

科目 【化学工学Ⅰ】基礎化学

問題 1

(1.1)

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = E\psi(x)$$

$$E_1 = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2mL^2} = \frac{h^2}{8mL^2}$$

(1.2)

$x=0$ に対する連続性の確認：

$$\lim_{x \rightarrow 0^+} \psi(x) = A \cdot 0 \cdot (L - 0) = 0$$

これは $x \leq 0$ での定義値 $\psi(0) = 0$ と一致している．

$x=L$ に対する連続性の確認：

$$\lim_{x \rightarrow L^-} \psi(x) = A \cdot L \cdot (L - L) = 0$$

これは $x = L$ での定義値 $\psi(L) = 0$ と一致している．

境界の左右両側からの極限值が一致するため，試行関数 $\psi(x)$ は境界条件を満たしている．

(1.3) $\sqrt{\frac{30}{L^5}}$

(1.4) $\frac{5\hbar^2}{mL^2}$

(1.5)

真のエネルギーとの差：

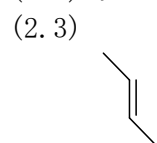
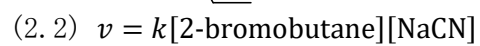
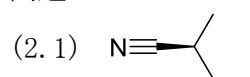
$$E'_1 - E_1 = \left(5 - \frac{\pi^2}{2}\right) \frac{\hbar^2}{mL^2}$$

相対誤差：

$$\frac{E'_1 - E_1}{E_1} = \frac{10 - \pi^2}{\pi^2} \cong 1.3\%$$

近似値の精度が高く，適した試行関数と考えられる．

問題 2



問題 3

