Hertree の式：

$$\left[\hat{H}_{\mathrm{c}}(i)+\sum_{j(\neq i)}^{n}\int\frac{e^2|\phi_j(\boldsymbol{r}_j)|^2}{4\pi\epsilon_0 r_{ij}}\mathrm{d}v_j\right]\phi_i(\boldsymbol{r}_i) \quad = \quad E_i\phi_i(\boldsymbol{r}_i) \quad \text{ただし}, i=1,2,\cdots,n \tag{1}$$

「ただし，$i=1,2,\cdots,n$」で，この式が n 元連立方程式であることを意味している。

個別に書くと，

$$\left[\hat{H}_{\mathrm{c}}(1)+\sum_{j(\neq 1)}^{n}\int\frac{e^2|\phi_j(\boldsymbol{r}_j)|^2}{4\pi\epsilon_0 r_{1j}}\mathrm{d}v_j\right]\phi_1(\boldsymbol{r}_1)=E_1\phi_1(\boldsymbol{r}_1) \qquad i=1 \tag{2}$$

この式から$\phi_1(\boldsymbol{r}_1)$ と E_1が求まる

$$\left[\hat{H}_{\mathrm{c}}(2)+\sum_{j(\neq 2)}^{n}\int\frac{e^2|\phi_j(\boldsymbol{r}_j)|^2}{4\pi\epsilon_0 r_{2j}}\mathrm{d}v_j\right]\phi_2(\boldsymbol{r}_2)=E_2\phi_2(\boldsymbol{r}_2) \qquad i=2 \tag{3}$$

この式から$\phi_2(\boldsymbol{r}_2)$ と E_2が求まる

$$\left[\hat{H}_{\mathrm{c}}(3)+\sum_{j(\neq 3)}^{n}\int\frac{e^2|\phi_j(\boldsymbol{r}_j)|^2}{4\pi\epsilon_0 r_{3j}}\mathrm{d}v_j\right]\phi_3(\boldsymbol{r}_3)=E_3\phi_3(\boldsymbol{r}_3) \qquad i=3 \tag{4}$$

この式から$\phi_3(\boldsymbol{r}_3)$ と E_3が求まる

$$\vdots$$

$$\left[\hat{H}_{\mathrm{c}}(n)+\sum_{j(\neq n)}^{n}\int\frac{e^2|\phi_j(\boldsymbol{r}_j)|^2}{4\pi\epsilon_0 r_{nj}}\mathrm{d}v_j\right]\phi_n(\boldsymbol{r}_i)=E_n\phi_n(\boldsymbol{r}_n) \qquad i=n \tag{5}$$

この式から$\phi_n(\boldsymbol{r}_n)$ と E_nが求まる

Hertree の式：

$$\left[\hat{H}_{\mathrm{c}}(i)+\sum_{j(\neq i)}^{n}\int\frac{e^2|\phi_j(\boldsymbol{r}_j)|^2}{4\pi\epsilon_0 r_{ij}}\mathrm{d}v_j\right]\phi_i(\boldsymbol{r}_i) \quad = \quad E_i\phi_i(\boldsymbol{r}_i) \qquad \text{ただし}, i=1,2,\cdots,n \tag{1}$$

「ただし，$i=1,2,\cdots,n$」で，この式が n 元連立方程式であることを意味している。

個別に書くと，

$$\left[\hat{H}_{\mathrm{c}}(1)+\sum_{j(\neq 1)}^{n}\int\frac{e^2|\boxed{\phi_j(\boldsymbol{r}_j)}|^2}{4\pi\epsilon_0 r_{1j}}\mathrm{d}v_j\right]\phi_1(\boldsymbol{r}_1)=E_1\phi_1(\boldsymbol{r}_1) \qquad i=1 \tag{2}$$

この式から $\phi_1(\boldsymbol{r}_1)$ と E_1 が求まる

でも，$\phi_2(\boldsymbol{r}_2),\phi_3(\boldsymbol{r}_3),\cdots\phi_n(\boldsymbol{r}_n)$ が必要

$$\left[\hat{H}_{\mathrm{c}}(2)+\sum_{j(\neq 2)}^{n}\int\frac{e^2|\boxed{\phi_j(\boldsymbol{r}_j)}|^2}{4\pi\epsilon_0 r_{2j}}\mathrm{d}v_j\right]\phi_2(\boldsymbol{r}_2)=E_2\phi_2(\boldsymbol{r}_2) \qquad i=2 \tag{3}$$

この式から $\phi_2(\boldsymbol{r}_2)$ と E_2 が求まる

でも，$\phi_1(\boldsymbol{r}_1),\phi_3(\boldsymbol{r}_3),\cdots\phi_n(\boldsymbol{r}_n)$ が必要

$$\left[\hat{H}_{\mathrm{c}}(3)+\sum_{j(\neq 3)}^{n}\int\frac{e^2|\boxed{\phi_j(\boldsymbol{r}_j)}|^2}{4\pi\epsilon_0 r_{3j}}\mathrm{d}v_j\right]\phi_3(\boldsymbol{r}_3)=E_3\phi_3(\boldsymbol{r}_3) \qquad i=3 \tag{4}$$

この式から $\phi_3(\boldsymbol{r}_3)$ と E_3 が求まる

でも，$\phi_1(\boldsymbol{r}_1),\phi_2(\boldsymbol{r}_2),\cdots\phi_n(\boldsymbol{r}_n)$ が必要

$$\vdots$$

$$\left[\hat{H}_{\mathrm{c}}(n)+\sum_{j(\neq n)}^{n}\int\frac{e^2|\boxed{\phi_j(\boldsymbol{r}_j)}|^2}{4\pi\epsilon_0 r_{nj}}\mathrm{d}v_j\right]\phi_n(\boldsymbol{r}_i)=E_n\phi_n(\boldsymbol{r}_n) \qquad i=n \tag{5}$$

この式から $\phi_n(\boldsymbol{r}_n)$ と E_n が求まる

でも，$\phi_1(\boldsymbol{r}_1),\phi_2(\boldsymbol{r}_2),\cdots\phi_{n-1}(\boldsymbol{r}_{n-1})$ が必要