

Замечание: Для бариона получилось, что RPA в варианте  $V^N$  виртуально отстает от  $V^{N-2}$  варианта. (Конфирм, в  $V^{N-2}$  варианте Е1 амплитуды уменьшаются на 10%, а в  $V^N$  - увеличиваются на 10% по сравнению с экспериментом) в связи с этим возникает.

Вопрос Какое RPA надо сделать?

Попробуем разобраться проанализировать, какие вклады учитывают оба варианта. Нам нужны явно только валентные амплитуды:

$$a \cdot b = a \cdot b + \underbrace{a \cdot b}_n + \underbrace{a \cdot b}_n + \dots \quad (1)$$

лиричные точки справа являются решениями основного уравнения.

Рассмотрим их явно:

$$= \underbrace{a \cdot b}_n + \underbrace{a \cdot b}_n + \underbrace{a \cdot b}_n + \dots + \underbrace{a \cdot b}_n + \underbrace{a \cdot b}_n + \underbrace{a \cdot b}_n + \dots \quad (2)$$

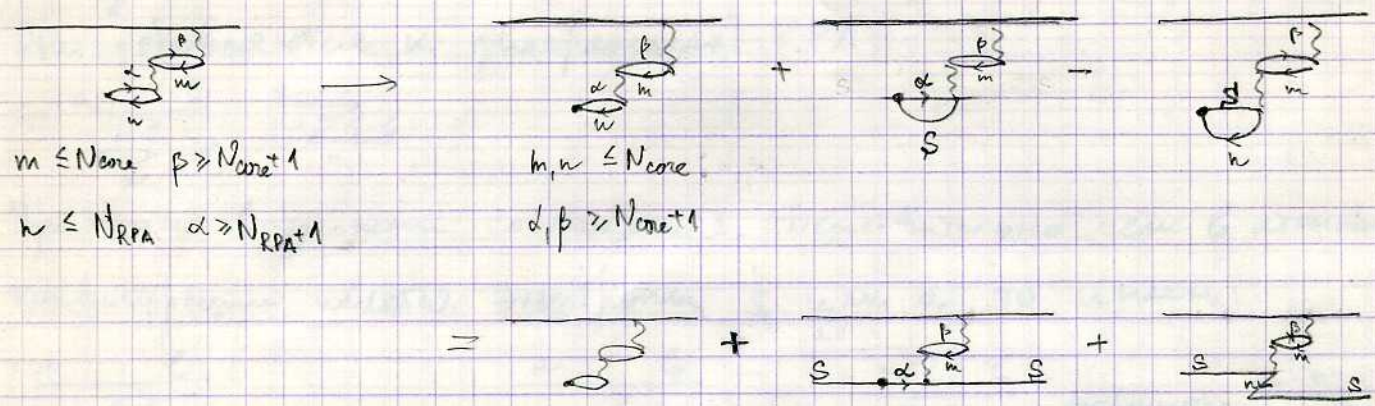
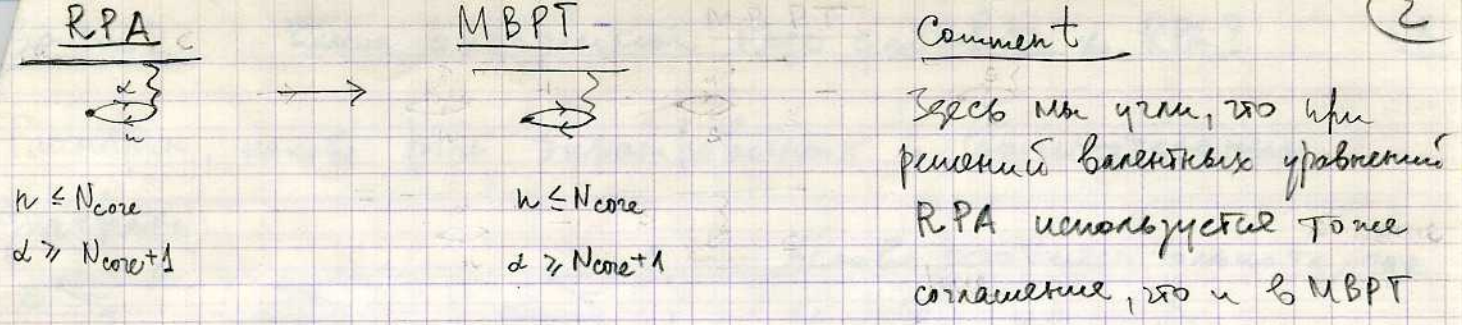
В (1) и (2) мы явно выписали только диаграммы где Кулоновские линии правее оператора A, обозначенного точкой.

Если RPA дается в варианте  $N_{RPA} = N_{core}$ , то соотношение по основным и виртуальным линиям для RPA и MBPT - совпадают.

Если же  $N_{RPA} > N_{core}$ , то соотношение RPA не совпадает с MBPT.

Имеется  $N_{RPA} - N_{core}$  линий, которые в RPA считаются основными, а в MBPT - виртуальными.

Для примера будем считать, что есть одна такая линия (s) и посмотрим как диаграммы (2) переписываются при переходе к соотношению MBPT?



Comment: Для всех итерь кроме первой в RPA используется свое сокращение, при котором  $S$  - считается основной. Это означает, что с точки зрения сокращения MBPT RPA включает диаграммы типа , которые содержат чисто валентные сетки.

Ответ

Если  $N_{RPA} \neq N_{core}$ , то RPA учитывает некоторые чисто валентные вклады, то есть приводит к асимптоту упред некоторым поправкам. В частности, диаграмма учитывается в CI+Scr. Важно, что такие вклады могут иметь малые знаменатели. (в частности для ва  $\epsilon_{0s} - \epsilon_{0p} \approx -0.01$ ), поэтому они могут давать anomalously большие вклады. Поэтому такой вариант RPA - плох!

Однако, RPA с  $N_{RPA} \neq N_{core}$  содержит и вклады типа , которые должны быть меньше, но могут быть полезны.

Поэтому, можно переопределить RPA так, чтобы в варианте

$N_{RPA} \geq N_{core}$  действовало сокращение:

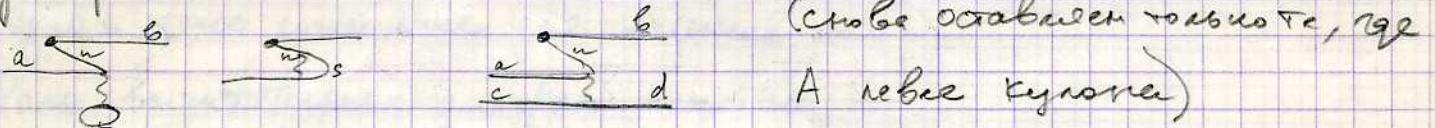
$$\begin{cases} n \leq N_{core} \\ d \geq N_{RPA} + 1 \end{cases} \quad \begin{cases} m \leq N_{core} \\ \beta \geq N_{core} + 1 \end{cases} \quad \begin{cases} \text{где } n \text{ и } d \text{ относятся к основному RPA,} \\ \text{а } m \text{ и } \beta \text{ - к валентному.} \end{cases}$$

Вопрос 2

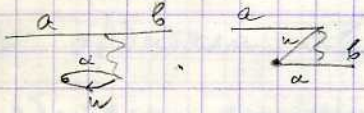
Какие диаграммы надо добавить к RPA?

(3)

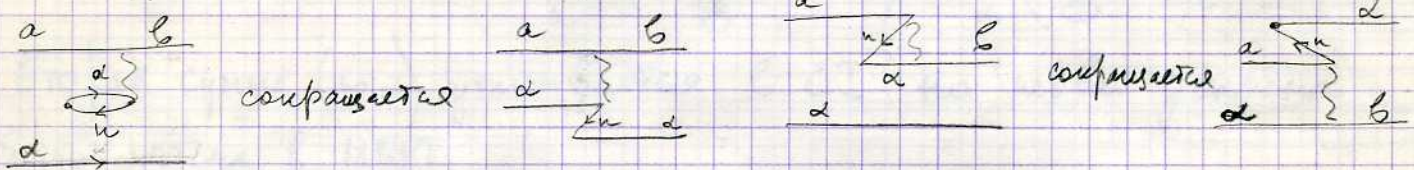
Рассмотрим, каковы роль экранированных и вычитательных диаграмм:



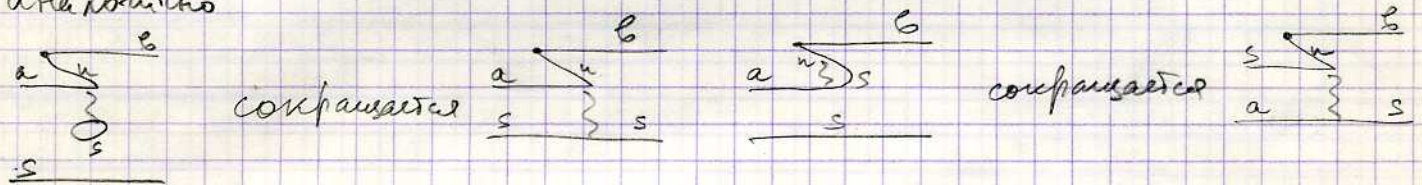
Они добавляются к диаграммам RPA:



При этом возможны сокращения. Действительно если в атомной конфигурации имеется электрон  $s$  или  $d$ , то имеем:

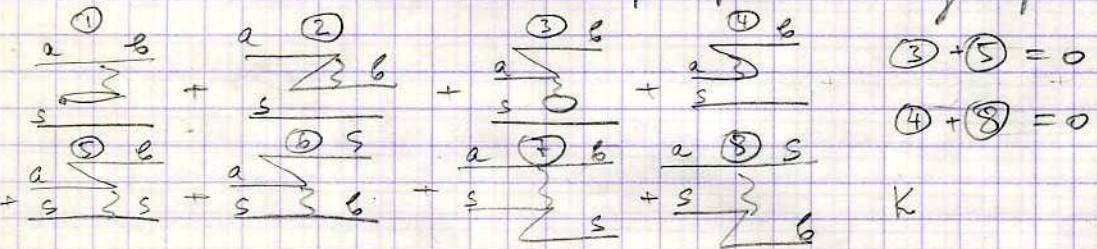


Аналогично



Таким образом, если мы имеем атомный переход  $(a,s) \rightarrow (b,s)$

то все вычитательные и экранированные диаграммы сокращаются:



Имеем:  $(3) + (5) = 0$ ;  $(4) + (8) = 0$  Кроме того



Если же орбиталь  $s$  - не заселена, то остаются и RPA и вычитательные диаграммы.

Вывод и валентные и эквивалентные диаграммы (4)  
нижны не зависят от того, какой вариант RPA используется (т.к. в любом варианте RPA для валентных МЭ используется одно и то же соотношение для индексов  $m$  и  $r$ ).

Роль валентных диаграмм заметна:

Если орбиталь не заселена, но она была включена в Хартри-Фока, то орбиталь является "неправильной". Неиспользуемые орбитали можно приближенно записать так:

$$\underline{a} \rightarrow = \underline{a} \rightarrow + \sum_n \left( \underline{a} \rightarrow \overset{n}{\delta} + \underline{a} \rightarrow \overset{n}{\delta} \right) + \sum_\alpha \left( \underline{a} \rightarrow \overset{\alpha}{\delta} + \underline{a} \rightarrow \overset{\alpha}{\delta} \right)$$

Вторая сумма (по  $\alpha$ ) учитывается в CI, но первая должна быть учтена в MBPT.