

In ogni modo, immaginando anche stavolta di aver fatto gli integrali e aver poi minimizzato l'energia elettronica rispetto alle due funzioni a un elettrone ψ_{1s} e ψ_{2s} sotto il vincolo di normalizzazione, si ottengono anche in questo caso due equazioni Hartree-Fock:

$$\begin{aligned} \left[-\frac{1}{2}\nabla^2 - \frac{4}{r} + \int d^3r' \frac{|\psi_{1s}(r')|^2 + 2|\psi_{2s}(r')|^2}{|\vec{r} - \vec{r}'|} \right] \psi_{1s}(r) \\ - \psi_{2s}(r) \left[\int d^3r' \frac{\psi_{2s}^*(r')\psi_{1s}(r')}{|\vec{r} - \vec{r}'|} \right] = \varepsilon_{1s}\psi_{1s}(r) \\ \left[-\frac{1}{2}\nabla^2 - \frac{4}{r} + \int d^3r' \frac{2|\psi_{1s}(r')|^2 + |\psi_{2s}(r')|^2}{|\vec{r} - \vec{r}'|} \right] \psi_{2s}(r) \\ - \psi_{1s}(r) \left[\int d^3r' \frac{\psi_{1s}^*(r')\psi_{2s}(r')}{|\vec{r} - \vec{r}'|} \right] = \varepsilon_{2s}\psi_{2s}(r). \end{aligned}$$

La derivazione delle equazioni Hartree-Fock per un caso sempre semplice (shell completi), ma un po' piú generale e con piú passaggi di rispetto all'elio e al berillio illustrati in questi appunti, si può trovare ad esempio in queste **16 slide**, che sono parte di un **corso di Chimica Computazionale** dell'University of Minnesota basato su un **testo molto ampio**.