

# § 変分法 (変分原理, variation method, variational principle)

## (I) レイリー・リッツの変分法 (Rayleigh-Ritz variation method)

$\phi(x)$ : 試行関数

$$J(\phi) \equiv \frac{\langle \phi | H | \phi \rangle}{\langle \phi | \phi \rangle}$$

を関数  $\phi$  の汎関数であるとして,  $\phi$  についての任意の変分  $\delta\phi$  に対して停留値を与えよという条件

$$\frac{\delta J}{\delta \phi} = 0$$

から

$$E = \langle \phi | H | \phi \rangle$$

と

$$(H - E)|\phi\rangle = \langle \phi|(H - E) = 0.$$

が得られる。

一般に

$$J(\phi) \equiv \int F(x, \phi, \phi_x) dx, \quad \phi_x \equiv \frac{d\phi(x)}{dx}$$

$\phi(x)$ : 試行関数

で与えられる (未知関数  $\phi(x)$  の) 汎関数  $J(\phi)$  が,  $\phi$  に関して停留値 (極値) をもつ必要条件は

$$\frac{\partial F}{\partial \phi} - \frac{d}{dx} \frac{\partial F}{\partial \phi_x} = 0 \quad (\text{オイラー・ラグランジュ方程式})$$

Euler-Lagrange equation

が満足することである。

この方法は、変分問題<sup>(偏)</sup>を微分方程式に変換して処理する方法である。

(II) 変分法 (Ritz method, 変分法)

試行関数  $\phi$  をある正規直交関数系  $(\psi_1, \psi_2, \dots, \psi_n)$  で展開する

$$\phi = \sum_{k=1}^n a_k \psi_k \quad (1)$$

ここで  $\phi$  について  $H$  の期待値

$$\langle H \rangle \equiv \frac{\langle \phi | H | \phi \rangle}{\langle \phi | \phi \rangle} \quad (2)$$

$$= \frac{\sum_k \sum_{k'} a_k^* a_{k'} H_{kk'}}{\sum_{k=1}^n |a_k|^2} \quad (3)$$

$$H_{kk'} \equiv \langle \psi_k | H | \psi_{k'} \rangle \quad (4)$$

この  $\langle H \rangle$  を最小にする  $\{a_k\}$  を選ぶ

$a_k$ : complex

$\rightarrow \{a_1, a_2, \dots, a_n, a_1^*, a_2^*, \dots, a_n^*\}$ : 独立変数とし (3) の最小値を求め?

$a_k^*$  について (3) を微分して

$$\sum_{k'} H_{kk'} a_{k'} - \langle H \rangle a_k = 0 \quad (5)$$

$\rightarrow$  自明解 ( $a_k = 0$ ) 以外の解が存在するための条件

$$\det(H_{kk'} - \langle H \rangle \delta_{kk'}) = 0$$

$\rightarrow \langle H \rangle: \exists \mathbb{R}$ .

$E \leq E_1 \leq E_2 \leq \dots$  とし

$$E - E_0 = \langle \phi | H - E_0 | \phi \rangle = \sum_{k=0}^{\infty} |a_k|^2 (E_k - E_0) \geq 0$$