

16s2008: リッツの変分法で求めた基底状態のエネルギーと第2励起状態のエネルギーを比べると、第2励起状態のエネルギー error が広がっていますがこれには意味があるのか M: 意味不明. “エネルギー error が広がって”とは?

16s2028: 実験値はどのようにすれば広く認められた値になるのか。 M: “広く認められ”って、どういうこと? // 実験結果は実験結果でしょ? 誰か(その道の権威?)が認めることで値が確定するものじゃないし??

16s2040: 第2励起状態の近似式は基底状態に比べ誤差が大きくなっていましたが、試行関数を変えると誤差は小さくなるのでしょうか。 M: 自分で判断できないのはなぜか? // 試行関数として特定の関数形を選ばなければいけないという規則はない. 変分原理に基づけば、最小のエネルギーを与えるのは、理論上どういう場合か?

16s2052: 物理センシ的な思考は物理の分野に慣れれば次第に身についていくものなのでしょうか M: 私は知りません. 方法がわかったら、教えてくださいネ

17s2007: レイリー・リッツの変分法を用いて厳密解を求めても、わからなかった場合は何をもって正解とするのでしょうか。 M: 意味不明. “わからない”とか“正解”とか、一体全体どういうことか? どういうつもりなのか?

17s2028: 変分パラメータである Z には有効核電荷という意味合いがありましたが、変分パラメータである $C1$, $C2$ などには物理的にはどのような意味合いがあるのでしょうか。 M: 自分で考えれ分からないのはなぜか? // なぜ Z を“有効核電荷”と見なすことができたのか?

17s2029: エネルギーの低いほうが基底状態であり、もう1つの解が第一励起状態エネルギーの上限に相当しているということであったが、なぜそのようになるのか。 M: 質問の意図がわかりにくい. “そのよう”は、何を指しているのか? // 教科書や参考書の説明の、どこがわからないのか? (どこまでは分かったのか?) // 教科書 p.xxx “異なる固有値に属する固有関数は直交する”

17s2037: 実験値は厳密解ではないとのことでしたが、では厳密解はどのようにして導き出されているのですか。 M: “厳密解”という言葉の意味が分からないなら、専門書を見ればいいのか? // “厳密解”は“方程式の解析解”だと講義で説明したのに、伝わってなくて残念.

17s2045: 変数分離型の波動関数を用いて求める He 原子のエネルギーで、電子間反発項を無視して計算する意味はあるのですか。 M: 科学では、単発・個別の結論を暗記すればいい、という発想は止めてください. // 厳密解を得ることができるという意義がある. 電子間反発項の大きさを見積もる時の基準になるという意味がある.

17s2047: 励起状態のエネルギーの上限のもっと良い値を得る方法はあるのでしょうか。 M: 自分で考えて分からないのはなぜか? // 基底状態とは異なる励起状態特有の性質をあらかじめ考慮した試行関数を用いる. // 宿題

17s2051: 今まで出た課題などの正式な解答が見たいです M: そうですか. しかし、質問が記載されていません.

18s2004: ϵ の値は複数求められますが、最小値でない ϵ の値は何を示していますか。 M: 17s2029 参照

18s2006: 教科書 p.276 の「二つの結果の非常に良い一致は、単純な試行関数にしてはできすぎである」とかいてありますが、 $N=2$ 以外の場合では、このように上手く一致しないのでしょうか? M: 自分で考えて分からないのはなぜか? (知ってる知っていないの問題ではなく、論理的に考える.) // 良く一致するための条件、よく一致したこと論理的理由、等があるのだろうか?

18s2009: 変分パラメータを決める時に結果をより精度の高いものにするには物理的性質をよく考察していけば良いのですか? M: そりゃ、しないよりした方が良さだろうと予想はできる. // まあ、色々考えることが重要.

18s2010: 重い元素の基底状態のエネルギーの計算をするとき、どの程度エネルギーの低い軌道までなら近似による誤差を無視できる程度になるか M: 自分で考えて分からないのはなぜか? // “誤差”とは何か? // 教科書 p.263 の“ほとんど望みの精度で解くことができる”の意味を理解していない?

18s2014: 試行関数の結合次数が増加してしまうと変分法で解くことが出来なくなってしまいますか。 M: 意味不明. “試行関数の結合次数”とは、一体全体なんのことか??

18s2018: 近似値を使うことで厳密に求められないものをある程度の誤差で求めるといのはわかりましたが、その誤差はどれくらいの範囲で許容されますか。 M: 誰が許すのか? // あなたはどれくらいの範囲の誤差を許容するのか? // 18s2010 も参考に

18s2027: レイリー・リッツの変分法の例として一次元の箱の中の粒子を挙げていましたが、2次元以上の箱の中の粒子でも解くことは可能ですか? M: 自分で解いてみればいいのか?

18s2029: 変分法ではパラメータを増やせば増やすほど結果が厳密解に近くなりますが、極限まで近づけることはできますか? M: 自分で考えて分からないのはなぜか? // “極限”とは何か?

18s2030: 試行関数を選ぶとき基底状態の波動関数と直行 [原文ママ] するようにする必要があるが、それに当てはまる試行関数はひとつではないのですか? M: 意味不明. 何の試行関数がどうだという話か?

18s2032: p.277 より、求めた解の一方は箱の中の粒子の第一励起状態エネルギーの上限に相当しているとあるが、これはたまたま近い値のエネルギーが得られただけなのでしょうか? M: 質問の意味が分かりにくい. 何が “たまたま” なのか? “近い” とは、何と何とが近いという話か?

18s2034: より多くの変分パラメータを含んだ試行関数を用いた方が良い値を得られるのはなぜか。 M: 自分でどれだけ必死に考えたのか? // 本気か? 例えば起伏の変化に乏しい関数と起伏の変化が大きい関数とを、同じ次数の多項式を用いて近似的に表現しようとすると、どちらがより良好な近似が得られるだろうか?

18s2038: ヘリウム原子の基底状態のエネルギーを精度の高い計算で求めた結果が実験値よりも小さくなっていたが、 E_ϕ が E_0 以上になるというのは変分法だけなのでしょうか? M: 自分で考えて分からないのはなぜか? // 変分原理をキチンと理解していないのか? 変分原理では、実測値・実験値について何か述べていたか?

18s2040: 変分パラメータが多いほど厳密解に近づくことあったが、その時に用いる試行関数によって、厳密解に近づく値の幅は大きくは変わってしまうものなのか M: 意味不明. “近づく値の幅”とは何のことか??

18s2045: 試行関数を用いる際に、試行関数として明らかに適さない関数はどのようなものがありますか M: 自分で考えて分からないのはなぜか? // 波動関数として不適切な関数は、当然、試行関数として不適切.

18s2046: 誤差はどうしても出てしまうものであるが、万人に対してこの程度の誤差ならば無視できるという境目はあるのですか M: 万人に対して OK と、どうやって確かめるか? 過去の人物や未来の人物に対しても、どうやって??

19s2001: レイリー・リッツの変分法はどのように考え出された方法なのですか M: 考え出した人に聞けばいいのか? :-p

19s2002: Z をヘリウムの変分パラメーターとすると、Z の値が求まりましたが、他の原子に当てはめて有効核電荷を求めるとき、何か不便な点はありますか。 **M:** 自分で求めてみれば分かるのでは？

19s2004: 厳密解よりエネルギーの最小値がより詳しく得られるのは何故ですか？ **M:** 何の話か？ // 18s2010 の回答参照

19s2005: 計算に用いる試行関数はどのように選択するのか **M:** 別に、好きにすればいいのでは？ // 系の物理的な性質に基づいて選ぶ。または、教科書 p.272 では“任意の既知の関数”とあるが？

19s2006: 実験値や、精度の高い計算の値をつかって電子間反発の項を導出することはできないのか。 **M:** 自分で導出してみれば分かるのでは？

19s2007: リッツの変分法における変分パラメーターの数は、結果に影響しますか？ (多いほど正確な値を求められるなど) **M:** 自分で判断できないのはなぜか？ // 教科書 pp.278-279 や参考書を読めばいいのでは？ 18s2034 参照

19s2009: 実測値が真の値ではないというのは測定誤差や対象物を取り巻く環境があるからというのは分かりました。ではどうすれば真の値が分かるのですか？ **M:** 自分で考えてわからないのはなぜか？ // 本気か？ 真の値とは、どんな状況における値か？

19s2010: ヘリウム原子よりももっと電子数の多い原子も永年行列式から近似的な基底状態のエネルギーを求められますか。 **M:** 自分で判断できないのはなぜか？ // 教科書や参考書をよく読んで勉強すれば分かるのでは？

19s2011: “単純な試行関数が E0 と非常に良い一致をする”というような試行関数はどのような関数の場合でも存在するのですか **M:** “どのような関数の場合”とは、どういう意味か？ // 試行関数を選ぶ意味はあるのか？

19s2012: 箱の中の粒子の問題を変分法を使って求めたときに得られた二つの解のうち、もう一方の解が第 1 励起状態でなく第 2 励起状態の状態の近似解になるのですか？ **M:** 講義で説明したのに、伝わってなくて理解されていないようで残念。// また、もう一方の解がいつも第二励起状態の近似値になるわけではない。系の物理的な状況、波動関数の形、などをよくよく考える。

19s2013: レイリー・リッツの変分法を使えば、空間の次元数関係なしに基底状態のエネルギーを求めることが出来るのですか。 **M:** 自分で判断できないのはなぜか？ // 自分で計算してみればいいのでは？

19s2014: 変分法では有効核電荷を近似することが出来ましたが、スレーター則と関係はありますか。 **M:** 微妙に勘違いの予感。それぞれの言葉の意味をしっかりと理解しておく必要があるのでは？ // “有効核電荷を近似する”とは？“スレーター則”が成り立つのはなぜか？

19s2015: 何故最小の解が基底状態のエネルギーの近似値となるのか **M:** 正気か？ // “基底状態”とはどんなエネルギーの状態か？

19s2016: 励起状態のとき、エネルギーの上限の近似値が粗くなるのはなぜですか **M:** 18s2034 参照

19s2017: [白紙] **M:** 質問が書いてありません。

19s2018: 複数の変分パラメータを含む試行関数で良好な結果になるとのことですが、どのような状況でも変分パラメータを増やせば、より厳密解に近付くのですか？ **M:** 自分で考えてわからないのはなぜか？ // 全ての場合について試したことはないので、私は知りません。

19s2019: 永年方程式を使い、変分パラメータを求めるときに虚数解になることはあるのでしょうか。 **M:** 質問の意味が分かりにくい。変分パラメータが虚数という意味か、エネルギー (の最小値) が虚数という意味か？ // 自分で考えてわからないのはなぜか？

19s2020: 電子反発項を無視しシュレーディンガー方程式を解いた後で、補正し近似することは可能か。 **M:** 自分で判断できないのはなぜか？ // 自分で計算してみればいいのでは？

19s2021: 励起状態のエネルギーの上限に値する解が粗いものなのはなぜですか？ **M:** 18s2034 参照

19s2022: 試行関数の項が 3 つ以上になることはあるのでしょうか。 **M:** 自分で判断できないのはなぜか？ // 教科書 p.272 や参考書をよく読めばいいのでは？

19s2023: 式 (7.37) のもう一方の解の意味について、励起状態のエネルギーのかなり粗い上限であることを分かりました。これに関し、より良い値を出せる手段とはどのような方法を用いるのでしょうか。 **M:** 自分で考えてわからないのはなぜか？ // 特別なことは何も無い。普段通りに考えればいいのでは？ // “厳密解に近い関数形であれば良い近似エネルギーを与える”という近似を考える時はいつも同じ考え方をすればいいのでは？

19s2024: 永年方程式の 2 つの解について、小さな解を選ぶ解の場合、Eexact と非常に良い一致をしている反面、大きな解を選ぶと E の上限ではあるが、かなり粗いものになるのは何故か。 **M:** 18s2034 参照

19s2025: 水素ヘリウム以外の原子で Z を求めたとき、どの軌道の電子がどのくらい遮蔽しているかで確認することは可能ですか **M:** 得られるものの意味が違うのでは？ それぞれの電子にとっての有効核電荷がいくつかが求まるのでは？

19s2027: 一次元の箱の中の粒子のエネルギー近似解を求めたとき、教科書では、単純な試行関数にしてはできすぎているとありますが、できすぎてはいけないのですか。 **M:** 自分で判断できないのはなぜか？ // あなたは何をやりたいのか？

19s2028: なぜ励起状態のエネルギーの上限の値は粗くなってしまっているのですか？ **M:** 18s2034 参照

19s2030: レイリー・リッツの変分法は試行関数に多くのパラメーターを存在させることが簡単にでき、それは厳密な波動関数に近い試行関数を得られるということなので、値も前回学んだ変分法よりも真の値に近い値が得られやすいのか？ **M:** 自分で考えてわからないのはなぜか？ // 得られやすいかどうか、どうやって判断するのか？

19s2031: 変分パラメータの数を増やせば精度が増しますが、誤差が 0 にならないことはありますか？ **M:** 自分で考えてわからないのはなぜか？ // 変分原理によれば、基底状態のエネルギーと一致する値が得られるのは、どんな場合か？

19s2032: レイリーリッツの変分法では連立方程式を解くために行列の考え方をしますが、どうして行列の考え方を取り入れた方が良いのですか。 **M:** 別に、行列の考え方を取り入れるかどうかによらず、やることは同じでは？

19s2033: 水素以外の水素型原子の最外殻電子の波動関数は実際にはその内側の電子からの反発を受け少し外側に広がることで計算した値より実験で得た値の方が大きくなるのではないですか？ **M:** “実際には”とは、どういうことか？ 水素型原子は、なにがどうあっても水素型原子でしょ？ 内側の電子って、何のことか？

19s2034: 行列要素を求めるときに 7・22 式の a の値がなぜ 1 としているのですか？ 簡単のためとあったがこれはどういう意味なのか？ **M:** 文字通りだが、何が分からないのか？ // どちらが計算や作図が簡単か？

19s2035: レイリー・リッツの変分法は、基底状態において成り立っていたが、他の状態の場合でも成り立つのか。 **M:** 17s2047 参照

19s2036: 電子間反発と有効核電荷の間には、何かしらの関与があるのでしょうか？ **M:** 具体的に、どういうことでしょうか？

19s2037: 厳密解を知らない方程式に関して試行関数の妥当性、解の妥当性はどのようにして分かるのか。 **M:** 変分法については明らかでは？ // 系の物理的な特性を考慮すればいいのでは？

19s2038: 教科書の式 7.37 の解である 51.065 は第一励起状態のエネルギーの上限であるとしていますが、どうしてそれを断定できるのですか？また、授業スライドに出てくるグラフは何を用いてプロットしてグラフを求めていますか？ **M:** 教科書 p.138 や参考書をよく読めばいいのでは？ // gnuplot

19s2039: 有効核電荷の値は計算上求められるが、実際の系では周囲からの影響を考慮すると値にずれが出てくるのでしょうか。 **M:** 自分で判断できないのはなぜか？ // 周囲の影響は何に効くのか？

19s2040: 変分パラメータを増やすほど厳密解に近づくのですか。 **M:** 18s2034 参照

19s2041: 試行関数のシュレーディンガー方程式の解のエネルギー固有値の最大値は $E = mc^2$ の E になるのでしょうか。 **M:** 自分で計算してみれば分かるのでは？

19s2042: 厳密解と近似解はどれくらいの誤差まで許されるのですか。 **M:** 18s2018 参照

19s2043: 変分法の精度はなぜ高いのでしょうか。 **M:** 教科書 p.263 の“ほとんど望みの精度で解くことができる”の意味を理解していない？

19s2044: 変分パラメーターを多く含む関数ほど厳密な結果に近づくのは何故ですか **M:** 18s2034 参照

19s2045: なぜ実験値を用いて比較するのですか？ **M:** あなたは何をやりたかったのか？

19s2046: 試行関数を選ぶときに、より多くの変数パラメータを含む関数を用いれば厳密解により近い値を求めることができるということですか？ **M:** 自分で判断できないのはなぜか？ // 18s2034 参照

19s2047: 計算結果が実験の値と誤差が何 % あると言う話が出ていましたが、計算で出した値より実験の値を基準にするのはなぜですか？ **M:** 計算で出した値とは？

19s2048: なぜ誤差が大きいのに電子間反発項を無視した場合の値を求める必要があるのですか？ **M:** 17s2045 参照

19s2049: 真の値と計測値の間に誤差が生じるのは当然であるとして、原子の運動などの非常に小さな粒子の物理的運動を計測した際、実測値の誤差がどの程度かというのは分かるのか？ **M:** “誤差”とは何か？ // 非常に小さな粒子であっても、最終的に観測される物理量はマクロなものでしょ？

19s2050: 良い近似値を得るための試行関数はどのように選べばいいんですか。 **M:** 自分で考えてわからないのはなぜか？ // 系の物理的性質を反映した試行関数を用いる。

19s2051: 厳密な波動関数を具体的に表現して計算することはできますか？ **M:** 何の話か？ // 厳密な波動関数をどうやって得るのか？

19s2052: 式をたてて理論的にあることを証明したとしてそれが実験的に証明することができない場合その理論は本当に証明されたといえるのでしょうか？ **M:** 本気か？ // 理論的に証明されたことは、証明されたといわないのか？

18s6025: 箱の中の粒子について、変分計算をした時に求めた二つの E のうち、小さい方は基底状態のそれと非常に近い値となっていました、もう一方の大きい方の E は既知の第二励起状態エネルギー値との誤差が大きかったのですが、これには何か理由があるのですか？それとも、今回採用した施行関数で、たまたま小さい方の E は誤差が小さく、大きい方の E は誤差が大きかったのでしょうか？ **M:** 18s2034 参照