

# 5-2 変分法は何故よいか？

- 求めたエネルギー  $E$  は  
 正確な値より正しい固有値より  
 $\epsilon$  だけ大きい  
 $E$  の誤差は  $\epsilon^2$  程度

(証明)  $\left\{ \begin{array}{l} \text{正しい正確な値を } \psi_0 \\ \text{その固有値を } E_0 \end{array} \right. \quad \text{とす}$

$$\underline{H\psi_0 = E_0\psi_0}$$

- 今仮定関数を  $\psi$  とし  $\psi_0$  から

$$\boxed{\psi = \psi_0 + \epsilon\psi_1}$$

と仮定すると仮定する。

条件  $\left\{ \begin{array}{l} \epsilon \ll 1 \\ \langle \psi_0 | \psi_1 \rangle = 0 \end{array} \right. \quad \text{とす}$

$$E = \frac{\langle \psi | H | \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle} = \frac{\langle \psi_0 + \epsilon\psi_1 | H | \psi_0 + \epsilon\psi_1 \rangle}{1 + \epsilon^2}$$

$$\approx (1 - \epsilon^2) \left( E_0 + \epsilon \langle \psi_1 | H | \psi_0 \rangle + \epsilon \langle \psi_0 | H | \psi_1 \rangle + \epsilon^2 \langle \psi_1 | H | \psi_1 \rangle \right)$$

222-

$$\begin{cases} \langle \psi_1 | H_0 | \psi_0 \rangle = E_0 \langle \psi_1 | \psi_0 \rangle = 0 \\ \langle \psi_0 | H | \psi_1 \rangle = E_0 \langle \psi_0 | \psi_1 \rangle = 0 \end{cases} \quad \text{よ}$$

$$E = (1 - \varepsilon^2) (E_0 + \varepsilon^2 \langle \psi_1 | H | \psi_1 \rangle + \dots)$$

$$E = E_0 + \varepsilon^2 (E_1 - E_0) + \dots$$

$$\text{ここで } E_1 \equiv \langle \psi_1 | H | \psi_1 \rangle \text{ である}$$

また、

$$\begin{cases} \psi = \psi_0 + \varepsilon \psi_1 \quad \text{の } \varepsilon E \\ E = E_0 + \varepsilon^2 (E_1 - E_0) \end{cases}$$

すなわち 摂動問題 として  $\varepsilon \approx 0.1$  程度ならばE の近似は  $\varepsilon^2 \approx 0.01$  程度E は  $E_0$  (2桁程度) 程度に近づく