• Dimostrazione che il principio variazionale produce limiti superiori a quello vero:

$$|\Phi\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} D_n |\varphi_n\rangle \quad \text{funzione di prova} \qquad 8)$$

dove le $|\varphi_n\rangle$ sono definite dall' eq. di Schrödinger

$$H|\varphi_n\rangle = E_n |\varphi_n\rangle. \qquad 9)$$

Quindi $|\Phi\rangle$ e' sviluppata in termini di funzioni d'onda "vere".

$$E[\Phi] = \frac{\langle\Phi|H|\Phi\rangle}{\langle\Phi|\Phi\rangle} = \frac{\sum_{nn'} \langle\varphi_n|D_n^* H D_{n'}|\varphi_{n'}\rangle}{\sum_{nn'} \langle\varphi_n|D_n^* D_{n'}|\varphi_{n'}\rangle}$$

$$= \frac{\sum_{nn'} D_n^* D_{n'} \langle\varphi_n|H|\varphi_{n'}\rangle}{\sum_{nn'} D_n^* D_{n'} \langle\varphi_n|\varphi_{n'}\rangle} = \frac{\sum_{nn'} D_n^* D_{n'} E_{n'} \delta_{n,n'}}{\sum_n |D_n|^2}$$

$$\geqslant \frac{\sum_{n=0}^{\infty} |D_n|^2 E_0}{\sum_{n=0}^{\infty} |D_n|^2} = E_0 \qquad 10)$$

Il maggiore e' legato al fatto che tutte le E_n sono maggiori di E_0 che e' l'energia dello stato fondamentale.

• Il principio variazionale funziona al suo meglio per lo stato fondamentale. Per il 1° stato eccitato bisognerebbe risolvere le equazioni variazionali con la condizione aggiuntiva

$$\langle\Phi_1|\Phi_0\rangle = 0$$

e per il 2° stato eccitato con

$$\langle\Phi_1|\Phi_0\rangle = 0 \quad \langle\Phi_2|\Phi_0\rangle = 0 \quad \langle\Phi_1|\Phi_2\rangle = 0$$

diventando sempre più complicato