Матричные уравнения RRA I 12.12.95

1. Стационарное возмущение F

апрель 96 г.: найдена ошибка в def. привед. МЭ

Имеем ХФ базис:

$$\begin{cases} H_0 \psi_n = \varepsilon_n \psi_n \quad n = 1, 2 \ldots N, \ldots \\ H_0 = H_0(\psi_1 \ldots \psi_N) \end{cases} \qquad (1)$$

Добавляем одночастичное возмущение F и ищем поправки I порядка по F:

$$\left(H_0 + \delta V(F) + F\right)\left(\psi_i + \delta\psi_i\right) = \left(\varepsilon_i + \delta\varepsilon_i\right)\left(\psi_i + \delta\psi_i\right) \qquad (2)$$

Т.к. $\langle \psi_i + \delta\psi_i | \psi_i + \delta\psi_i \rangle = 1 + 2\,\mathrm{Re}\langle \delta\psi_i | \psi_i \rangle + O(F^2) = 1 + O(F^2)$

$$\Rightarrow \langle \delta\psi_i | \psi_i \rangle = 0 \qquad (3)$$

Поэтому, умножая (2) слева на ψ_i^* и интегрируя, получаем:

$$\delta\varepsilon_i = \langle \psi_i | \delta V(F) + F | \psi_i \rangle \equiv \langle \psi_i | \tilde{F} | \psi_i \rangle \qquad (4)$$

а для поправки $\delta\psi_i$ получаем систему:

$$\delta\psi_i = \sum_{k \neq i} C_{ki} \psi_k \qquad (5)$$

$$C_{ki} = \frac{\langle \psi_k | \delta V(F) + F | \psi_i \rangle}{\varepsilon_i - \varepsilon_k} = \frac{\delta V_{ki} + F_{ki}}{\varepsilon_i - \varepsilon_k} \qquad (6)$$

Очевидно, что $C_{ik} = -C_{ki}^*$. Это означает, что если $i, k \leq N$, то соответствующая поправка к ψ_i компенсируется поправкой к ψ_k (унитарное преобразование заполненных состояний). Поэтому, эту часть суммы (6) можно опустить (см. формулу (10)):

$$(\varepsilon_i - \varepsilon_k) C_{ki} = \sum_{\substack{k \neq i \\ \text{если } i \leq N, \\ \text{то } k > N}} \left(\delta V_{ki} + F_{ki}\right) = \tilde{F}_{ki} \qquad (7)$$

Явный вид δV_{ki}:

$$V_{ki} = \sum_{n\le N}\int\left[\frac{\psi_k^*(\vec r)\psi_i(\vec r)\psi_n^*(\vec r')\psi_n(\vec r') - \psi_k^*(\vec r)\psi_n(\vec r)\psi_n^*(\vec r')\psi_i(\vec r')}{|\vec r-\vec r'|}\right] d\vec r\, d\vec r' \quad (8)$$

$$\delta V_{ki} = \sum_{n\le N}\int\left[\frac{\psi_k^*(r)\psi_i(r)\delta\psi_n^*(r')\psi_n(r') + \psi_k^*(r)\psi_i(r)\psi_n^*(r')\delta\psi_n(r')}{|\vec r-\vec r'|} - \frac{\psi_k^*(r)\delta\psi_n(r)\psi_n^*(r')\psi_i(r') + \psi_k^*(r)\psi_n(r)\delta\psi_n^*(r')\psi_i(r')}{|\vec r-\vec r'|}\right] d\vec r\, d\vec r'$$

Если обозначить

$$V_{kiln} = \int \frac{\psi_k^*(r)\psi_i(r)\psi_l^*(r')\psi_n(r')}{|r-r'|} \qquad \frac{i \quad k}{n \;\xi\; l} \quad (9)$$

то

Def U_1, U_2

$$\delta V_{ki} = \sum_{\substack{n\le N\\ l>N}}\left[(V_{kinl}-V_{klni})C_{ln} + (V_{kiln}-V_{knli})C^*_{ln}\right] \equiv \sum \left[U^1_{kiln}C_{ln} + U^2_{kiln}C^*_{ln}\right] \quad (10)$$

видно, что из условия $C^*_{ln} = -C_{nl} \Rightarrow$ что смешивание внутри заполненных оболочек не дает вклада в δV_{ki}

Из (7) и (10) получаем ур-ние на C

$$(\varepsilon_i-\varepsilon_k)C_{ki} - \sum_{nl}\left[U^1_{kiln}C_{ln} + U^2_{kiln}C^*_{ln}\right] = F_{ki} \quad (11)$$

Введем эффективный оператор:

$$\tilde F = F + \delta V(F) = F + U_1 C + U_2 C^* \quad (12)$$

Решаем (11) и (12):

$$\begin{cases} DC = \tilde F \\ \tilde F = U_1 C + U_2 C^* + F \end{cases} \;\Bigg|\; \boxed{\begin{array}{l} C = D^{-1}\tilde F \\ \tilde F - U_1 D^{-1}\tilde F - U_2 D^{-1}\tilde F^* = F \end{array}} \quad (14)$$

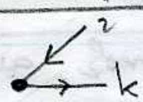
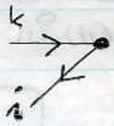
В явном виде это записывается так (получается из (11) подстановкой (7))

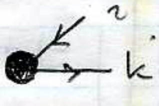
$$\tilde F_{ki} - \sum_{\substack{n\le N\\ l>N}}\left[(V_{kinl}-V_{klni})\frac{1}{\varepsilon_n-\varepsilon_l}\tilde F_{ln} + (V_{kiln}-V_{knli})\frac{1}{\varepsilon_n-\varepsilon_l}\tilde F^*_{ln}\right] = F_{ki} \quad (15)$$

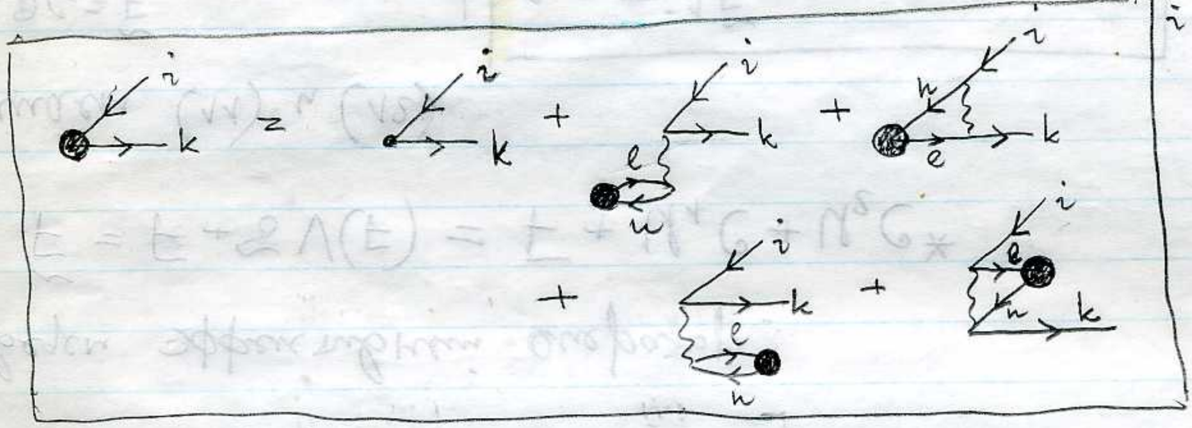
см. оборот

Графически ур-ние (15) запишется так:

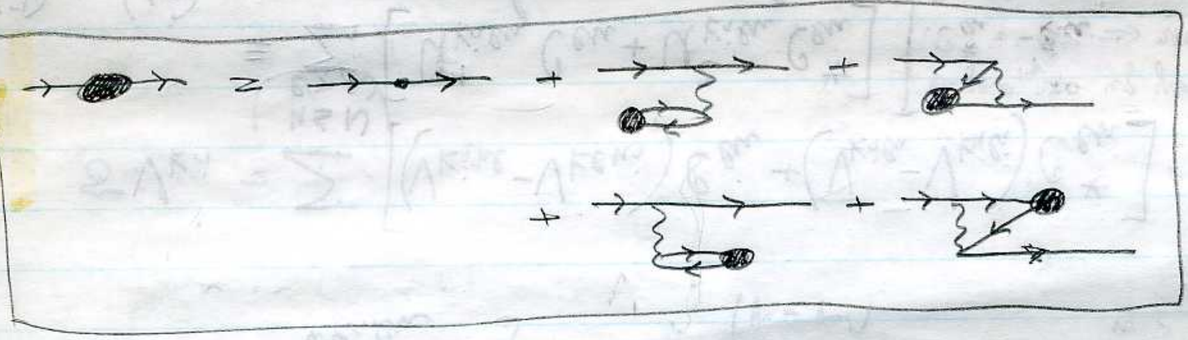
Если $i \le N$, а $k > N$, то

$F_{ki} \equiv$  $F^*_{ki} = F_{ik} \equiv$ 

$\tilde{F}_{ki} \equiv$  $\tilde{F}^*_{ki} = \tilde{F}_{ik} \equiv$ 



или для валентных электронов



Замечание (5.06.96) Правило отбора по четности для прямой диаграммы:

Если четность оператора р и его ранг r связаны равенством $p = (-1)^r$ то прямая диаграмма есть, в противном случае она обращается в нуль

2. Полное возмущение $F^+ e^{i\omega t} + F e^{-i\omega t}$

2. Периодическое возмущение $F^+ e^{i\omega t} + F e^{-i\omega t}$

Будем считать, что ω не совпадает с собств. частотами задачи. Решаем нестац. ур-ние:

$$\left[i\partial_t - \left(H_0 + \delta V^+ e^{i\omega t} + \delta V e^{-i\omega t} + F^+ e^{i\omega t} + F e^{-i\omega t}\right)\right] e^{-i\varepsilon_i t}\left[\psi_i + \sum_{k\neq i}\left(C^+_{ki} e^{i\omega t} + C_{ki} e^{-i\omega t}\right)\psi_k\right] = 0 \qquad (16)$$

Получаем два ур-ния для частот $\varepsilon_i \mp \omega$:

$$\begin{cases} (\varepsilon_i - \varepsilon_k - \omega) C^+_{ki} = F^+_{ki} + \delta V^+_{ki} \\ (\varepsilon_i - \varepsilon_k + \omega) C_{ki} = F_{ki} + \delta V_{ki} \end{cases} \qquad (17)$$

δV_{ki} и δV^+_{ki} получаются из (10):

$$\begin{cases} \delta V^+_{ki} = \sum\limits_{\substack{n\le N \\ l>N}} \left[(V_{kinl} - V_{klni}) C^+_{ln} + (V_{kiln} - V_{knli}) C^*_{ln}\right] \\ \delta V_{ki} = \sum \left[(V_{kinl} - V_{klni}) C_{ln} + (V_{kiln} - V_{knli}) C^{+*}_{ln}\right] \end{cases} \qquad (18)$$

В матричном виде (17) запишется так:

$$\begin{cases} \Phi^+ C^+ - U_1 C^+ - U_2 C^* = F^+ \\ \Phi^- C - U_1 C - U_2 C^{+*} = F \end{cases} \quad \text{где} \quad \begin{aligned} \Phi^+ &= (\varepsilon_i - \varepsilon_k - \omega)\delta_{in}\delta_{kl} \\ \Phi^- &= (\varepsilon_i - \varepsilon_k + \omega)\delta_{in}\delta_{kl} \end{aligned} \qquad (19)$$

Вводим эфф. операторы:

$$\begin{cases} \tilde{F} = F + U_1 C + U_2 C^{+*} \\ \tilde{F}^+ = F^+ + U_1 C^+ + U_2 C^* \end{cases} \qquad (20)$$

Решая (19) и (20) относительно $\tilde{F}$ и $\tilde{F}^+$, получаем:

$$\begin{cases} \tilde{F} - U_1 (\Phi^-)^{-1} \tilde{F} - U_2 (\Phi^+)^{-1} \tilde{F}^{+*} = F \\ \tilde{F}^+ - U_1 (\Phi^+)^{-1} \tilde{F}^+ - U_2 (\Phi^-)^{-1} \tilde{F}^* = F^+ \end{cases} \qquad (21)$$

15.12.95

II

Уравнения Амусьи – Черепковой для RPA [см (1.51)]

$$\tilde F^+_{ki} - \sum_{ln}\left[\frac{V_{kiln}}{\varepsilon_n-\varepsilon_l+\omega}\tilde F^+_{ln} - \frac{V_{kinl}}{\varepsilon_l-\varepsilon_n+\omega}\tilde F^+_{nl} - \frac{V_{klni}}{\varepsilon_n-\varepsilon_l+\omega}\tilde F^+_{ln} + \frac{V_{knli}}{\varepsilon_l-\varepsilon_n+\omega}\tilde F^+_{nl}\right] = F^+_{ki} \qquad (1)$$

Перепишем так:

$$\tilde F^+_{ki} - \sum_{\substack{n\le N\\ l>N}}\left[\frac{V_{kiln}-V_{klni}}{\varepsilon_n-\varepsilon_l+\omega}\tilde F^+_{ln} + \frac{V_{kinl}-V_{knli}}{\varepsilon_n-\varepsilon_l-\omega}\tilde F^+_{nl}\right] = F^+_{ki} \qquad (2)$$

Введем обозначения:

$$\begin{cases} (U_1)_{ki,ln} \equiv V_{kiln}-V_{klni} \\ (U_2)_{ki,ln} \equiv V_{kinl}-V_{knli} \\ (D_\pm^{-1})_{ki,ln} = \dfrac{\delta_{kl}\delta_{in}}{\varepsilon_n-\varepsilon_l\mp\omega} \\ \tilde\Phi_{ln} \equiv \tilde F^+_{nl} \end{cases} \qquad (3)$$

При этом (2) записывается так:

$$\tilde F^+ - U_1 D_-^{-1}\tilde F^+ - U_2 D_+^{-1}\tilde\Phi = F^+ \qquad (3a)$$

Переставим в (2) $i \leftrightarrow k$:

$$\tilde\Phi_{ki} - \sum_{nl}\left[\frac{V_{ikln}-V_{ilnk}}{\varepsilon_n-\varepsilon_l+\omega}\tilde F^+_{ln} + \frac{V_{iknl}-V_{inlk}}{\varepsilon_n-\varepsilon_l-\omega}\tilde\Phi_{ln}\right] = F^+_{ik} \qquad (4)$$

или, учитывая, что $F^+_{ik} = F^{+*}_{ik}$? F^{+*}_{ki}

$$\tilde\Phi - U_1 D_+^{-1}\tilde\Phi - U_2 D_-^{-1}\tilde F^+ = F^{+*} \qquad (4a)$$

Делаем комплексное сопряжение ур-ния (4a) и введем обозначение

$$\tilde{F}^{+} = \tilde{\Phi}^{*} \qquad (5)$$

тогда (3a) и (4a) переписываются так:

$$\begin{cases} \tilde{F} - U_1 D_-^{-1} \tilde{F} - U_2 D_+^{-1} \tilde{F}^{+*} = F & (6a) \\ \tilde{F}^{+} - U_1 D_+^{-1} \tilde{F}^{+} - U_2 D_-^{-1} \tilde{F}^{*} = F^{+} & (6b) \end{cases}$$

Поскольку (6b) получено из (6a) заменой $i \leftrightarrow k$ и комплексным сопряжением, очевидно, что обозначение (5) - правильное, т.е.

$$\tilde{F}^{+}_{ik} = \tilde{F}^{*}_{ki} \qquad (7)$$

В этом смысле система (6) - переполненная. Поэтому, достаточно решать

либо
Одно из уравнений (6) с условием (7)
либо
Оба уравнения (6) но лишь для F_{ki} и F^{+}_{ki} таких, что $k > N$ $i \leq N$.

Мы выбираем II вариант.

При этом система (6) совпадает с (I.21)

III

Калибровка скорости в RPA

13.12.95

Для простоты ограничимся нерелятивистским приближением.

1. Хартри-Фок

$$H_0 = \frac{1}{2}\nabla^2 + V_{dir} + V_{exh}$$

$$[H_0 r] = [\nabla r]\nabla + [V_{exh}, r] = \nabla + [V_{exh}, r]$$

$$V_{exh\ ik} = -\sum_n \frac{\psi_i^*(r)\psi_n(r)\psi_n^*(r')\psi_k(r')}{|r-r'|}$$

$$[V r] = V_{ik} r_{kj} - r_{ik} V_{kj}$$

$$r_{ij} = \frac{1}{\varepsilon_i - \varepsilon_j}\left[\nabla_{ij} + \sum_{nk}\left(r_{ik} V_{knnj} - V_{innk} r_{kj}\right)\right] \quad (1)$$

Выразим ∇_{ij}:

$$\nabla_{ij} = (\varepsilon_i - \varepsilon_j) r_{ij} + \sum_{nk}\left(V_{innk} r_{kj} - r_{ik} V_{knnj}\right) \quad (2)$$

Посмотрим как выглядит поправка RPA к оператору ∇:

$$\tilde{\nabla}_{ki} = \nabla_{ki} + U_1 D_-^{-1}\nabla - U_2 D_+^{-1}\nabla \quad (3)$$

Явно это выглядит так:

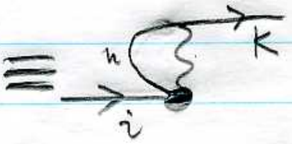
$$\tilde{\nabla}_{ki} = \nabla_{ki} + \left(V_{kinl} - V_{klni}\right)\frac{1}{\varepsilon_n - \varepsilon_l + \omega}\nabla_{ln} - \left(V_{kiln} - V_{knli}\right)\frac{1}{\varepsilon_n - \varepsilon_l - \omega}\nabla_{ln} \quad (4)$$

Подставляем (2) в (4) и отбрасываем члены квадратичные по V:

$$\tilde{\nabla}_{ki} = (\varepsilon_k-\varepsilon_i) r_{ki} + V_{knne} r_{ei} - r_{ke} V_{enni}$$
$$+ (V_{kine}-V_{keni}) \frac{\varepsilon_e-\varepsilon_n}{\varepsilon_n-\varepsilon_e+\omega} r_{en} - (V_{kien}-V_{knei}) \frac{\varepsilon_e-\varepsilon_n}{\varepsilon_n-\varepsilon_e-\omega} r_{en}$$
$$= (\varepsilon_k-\varepsilon_i) r_{ki} + \omega\left[(V_{kine}-V_{keni})\frac{1}{\varepsilon_n-\varepsilon_e+\omega} r_{en} + (V_{kien}-V_{knei})\frac{1}{\varepsilon_n-\varepsilon_e-\omega} r_{en}\right]$$
$$+ V_{knn\alpha} r_{\alpha i} - r_{k\alpha} V_{\alpha nni} - \cancel{V_{kine} r_{en}} + V_{keni} r_{en} + \cancel{V_{kien} r_{en}} - V_{knei} r_{en}$$

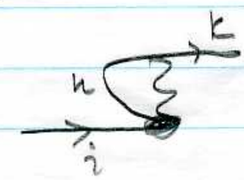
Соглашение $\begin{cases} \alpha,\beta - \text{любые} \\ i,j,n,m \le N \\ k,l > N \end{cases}$

Разбираемся с членами последней строки:

$$V_{knn\alpha} r_{\alpha i} = \sum_{n\alpha} \int \frac{\psi_k^*(r)\psi_n(r)\psi_n^*(r')\psi_\alpha(r')\psi_\alpha^*(r'')r''\psi_i(r'')}{|r-r'|} =$$
$$= \sum_n \int \frac{\psi_k^*(r)\psi_n(r)\psi_n^*(r')\psi_i(r')r'}{|r-r'|} \equiv$$


$r_{k\alpha}V_{\alpha nni} =$


$$V_{keni} r_{en} = V_{k\alpha ni} r_{\alpha n} - V_{kjni} r_{jn}$$
$$V_{knei} r_{en} = V_{kn\alpha i} r_{\alpha n} - V_{knji} r_{jn}$$
$$V_{k\alpha ni} r_{\alpha n} = \sum_{\alpha n} \int \frac{\psi_k^*(r)\psi_\alpha(r)\psi_n^*(r')\psi_i(r')\psi_\alpha(r'')r''\psi_n(r'')}{|r-r'|} =$$


$V_{kn\alpha i} r_{\alpha n} =$


Т.о. последняя строка равна:

 $-$  $+$  $-$  $- V_{kjni} r_{jn} + V_{knji} r_{jn} = 0$

Это означает, что в I порядке по V получаем:

$$\tilde{\nabla}_{ki} = (\varepsilon_k - \varepsilon_i) r_{ki} + \omega \left[(V_{kinl} - V_{klni}) \frac{1}{\varepsilon_n - \varepsilon_l + \omega} r_{ln} + (V_{kiln} - V_{knli}) \frac{1}{\varepsilon_n - \varepsilon_l - \omega} r_{ln} \right]$$

Если $\omega = \varepsilon_k - \varepsilon_i$, то

$$\tilde{\nabla}_{ki} = (\varepsilon_k - \varepsilon_i) \tilde{r}_{ki},$$

Отделение угловых частей в RPA

$$V_{ki,nl} \equiv \frac{\;i \qquad k\;}{\;l \;\big\}\; n\;}$$

$$= (-1)^{m_i+m_n+1}\sqrt{(2j_i+1)(2j_k+1)(2j_l+1)(2j_n+1)}$$

$$\begin{pmatrix} j_k & j_i & q \\ -m_k & m_i & \lambda \end{pmatrix}\begin{pmatrix} j_l & j_n & q \\ -m_l & m_n & \lambda \end{pmatrix}\begin{pmatrix} j_k & j_i & q \\ \frac{1}{2} & -\frac{1}{2} & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} j_l & j_n & q \\ \frac{1}{2} & -\frac{1}{2} & 0 \end{pmatrix} R^q_{ki,nl} \qquad (1)$$

$V_{kinl} - V_{klni}$

$$\frac{\;i \qquad k\;}{\;l \;\big\}\; n\;} - \frac{\;l \qquad k\;}{\;i \;\big\}\; n\;}$$

$$(U_1)_{kiln} = \sqrt{(i)(k)(l)(n)}$$

$$\Big[(-1)^{m_i+m_l+1}\begin{pmatrix} j_k & j_i & q \\ -m_k & m_i & \lambda \end{pmatrix}\begin{pmatrix} j_n & j_l & q \\ -m_n & m_l & \lambda \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \\ \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \\ \end{pmatrix} R^q_{kinl}$$

$$-(-1)^{m_l+m_n+1}\begin{pmatrix} j_k & j_l & q \\ -m_k & m_l & \lambda \end{pmatrix}\begin{pmatrix} j_i & j_n & q \\ -m_i & m_n & \lambda \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \\ \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \\ \end{pmatrix} R^q_{klni}\Big] \qquad (2)$$

$V_{kiln} - V_{knli}$

$$\frac{\;i \qquad k\;}{\;n \;\big\}\; l\;} - \frac{\;n \qquad k\;}{\;i \;\big\}\; l\;}$$

$$(U_2)_{kiln} = \sqrt{(i)(k)(l)(n)}$$

$$\Big[(-1)^{m_i+m_n+1}\begin{pmatrix} j_k & j_i & q \\ -m_k & m_i & \lambda \end{pmatrix}\begin{pmatrix} j_l & j_n & q \\ -m_l & m_n & \lambda \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \\ \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \\ \end{pmatrix} R^q_{kiln}$$

$$-(-1)^{m_n+m_l+1}\begin{pmatrix} j_k & j_n & q \\ -m_k & m_n & \lambda \end{pmatrix}\begin{pmatrix} j_i & j_l & q \\ -m_i & m_l & \lambda \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \\ \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \\ \end{pmatrix} R^q_{knli}\Big] \qquad (3)$$

Считаем, что F и $\tilde{F}$ имеют ранг r и проекцию 0:

$$F_{ki} = (-1)^{j_k-m_k}\begin{pmatrix} j_k & r & j_i \\ -m_k & 0 & m_i \end{pmatrix} f_{ki} = (-1)^{j_i+r+m_k}\begin{pmatrix} j_k & j_i & r \\ -m_k & m_i & 0 \end{pmatrix} f_{ki} \qquad (4)$$

В левых частях уравнений RPA (II-21) возникают четыре комбинации 3j-символов:

$$(-1)^{m_i+m_e+1+\overset{j_n+r+m_e}{\cancel{j_e-m_n}}}\sum_{m_n m_e}\begin{pmatrix} j_k & j_i & q\\ -m_k & m_i & \lambda\end{pmatrix}\begin{pmatrix} j_n & j_e & q\\ -m_n & m_e & \lambda\end{pmatrix}\begin{pmatrix} j_e & j_n & r\\ -m_e & m_n & 0\end{pmatrix}=$$

$$=(-1)^{\overset{j_n+r+m_i}{\cancel{j_e+m_i+1}}}\frac{1}{2r+1}\begin{pmatrix} j_k & j_i & r\\ -m_k & m_i & 0\end{pmatrix}\delta_{qr}\delta_{\lambda 0} \qquad (5)$$

$$(-1)^{m_e+m_n+1+\overset{j_n+r+m_e}{\cancel{j_e-m_e}}}\sum_{m_e m_n \lambda}\begin{pmatrix} j_k & j_e & q\\ -m_k & m_e & \lambda\end{pmatrix}\begin{pmatrix} j_i & j_n & q\\ -m_i & m_n & \lambda\end{pmatrix}\begin{pmatrix} j_e & j_n & r\\ -m_e & m_n & 0\end{pmatrix}$$

$$=(-1)^{\overset{j_n+q-m_k}{\cancel{j_e+r+q-m_k+1}}}\begin{pmatrix} j_k & j_i & r\\ -m_k & m_i & 0\end{pmatrix}\begin{Bmatrix} j_k & j_i & r\\ j_n & j_e & q\end{Bmatrix} \qquad (6)$$

$$(-1)^{m_i+m_n+1+\overset{j_n+r+m_e}{\cancel{j_e-m_e}}}\begin{pmatrix} j_k & j_i & q\\ -m_k & m_i & \lambda\end{pmatrix}\begin{pmatrix} j_e & j_n & q\\ -m_e & m_n & \lambda\end{pmatrix}\begin{pmatrix} j_e & j_n & r\\ -m_e & m_n & 0\end{pmatrix}$$

$$=(-1)^{\overset{j_n+r+m_i}{\cancel{j_e+m_i+1}}}\frac{1}{2r+1}\begin{pmatrix} j_k & j_i & r\\ -m_k & m_i & 0\end{pmatrix}\delta_{qr}\delta_{\lambda 0} \qquad (7)$$

$$(-1)^{m_n+m_e+1+\overset{j_n+r+m_e}{\cancel{j_e-m_e}}}\sum_{m_e m_n \lambda}\begin{pmatrix} j_k & j_n & q\\ -m_k & m_n & \lambda\end{pmatrix}\begin{pmatrix} j_i & j_e & q\\ -m_i & m_e & \lambda\end{pmatrix}\begin{pmatrix} j_e & j_n & r\\ -m_e & m_n & 0\end{pmatrix}$$

$$=(-1)^{\overset{j_n+q-m_i}{\cancel{j_e+r+m_i\,q}}}\begin{pmatrix} j_k & j_i & r\\ -m_k & m_i & 0\end{pmatrix}\begin{Bmatrix} j_k & j_i & r\\ j_e & j_n & q\end{Bmatrix} \qquad (8)$$

При переходе к уравнениям на приведенные МЭ $\tilde{f}$ опускаем слева и справа в (I.21) множитель $(-1)^{\overset{j_i+r+m_k}{\cancel{j_k-m_k}}}\begin{pmatrix} j_k & j_i & r\\ -m_k & m_i & 0\end{pmatrix}$

То что остается назовем $\tilde{U}_1$ и $\tilde{U}_2$:

$$(\tilde{U}_1)_{kiln} = \sqrt{(k)(i)(l)(n)}$$

$$\Big[(-1)^{\substack{j_n+r+m_i+j_i+r+m_k \\ \cancel{j_l+m_i+1+j_k-m_k}}} \frac{1}{2r+1} \begin{pmatrix} j_k & j_i & r \end{pmatrix} \begin{pmatrix} j_n & j_l & r \end{pmatrix} R^r_{kinl}$$

$$+ (-1)^{\substack{j_n+q+m_k+j_i+r+m_k \\ \cancel{j_l+r+q-m_k+j_k-m_k}}} \begin{pmatrix} j_k & j_l & q \end{pmatrix} \begin{pmatrix} j_i & j_n & q \end{pmatrix} \begin{Bmatrix} j_k & j_i & r \\ j_n & j_l & q \end{Bmatrix} R^q_{klni} \Big]$$

$$= (-1)^{\substack{j_n+j_i+1 \\ \cancel{j_l+j_k+1}}} \sqrt{(2j_k+1)(2j_i+1)(2j_l+1)(2j_n+1)}$$

$$\left[\frac{1}{2r+1} \begin{pmatrix} j_k & j_i & r \\ \frac{1}{2} & -\frac{1}{2} & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} j_n & j_l & r \\ \frac{1}{2} & -\frac{1}{2} & 0 \end{pmatrix} R^r_{kinl} + (-1)^{r+q} \begin{pmatrix} j_k & j_l & q \\ \frac{1}{2} & -\frac{1}{2} & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} j_i & j_n & q \\ \frac{1}{2} & -\frac{1}{2} & 0 \end{pmatrix} \begin{Bmatrix} j_k & j_i & r \\ j_n & j_l & q \end{Bmatrix} R^q_{klni} \right] \quad (9)$$

$$(\tilde{U}_2)_{kiln} = \sqrt{(\;)(\;)(\;)(\;)}$$

$$\Big[(-1)^{\substack{j_n+r+m_i+j_i+r+m_k \\ \cancel{j_l+m_i+1+j_k-m_k}}} \frac{1}{2r+1} \begin{pmatrix} j_k & j_i & r \end{pmatrix} \begin{pmatrix} j_l & j_n & r \end{pmatrix} R^r_{kiln}$$

$$+ (-1)^{\substack{j_l+q+m_i+j_i+r+m_k \\ \cancel{j_l+r-m_i-q+j_k-m_k}}} \begin{pmatrix} j_k & j_n & q \end{pmatrix} \begin{pmatrix} j_i & j_l & q \end{pmatrix} \begin{Bmatrix} j_k & j_i & r \\ j_l & j_n & q \end{Bmatrix} R^q_{knli} \Big]$$

$$= (-1)^{\substack{j_n+j_i+1 \\ \cancel{j_l+j_k+1}}} \sqrt{(2j_k+1)(2j_i+1)(2j_l+1)(2j_n+1)}$$

$$\left[\frac{1}{2r+1} \begin{pmatrix} j_k & j_i & r \\ \frac{1}{2} & -\frac{1}{2} & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} j_l & j_n & r \\ \frac{1}{2} & -\frac{1}{2} & 0 \end{pmatrix} R^r_{kiln} + (-1)^{r+q} \begin{pmatrix} j_k & j_n & q \\ \frac{1}{2} & -\frac{1}{2} & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} j_i & j_l & q \\ \frac{1}{2} & -\frac{1}{2} & 0 \end{pmatrix} \begin{Bmatrix} j_k & j_i & r \\ j_l & j_n & q \end{Bmatrix} R^q_{knli} \right] \quad (10)$$

Видно, что первые члены в (9) и (10) – одинаковы, так что имеем только три различных конструкции:

$$(t_1)_{kiln} = (-1)^{\substack{j_n+j_i+1 \\ \cancel{j_l+j_k+1}}} \sqrt{(\;)(\;)(\;)(\;)} \frac{1}{2r+1} \begin{pmatrix} j_k & j_i & r \\ \frac{1}{2} & -\frac{1}{2} & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} j_l & j_n & r \\ \frac{1}{2} & -\frac{1}{2} & 0 \end{pmatrix} R^r_{kinl} \quad (11a)$$

$$(t_2)_{kiln} = \sum_q (-1)^{\substack{j_n+j_i+1+r+q \\ \cancel{j_l+j_k+1+r+q}}} \sqrt{(\;)(\;)(\;)(\;)} \begin{pmatrix} j_k & j_l & q \\ \frac{1}{2} & -\frac{1}{2} & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} j_i & j_n & q \\ \frac{1}{2} & -\frac{1}{2} & 0 \end{pmatrix} \begin{Bmatrix} j_k & j_i & r \\ j_n & j_l & q \end{Bmatrix} R^q_{klni} \quad (11b)$$

$$(t_3)_{kiln} = \sum_q (-1)^{\substack{j_n+j_i+1+r+q \\ \cancel{j_l+j_k+1+r+q}}} \sqrt{(\;)(\;)(\;)(\;)} \begin{pmatrix} j_k & j_n & q \\ \frac{1}{2} & -\frac{1}{2} & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} j_i & j_l & q \\ \frac{1}{2} & -\frac{1}{2} & 0 \end{pmatrix} \begin{Bmatrix} j_k & j_i & r \\ j_l & j_n & q \end{Bmatrix} R^q_{knli} \quad (11c)$$

Итерационное решение ур-ний RPA для $\tilde{\omega} \ll 1$

Согласно (I.21) ур-ние RPA имеют вид:

$$\begin{cases} \tilde{F} - U_1 D_-^{-1} \tilde{F} - U_2 D_+^{-1} \tilde{F}^{+*} = F \\ \tilde{F}^+ - U_1 D_+^{-1} \tilde{F}^+ - U_2 D_-^{-1} \tilde{F}^* = F^+ \end{cases} \quad (1)$$

Перейдем к переменным F_1 и F_2:

$$\begin{cases} F_1 = (F^+ + F)/2 \\ F_2 = (F^+ - F)/2 \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} F^+ = F_1 + F_2 \\ F = F_1 - F_2 \end{cases} \quad (2)$$

и введем матрицы

$$\begin{cases} D_1^{-1} = \left(\frac{1}{D_+} + \frac{1}{D_-}\right)/2 \\ D_2^{-1} = \left(\frac{1}{D_+} - \frac{1}{D_-}\right)/2 \end{cases} \qquad \begin{cases} D_+^{-1} = D_1^{-1} + D_2^{-1} \\ D_-^{-1} = D_1^{-1} - D_2^{-1} \end{cases} \quad (3)$$

Получаем:

$$\begin{cases} \tilde{F}_1 - U_1 D_1^{-1} \tilde{F}_1 - U_1 D_2^{-1} \tilde{F}_2 - U_2 D_1^{-1} \tilde{F}_1^* - U_2 D_2^{-1} \tilde{F}_2^* = F_1 \\ \tilde{F}_2 - U_1 D_1^{-1} \tilde{F}_2 - U_1 D_2^{-1} \tilde{F}_1 + U_2 D_1^{-1} \tilde{F}_2^* + U_2 D_2^{-1} \tilde{F}_1^* = F_2 \end{cases} \quad (4)$$

Если $F^* = \eta F$, то это упрощается:

$$\begin{cases} \tilde{F}_1 - (U_1 + \eta U_2) D_1^{-1} \tilde{F}_1 - (U_1 + \eta U_2) D_2^{-1} \tilde{F}_2 = F_1 \\ \tilde{F}_2 - (U_1 - \eta U_2) D_1^{-1} \tilde{F}_2 - (U_1 - \eta U_2) D_2^{-1} \tilde{F}_1 = F_2 \end{cases} \quad (5)$$

Согласно (V.9) - (V.11)
$$\begin{cases} U_1 + \eta U_2 = (1+\eta) t_1 + t_2 + \eta t_3 \\ U_1 - \eta U_2 = (1-\eta) t_1 + t_2 - \eta t_3 \end{cases} \quad (6)$$

Посмотрим, что дают уравнения (5) для E1 амплитуды в V-форме.

Вариант 1.

$\exists F = \nabla$ тогда

$$F^+ = -F \Rightarrow \begin{cases} F_1 = 0 \\ F_2 = -F \end{cases}$$

$\eta = +1$

$$\begin{cases} \tilde{F}_1 - (U_1+U_2)\mathcal{D}_1^{-1}\tilde{F}_1 - (U_1+U_2)\mathcal{D}_2^{-1}\tilde{F}_2 = 0 \\ \tilde{F}_2 - (U_1-U_2)\mathcal{D}_1^{-1}\tilde{F}_2 - (U_1-U_2)\mathcal{D}_2^{-1}\tilde{F}_1 = -F \end{cases}$$

Вариант 2.

$\exists F = i\nabla$ тогда

$$F^+ = F \Rightarrow \begin{cases} F_1 = F \\ F_2 = 0 \end{cases}$$

$\eta = -1$

$$\begin{cases} \tilde{F}_1 - (U_1-U_2)\mathcal{D}_1^{-1}\tilde{F}_1 - (U_1-U_2)\mathcal{D}_2^{-1}\tilde{F}_2 = F \\ \tilde{F}_2 - (U_1+U_2)\mathcal{D}_1^{-1}\tilde{F}_2 - (U_1-U_2)\mathcal{D}_2^{-1}\tilde{F}_1 = 0 \end{cases}$$

Видно, что решения связаны соотношением

$$\begin{cases} \tilde{F}_2 \longleftrightarrow -\tilde{F}_1 \\ \tilde{F}_1 \longleftrightarrow -\tilde{F}_2 \end{cases} \text{ или } \begin{cases} \tilde{F}^+ \longleftrightarrow -\tilde{F}^+ \\ \tilde{F} \longleftrightarrow \tilde{F} \end{cases}$$

Т.е. для F оба варианта эквивалентны.

Вариант 2 выглядит предпочтительнее, т.к. в нем оператор — самосопряженный, как и все остальные операторы для которых решается RPA. При этом $F_2 = 0$ и уравнения для разных операторов отличаются только фазовым множителем η

19.12.95

Связь приведенных МЭ с рад. интегралами для программы RPA.

Используем 26.03.93.

Согласно последней формуле стр 1 приведенными МЭ являются коэффициенты при $\rho^{L}_{nl_j j, n'l'j'}$ в последующих формулах.

Порядок соответствует RPA:

1. Магнитная СТС:

$$\langle k \| f \| i \rangle = (-1)^{j_i + l_i + 1/2} \begin{cases} \sqrt{\dfrac{(2j_i+1)(2j_k+1)}{j_{min}+1}}, & j_i \neq j_k \\ \sqrt{\dfrac{(2j_i+1)^3}{j_i(j_i+1)}}, & j_i = j_k \end{cases} \quad R_{ki}$$

2. Квадрупн. СТС

$$\langle k \| f \| i \rangle = (-1)^{j_i + 1/2} \sqrt{(2j_i+1)(2j_k+1)(2l_i+1)(2l_k+1)} \begin{pmatrix} l_k & l_i & 2 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{Bmatrix} j_k & j_i & 2 \\ l_i & l_k & 1/2 \end{Bmatrix} R_{ki}$$

3. E1(L) амплитуда

$$\langle k \| f \| i \rangle = (-1)^{j_i + l_{max} - 1/2} \sqrt{(2j_i+1)(2j_k+1)\, l_{max}} \begin{Bmatrix} l_k & j_k & 1/2 \\ j_i & l_i & 1 \end{Bmatrix} R_{ki}$$

4. EDM электрона

$$\langle k \| f \| i \rangle = \sqrt{2j_k+1}\, R_{ki}$$

5. PNC амплитуда

$$\langle k \| f \| i \rangle = \sqrt{2j_k+1}\, R_{ki}$$

6. E1(V) амплитуда

$$\langle k \| f \| i \rangle = (-1)^{j_k + l_k + 1/2} \sqrt{(2j_i+1)(2j_k+1)} \left[W_1 R^{(1)}_{ki} + W_2 R^{(2)}_{ki} \right]$$

7. Аналоговый момент. Затравочная амплитуда определена только для $s_{1/2}-p_{1/2}$ перехода, поэтому в 26.03.93 не определен множитель для общего случая. Кажется (?), что его можно выбрать произвольно при условии, что

1) для $s_{1/2}-p_{1/2}$ он совпадает со старым

2). соответствует общим свойствам приведенных МЭ:

$$\langle k \| f \| i \rangle = (-1)^{j_i - j_k} \langle i \| f \| k \rangle^*$$

Положим

$$\langle k \| f \| i \rangle = (-1)^{j_i + l_{max} + 1/2} R_{ki}$$

8. Магнитный кв. момент

$$\langle k \| f \| i \rangle = \sqrt{(2j_i+1)(2j_k+1)} \Big[(-1)^{l_k + l_{max}} \sqrt{30\, l_{max}} \begin{Bmatrix} l_i & l_k & 1 \\ j_i & j_k & 2 \\ 1/2 & 1/2 & 1 \end{Bmatrix}$$
$$+ (-1)^{j_i + 1/2} \sqrt{\tfrac{2}{3}(2l_k+1)(4j_i - 2l_i + 1)} \begin{pmatrix} l_k & 2 & (2j_i - l_i) \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{Bmatrix} l_k & j_k & 1/2 \\ j_i & (2j_i - l_i) & 2 \end{Bmatrix} \Big] R_{ki}$$