x \to 0} \left\{ g(x+\Delta x) \frac{f(x+\Delta x) - f(x)}{\Delta x} \right\} + \lim_{\Delta x \to 0} \left\{ f(x) \frac{g(x+\Delta x) - g(x)}{\Delta x} \right\} \\ &= f'(x) \cdot g(x) + f(x) \cdot g'(x) \end{aligned}$$

1.3　合成関数 $y = f\{g(x)\}$ の導関数

$y = f(u), u = g(x)$ の合成関数 $y = f\{g(x)\}$ の導関数は

$$\frac{dy}{dx} = \frac{df}{dg} \cdot \frac{dg}{dx} \tag{3}$$

(証明)

初めに Δg と Δx の関係について考えます。Δg は $g(x)$ の Δx に対する増分なので

$$\Delta g = g(x+\Delta x) - g(x)$$

$$g(x+\Delta x) = g + \Delta g$$

と表すことができます。もちろん $\Delta x \to 0$ のとき $\Delta g \to 0$ です。このとき dy/dx は

$$\begin{aligned}\frac{dy}{dx} &= \lim_{\Delta x \to 0} \frac{f\{g(x+\Delta x)\} - f\{g(x)\}}{\Delta x} = \lim_{\Delta x \to 0} \left\{ \frac{f(g+\Delta g) - f(g)}{\Delta g} \cdot \frac{\Delta g}{\Delta x} \right\} \\ &= \lim_{\Delta g \to 0} \frac{f(g+\Delta g) - f(g)}{\Delta g} \cdot \lim_{\Delta x \to 0} \frac{g(x+\Delta x) - g(x)}{\Delta x} \\ &= \frac{df}{dg} \cdot \frac{dg}{dx}\end{aligned}$$

1.4　対数関数の導関数

これから特に断らない限り log と表記した場合、log はネピア数 e を底とする対数関数 (自然対数関数) であるとします。この導関数は

$$\frac{d}{dx}(\log x) = \frac{1}{x} \tag{4}$$

(証明)

$$\begin{aligned}\frac{d}{dx}(\log x) &= \lim_{\Delta x \to 0} \frac{\log(\Delta x + x) - \log(x)}{\Delta x} = \lim_{\Delta x \to 0} \left\{ \frac{1}{\Delta x} \log\left(1 + \frac{\Delta x}{x}\right) \right\} \\ &= \lim_{\Delta x \to 0} \left\{ \log\left(1 + \frac{\Delta x}{x}\right)^{1/\Delta x} \right\}\end{aligned} \tag{5}$$

ここで $x/\Delta x = n$ とすれば、$1/\Delta x = n/x$ で、$\Delta x \to 0$ のとき $n \to \infty$ となるので

$$\begin{aligned}\frac{d}{dx}(\log x) &= \lim_{\Delta x \to 0} \left\{ \log\left(1 + \frac{\Delta x}{x}\right)^{1/\Delta x} \right\} = \lim_{\Delta n \to \infty} \left\{ \log\left(1 + \frac{1}{n}\right)^{n/x} \right\} \\ &= \frac{1}{x} \log\left\{ \lim_{\Delta n \to \infty} \left(1 + \frac{1}{n}\right)^{n} \right\} = \frac{1}{x} \log e \\ &= \frac{1}{x} \qquad \left(\text{ここで } e = \lim_{\Delta n \to \infty} \left(1 + \frac{1}{n}\right)^{n} \text{ です} \right)\end{aligned} \tag{6}$$

2　1 階微分方程式

2.1　変数分離型

1 階微分方程式の基本は変数分離型です。下記の形式を取ります。

$$\frac{dy}{dx} = f(x)g(y) \tag{7}$$

それでは一般解[1]を求めてみましょう。式 (7) は式 (8) のように変更できます。

$$\frac{1}{g(y)} \cdot \frac{dy}{dx} = f(x) \tag{8}$$

さて、式 (8) の左辺ですが

$$\frac{1}{g(y)} = \frac{d}{dy}\left(\int \frac{1}{g(y)} dy \right)$$

と解釈できるので、これを式 (8) に代入し、合成関数の導関数を頭に置けば

$$\begin{gathered}\frac{d}{dy}\left(\int \frac{1}{g(y)} dy \right) \cdot \frac{dy}{dx} = f(x) \quad \to \quad \frac{d}{dx}\left(\int \frac{1}{g(y)} dy \right) = f(x) \\ \int \frac{1}{g(y)} dy = \int f(x)dx + c\end{gathered} \tag{9}$$

が得られます。(c は任意定数)

[1]一般解の定義については後述。

2.2 線形同次 1 階微分方程式

関数 y と y' が 1 次式 (線形) で結合した方程式

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

を線形 1 階微分方程式と呼びます。特に $Q(x) = 0$ のとき同次方程式、$Q(x) \neq 0$ のとき非同次方程式といいます。では初めに同次方程式の一般解を見ていきましょう。

$$\begin{gathered}
\frac{dy}{dx} + P(x)y = 0 \\
\frac{1}{y} \cdot \frac{dy}{dx} = -P(x) \\
\int \frac{1}{y} dy = -\int P(x)dx + c \\
\log y = -\int P(x)dx + c \\
y = e^{-\int P(x)dx + c} = ce^{-\int P(x)dx} \qquad (c \text{ は任意定数})
\end{gathered} \tag{10}$$

2.3 線形非同次 1 階微分方程式

次は非同次の場合を考えます。

$$\frac{dy}{dx} + P(x)y = Q(x) \tag{11}$$

非同次方程式の解として、同次方程式の一般解

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

において任意定数 c が関数 $k(x)$ であると仮定します。

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

これを式 (11) に代入すると

$$\begin{gathered}
k'(x)e^{-\int P(x)dx} - k(x)P(x)e^{-\int P(x)dx} + P(x)k(x)e^{-\int P(x)dx} = Q(x) \\
k'(x)e^{-\int P(x)dx} = Q(x) \\
k'(x) = Q(x)e^{\int P(x)dx} \\
k(x) = \int Q(x)e^{\int P(x)dx}dx + c
\end{gathered} \tag{12}$$

よって

$$y = e^{-\int P(x)dx} \left(\int Q(x)e^{\int P(x)dx}dx + c \right) \tag{13}$$

ちなみに、前回のレポートで Taylor の定理の証明でも使用しましたが、定数を関数に置き換えるこの方法を定数変化法と呼びます。(また後で使用します)

3 2 階微分方程式

2 階微分方程式の本題 (セクション 3.4) へ入る前に、用語解説 (基本解, 1 次独立, 一般解) と予備知識 (重ね合わせの定理, 複素関数 $e^{\lambda x}$ の導関数) の説明をします。

上記内容を既知の方は間を飛ばして本題 (セクション 3.4) から入って下さい。知らない/忘れた[2]方は、冗長感があるかもしれませんが、下記セクションから順番に読んで下さい。

[2]ちなみに私 (Monpe) は忘れていました

3.1　基本解/1 次独立/一般解

n 階の線形微分方程式

$$\frac{d^{(n)}y}{dx^n}+P_1(x)\frac{d^{(n-1)}y}{dx^{n-1}}+\cdots+P_{n-1}(x)\frac{dy}{dx}+P_n(x)y=Q(x)$$

における、1 次独立な n 個の解を基本解と呼びます。

ここで 1 次独立とは、ある区間 I で定義される n 個の関数

$$u_1(x),u_2(x),\cdots u_n(x)$$

が線形 (1 次) に結合した

$$k_1u_1(x)+k_2u_2(x)+\cdots+k_nu_n(x)=0$$

が成立するのは、$k_1=k_2=\cdots=k_n=0$ の場合に限るとき、「$u_1(x),u_2(x),\cdots u_n(x)$ は一次独立である」と言います。

そして一般解とは、n 個の任意定数を含んだ解です。一般解は基本解と任意定数の組み合わせとなる場合が多くなります。

3.2　重ね合わせの定理

一般解を構成する「組み合わせ」に関わる話です。簡単のために定数係数の線形同次 2 階微分方程式を例にしますが

$$\frac{d^2y}{dx^2}+a\frac{dy}{dx}+by=0$$

の基本解を $y_1(x),y_2(x)$ としたとき

$$c_1y_1(x)+c_2y_2(x)$$

も解になります。これを重ね合わせの定理と呼びます。

(証明)

実際に代入して確かめてみます。

$$\begin{aligned}\frac{d^2y}{dx^2}+a\frac{dy}{dx}+by&=\frac{d^2}{dx^2}(c_1y_1+c_2y_2)+a\frac{d}{dx}(c_1y_1+c_2y_2)+b(c_1y_1+c_2y_2)\\&=\frac{d^2}{dx^2}(c_1y_1)+\frac{d^2}{dx^2}(c_2y_2)+a\frac{d}{dx}(c_1y_1)+a\frac{d}{dx}(c_2y_2)+bc_1y_1+bc_2y_2\\&=c_1\left(\frac{d^2y_1}{dx^2}+a\frac{dy_1}{dx}+by_1\right)+c_2\left(\frac{d^2y_2}{dx^2}+a\frac{dy_2}{dx}+by_2\right)\\&=0\end{aligned}\tag{14}$$

3.3　$e^{\lambda x}$ の導関数

λ が $\lambda=\alpha+i\beta$ の複素数である場合に、$e^{\lambda x}$ の導関数を考えます。(ここで前回学習した Euler の公式も使用します。)

$$\begin{aligned}\frac{d}{dx}(e^{\lambda x})&=\frac{d}{dx}\{e^{(\alpha+i\beta)x}\}=\frac{d}{dx}(e^{\alpha x}e^{i\beta x})=\frac{d}{dx}\{e^{\alpha x}(\cos\beta x+i\sin\beta x)\}\\&=\alpha e^{\alpha x}(\cos\beta x+i\sin\beta x)+e^{\alpha x}(-\beta\sin\beta x+i\beta\cos\ \beta x)\\&=e^{\alpha x}\{(\alpha+i\beta)\cos\beta x+i(\alpha+i\beta)\sin\beta x\}=(\alpha+i\beta)e^{\alpha x}(\cos\beta x+i\sin\beta x)\\&=\lambda e^{\alpha x}e^{i\beta x}=\lambda e^{\lambda x}\end{aligned}\tag{15}$$

つまり複素数の場合でも、合成関数として導関数を扱えることがわかります。ここで λ が複素数の場合を扱った理由は、次回の Schrödinger 波動方程式への布石になっているので、この点は意識しておいて下さい。

3.4 定数係数の線形同次 2 階微分方程式 : 基本解

では、最後のテーマですが、定数係数の線形同次 2 階微分方程式

$$\frac{d^2y}{dx^2} + a\frac{dy}{dx} + by = 0 \tag{16}$$

の基本解について考えることにします。仮に式 (16) の基本解が $y = e^{\lambda x}$ で表せるとすれば、これを式 (16) に代入することで、式 (17) が得られます。

$$(\lambda^2 + a\lambda + b)e^{\lambda x} = 0 \quad \to \quad \lambda^2 + a\lambda + b = 0 \tag{17}$$

この式 (17) を特性方程式と呼び、その根は特性根と呼ばれます。特性根は解の公式で求められますが、念のため導出しておきます。

$$\begin{aligned}
\lambda^2 + a\lambda + b = 0 \quad &\to \quad \lambda^2 + 2\left(\frac{a}{2}\right)\lambda = -b \\
\lambda^2 + 2\left(\frac{a}{2}\right)\lambda + \left(\frac{a}{2}\right)^2 &= -b + \left(\frac{a}{2}\right)^2 \\
\left(\lambda + \frac{a}{2}\right)^2 &= \frac{a^2 - 4b}{4} \\
\lambda + \frac{a}{2} &= \frac{\pm\sqrt{a^2 - 4b}}{2} \\
\lambda &= \frac{-a \pm \sqrt{a^2 - 4b}}{2}
\end{aligned} \tag{18}$$

式 (18) より、λ は 2 つの異なる実数/複素数、または重解を持つことがわかります。そしてこれらの λ を有する $ce^{\lambda x}$ が基本解となります。

3.5 定数係数の線形同次 2 階微分方程式 : 一般解

基本解と任意定数を組み合わせた一般解を作りたいと思います。先ほど説明したように特性根が

- 特性根 $\lambda_1 \neq \lambda_2$ の場合
- 特性根 $\lambda_1 = \lambda_2$(重解) の場合

について考えることになります。

特性根 $\lambda_1 \neq \lambda_2$ の場合

この場合は重ね合わせの定理により、c_1, c_2 を任意定数とすれば

$$y = c_1e^{\lambda_1 x} + c_2e^{\lambda_2 x}$$

が一般解になります。

特性根 $\lambda_1 = \lambda_2$(重解) の場合

$\lambda_1 = \lambda_2 = \lambda$ において、$y = e^{\lambda x}$ は基本解になります。そこで、この $e^{\lambda x}$ の定数倍ではない基本解を定数変化法に基づいて $y = k(x)e^{\lambda x}$ と仮定します。このとき

$$\frac{d^2y}{dx^2} = k''e^{\lambda x} + 2k'\lambda e^{\lambda x} + k\lambda^2e^{\lambda x} \tag{19}$$

$$\frac{dy}{dx} = k'e^{\lambda x} + k\lambda e^{\lambda x} \tag{20}$$

となるので、式 (19)(20) を式 (16) に代入/整理すると、式 (21) が得られます。

$$k'' + k'(2\lambda + a) + k(\lambda^2 + a\lambda + b) = 0 \tag{21}$$

ここで、λ は特性根なので、$\lambda^2 + a\lambda + b = 0$ です。そして λ は重解なので式 (18) より $\lambda = -a/2$ すなわち $2\lambda + a = 0$ となります。よって式 (21) から

$$k''(x) = 0 \tag{22}$$

となります。式 (22) を満たす関数 $k(x)$ には、例えば $k(x) = x$ があります。これより $y = xe^{\lambda x}$ も基本解になることがわかります。従って c_1, c_2 を任意定数とすれば、特性根 λ が重解の場合の一般解は

$$y = c_1 e^{\lambda x} + c_2 x e^{\lambda x} \tag{23}$$

になります。

4 まとめ

前回は Euler の公式、今回は微分方程式と数学の準備が続きました。これは全て Schrödinger 方程式を扱って解析を進めるための準備です。次回は Schrödinger 波動方程式の導出と、これを適用した電子モデルの解析を行いたいと思います。

以上

履歴
2005/07/04 : 初版