式 (??) の両辺に $\left\langle n^{(0)} \right|$ を作用すると，

$$\left\langle n^{(0)} \middle| \left(E_n^{(0)} - \hat{H}^{(0)} \right) \middle| n^{(2)} \right\rangle + \left\langle n^{(0)} \middle| E_n^{(1)} \middle| n^{(1)} \right\rangle + \left\langle n^{(0)} \middle| E_n^{(2)} \middle| n^{(0)} \right\rangle = \left\langle n^{(0)} \middle| \hat{V} \middle| n^{(1)} \right\rangle \tag{0.0.1}$$

$$E_n^{(0)} \left\langle n^{(0)} \middle| n^{(2)} \right\rangle - E_n^{(0)} \left\langle n^{(0)} \middle| n^{(2)} \right\rangle + E_n^{(1)} \left\langle n^{(0)} \middle| n^{(1)} \right\rangle + E_n^{(2)} \left\langle n^{(0)} \middle| n^{(0)} \right\rangle = \left\langle n^{(0)} \middle| \hat{V} \middle| n^{(1)} \right\rangle \tag{0.0.2}$$

$$E_n^{(2)} = \left\langle n^{(0)} \middle| \hat{V} \middle| n^{(1)} \right\rangle \tag{0.0.3}$$

となる．途中，**式** (??) より，$\left| n^{(1)} \right\rangle$ と $\left| n^{(0)} \right\rangle$ は直交することを用いた．**式** (??) を**式** (0.0.3) に代入すると，

$$E_n^{(2)} = \left\langle n^{(0)} \middle| \hat{V} \middle| n^{(1)} \right\rangle \tag{0.0.4}$$

$$= \sum_{m \neq n} \frac{\left\langle m^{(0)} \middle| \hat{V} \middle| n^{(0)} \right\rangle}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}} \left\langle n^{(0)} \middle| \hat{V} \middle| m^{(0)} \right\rangle \tag{0.0.5}$$

$$= \sum_{m \neq n} \frac{\left| \left\langle m^{(0)} \middle| \hat{V} \middle| n^{(0)} \right\rangle \right|^2}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}} \tag{0.0.6}$$

と計算できて，2 次摂動によるエネルギー補正を得る．

2 次摂動によるエネルギー補正

$$E_n^{(2)} = \sum_{m \neq n} \frac{\left| \left\langle m^{(0)} \middle| \hat{V} \middle| n^{(0)} \right\rangle \right|^2}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}} \tag{0.0.7}$$

また，基底状態のエネルギーは $E_0^{(0)} < E_m^{(0)}$ である．つまり，常に**式** (0.0.7) の和の部分の分母は負であるため，**基底状態のエネルギーは 2 次摂動により必ず下がる．**