

摂動が無い状態の Schödinger 方程式,

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

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¹を考えると, 摂動ハミルトニアンを \hat{V} として,

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

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

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

とする． $\lambda \rightarrow 0$ ならば明らかに,

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

である．ここで, 式 (0.0.3) の解が,

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

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

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

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,

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

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

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

$$(0.0.10)$$

を得る．

¹摂動の例: 光, 電場