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**.