式 (??) の両辺に $\langle n^1|$ を作用すると

$$\langle n^0| E_n^1 |n^0\rangle = \langle n^0| \hat{V} |n^0\rangle \tag{0.0.1}$$

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

$$E_n^1 = \langle n^0| \hat{V} |n^0\rangle \tag{0.0.2}$$

である．

例題 0.1: ヘリウム原子の基底エネルギー

$$\hat{H} = \hat{H}^0 + \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r_{12}} \equiv \hat{H}^0 + \hat{V} \tag{0.0.3}$$

$\hat{H}^0$ の基底エネルギーは

$$\psi^0 = \frac{Z^3}{\pi a_0^3} \mathrm{e}^{-Z(r_1+r_2)/a_0} \tag{0.0.4}$$

である．よって，$\hat{V}$ による 1 次のエネルギー補正は以下のように計算できる．

$$E^1 = \langle \psi^0| \hat{V} |\psi^0\rangle \tag{0.0.5}$$
$$= \int \psi^{0*} \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r_{12}} \psi^0 \, \mathrm{d}\boldsymbol{r}_1 \, \mathrm{d}\boldsymbol{r}_2 \tag{0.0.6}$$
$$= \frac{5}{4} Z \text{ Ry} \tag{0.0.7}$$

よって，基底エネルギー

$$E_0 = E^0 + E^1 \tag{0.0.8}$$
$$= -8 \text{ Ry} + \frac{5}{4} \times 2 \text{ Ry} \tag{0.0.9}$$
$$= -74.8 \text{ eV} \tag{0.0.10}$$

を得る[a]．

[a] 測定値は -78.6 eV

次に固有ベクトルの補正を求める．**式** (??) の両辺に $\langle m^0|$ $(m \neq n)$ を作用する．

$$(E_n^0 - \hat{H}^0) \langle m^0|n^1\rangle + 0 = \langle m^0| \hat{V} |n^0\rangle \tag{0.0.11}$$
$$\langle m^0|n^1\rangle = \frac{\langle m^0| \hat{V} |n^0\rangle}{E_n^0 - E_m^0} \tag{0.0.12}$$
$$\tag{0.0.13}$$

ただし，エネルギー縮退は無く，$E_n^0 - E_m^0$ とする．以上より，

$$|n^1\rangle = \sum_m |m^0\rangle \langle m^0|n^1\rangle \tag{0.0.14}$$

$$\left|n^1\right\rangle = \sum_{m\neq n} \frac{\left\langle m^0\right| \hat{V} \left|n^0\right\rangle}{E_n^0 - E_m^0} \left|m^0\right\rangle \tag{0.0.15}$$

を得る.