

+ список всех энергетических знаменателей в программах

Задача 1 Энергетические знаменатели в RPA (см. 12/12/95 (15) и (21)) не согласуются с диаграммами (такие оборот стр. 1).

Проверим это на примере ур-ния (21) для валентных электронов, вычислив (а) диаграммы, (б) соотв. им выражения согласно MBPT и (в) выражения (21).

(1a)

(1b) 
$$\tilde{F}_{fi} = F_{fi} + \frac{V_{fiu} \tilde{F}_{eu}}{\epsilon_u - \epsilon_e + \omega} - \frac{V_{euu} \tilde{F}_{eu}}{\epsilon_u - \epsilon_e + \omega} + \frac{V_{fiu} \tilde{F}_{ue}}{\epsilon_i + \epsilon_u - \epsilon_e - \epsilon_f} - \frac{V_{uei} \tilde{F}_{ue}}{\epsilon_i + \epsilon_u - \epsilon_e - \epsilon_f}$$

(1c) 
$$\tilde{F}_{fi} = F_{fi} + \frac{V_{fiu} \tilde{F}_{eu}}{\epsilon_u - \epsilon_e + \omega} - \frac{V_{euu} \tilde{F}_{eu}}{\epsilon_u - \epsilon_e + \omega} + \frac{V_{fiu} \tilde{F}_{eu}^*}{\epsilon_u - \epsilon_e - \omega} - \frac{V_{uei} \tilde{F}_{eu}^*}{\epsilon_u - \epsilon_e - \omega}$$

Операторная часть (1b) и (1c) совпадает если выполнено равенство

(2) 
$$\tilde{F}_{ue}^+ = \tilde{F}_{eu}^*$$

но знаменатели совпадают только на массовой поверхности, т.е. когда

(3) 
$$\epsilon_i + \omega = \epsilon_f$$

Для проверки равенства (2) вычислим выражение для  $\tilde{F}_{if}^+$ :

(4a)

(4b) 
$$\tilde{F}_{if}^+ = F_{if}^+ + \frac{V_{ifu} \tilde{F}_{eu}^+}{\epsilon_u - \epsilon_e - \omega} - \frac{V_{euf} \tilde{F}_{eu}^+}{\epsilon_u - \epsilon_e - \omega} + \frac{V_{ifu} \tilde{F}_{ue}^+}{\epsilon_f + \epsilon_u - \epsilon_e - \epsilon_i} - \frac{V_{uef} \tilde{F}_{ue}^+}{\epsilon_f + \epsilon_u - \epsilon_e - \epsilon_i}$$

(4c) 
$$\tilde{F}_{if}^+ = F_{if}^+ + \frac{V_{ifu} \tilde{F}_{eu}^+}{\epsilon_u - \epsilon_e - \omega} - \frac{V_{euf} \tilde{F}_{eu}^+}{\epsilon_u - \epsilon_e - \omega} + \frac{V_{ifu} \tilde{F}_{eu}^*}{\epsilon_u - \epsilon_e + \omega} - \frac{V_{uef} \tilde{F}_{eu}^*}{\epsilon_u - \epsilon_e + \omega}$$

Видно, что (1c) и (4c) согласуются с (2), а (1b) и (4b) согласуются с (2) снова при условии (3).



Как сделать так, чтобы согласовать правила MBPT с условием (2) без требования (3)?

- Рецепт:
1. Перейти к Вигнеровской ТВ
  2. Пренебречь частотой фотона

Проверим, что это работает. Переменим (1б) и (4б) в новом соглашении

$$\tilde{F}_{fi} = F_{fi} + \frac{V_{finl} \tilde{F}_{en}}{\epsilon - \epsilon_i + \epsilon_n - \epsilon_e} - \frac{V_{feni} \tilde{F}_{en}}{\epsilon - \epsilon_i + \epsilon_n - \epsilon_e} + \frac{V_{filn} \tilde{F}_{el}}{\epsilon - \epsilon_f + \epsilon_n - \epsilon_e} - \frac{V_{fnli} \tilde{F}_{el}}{\epsilon - \epsilon_f + \epsilon_n - \epsilon_e} \quad (5a)$$

$$\tilde{F}_{if}^+ = F_{if}^+ + \frac{V_{ifne} \tilde{F}_{en}^+}{\epsilon - \epsilon_f + \epsilon_n - \epsilon_e} - \frac{V_{ienf} \tilde{F}_{en}^+}{\epsilon - \epsilon_f + \epsilon_n - \epsilon_e} + \frac{V_{ifln} \tilde{F}_{el}^+}{\epsilon - \epsilon_i + \epsilon_n - \epsilon_e} - \frac{V_{inlf} \tilde{F}_{el}^+}{\epsilon - \epsilon_i + \epsilon_n - \epsilon_e} \quad (5b)$$

Что мы вынуждены, и что упрощаем при использовании (5)?

⊕ Для стационарных операторов ( $\omega=0$ ) все становится совсем гладко и никаких натяжек нет вообще, т.к. единичные правила используются и в RPA и в MBPT. При этом можно упрощать члены ( $\partial_{\epsilon} A_{eff}$ ) по аналогии с  $\partial_{\epsilon} \Sigma$

⊖ Для операторов, зависящих от времени, не стиковые сохраняются. Главная из них:  $F \neq F^+$  и  $\Rightarrow F_{if} \neq F_{fi}^*$ . Это означает, что нельзя пользоваться ФТМ и функциями программы для расчета многочастичных ИЭ.

# Решение для RPA

1. Уравнения для осевого резонанса в том виде, как они записаны в 12/12/95 (см I.21 или VI.5). При этом

$$\text{если } \begin{cases} \omega = 0, \text{ то } F^+ = F, \\ \omega \neq 0, \text{ то } F^+ \neq F \end{cases} \quad \text{огранич в обоих случаях} \quad \boxed{F_{nl}^+ = F_{en}^*} \quad (1)$$

2. Для вращательных МЭ решаются уравнения (5) от 12/11/97:

$$\tilde{F}_{ji}^- = F_{ji}^- + \frac{V_{jiln} - V_{jeln}}{\epsilon - \epsilon_i + \epsilon_n - \epsilon_e} \tilde{F}_{en}^- + \frac{V_{jien} - V_{jnli}}{\epsilon - \epsilon_f + \epsilon_n - \epsilon_e} \tilde{F}_{en}^{+*} \quad (2a)$$

$$\tilde{F}_{ji}^+ = F_{ji}^+ + \frac{V_{jiln} - V_{jeln}}{\epsilon - \epsilon_i + \epsilon_n - \epsilon_e} \tilde{F}_{en}^+ + \frac{V_{jien} - V_{jnli}}{\epsilon - \epsilon_f + \epsilon_n - \epsilon_e} F_{en}^* \quad (2b)$$

где мы использовали (1) и переставили  $j \leftrightarrow i$  во втором уравнении.

Вводим матрицы  $U_1$  и  $U_2$  согласно (I.10) и будем считать, что

$$F^* = \eta F. \quad (3)$$

Тогда получаем:

$$\tilde{F}_{ji}^- = F_{ji}^- + U_{jiln}^1 \frac{1}{\epsilon - \epsilon_i + \epsilon_n - \epsilon_e} \tilde{F}_{en}^- + \eta U_{jien}^2 \frac{1}{\epsilon - \epsilon_f + \epsilon_n - \epsilon_e} \tilde{F}_{en}^+ \quad (4a)$$

$$\tilde{F}_{ji}^+ = F_{ji}^+ + U_{jiln}^1 \frac{1}{\epsilon - \epsilon_i + \epsilon_n - \epsilon_e} \tilde{F}_{en}^+ + \eta U_{jien}^2 \frac{1}{\epsilon - \epsilon_f + \epsilon_n - \epsilon_e} F_{en} \quad (4b)$$

В форме RPA мы используем следующие преобразования:

$$\begin{cases} F_p = (F^+ + F) / 2 \\ F_m = (F^+ - F) / 2 \end{cases} \quad (5)$$

Для них получаем из (4):

$$\tilde{F}_p = F + U^1 \mathcal{D}_1^{-1} \tilde{F}_p + \eta U^2 \mathcal{D}_2^{-1} \tilde{F}_p \quad (6a)$$

$$\tilde{F}_m = 0 + U^1 \mathcal{D}_1^{-1} \tilde{F}_m - \eta U^2 \mathcal{D}_2^{-1} \tilde{F}_m \quad (6b)$$

$$\text{где } \mathcal{D}_1^{-1} = (\epsilon - \epsilon_i + \epsilon_n - \epsilon_e)^{-1} \quad (7a)$$

$$\mathcal{D}_2^{-1} = (\epsilon - \epsilon_f + \epsilon_n - \epsilon_e)^{-1} \quad (7b)$$

Знаменатели в программах, использующих МВРП  
по состоянию на 14/11/97

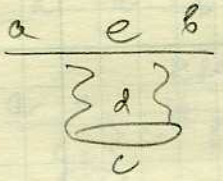
программа  
sgc/sgd

квадрат

знаменатель

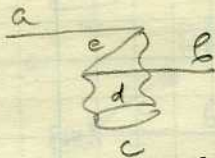
формулы

4



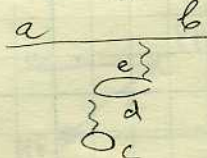
$$\tilde{\Sigma}_a + \varepsilon_c - \varepsilon_d - \varepsilon_e$$

4



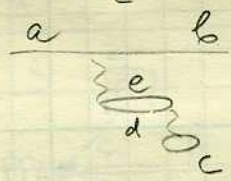
$$\tilde{\Sigma}_a - \varepsilon_a + \varepsilon_c + \varepsilon_e - \varepsilon_d - \varepsilon_b$$

4



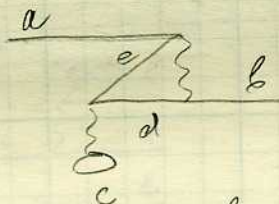
$$\tilde{\Sigma}_a - \varepsilon_a + \varepsilon_d - \varepsilon_e$$

4

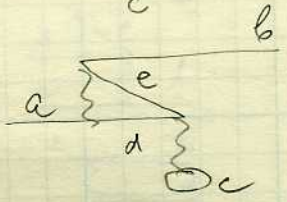


$$\tilde{\Sigma}_a - \varepsilon_b + \varepsilon_d - \varepsilon_e$$

4



$$\tilde{\Sigma}_a - \varepsilon_a + \varepsilon_e - \varepsilon_d$$

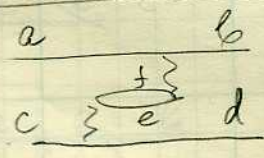


$$\tilde{\Sigma}_b - \varepsilon_b + \varepsilon_e - \varepsilon_d$$

более упрощенный  
знаменатель:

$$\tilde{\Sigma}_a - \varepsilon_b + \varepsilon_e - \varepsilon_d$$

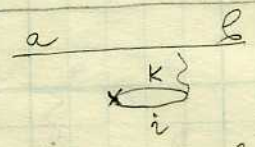
sgrc/sgrd



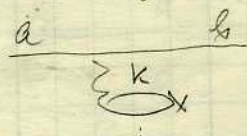
$$\tilde{\Sigma}_a + \tilde{\Sigma}_c - \varepsilon_a - \varepsilon_d + \varepsilon_e - \varepsilon_f$$

Все остальные  
формулы - по  
этой же формуле

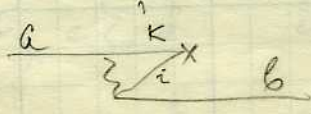
гра



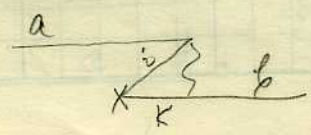
$$\tilde{\Sigma}_{min} - \varepsilon_a + \varepsilon_i - \varepsilon_k$$



$$\tilde{\Sigma}_{min} - \varepsilon_b + \varepsilon_i - \varepsilon_k$$



$$\tilde{\Sigma}_{min} - \varepsilon_b + \varepsilon_i - \varepsilon_k$$



$$\tilde{\Sigma}_{min} - \varepsilon_a + \varepsilon_i - \varepsilon_k$$

$$\tilde{\Sigma}_{min} = \min \{ \tilde{\Sigma}_a, \tilde{\Sigma}_b, \tilde{\Sigma}_c, \tilde{\Sigma}_d \}$$

13-782  
42-381  
42-382  
42-383  
42-384  
42-385  
42-386  
42-387  
42-388  
42-389  
42-390  
42-391  
42-392  
42-393  
42-394  
42-395  
42-396  
42-397  
42-398  
42-399  
42-400  
42-401  
42-402  
42-403  
42-404  
42-405  
42-406  
42-407  
42-408  
42-409  
42-410  
42-411  
42-412  
42-413  
42-414  
42-415  
42-416  
42-417  
42-418  
42-419  
42-420  
42-421  
42-422  
42-423  
42-424  
42-425  
42-426  
42-427  
42-428  
42-429  
42-430  
42-431  
42-432  
42-433  
42-434  
42-435  
42-436  
42-437  
42-438  
42-439  
42-440  
42-441  
42-442  
42-443  
42-444  
42-445  
42-446  
42-447  
42-448  
42-449  
42-450  
42-451  
42-452  
42-453  
42-454  
42-455  
42-456  
42-457  
42-458  
42-459  
42-460  
42-461  
42-462  
42-463  
42-464  
42-465  
42-466  
42-467  
42-468  
42-469  
42-470  
42-471  
42-472  
42-473  
42-474  
42-475  
42-476  
42-477  
42-478  
42-479  
42-480  
42-481  
42-482  
42-483  
42-484  
42-485  
42-486  
42-487  
42-488  
42-489  
42-490  
42-491  
42-492  
42-493  
42-494  
42-495  
42-496  
42-497  
42-498  
42-499  
42-500



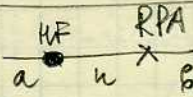
упростим

упростим

упростим

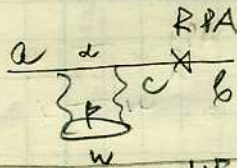
упростим

pt\_val



$$\tilde{\epsilon}_{min} - \epsilon_u$$

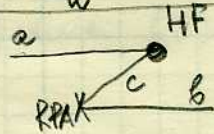
$$\tilde{\epsilon}_{min} = \min \{ \tilde{\epsilon}_a, \tilde{\epsilon}_b \}$$



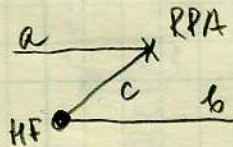
$$(\tilde{\epsilon}_{min} + \epsilon_u - \epsilon_d - \epsilon_p)(\tilde{\epsilon}_{min} - \epsilon_u)$$

и также наоборот

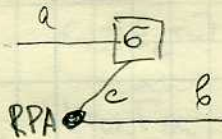
rpa\_val



$$\tilde{\epsilon}_{min} + \epsilon_c - \epsilon_a - \epsilon_b$$



sg-rpa



$$\tilde{\epsilon}_{min} + \epsilon_c - \epsilon_a - \epsilon_b$$

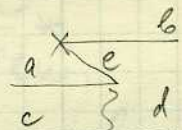
здесь, как и в pt\_val  $b = \tilde{b}(\tilde{\epsilon}_{min})$

a\_eff

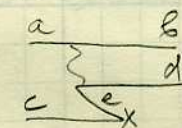


$$\tilde{\epsilon}_{min} + \epsilon_c - \epsilon_a - \epsilon_b - \epsilon_d$$

$$\tilde{\epsilon}_{min} = \min \{ \tilde{\epsilon}_a + \tilde{\epsilon}_c, \tilde{\epsilon}_d \}$$

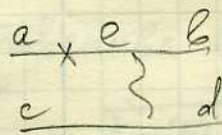


$$\tilde{\epsilon}_{min} + \epsilon_c - \epsilon_a - \epsilon_b - \epsilon_c$$



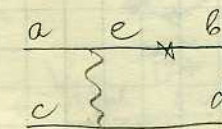
$$\tilde{\epsilon}_{min} + \epsilon_c - \epsilon_b - \epsilon_c - \epsilon_d$$

a\_val

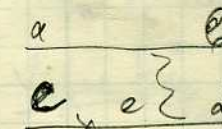


$$\tilde{\epsilon}_{min} - \epsilon_e - \epsilon_c$$

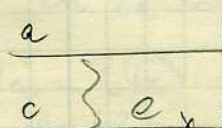
$\tilde{\epsilon}_{min}$  тоже, но b a\_eff



$$\tilde{\epsilon}_{min} - \epsilon_e - \epsilon_d$$



$$\tilde{\epsilon}_{min} - \epsilon_e - \epsilon_a$$



$$\tilde{\epsilon}_{min} - \epsilon_e - \epsilon_b$$

13-762 500 SHEETS, FILLER, 5 SQUARE  
 42-381 50 SHEETS, FILLER, 5 SQUARE  
 42-382 100 SHEETS, FILLER, 5 SQUARE  
 42-383 100 SHEETS, FILLER, 5 SQUARE  
 42-384 200 SHEETS, FILLER, 5 SQUARE  
 42-385 200 SHEETS, FILLER, 5 SQUARE  
 42-386 200 SHEETS, FILLER, 5 SQUARE  
 42-387 200 SHEETS, FILLER, 5 SQUARE  
 42-388 200 SHEETS, FILLER, 5 SQUARE  
 42-389 200 SHEETS, FILLER, 5 SQUARE  
 Made in U.S.A.

