

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

変分法 (variational principle) とは Hamiltonian の基底エネルギー 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 Hamiltonian 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.