No.

Date

10-2-2 変分法は何故よいか？

{ エネルギー E は 波動関数が
真の固有関数から ε ズレていても
E のズレは ϵ^2 になり、よい値が求まる }

(証) 正しい波動関数を ψ_0
その固有値を E_0
} とする。

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

• 変分関数を ψ として ψ_0 から

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

とズレているとする。

ただし $\boxed{\epsilon \ll 1}$

また $\underline{\langle\psi_0|\psi_1\rangle = 0}$ を仮定する。

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

$$= (1-\epsilon^2)\Big(E_0 + \epsilon\langle\psi_1|H|\psi_0\rangle + \epsilon\langle\psi_0|H|\psi_1\rangle + \epsilon^2\langle\psi_1|H|\psi_1\rangle\Big)$$

ここで

$$\left.\begin{array}{l} \langle \psi_1 | H_0 | \psi_0 \rangle = E_0 \langle \psi_1 | \psi_0 \rangle = 0 \\ \langle \psi_0 | H | \psi_1 \rangle = E_0 \langle \psi_0 | \psi_1 \rangle = 0 \end{array}\right\} \text{より}$$

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

$$= E_0 + \epsilon^2 (E_1 - E_0) + \cdots$$

となる。 但し $E_1 \equiv \langle \psi_1 | H | \psi_1 \rangle$

とおいた。

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

波動関数が $\epsilon \simeq 0.1$ 程ズレていても

E のズレは $\epsilon^2 = 0.01$ となり

E は E_0 にかなり近いことになる!!