- Ci sono alcune regole empiriche per decidere di due set di funzioni di prova quale sia quello migliore.
  a) Se un set contiene un altro set, allora il set più grande è quello migliore, perché contiene anche il minimo dell'altro.
  b) Se un set produce un minimo inferiore a quello di un altro set, allora è considerato migliore.

  Attenzione ci sono anomalie in questo comportamento.

• La Hamiltoniana Hartree-Fock •

Consideriamo un'hamiltoniana con interazione a 2 corpi.

$$H = \sum_{i=1}^{A} T(\vec{r}_i) + \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^{A} V(\vec{r}_i, \vec{r}_j)$$

in seconda quantizzazione

$$\hat{H} = \sum_{\nu\nu'} \langle \nu | T | \nu' \rangle a^+_\nu a_{\nu'} + \frac{1}{2} \sum_{\mu\mu'\nu\nu'} \langle \nu\mu | V | \nu'\mu' \rangle a^+_\nu a^+_\mu a_{\mu'} a_{\nu'}$$

$$\equiv \sum_{\nu\nu'} T_{\nu\nu'} a^+_\nu a_{\nu'} + \frac{1}{2} \sum_{\mu\mu'\nu\nu'} V_{\nu\mu\nu'\mu'} a^+_\nu a^+_\mu a_{\mu'} a_{\nu'}$$

$$\equiv \sum_{\nu\nu'} T_{\nu\nu'} a^+_\nu a_{\nu'} + \frac{1}{4} \sum_{\mu\mu'\nu\nu'} \overline{V}_{\nu\mu\nu'\mu'} a^+_\nu a^+_\mu a_{\mu'} a_{\nu'}$$

dove

$$\overline{V}_{\nu\mu\nu'\mu'} = \langle \nu\mu | V | \nu'\mu' \rangle - \langle \nu\mu | V | \mu'\nu' \rangle$$

Nell'eq. 12 ci sono due set di operatori di creazione e distruzione che sono da gestire con il teorema di Wick