

La parte a destra della 4) da'

$$\begin{aligned} \langle \bar{\Phi}_0 | [a_i^\dagger a_m, a_q^\dagger a_k] | \bar{\Phi}_0 \rangle &= \\ &= \langle \bar{\Phi}_0 | a_i^\dagger a_m a_q^\dagger a_k | \bar{\Phi}_0 \rangle - \langle \bar{\Phi}_0 | a_q^\dagger a_k a_i^\dagger a_m | \bar{\Phi}_0 \rangle \end{aligned}$$

Bisogna applicare il teorema di Wick. Sappiamo comunque che tutte le componenti che contengono un PNO sono nulle, ci preoccupiamo soltanto delle contrazioni.

Per il primo termine abbiamo:

$$\langle \bar{\Phi}_0 | \overbrace{a_i^\dagger a_m a_q^\dagger a_k} | \bar{\Phi}_0 \rangle = \delta_{mq} \delta_{ik}$$

e il secondo è $= 0$ dato che $a_m | \bar{\Phi}_0 \rangle = 0$

Quindi la 4) è data da:

$$\sum_{nj} x_{nj}^\nu \langle \bar{\Phi}_0 | [a_i^\dagger a_m, [H, a_n^\dagger a_j]] | \bar{\Phi}_0 \rangle = (E_\nu - E_0) x_{mj}^\nu \delta_{mq} \delta_{ik}$$

• Per i termini hamiltoniani usiamo l'hamiltoniana HF

$$H = \sum_{\alpha\beta} h_{\alpha\beta} a_\alpha^\dagger a_\beta - \frac{1}{2} \sum_{ij} \bar{V}_{ijij} + \frac{1}{4} \sum_{\alpha\beta\gamma\delta} \bar{V}_{\alpha\beta\gamma\delta} N[a_\alpha^\dagger a_\beta^\dagger a_\gamma a_\delta]$$

Inseriamo il primo termine nel doppio commutatore, il primo commutatore è:

$$[a_\alpha^\dagger a_\beta, a_n^\dagger a_j] = a_\alpha^\dagger a_\beta a_n^\dagger a_j - a_n^\dagger a_j a_\alpha^\dagger a_\beta = \text{usando le regole di anticommut. (AN 31)}$$

$$= a_\alpha^\dagger a_\beta a_n^\dagger a_j - a_n^\dagger \left[\delta_{\alpha n} - a_\alpha^\dagger a_\alpha \right] a_j = a_\alpha^\dagger a_\beta a_n^\dagger a_j - a_n^\dagger a_\beta \delta_{\alpha n} + a_n^\dagger a_\alpha^\dagger a_\alpha a_j$$

$$= a_\alpha^\dagger a_\beta a_n^\dagger a_j - a_n^\dagger a_\beta a_\alpha - \delta_{\alpha n} a_n^\dagger a_j = a_\alpha^\dagger a_\beta a_n^\dagger a_j + a_n^\dagger a_\alpha^\dagger a_\alpha a_j - \delta_{\alpha n} a_n^\dagger a_j$$

$$= a_\alpha^\dagger a_\beta a_n^\dagger a_j + a_n^\dagger \left[\delta_{\alpha n} - a_\alpha^\dagger a_\alpha \right] a_j - \delta_{\alpha n} a_n^\dagger a_j = a_\alpha^\dagger a_\beta a_n^\dagger a_j - a_n^\dagger a_\beta a_\alpha + \delta_{\alpha n} a_n^\dagger a_j - \delta_{\alpha n} a_n^\dagger a_j$$