

\hat{H}_0 è l'hamiltoniana Hartree-Fock e \hat{V}_{res} l'interazione residua.

Supponiamo di calcolare il valore medio dell'energia tra determinanti di Slater di autofunzioni di $|\Phi_0\rangle$

$$\langle \bar{\Phi}_0 | \hat{H} | \bar{\Phi}_0 \rangle = \langle \bar{\Phi}_0 | \hat{H}_0 | \bar{\Phi}_0 \rangle + \langle \bar{\Phi}_0 | \hat{V}_{res} | \bar{\Phi}_0 \rangle$$

$$= \sum_{\nu} \epsilon_{\nu} \langle \bar{\Phi}_0 | a_{\nu}^{\dagger} a_{\nu} | \bar{\Phi}_0 \rangle - \frac{1}{2} \sum_{ij} \bar{V}_{ijij} \langle \bar{\Phi}_0 | \bar{\Phi}_0 \rangle$$

$$+ \frac{1}{4} \sum_{\mu\nu\mu'\nu'} \bar{V}_{\mu\nu\mu'\nu'} \langle \bar{\Phi}_0 | N [a_{\mu}^{\dagger} a_{\nu}^{\dagger} a_{\mu'} a_{\nu'}] | \bar{\Phi}_0 \rangle =$$

$$= \sum_i \epsilon_i - \frac{1}{2} \sum_{ij} \bar{V}_{ijij} = \bar{E}_0$$

25

$$\langle \bar{\Phi}_0 | a_{\nu}^{\dagger} a_{\nu} | \bar{\Phi}_0 \rangle = \langle \bar{\Phi}_0 | a_{\nu}^{\dagger} a_{\nu} | \bar{\Phi}_0 \rangle = \delta_{\nu i} \text{ perche' } \langle N \rangle = 0$$

$$\langle \bar{\Phi}_0 | \bar{\Phi}_0 \rangle = 1 \text{ e } \langle \bar{\Phi}_0 | N | \bar{\Phi}_0 \rangle = 0 \text{ per definizione.}$$

- Nota che \bar{E}_0 non è dato semplicemente dalla somma delle energie di singola particella ϵ_i ma bisogna sottrarre una costante $-\frac{1}{2} \sum_{ij} \bar{V}_{ijij}$.