Ｑ．
量子力学的少数多体問題で、基底状態だけでなく、
励起状態まで含めて系統的に解くにはどのような方法があるでしょうか？

Ａ．
ガウス型の基底関数を用いて、変分法で解くのが良いのではないかと
思います。例えば 10 次元のガウス型基底関数を用いて、行列要素を求め、
固有値を求めれば、10 個の固有値が出てきます。

求めたい状態のエネルギー固有値を E_n, (n=1,2,3,…)として、
変分法で得られたエネルギー期待値を下から ε_n, (n=1,2,3,…)としますと、
（拡張された）変分原理より、

E_1 <= ε_1,
E_2 <= ε_2,
E_3 <= ε_3,
…

という関係が成り立ちますので、「良い」基底関数を選ぶことにより、
主量子数 n=1 を超えた state を良い精度で求めることが可能かと思います。

「良い」基底関数の選び方としては、
(1)ガウス関数のひろがりをまず等比数列で作っておき、変分計算を実行。
これで満足のいく結果が得られましたら、ここで終わっても良いと思います。
あるいは、
(2)基底関数のひとつについてだけ、ひろがりパラメータを手で変更してみます。
実際には適当な乱数をふれば良いと思いますが、乱数をふって変更した後の
基底関数のセットが、一次独立であることに注意する必要があります。この
基底関数のセットで行列要素を計算し、固有値を求めてみます。もし以前の
結果よりも改善されていれば、こちらの方が「良い」基底関数のセットになります。
(3)さらに基底関数を改善する余地があると思われれば、基底関数のうち、
また別のひとつについて、乱数をふってガウスのひろがりを変更し、
固有値を求めてみます。一次独立性を注意することなどは(2)と同じです。

このような作業を繰り返すことにより、一般に、比較的小さな行列要素の
計算で、励起状態を含めて精度の良い答えが得られるものと思われます。

（参考文献）
Suzuki and Varga, "Stochastic Variational Approach to Quantum Mechanical
Few-Body Problems", (Springer, 1998)
（§３．１に励起状態を含めた変分法についての説明がございます。）