

9-2-2 変分法は何故よいのか？

正確な E は波動関数 ψ の
真の固有関数からなる ψ である
といえる

(証明) 正しい波動関数 ψ_0 } とする
その固有値 E_0

すなわち

$$H \psi_0 = E_0 \psi_0$$

変分波動関数 ψ とは

ψ_0 からのずれ $\epsilon \in \psi_1$, ($\epsilon \ll 1$) とする

$$\psi = \psi_0 + \epsilon \psi_1$$

$$\epsilon \ll 1$$

つまり $\underbrace{\langle \psi_0 | \psi_1 \rangle = 0}$ と仮定する

したがって変分法によつて H の期待値を求めよう

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

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

$$\rightarrow \langle \psi_1 | H | \psi_0 \rangle = E_0 \quad \langle \psi_1 | \psi_0 \rangle = 0$$

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

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

$$\approx E_0 + \epsilon^2 (E_1 - E_0)$$

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

$$\text{すなわち } \begin{cases} \psi = \psi_0 + \epsilon \psi_1 & \text{のとき} \\ E = E_0 + \epsilon^2 (E_1 - E_0) \end{cases}$$

この範囲では ϵ (例えば $\epsilon = 0.1$) が小さいので

正確な値は E_0 である (例えば $\epsilon^2 (\epsilon^2 = 0.01)$ 程度) とする。