

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

$$|\Phi\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} D_n |\psi_n\rangle \quad \text{funzione di prova}$$

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

$$H|\psi_n\rangle = E_n |\psi_n\rangle.$$

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

$$\begin{aligned} E[\Phi] &= \frac{\langle \Phi | H | \Phi \rangle}{\langle \Phi | \Phi \rangle} = \frac{\sum_{nn'} \langle \psi_n | D_n^* H D_{n'} | \psi_{n'} \rangle}{\sum_{nn'} \langle \psi_n | D_n^* D_{n'} | \psi_{n'} \rangle} \\ &= \frac{\sum_{nn'} D_n^* D_{n'} \langle \psi_n | H | \psi_{n'} \rangle}{\sum_{nn'} D_n^* D_{n'} \langle \psi_n | \psi_{n'} \rangle} = \frac{\sum_{nn'} D_n^* D_{n'} E_n \delta_{nn'}}{\sum_{nn'} D_n^* D_{n'} \delta_{nn'}} \\ &= \frac{\sum_{nn'} D_n^* D_{n'} \langle \psi_n | \psi_{n'} \rangle}{\sum_{nn'} D_n^* D_{n'} \delta_{nn'}} = \frac{\sum_{nn'} D_n^* D_{n'} \delta_{nn'}}{\sum_{nn'} D_n^* D_{n'} \delta_{nn'}} \\ &\geq \frac{\sum_{n=0}^{\infty} |D_n|^2 E_0}{\sum_{n=0}^{\infty} |D_n|^2} = E_0 \end{aligned}$$

Il maggiore è legato al fatto che tutte le E_n sono maggiori di E_0 che è 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

$$\langle \bar{\Phi}_1 | \bar{\Phi}_0 \rangle = 0$$

e per il 2° stato eccitato con

$$\langle \bar{\Phi}_1 | \bar{\Phi}_0 \rangle = 0 \quad \langle \bar{\Phi}_2 | \bar{\Phi}_0 \rangle = 0 \quad \langle \bar{\Phi}_1 | \bar{\Phi}_2 \rangle = 0$$

diventando sempre più complicato.