摂動が無い状態の Schödinger 方程式,

$$\hat{H}^{(0)} \left| n^{(0)} \right\rangle = E_0^{(0)} \left| n^{(0)} \right\rangle \tag{0.0.1}$$

が厳密に解くことができるとする. ここに摂動 \hat{V} を加わったこと を考えると、摂動ハミルトニアンを \hat{V} として、

$$\left(\hat{H}^{(0)} + \hat{V}\right)|n\rangle = E_n|n\rangle \tag{0.0.2}$$

とかける. 摂動の大きさを表すパラメータを λ として式(0.0.2)を

$$\hat{H} = \hat{H}^{(0)} + \lambda \hat{V} \tag{0.0.3}$$

とする. $\lambda \to 0$ ならば明らかに,

$$\begin{cases} |n\rangle \to \left| n^{(0)} \right\rangle \\ E_n \to E_n^{(0)} \end{cases} \tag{0.0.4}$$

である. ここで,式(0.0.3)の解が,

$$\begin{cases} |n\rangle &= \left| n^{(0)} \right\rangle + \lambda \left| n^{(1)} \right\rangle + \lambda^2 \left| n^{(2)} \right\rangle + \cdots \\ E_n &= E_n^{(0)} + \lambda E_n^{(1)} + \lambda^2 E_n^{(2)} + \cdots \end{cases}$$
(0.0.5)

と書けたとする. $\left|n^{(1)}\right\rangle,\;\left|n^{(2)}\right\rangle,\;E_n^{(1)},\;E_n^{(2)}$ を考える. 規格化条件として

$$\left\langle n^{(0)} \middle| n \right\rangle = 1 \tag{0.0.6}$$

を定める. 式 (0.0.5) を式 (0.0.3) に代入して、 λ の次数ごとにまとめると、

$$(E_n^{(0)} - \hat{H}^{(0)}) \left| n^{(0)} \right\rangle = 0 \tag{0.0.7}$$

$$(E_n^{(0)} - \hat{H}^{(0)}) \left| n^{(1)} \right\rangle + E_n^{(1)} \left| n^{(0)} \right\rangle = \hat{V} \left| n^{(0)} \right\rangle \tag{0.0.8}$$

$$(E_n^{(0)} - \hat{H}^{(0)}) \left| n^{(2)} \right\rangle + E_n^{(1)} \left| n^{(1)} \right\rangle + E_n^{(2)} \left| n^{(0)} \right\rangle = \hat{V} \left| n^{(1)} \right\rangle \tag{0.0.9}$$

(0.0.10)

を得る.

APPi