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

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

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

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

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

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

$$E_n^{(1)}=\left\langle n^{(0)}\middle|\hat{V}\middle|n^{(0)}\right\rangle \tag{0.0.5}$$

である．

次に固有ベクトル $\left|n^{(1)}\right\rangle$ の補正を求める．**式** (??) の両辺に $\left\langle m^{(0)}\right|$，ただし $m\neq n$ を作用すると，

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

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

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

$$\tag{0.0.9}$$

ただし，エネルギー縮退は無く，

$$E_n^{(0)}-E_m^{(0)}\neq 0 \tag{0.0.10}$$

とする．ところで，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，

$$I=\sum_m\left|m^{(0)}\middle\rangle\middle\langle m^{(0)}\right| \tag{0.0.11}$$

であるから，**式** (??) の両辺に右から $\left|n^{(1)}\right\rangle$ をかけて，

$$\left|n^{(1)}\right\rangle=\sum_m\left|m^{(0)}\right\rangle\left\langle m^{(0)}\middle|n^{(1)}\right\rangle \tag{0.0.12}$$

を得る．**式** (??) を**式** (??) に代入すると，

1 次摂動による固有ベクトル補正

$$\left|n^{(1)}\right\rangle=\sum_{m\neq n}\frac{\left\langle m^{(0)}\middle|\hat{V}\middle|n^{(0)}\right\rangle}{E_n^{(0)}-E_m^{(0)}}\left|m^{(0)}\right\rangle \tag{0.0.13}$$

を得る．