

$\hat{H}_0$ 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 $|\Phi_0\rangle$

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

$$= \sum_p \epsilon_p \langle \bar{\Phi}_0 | a_p^\dagger a_p | \bar{\Phi}_0 \rangle - \frac{1}{2} \sum_{ij} \bar{V}_{ijij} \langle \bar{\Phi}_0 | \bar{\Phi}_0 \rangle$$

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

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

$$\langle \bar{\Phi}_0 | a_p^\dagger a_p | \bar{\Phi}_0 \rangle = \langle \bar{\Phi}_0 | a_p^\dagger a_p | \bar{\Phi}_0 \rangle = \delta_{pi} \text{ perche' } \langle N \rangle = 0$$

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

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