

まずエネルギー補正 $E_n^{(1)}$ について考える．式 (??) の両辺に $\langle n^{(0)} |$ を作用すると，

$$\langle n^{(0)} | (E_n^{(0)} - \hat{H}^{(0)}) | n^{(1)} \rangle + \langle n^{(1)} | E_n^{(1)} | n^{(0)} \rangle = \langle n^{(0)} | \hat{V} | n^{(0)} \rangle \quad (0.0.1)$$

$$\Leftrightarrow E_n^{(0)} \langle n^{(0)} | n^{(1)} \rangle - E_n^{(0)} \langle n^{(0)} | n^{(1)} \rangle + E_n^{(1)} \langle n^{(1)} | n^{(0)} \rangle = \langle n^{(0)} | \hat{V} | n^{(0)} \rangle \quad (0.0.2)$$

$$\Leftrightarrow 0 + E_n^{(1)} \langle n^{(0)} | n^{(0)} \rangle = \langle n^{(0)} | \hat{V} | n^{(0)} \rangle \quad (0.0.3)$$

$$\Leftrightarrow E_n^{(1)} = \langle n^{(0)} | \hat{V} | n^{(0)} \rangle \quad (0.0.4)$$

を得る．よって，1 次摂動によるエネルギー補正は，

1 次摂動によるエネルギー補正

$$E_n^{(1)} = \langle n^{(0)} | \hat{V} | n^{(0)} \rangle \quad (0.0.5)$$

である．

次に固有ベクトル $|n^{(1)}\rangle$ の補正を求める．式 (??) の両辺に $\langle m^{(0)} |$ を左から作用すると，

$$\langle m^{(0)} | (E_n^{(0)} - \hat{H}^{(0)}) | n^{(1)} \rangle + \langle m^{(0)} | E_n^{(1)} | n^{(0)} \rangle = \langle m^{(0)} | \hat{V} | n^{(0)} \rangle \quad (0.0.6)$$

$$E_n^{(0)} \langle m^{(0)} | n^{(1)} \rangle - E_m^{(0)} \langle m^{(0)} | n^{(1)} \rangle + 0 = \langle m^{(0)} | \hat{V} | n^{(0)} \rangle \quad (0.0.7)$$

$$(E_n^{(0)} - E_m^{(0)}) \langle m^{(0)} | n^{(1)} \rangle = \langle m^{(0)} | \hat{V} | n^{(0)} \rangle \quad (0.0.8)$$

となる．式 (0.0.8) に $\langle m^{(0)} |$ をかけて， m に関して和を取れば，

$$\sum_m (E_n^{(0)} - E_m^{(0)}) \langle m^{(0)} | \langle m^{(0)} | n^{(0)} \rangle = \sum_m \langle m^{(0)} | \hat{V} | n^{(0)} \rangle \langle m^{(0)} | \quad (0.0.9)$$

$$\Leftrightarrow \sum_m (E_n^{(0)} - E_m^{(0)}) \langle m^{(0)} | n^{(0)} \rangle = \sum_m \langle m^{(0)} | \hat{V} | n^{(0)} \rangle \langle m^{(0)} | \quad (0.0.10)$$

$$\Leftrightarrow |n^{(0)}\rangle \sum_{m \neq n} (E_n^{(0)} - E_m^{(0)}) = \sum_{m \neq n} \langle m^{(0)} | \hat{V} | n^{(0)} \rangle |m^{(0)}\rangle \quad (0.0.11)$$

$$\Leftrightarrow |n^{(0)}\rangle = \sum_{m \neq n} \frac{\langle m^{(0)} | \hat{V} | n^{(0)} \rangle}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}} |m^{(0)}\rangle \quad (0.0.12)$$

となる．途中の式変形でエネルギー縮退がないので，

$$E_n^{(0)} - E_m^{(0)} \begin{cases} = 0 & n = m \\ \neq 0 & n \neq m \end{cases} \quad (0.0.13)$$

とした．また，Hermite 演算子である $\hat{H}^{(0)}$ の固有ベクトルに関する完全性より，

$$I = \sum_m |m^{(0)}\rangle \langle m^{(0)}| \quad (0.0.14)$$

を用いた．

1 次摂動による固有ベクトル補正

$$|n^{(1)}\rangle = \sum_{m \neq n} \frac{\langle m^{(0)} | \hat{V} | n^{(0)} \rangle}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}} |m^{(0)}\rangle \quad (0.0.15)$$

を得る．式 (0.0.15) において， $|n^{(1)}\rangle$ と $|n^{(0)}\rangle$ は直交することに注意する．