高次摂動論

中嶋 慧

October 23, 2024

Abstract

時間に依存しない摂動論の一般論を議論し、エネルギー固有値を 5 次摂動論まで求める。

Contents

1 一般論：公式

ハミルトニアンを、

$$H = H_0 + \lambda V \tag{1.1}$$

とかく。H_0 は被摂動ハミルトニアンであり、λ は実数である。H_0, H の固有値と固有ベクトルを、

$$H_0|n\rangle = E_n|n\rangle, \tag{1.2}$$

$$H|\psi_n\rangle = \mathcal{E}_n|\psi_n\rangle \tag{1.3}$$

とする。E_n は縮退していないとする。$\mathcal{E}_n$ を λ の m 次まで近似したものを $E_n^{(m)}$ と書くと、

$$
\begin{aligned}
E_n^{(m)} = E_n + \lambda V_{nn} + \lambda^2 \Big\{ \sum_{i(\neq n)} \frac{V_{ni}V_{in}}{E_n^{(m-2)} - E_i} \Big\}_{\leq m-2} \\
+ \lambda^3 \Big\{ \sum_{i,j(\neq n)} \frac{V_{ni}V_{ij}V_{jn}}{(E_n^{(m-3)} - E_i)(E_n^{(m-3)} - E_j)} \Big\}_{\leq m-3} + \cdots \\
+ \lambda^m \sum_{i_1 \cdots, i_{m-1}(\neq n)} \frac{V_{ni_1}V_{i_1 i_2}V_{i_2 i_3} \cdots V_{i_{m-1}n}}{(E_n - E_{i_1})(E_n - E_{i_2}) \cdots (E_n - E_{i_{m-1}})}
\end{aligned}
\tag{1.4}
$$

である。ここで、$\{f(\lambda)\}_{\leq l}$ は λ の λ^l 次までの寄与を取ってきたものを表す。また、和は

$$
i_a \neq n \tag{1.5}
$$

の範囲で取る。特に、

$$
E_n^{(1)} = E_n + \lambda V_{nn}, \tag{1.6}
$$

$$
E_n^{(2)} = E_n + \lambda V_{nn} + \lambda^2 \sum_{i(\neq n)} \frac{V_{ni}V_{in}}{E_n - E_i} \tag{1.7}
$$

である。

2　一般論：導出

§1 の公式を導出する [1]。まず、

$$
G_{\mathcal{E}} := \sum_i \frac{|i\rangle\langle i|}{E_i - \mathcal{E}} = (H_0 - \mathcal{E})^{-1} \tag{2.1}
$$

と置く。これと、

$$
(H_0 - \mathcal{E}_n)|\psi_n\rangle = -\lambda V|\psi_n\rangle \tag{2.2}
$$

から、

$$
\begin{aligned}
|\psi_n\rangle &= -\lambda G_{\mathcal{E}_n} V|\psi_n\rangle \\
&= \lambda \sum_i \frac{\langle i|V|\psi_n\rangle}{\mathcal{E}_n - E_i}|i\rangle \\
&= \lambda \frac{\langle n|V|\psi_n\rangle}{\mathcal{E}_n - E_n}|n\rangle + \lambda \sum_{i(\neq n)} \frac{\langle i|V|\psi_n\rangle}{\mathcal{E}_n - E_i}|i\rangle
\end{aligned}
\tag{2.3}
$$

を得る。(1.3) より、

$$
E_n\langle n|\psi_n\rangle + \lambda\langle n|V|\psi_n\rangle = \mathcal{E}_n\langle n|\psi_n\rangle, \tag{2.4}
$$

$$
\lambda \frac{\langle n|V|\psi_n\rangle}{\mathcal{E}_n - E_n} = \langle n|\psi_n\rangle \tag{2.5}
$$

なので、

$$|\psi_n\rangle = \langle n|\psi_n\rangle|n\rangle + \lambda\sum_{i(\neq n)}\frac{\langle i|V|\psi_n\rangle}{\mathcal{E}_n - E_i}|i\rangle \tag{2.6}$$

となる。以下、

$$\langle n|\psi_n\rangle = 1 \tag{2.7}$$

を課す。これを中間規格化という。このとき、

$$|\psi_n\rangle = |n\rangle + \lambda\sum_{i(\neq n)}\frac{\langle i|V|\psi_n\rangle}{\mathcal{E}_n - E_i}|i\rangle \tag{2.8}$$

となる。(2.4) と中間規格化より、

$$\mathcal{E}_n = E_n + \lambda\langle n|V|\psi_n\rangle \tag{2.9}$$

である。

(2.8) より、

$$|\psi_n^{(1)}\rangle = |n\rangle + \lambda\sum_{i(\neq n)}\frac{V_{in}}{\mathcal{E}_n - E_i}|i\rangle \tag{2.10}$$

と置く。ここで、$V_{in} := \langle i|V|n\rangle$ である。次に、

$$\begin{aligned}|\psi_n^{(2)}\rangle &= |n\rangle + \lambda\sum_{i(\neq n)}\frac{\langle i|V|\psi_n^{(1)}\rangle}{\mathcal{E}_n - E_i}|i\rangle \\ &= |n\rangle + \lambda\sum_{i(\neq n)}\frac{V_{in}}{\mathcal{E}_n - E_i}|i\rangle + \lambda^2\sum_{i,j(\neq n)}\frac{V_{ij}V_{jn}}{(\mathcal{E}_n - E_i)(\mathcal{E}_n - E_j)}|j\rangle \end{aligned}\tag{2.11}$$

とし、同様に、

$$\begin{aligned}|\psi_n^{(m)}\rangle = |n\rangle &+ \lambda\sum_{i(\neq n)}\frac{V_{in}}{\mathcal{E}_n - E_i}|i\rangle + \lambda^2\sum_{i,j(\neq n)}\frac{V_{ij}V_{jn}}{(\mathcal{E}_n - E_i)(\mathcal{E}_n - E_j)}|j\rangle + \cdots \\ &+ \lambda^m\sum_{i_1\cdots,i_m(\neq n)}\frac{V_{ni_1}V_{i_1i_2}V_{i_2i_3}\cdots V_{i_mn}}{(E_n - E_{i_1})(E_n - E_{i_2})\cdots(E_n - E_{i_m})}|i_m\rangle\end{aligned}\tag{2.12}$$

とする。$|\psi_n^{(m)}\rangle$ から λ^m までの寄与を取り出したものが m 次近似である。(2.9) より、

$$E_n^{(m)} = E_n + \lambda\{\langle n|V|\psi_n^{(m-1)}\rangle\}_{\leq m-1} \tag{2.13}$$

である。これより (1.4) を得る。

3　3次摂動

さて、

$$E_n^{(3)} = E_n + \lambda V_{nn} + \lambda^2 \Big\{ \sum_{i(\neq n)} \frac{V_{ni}V_{in}}{E_n^{(1)} - E_i} \Big\}_{\leq 1} + \lambda^3 \sum_{i,j(\neq n)} \frac{V_{ni}V_{ij}V_{jn}}{(E_n - E_i)(E_n - E_j)}, \tag{3.1}$$

$$\begin{aligned} E_n^{(4)} &= E_n + \lambda V_{nn} + \lambda^2 \Big\{ \sum_{i(\neq n)} \frac{V_{ni}V_{in}}{E_n^{(2)} - E_i} \Big\}_{\leq 2} + \lambda^3 \Big\{ \sum_{i,j(\neq n)} \frac{V_{ni}V_{ij}V_{jn}}{(E_n^{(1)} - E_i)(E_n^{(1)} - E_j)} \Big\}_{\leq 1} \\ &\quad + \lambda^4 \sum_{i,j,k(\neq n)} \frac{V_{ni}V_{ij}V_{jk}V_{kn}}{(E_n - E_i)(E_n - E_j)(E_n - E_k)} \end{aligned} \tag{3.2}$$

である。これを求める。いま、

$$E_n^{(m)} = E_n + \lambda \Delta_n^{(1)} + \lambda^2 \Delta_n^{(2)} + \cdots + \lambda^m \Delta_n^{(m)} \tag{3.3}$$

とする。特に、

$$\Delta_n^{(1)} = V_{nn}, \tag{3.4}$$

$$\Delta_n^{(2)} = \sum_{i(\neq n)} \frac{V_{ni}V_{in}}{E_n - E_i} \tag{3.5}$$

である。さて、

$$\frac{1}{E_n^{(m)} - E_i} = \frac{1}{E_n - E_i + \delta_n^{(m)}}, \quad \delta_n^{(m)} := \lambda \Delta_n^{(1)} + \lambda^2 \Delta_n^{(2)} + \cdots + \lambda^m \Delta_n^{(m)} \tag{3.6}$$

である。よって、

$$\begin{aligned} \frac{1}{E_n^{(m)} - E_i} &= \frac{1}{E_n - E_i} \frac{1}{1 + \delta_n^{(m)}/(E_n - E_i)} \\ &= \frac{1}{E_n - E_i} \Big[1 - \frac{\delta_n^{(m)}}{E_n - E_i} + \frac{[\delta_n^{(m)}]^2}{(E_n - E_i)^2} - \cdots \Big] \\ &= \frac{1}{E_n - E_i} - \frac{\delta_n^{(m)}}{(E_n - E_i)^2} + \frac{[\delta_n^{(m)}]^2}{(E_n - E_i)^3} - \cdots \end{aligned} \tag{3.7}$$

となる。これより、

$$\Big\{ \frac{1}{E_n^{(2)} - E_i} \Big\}_{\leq 2} = \frac{1}{E_n - E_i} - \frac{\lambda \Delta_n^{(1)} + \lambda^2 \Delta_n^{(2)}}{(E_n - E_i)^2} + \frac{\lambda^2 [\Delta_n^{(1)}]^2}{(E_n - E_i)^3} \tag{3.8}$$

を得る。これより、

$$\Big\{ \frac{1}{E_n^{(1)} - E_i} \Big\}_{\leq 1} = \frac{1}{E_n - E_i} - \frac{\lambda \Delta_n^{(1)}}{(E_n - E_i)^2} \tag{3.9}$$

である。よって、

$$\begin{aligned} \Delta_n^{(3)} &= -\Delta_n^{(1)} \sum_{i(\neq n)} \frac{V_{ni}V_{in}}{(E_n - E_i)^2} + \sum_{i,j(\neq n)} \frac{V_{ni}V_{ij}V_{jn}}{(E_n - E_i)(E_n - E_j)} \\ &= -V_{nn} \sum_{i(\neq n)} \frac{V_{ni}V_{in}}{(E_n - E_i)^2} + \sum_{i,j(\neq n)} \frac{V_{ni}V_{ij}V_{jn}}{(E_n - E_i)(E_n - E_j)} \end{aligned} \tag{3.10}$$

を得る。

4　4次摂動

次に、

$$\Delta_n^{(4)} = \Big(\sum_{i(\neq n)} \frac{V_{ni}V_{in}}{E_n^{(2)} - E_i}\Big)_2 + \Big(\sum_{i,j(\neq n)} \frac{V_{ni}V_{ij}V_{jn}}{(E_n^{(1)} - E_i)(E_n^{(1)} - E_j)}\Big)_1 \\ + \sum_{i,j,k(\neq n)} \frac{V_{ni}V_{ij}V_{jk}V_{kn}}{(E_n - E_i)(E_n - E_j)(E_n - E_k)} \tag{4.1}$$

を求める。ここで、$\big(f(\lambda)\big)_l$ は $f(\lambda)$ の λ^l の係数である。まず、(3.8) より、

$$\Big(\frac{1}{E_n^{(2)} - E_i}\Big)_2 = -\frac{\Delta_n^{(2)}}{(E_n - E_i)^2} + \frac{[\Delta_n^{(1)}]^2}{(E_n - E_i)^3} \tag{4.2}$$

である。また、

$$\begin{aligned} &\frac{1}{(E_n^{(m)} - E_i)(E_n^{(m)} - E_j)} \\ &= \frac{1}{(E_n - E_i)(E_n - E_j)}\Big(1 - \frac{\delta_n^{(m)}}{E_n - E_i} + \cdots\Big)\Big(1 - \frac{\delta_n^{(m)}}{E_n - E_j} + \cdots\Big) \\ &= \frac{1}{(E_n - E_i)(E_n - E_j)} - \lambda\Delta_n^{(1)}\Big[\frac{1}{(E_n - E_i)^2(E_n - E_j)} + \frac{1}{(E_n - E_i)(E_n - E_j)^2}\Big] \\ &\quad + O(\lambda^2) \end{aligned} \tag{4.3}$$

なので、

$$\Big(\frac{1}{(E_n^{(1)} - E_i)(E_n^{(1)} - E_j)}\Big)_1 = -\Delta_n^{(1)}\Big[\frac{1}{(E_n - E_i)^2(E_n - E_j)} + \frac{1}{(E_n - E_i)(E_n - E_j)^2}\Big] \tag{4.4}$$

となる。これより、

$$\begin{aligned} \Delta_n^{(4)} &= \sum_{i,j,k(\neq n)} \frac{V_{ni}V_{ij}V_{jk}V_{kn}}{(E_n - E_i)(E_n - E_j)(E_n - E_k)} \\ &\quad - \Delta_n^{(2)} \sum_{i(\neq n)} \frac{V_{ni}V_{in}}{(E_n - E_i)^2} + [\Delta_n^{(1)}]^2 \sum_{i(\neq n)} \frac{V_{ni}V_{in}}{(E_n - E_i)^3} \\ &\quad - \Delta_n^{(1)}\Big[\sum_{i,j(\neq n)} \frac{V_{ni}V_{ij}V_{jn}}{(E_n - E_i)^2(E_n - E_j)} + \sum_{i,j(\neq n)} \frac{V_{ni}V_{ij}V_{jn}}{(E_n - E_i)(E_n - E_j)^2}\Big] \\ &= \sum_{i,j,k(\neq n)} \frac{V_{ni}V_{ij}V_{jk}V_{kn}}{(E_n - E_i)(E_n - E_j)(E_n - E_k)} \\ &\quad - \sum_{k(\neq n)} \frac{V_{nk}V_{kn}}{E_n - E_k} \sum_{i(\neq n)} \frac{V_{ni}V_{in}}{(E_n - E_i)^2} + V_{nn}^2 \sum_{i(\neq n)} \frac{V_{ni}V_{in}}{(E_n - E_i)^3} \\ &\quad - V_{nn}\Big[\sum_{i,j(\neq n)} \frac{V_{ni}V_{ij}V_{jn}}{(E_n - E_i)^2(E_n - E_j)} + \mathrm{c.c.}\Big] \end{aligned} \tag{4.5}$$

を得る。

　まとめると、

$$E^{(4)} = E_n + \lambda\Delta_n^{(1)} + \lambda^2\Delta_n^{(2)} + \lambda^3\Delta_n^{(3)} + \lambda^4\Delta_n^{(4)}, \tag{4.6}$$

$$\Delta_n^{(1)} = V_{nn}, \tag{4.7}$$

$$\Delta_n^{(2)} = \sum_{i(\neq n)} \frac{V_{ni}V_{in}}{E_n - E_i}, \tag{4.8}$$

$$\Delta_n^{(3)} = \sum_{i,j(\neq n)} \frac{V_{ni}V_{ij}V_{jn}}{(E_n - E_i)(E_n - E_j)} - V_{nn}\sum_{i(\neq n)} \frac{V_{ni}V_{in}}{(E_n - E_i)^2}, \tag{4.9}$$

$$\begin{aligned}\Delta_n^{(4)} = &\sum_{i,j,k(\neq n)} \frac{V_{ni}V_{ij}V_{jk}V_{kn}}{(E_n - E_i)(E_n - E_j)(E_n - E_k)} \\ &- \Delta_n^{(2)}\sum_{i(\neq n)} \frac{V_{ni}V_{in}}{(E_n - E_i)^2} + V_{nn}^2\sum_{i(\neq n)} \frac{V_{ni}V_{in}}{(E_n - E_i)^3} \\ &- V_{nn}\Big[\sum_{i,j(\neq n)} \frac{V_{ni}V_{ij}V_{jn}}{(E_n - E_i)^2(E_n - E_j)} + \text{c.c.}\Big]\end{aligned} \tag{4.10}$$

である。なお、[2] には 6 次摂動までの結果が載っている。

5　別の方法

5.1　一般論

$$G := \sum_{i(\neq n)} \frac{|i\rangle\langle i|}{E_n - E_i}, \tag{5.1}$$

$$\delta := \mathcal{E}_n - E_n \tag{5.2}$$

とすると、

$$\delta = \sum_{n=0}^{\infty}\langle\lambda V[G(\lambda V - \delta)]^n\rangle \tag{5.3}$$

である [2]。ここで、$\langle\cdots\rangle = \langle n|\cdots|n\rangle$ である。いま、右辺を、

$$\sum_{n=0}^{\infty}\langle\lambda V[G(\lambda V - \delta)]^n\rangle = A_0(\lambda) + \sum_{n=1}^{\infty} A_n(\lambda)\delta^n \tag{5.4}$$

と置くと、(5.3) は、

$$f(\delta) = A_0(\lambda), \tag{5.5}$$

$$\begin{aligned}f(x) &:= x - \sum_{n=1}^{\infty} A_n(\lambda)x^n \\ &= [1 - A_1(\lambda)]x - \sum_{n=2}^{\infty} A_n(\lambda)x^n \equiv \sum_{n=1}^{\infty} \alpha_n(\lambda)x^n\end{aligned} \tag{5.6}$$

となる。$g(x)$ を $f(x)$ の逆関数とすると、

$$\delta = g(A_0) \tag{5.7}$$

である。ここで、

$$g(y) = \sum_{n=1}^{\infty} b_n(\lambda) y^n \tag{5.8}$$

とすると、

$$b_1 = \frac{1}{\alpha_1}, \tag{5.9}$$

$$b_2 = -\frac{\alpha_2}{\alpha_1^3}, \tag{5.10}$$

$$b_3 = \frac{2\alpha_2^2 - \alpha_1\alpha_3}{\alpha_1^5}, \tag{5.11}$$

$$b_4 = \frac{5\alpha_2^3 - 5\alpha_1\alpha_2\alpha_3 + \alpha_1\alpha_4}{\alpha_1^7} \tag{5.12}$$

などである。
　さて、

$$A_0(\lambda) = \sum_{n=0}^{\infty} \lambda^{n+1} \langle V(GV)^n \rangle \tag{5.13}$$

である。また、

$$\begin{aligned} A_1(\lambda) &= -\lambda\langle VG\rangle - \lambda^2[\langle VG^2V\rangle + \langle VGVG\rangle] \\ &\quad - \lambda^3[\langle VG^2VGV\rangle + \langle VGVG^2V\rangle + \langle VGVGVG\rangle] \\ &\quad - \lambda^4[\langle VG^2VGVGV\rangle + \langle VGVG^2VGV\rangle + \langle VGVGVG^2V\rangle + \langle VGVGVGVG\rangle] + O(\lambda^5) \\ &= -\lambda^2\langle VG^2V\rangle - \lambda^3[\langle VG^2VGV\rangle + \langle VGVG^2V\rangle] \\ &\quad - \lambda^4[\langle VG^2VGVGV\rangle + \langle VGVG^2VGV\rangle + \langle VGVGVG^2V\rangle] + O(\lambda^5) \end{aligned} \tag{5.14}$$

である。よって、

$$\begin{aligned} \alpha_1(\lambda) &= 1 + \lambda^2\langle VG^2V\rangle + \lambda^3[\langle VG^2VGV\rangle + \langle VGVG^2V\rangle] \\ &\quad + \lambda^4[\langle VG^2VGVGV\rangle + \langle VGVG^2VGV\rangle + \langle VGVGVG^2V\rangle] + O(\lambda^5) \end{aligned} \tag{5.15}$$

となる。また、

$$\begin{aligned} A_2(\lambda) &= \lambda\langle VG^2\rangle + \lambda^2[\langle VG^3V\rangle + \langle VGVG^2\rangle + \langle VG^2VG\rangle] + O(\lambda^3) \\ &= \lambda^2\langle VG^3V\rangle + O(\lambda^3) \end{aligned} \tag{5.16}$$

であり、

$$\begin{aligned} A_3(\lambda) &= -\lambda\langle VG^3\rangle - \lambda^2[\langle VG^4V\rangle + \langle VG^3VG\rangle + \langle VG^2VG^2\rangle + \langle VGVG^3\rangle] + O(\lambda^3) \\ &= -\lambda^2\langle VG^4V\rangle + O(\lambda^3) \end{aligned} \tag{5.17}$$

となる。同様に、

$$A_4(\lambda) = \lambda^2 \langle VG^5V \rangle + O(\lambda^3) \tag{5.18}$$

である。(5.7) より、

$$\delta = \frac{A_0}{\alpha_1} - \frac{\alpha_2}{\alpha_1^3} A_0^2 + \frac{2\alpha_2^2 - \alpha_1\alpha_3}{\alpha_1^5} A_0^3 + \frac{5\alpha_2^3 - 5\alpha_1\alpha_2\alpha_3 + \alpha_1\alpha_4}{\alpha_1^7} A_0^4 + \cdots \tag{5.19}$$

である。ここで第 2 項は 4 次以上の寄与, 第 3 項は 5 次以上の寄与, 第 4 項は 6 次以上の寄与である。

5.2　4 次摂動

4 次までの摂動を考えると、

$$\begin{aligned}
\delta^{(4)} &= \left\{ \frac{A_0}{\alpha_1} \right\}_{\leq 4} - \left\{ \frac{\alpha_2}{\alpha_1^3} A_0^2 \right\}_{\leq 4} \\
&= \left\{ \frac{A_0}{\alpha_1} \right\}_{\leq 4} - \left\{ \alpha_2 A_0^2 \right\}_{\leq 4}
\end{aligned} \tag{5.20}$$

である。ここで、

$$\left\{ \frac{A_0}{\alpha_1} \right\}_{\leq 4} = \{A_0\}_{\leq 4} - \lambda^2 \langle VG^2V \rangle \{A_0\}_{\leq 2} - \lambda^3 [\langle VG^2VGV \rangle + \langle VGVG^2V \rangle] \{A_0\}_{\leq 1}, \tag{5.21}$$

$$\left\{ \alpha_2 A_0^2 \right\}_{\leq 4} = \{\alpha_2\}_{\leq 2} (\{A_0\}_{\leq 1})^2 \tag{5.22}$$

なので、

$$\Delta^{(1)} = \langle V \rangle, \tag{5.23}$$

$$\Delta^{(2)} = \langle VGV \rangle, \tag{5.24}$$

$$\begin{aligned}
\Delta^{(3)} &= \langle VGVGV \rangle - \langle V \rangle \langle VG^2V \rangle \\
\Delta^{(4)} &= \langle VGVGVGV \rangle - \langle VGV \rangle \langle VG^2V \rangle + \langle V \rangle^2 \langle VG^3V \rangle \\
&\quad - \langle V \rangle [\langle VG^2VGV \rangle + \langle VGVG^2V \rangle]
\end{aligned} \tag{5.25}$$

を得る。

6　5 次摂動

5 次までの摂動を考えると、

$$\begin{aligned}
\delta^{(5)} &= \left\{ \frac{A_0}{\alpha_1} \right\}_{\leq 5} - \left\{ \frac{\alpha_2}{\alpha_1^3} A_0^2 \right\}_{\leq 5} + \left\{ \frac{2\alpha_2^2 - \alpha_1\alpha_3}{\alpha_1^5} A_0^3 \right\}_{\leq 5} \\
&= \left\{ \frac{A_0}{\alpha_1} \right\}_{\leq 5} - \left\{ \frac{\alpha_2}{\alpha_1^3} A_0^2 \right\}_{\leq 5} - \left\{ \alpha_3 A_0^3 \right\}_{\leq 5}
\end{aligned} \tag{6.1}$$

である。ここで、

$$
\begin{aligned}
\left\{\frac{A_0}{\alpha_1}\right\}_{\leq 5} = \{A_0\}_{\leq 5} &- \lambda^2\langle VG^2V\rangle\{A_0\}_{\leq 3} - \lambda^3[\langle VG^2VGV\rangle + \langle VGVG^2V\rangle]\{A_0\}_{\leq 2} \\
&- \lambda^4[\langle VG^2VGVGV\rangle + \langle VGVG^2VGV\rangle + \langle VGVGVG^2V\rangle]\{A_0\}_{\leq 1} \\
&+ \lambda^4\langle VG^2V\rangle^2\{A_0\}_{\leq 1}
\end{aligned}
\tag{6.2}
$$

であり、

$$
\begin{aligned}
-\left\{\frac{\alpha_2}{\alpha_1^3}A_0^2\right\}_{\leq 5} &= -\{\alpha_2 A_0^2\}_{\leq 5} \\
&= -\lambda^4(\alpha_2)_2(A_0)_1^2 - \lambda^5[(\alpha_2)_2(A_0^2)_3 + (\alpha_2)_3(A_0^2)_2]
\end{aligned}
\tag{6.3}
$$

である。また、

$$
-\left\{\alpha_3 A_0^3\right\}_{\leq 5} = -\lambda^5(\alpha_3)_2(A_0)_1^3 \tag{6.4}
$$

である。よって、

$$
\begin{aligned}
\Delta^{(5)} = (A_0)_5 &- \langle VG^2V\rangle(A_0)_3 - [\langle VG^2VGV\rangle + \langle VGVG^2V\rangle](A_0)_2 \\
&+ [\langle VG^2V\rangle^2 - \langle VG^2VGVGV\rangle - \langle VGVG^2VGV\rangle - \langle VGVGVG^2V\rangle](A_0)_1 \\
&- (\alpha_2)_2(A_0^2)_3 - (\alpha_2)_3(A_0)_1^2 - (\alpha_3)_2(A_0)_1^3
\end{aligned}
\tag{6.5}
$$

となる。ここで、

$$
\begin{aligned}
-(\alpha_2)_3 &= (A_2)_3 \\
&= \langle VG^3VGV\rangle + \langle VG^2VG^2V\rangle + \langle VG^2VGVG\rangle \\
&\quad + \langle VGVG^2V\rangle + \langle VGVG^2VG\rangle + \langle VGVGVG^2 \\
&= \langle VG^3VGV\rangle + \langle VG^2VG^2V\rangle + \langle VGVG^2V\rangle
\end{aligned}
\tag{6.6}
$$

である。また、

$$
(A_0^2)_3 = 2(A_0)_1(A_0)_2 \tag{6.7}
$$

なので、

$$
\begin{aligned}
\Delta^{(5)} = \langle VGVGVGVGV\rangle &- \langle VG^2V\rangle\langle VGVGV\rangle - \langle VGV\rangle[\langle VG^2VGV\rangle + \langle VGVG^2V\rangle] \\
&+ \langle V\rangle[\langle VG^2V\rangle^2 - \langle VG^2VGVGV\rangle - \langle VGVG^2VGV\rangle - \langle VGVGVG^2V\rangle] \\
&+ 2\langle V\rangle\langle VGV\rangle\langle VG^3V\rangle + \langle V\rangle^2[\langle VG^3VGV\rangle + \langle VG^2VG^2V\rangle + \langle VGVG^2V\rangle] \\
&- \langle V\rangle^3\langle VG^4V\rangle
\end{aligned}
\tag{6.8}
$$

を得る。

References

[1] 後藤憲一『現代科学における数学概説 I』共立出版, 1981 年.

[2] 中井浩巳『手で解く量子化学 II: 電子相関法・密度汎関数理論 編』丸善出版, 2024 年.