

$$\hat{H} |k\rangle = E_k |k\rangle \quad (0.0.1)$$

変分法 (variational principle) とはハミルトニアン基底エネルギー E_0 の近似法である¹。変分法は式 (0.0.1) において \hat{H} の一般の固有値を求めることが困難であるとき、基底エネルギーのみを求めるにときに用いられる。量子系において、基底エネルギーは系の特徴の 1 つであるため、それが分かることだけでも、十分な議論となる場合があるのだ。

¹ 近似法には摂動法と変分法がある。摂動法はハミルトニアンが厳密に解ける項 \hat{H}^0 と摂動項 $\hat{\delta}$ を用いて、 $\hat{H} = \hat{H}^0 + \hat{\delta}$ と表され、摂動項が小さいときのみ有効である。これに対し、変分法はどんなときでも有効である。