Apèndix E

Desenvolupament analític de la contribució a l'energia de les correlacions de backflow i correccions.

De la nova fase obtinguda a l'apèndix B, els dos primers sumands són els ja coneguts:

$$\Omega_{op} = \sum_{i=1}^{N} q_a r_i^a \qquad \text{ones planes}$$

$$\Omega_{back} = \sum_{i=1}^{N} A q_a Z_i^a \qquad \text{backflow}$$

$$\Omega = \sum_{i=1}^{N} C q_a \left(W_i\right)_b^a Z_i^b \qquad \text{correccions al backflow}$$

Es troben a continuació les contribucions a l'energia de cadascun d'aquests termes.

Contribució a l'energia del terme de backflow.

Es tracta de trobar la contribució a l'energia cinètica provinent de la part antisimètrica de la funció d'ona, és a dir, calcular l'expressió:

$$\left(\frac{\nabla_i^a \Psi_A}{\Psi_A}\right)\cdot\left(\frac{\nabla_i^a \Psi_A}{\Psi_A}\right) + \nabla_i^a\left(\frac{\nabla_i^a \Psi_A}{\Psi_A}\right)$$

Per fer-ho usarem un resultat molt útil a l'hora de trobar les derivades d'aquesta part antisimètrica de la funció d'ona, resultat que es demostra a l'apartat C.1 d'aquest apèndix:

$$\frac{\nabla_i^a \Psi_A}{\Psi_A} = \sum_{j=1}^{n} \sum_{\alpha} \frac{\partial \varphi_\alpha\left(r_j\right)}{\partial r_i^a} \overline{D}_\alpha(j)$$

on com sempre, el signicat dels subíndexs és:

α: orbitals, i,j: partícules, a: component

i Ψ_A és la part antisimètrica de la funció d'ona: el determinant D format pels elements $\varphi_\alpha(\vec{r}_i)$. Per al sistema sense backflow els orbitals φ_α són ones planes:

$$\varphi_\alpha(\vec{r}_i) = \exp\left(i\vec{k}_\alpha \vec{r}_i\right)$$

però en introduir el backflow passen a ser la combinació més complexa:

$$\varphi_\alpha(\vec{r}_i) = \exp\left(i\vec{k}_\alpha\left(\vec{r}_i + \lambda \sum_{j\neq i} \eta(r_{ij})\vec{r}_{ij}\right)\right)$$

formalment igual a la d'ones planes si introduïm la nova coordenada r':

$$\vec{r}_j^{\,'} = \vec{r}_j + \lambda \sum_{\substack{k=1 \\ k\neq j}}^{n} \eta(r_{jk})\vec{r}_{jk}$$

E.1. Demostració d'una identitat útil en el càlcul de $\frac{\nabla_i^a \Psi_A}{\Psi_A}$

Anomenarem D al determinant format pels orbitals φ_α.

$$D = \begin{vmatrix} \varphi_1(\vec{r}_1) & \varphi_1(\vec{r}_2) & \ldots & \varphi_1(\vec{r}_N) \\ \varphi_2(\vec{r}_1) & \varphi_2(\vec{r}_2) & \ldots & \varphi_2(\vec{r}_N) \\ \ldots & \ldots & \ldots & \ldots \\ \varphi_N(\vec{r}_1) & \varphi_N(\vec{r}_2) & \ldots & \varphi_N(\vec{r}_N) \end{vmatrix}$$

i $\overline{D}$ al determinant de la inversa transposada de la matriu corresponent a D.

Es tracta de veure com canvia el determinant en moure les partícules des de la posició r a la r'. Imaginem que canviem la posició de la partícula j en la quantitat $\delta\vec{r}_j$. Comencem canviant la columna 1 del determinant:

$$q_1 = \sum_\alpha \varphi_\alpha(r_1')\overline{D}_\alpha(1) \qquad \text{amb:} \quad \varphi_\alpha(r_1') = \varphi_\alpha(r_1) + \frac{\partial \varphi_\alpha(r_1)}{\partial r_j^b}\delta r_j^b$$

$$q_1 = \sum_\alpha \left(\varphi_\alpha(r_1)\overline{D}_\alpha(1) + \frac{\partial \varphi_\alpha(r_1)}{\partial r_j^b}\delta r_j^b \overline{D}_\alpha(1)\right) = 1 + \sum_\alpha \frac{\partial \varphi_\alpha(r_1)}{\partial r_j^b}\delta r_j^b \overline{D}_\alpha(1)$$

el nou determinant $\overline{D}_\alpha^{\,'}(k)$ es pot escriure:

$$\overline{D}_{\alpha}^{'}(k) = \overline{D}_{\alpha}(k) - c_k \frac{\overline{D}_{\alpha}(1)}{q_1} \quad \text{essent: } c_k = \sum_{\beta} \varphi_{\beta}(r_1^{'})\overline{D}_{\beta}(k)$$

que pot arribar a expressar-se així:

$$\overline{D}_{\alpha}^{'}(k) = \overline{D}_{\alpha}(k) - \frac{\sum_{\beta} \frac{\partial \varphi_{\beta}(r_1)}{\partial r_j^b} \delta r_j^b \overline{D}_{\alpha}(1)\overline{D}_{\beta}(k)}{q_1}$$

Havent canviat ja la primera columna, i fent servir el resultat anterior, canviem ara la segona columna per a obtenir q_2:

$$q_2 = \sum_{\alpha} \varphi_{\alpha}(r_2^{'})\overline{D}_{\alpha}^{'}(2) = 1 + \sum_{\alpha} \frac{\partial \varphi_{\alpha}(r_2)}{\partial r_j^b} \delta r_j^b \overline{D}_{\alpha}^{'}(2) =$$

$$= 1 + \sum_{\alpha} \frac{\partial \varphi_{\alpha}(r_2)}{\partial r_j^b} \delta r_j^b \overline{D}_{\alpha}(2) - \frac{1}{q_1} \sum_{\alpha\beta} \frac{\partial \varphi_{\alpha}(r_2)}{\partial r_j^b} \frac{\partial \varphi_{\beta}(r_1)}{\partial r_j^c} \delta r_j^c \delta r_j^b \overline{D}_{\alpha}(2)\overline{D}_{\beta}(1)$$

Si ara repetíssim el càlcul per a la tercera columna obtindríem un resultat similar a aquest darrer però amb nous termes. I aquí està el punt important: fixem-nos que el segon sumant ja és d'ordre $\left(\delta\vec{r}_j\right)^2$. Si seguíssim obtindríem termes d'ordres encara superiors.

Amb això ben present retornem a la definició de derivada i apliquem-la a la part antisimètrica de la funció d'ona:

$$\nabla_i^a \Psi_A = \lim_{\delta r_i^a \to 0} \frac{\Psi_A(\vec{r}_i^{\,'}) - \Psi_A(\vec{r}_i)}{\delta r_i^a} = \lim_{\delta r_i^a \to 0} \frac{q\Psi_A(\vec{r}_i) - \Psi_A(\vec{r}_i)}{\delta r_i^a}$$

i per tant podrem escriure:.

$$\frac{\nabla_i^a \Psi_A}{\Psi_A} = \lim_{\delta r_i^a \to 0} \frac{q-1}{\delta r_i^a} = \sum_{j=1}^{n} \sum_{\alpha} \frac{\partial \varphi_{\alpha}(r_j)}{\partial r_i^a} \overline{D}_{\alpha}(j)$$

ja que els termes successius tenen com a mínim un factor $\left(\delta\vec{r}_j\right)$, que n'anul·len tota possible contribució.

E.2. Càlcul de $\frac{\nabla_i^a \Psi_A}{\Psi_A}$

$$\frac{\nabla_i^a \Psi_A}{\Psi_A} = \sum_{j=1}^{n} \sum_{\alpha} \frac{\partial \varphi_\alpha(r_j')}{\partial r_i^a} \overline{D}_\alpha(j) = \sum_{j=1}^{n} \sum_{\alpha} \frac{\partial \varphi_\alpha(r_j')}{\partial r'^b_j} \overline{D}_\alpha(j) \frac{\partial r'^b_j}{\partial r_i^a}$$

Calculem per separat les derivades segons que sigui $j=i$ o $j\neq i$.

Cas $j\neq i$.

$$\frac{\partial r'^b_j}{\partial r_i^a} = \lambda \sum_{k\neq j} \left(\eta'(r_{ij}) \frac{\partial r_{jk}}{\partial r_i^a} r_{jk}^b + \eta(r_{ij}) \frac{\partial r_{jk}^b}{\partial r_i^a} \right) = -\lambda \left(\eta'(r_{ij}) \frac{r_{ij}^a r_{ij}^b}{r_{ij}} + \eta(r_{ij}) \delta_{ab} \right)$$

ja que:

$$\frac{\partial r_{ij}}{\partial r_i^a} = \frac{r_{ij}^a}{r_{ij}} \; ; \quad \frac{\partial r_{ij}^b}{\partial r_i^a} = \delta_{ab}$$

Cas $j=i$.

$$\frac{\partial r'^b_i}{\partial r_i^a} = \delta_{ab} + \frac{\partial}{\partial r_i^a} \left(\lambda \sum_{k\neq i} \eta(r_{ik}) r_{ik}^b \right) = \delta_{ab} + \lambda \sum_{k\neq i} \left(\eta'(r_{ik}) \frac{\partial r_{ik}}{\partial r_i^a} r_{ik}^b + \eta(r_{ik}) \frac{\partial r_{ik}^b}{\partial r_i^a} \right) =$$

$$= \delta_{ab} + \lambda \sum_{k\neq i} \left(\eta'(r_{ik}) \frac{r_{ik}^a r_{ik}^b}{r_{ik}} + \eta(r_{ik}) \delta_{ab} \right)$$

Definim les quantitats:

$$T_{ij}^{ab} = -\lambda \left(\eta'(r_{ij}) \frac{r_{ij}^a r_{ij}^b}{r_{ij}} + \eta(r_{ij}) \delta_{ab} \right)$$

$$T_{ii}^{ab} = \delta_{ab} + \lambda \sum_{k\neq i} \left(\eta'(r_{ik}) \frac{r_{ik}^a r_{ik}^b}{r_{ik}} + \eta(r_{ik}) \delta_{ab} \right)$$

$$H_b^{jj} = \frac{\partial \varphi_\alpha(r'_j)}{\partial r'^b_j} \overline{D}_\alpha(j)$$

de manera que obtenim:

$$\frac{\nabla_i^a \Psi_a}{\Psi_a} = \sum_{j=1}^{n} \sum_{\alpha} \frac{\partial \varphi_\alpha(r_j')}{\partial r'^b_j} \overline{D}_\alpha(j) T_{ij}^{ab} = \sum_{j=1}^{n} H_b^{jj} T_{ij}^{ab}$$

Expressió que ens dóna directament el doble de la força que sent la partícula i provinent d'aquesta part de la funció d'ona.

E.3. Càlcul de $\nabla_i^a\left(\frac{\nabla_i^a\Psi_A}{\Psi_A}\right)$

Amb els resultats anteriors desenrotllem aquest terme. L’expressió es dividirà en tres sumants, als que s’anomenarà **(a)**, **(b)** i **(c)**, i que per la seva dificultat es tractaran per separat. Definint les quantitats adients es pot arribar a una expressió molt compacta i pràctica per a la seva implementació en un programa.

En el que segueix s’usarà la següent notació:

* $\nabla_j^{'a}$ indica derivada respecte a la variable $r_j^{'a}$

* ∇_j^{a} indica derivada respecte a la variable r_j^{a}

* el conveni d’Einstein, sobreentenent les sumes quan hi ha índexs repetits

$$\nabla_i^a\left(\frac{\nabla_i^a\Psi_a}{\Psi_a}\right)=\nabla_i^a\left(\sum_{j=1}^{n}H_b^{jj}T_{ij}^{ab}\right)=\nabla_i^a\left(\sum_{j=1}^{n}\nabla_j^{'b}\varphi_\alpha\left(r_j^{'}\right)\overline{D}_\alpha(j)T_{ij}^{ab}\right)=$$

que podem separar en els tres termes:

(a) $$=\sum_{j=1}^{n}\nabla_i^a\left(\nabla_j^{'b}\varphi_\alpha\left(r_j^{'}\right)\overline{D}_\alpha(j)T_{ij}^{ab}\right)+$$

(b) $$+\sum_{j=1}^{n}\nabla_j^{'b}\varphi_\alpha\left(r_j^{'}\right)\nabla_i^a\overline{D}_\alpha(j)T_{ij}^{ab}+$$

(c) $$+\sum_{j=1}^{n}\nabla_j^{'b}\varphi_\alpha\left(r_j^{'}\right)\overline{D}_\alpha(j)\nabla_i^a T_{ij}^{ab}$$

Càlcul d’**(a)**.

$$\nabla_i^a=\frac{\partial}{\partial r_i^a}=\frac{\partial}{\partial r_k^{'c}}\frac{\partial r_k^{'c}}{\partial r_i^a}=T_{ik}^{ac}\nabla_k^{'c}$$

$$\sum_j\nabla_i^a\left(\nabla_j^{'b}\varphi_\alpha\left(r_j^{'}\right)\right)\overline{D}_\alpha(j)T_{ij}^{ab}=\sum_j\nabla_k^{'c}\nabla_j^{'b}\varphi_\alpha\left(r_j^{'}\right)\overline{D}_\alpha(j)T_{ik}^{ac}T_{ij}^{ab}=$$

$$=\sum_j\delta_{jk}k_c^\alpha k_b^\alpha\varphi_\alpha\left(r_j^{'}\right)\overline{D}_\alpha(j)T_{ik}^{ac}T_{ij}^{ab}=\sum_j HD_{cb}^{jj}T_{ik}^{ac}T_{ij}^{ab}$$

havent definit les quantitats:

$$HD_{cb}^{jj}=\delta_{jk}k_c^\alpha k_b^\alpha\varphi_\alpha\left(r_j^{'}\right)\overline{D}_\alpha(j)T_{ik}^{ac}T_{ij}^{ab}$$

Càlcul de **(b)**

Trobem primer la derivada de $\overline{D}_{\alpha}(j)$

$$\nabla_i^a \overline{D}_{\alpha}(j) = -\sum_l T_{il}^{ac} \nabla_l^{'c} \varphi_{\beta}(r_l) \overline{D}_{\beta}(j) \overline{D}_{\alpha}(l) = -\sum_l T_{il}^{ac} H_c^{lj} \overline{D}_{\alpha}(l).$$

que substituint-la ens donarà:

$$\sum_j \nabla_j^{'b} \varphi_{\alpha}(r_j^{'}) \nabla_i^a \overline{D}_{\alpha}(j) T_{ij}^{ab} = -\sum_{jl} \nabla_j^{'b} \varphi_{\alpha}(r_j^{'}) T_{il}^{ac} \nabla_l^{'c} \varphi_{\beta}(r_l^{'}) \overline{D}_{\beta}(j) \overline{D}_{\alpha}(l) T_{ij}^{ab} =$$

$$= -\sum_{jl} \nabla_j^{'b} \varphi_{\alpha}(r_j^{'}) \overline{D}_{\alpha}(l) T_{ij}^{ab} \nabla_l^{'c} \varphi_{\beta}(r_l^{'}) \overline{D}_{\beta}(j) T_{il}^{ac} = -\sum_{jl} H_b^{jj} T_{ij}^{ab} H_c^{lj} T_{il}^{ac}$$

Càlcul de **(c)**

Ens cal trobar l'expressió de $\nabla_i^a T_{ij}^{ab}$, que està dins d'un sumatori sobre j. Distingirem entre els casos $i=j$, $i\neq j$. Farem us de les expressions per a T_{ij}^{ab} derivades anteriorment.

<u>Cas $j\neq i$.</u>

$$\nabla_i^a \left\{ -\lambda \left(\eta'(r_{ij}) \frac{r_{ij}^a r_{ij}^b}{r_{ij}} + \eta(r_{ij}) \delta_{ab} \right) \right\} =$$

aplicant que: $\dfrac{\partial r_{ij}}{\partial r_i^a} = \dfrac{r_{ij}^a}{r_{ij}}$ i $\dfrac{\partial r_{ij}^b}{\partial r_i^a} = \delta_{ab}$, i simplificant s'obtenen les següents expressions:

per a $b\neq a$:

$$\nabla_i^a T_{ij}^{ab} = -\lambda \left(\eta''(r_{ij}) \frac{(r_{ij}^a)^2 r_{ij}^b}{(r_{ij})^2} + \eta'(r_{ij}) \left[\frac{r_{ij}^b}{r_{ij}} - \frac{(r_{ij}^a)^2 r_{ij}^b}{(r_{ij})^3} \right] \right) \equiv EB_{ij}^{ab}$$

per a $b=a$:

$$\nabla_i^a T_{ij}^{aa} = -\lambda \left(\eta''(r_{ij}) \frac{(r_{ij}^a)^3}{(r_{ij})^2} + \eta'(r_{ij}) \left[3\frac{r_{ij}^a}{r_{ij}} - \frac{(r_{ij}^a)^3}{(r_{ij})^3} \right] \right) \equiv EB_{ij}^{aa}$$

<u>Cas $j=i$.</u>

$$\nabla_i^a \left(\delta_{ab} + \lambda \sum_{k\neq i} \left(\eta'(r_{ik}) \frac{r_{ik}^a r_{ik}^b}{r_{ik}} + \eta(r_{ik}) \delta_{ab} \right) \right) = \lambda \sum_{k\neq i} \nabla_i^a \left(\eta'(r_{ik}) \frac{r_{ik}^a r_{ik}^b}{r_{ik}} + \eta(r_{ik}) \delta_{ab} \right) =$$

$$= \lambda \sum_{k \neq i} \left(\eta''(r_{ik}) \frac{\partial r_{ik}}{\partial r_i^a} \frac{r_{ik}^a r_{ik}^b}{r_{ik}} + \eta'(r_{ik}) \frac{1}{r_{ik}^2} \left[\left[r_{ik}^b + r_{ik}^a \delta_{ab} \right] r_{ik} - \frac{\left(r_{ik}^a \right)^2 r_{ik}^b}{r_{ik}} \right] + \eta'(r_{ik}) \frac{\partial r_{ik}}{\partial r_i^a} \delta_{ab} \right) =$$

Separant com en el cas anterior tenim:

per a $b \neq a$:

$$\nabla_i^a T_{ii}^{ab} = \lambda \sum_{k \neq i} \left(\eta''(r_{ik}) \frac{\left(r_{ik}^a \right)^2 r_{ik}^b}{\left(r_{ik} \right)^2} + \eta'(r_{ik}) \left[\frac{r_{ik}^b}{r_{ik}} - \frac{\left(r_{ik}^a \right)^2 r_{ik}^b}{r_{ik} r_{ik}^3} \right] \right) \equiv EB_{ii}^{ab}$$

per a $b = a$:

$$\nabla_i^a T_{ii}^{aa} = \lambda \sum_{k \neq i} \left(\eta''(r_{ik}) \frac{\left(r_{ik}^a \right)^3}{\left(r_{ik} \right)^2} + \eta'(r_{ik}) \left[3 \frac{r_{ik}^a}{r_{ik}} - \frac{\left(r_{ik}^a \right)^3}{r_{ik}^3} \right] \right) \equiv EB_{ii}^{aa}$$

Amb aquests termes ja calculats finalment podrem escriure:

$$\sum_{j=1}^{n} \nabla_j^b \varphi_\alpha \left(r_j' \right) \overline{D}_\alpha (j) \nabla_i^a T_{ij}^{ab} = \sum_{j=1}^{n} H_b^{jj} \nabla_i^a T_{ij}^{ab} = \sum_{j=1}^{n} H_b^{jj} EB_{ij}^{ab}$$

Podem ara unir els resultats per als termes **(a)**, **(b)** i **(c)** i obtenir l'expressió buscada:

$$\nabla_i^a \left(\frac{\nabla_i^a \Psi_A}{\Psi_A} \right) = \sum_j HD_{cb}^{jj} T_{ij}^{ac} T_{ij}^{ab} - \sum_{jl} H_b^{jl} T_{ij}^{ab} H_c^{lj} T_{il}^{ac} + \sum_j H_b^{jj} EB_{ij}^{ab}$$

Aquesta expressió coincideix amb la donada per Kwon, Ceperley i Martin en l'apèndix B de l'article publicat en PRB 48, 12037(1993).

E.4. Resultat complet per a la contribució del backflow a l'energia cinètica.

$$E_{cin} = -\frac{\hbar^2}{2m} \sum_{ij} \left[HD_{cb}^{jj} T_{ij}^{ac} T_{ij}^{ab} - \sum_l H_b^{jl} T_{ij}^{ab} H_c^{lj} T_{il}^{ac} + H_b^{jj} EB_{ij}^{ab} + \frac{1}{2} H_b^{jj} T_{ij}^{ab} \right]$$

Contribució a l'energia dels nous termes.

Es calcula a continuació l'expressió per a les contribucions a l'energia cinètica del tercer terme de la fase:

$$\Omega = \sum_{i=1}^{N} Cq_a \left(W_i\right)_b^a Z_i^b \;\; = \sum_{\mathrm{i}=1}^{\mathrm{N}} q_a \left\{ C \sum_{k \neq i} \beta(r_{ik}) r_{ik}^a r_{ik}^b \sum_{l \neq i} \eta(r_{il}) r_{il}^b + C \sum_{k \neq i} \eta(r_{ik}) \sum_{l \neq i} \eta(r_{il}) r_{il}^a \right\}$$

La utilitat d'usar les noves coordenades $\tilde{r}_i^a = r_i^a + AZ_i^a + BT_i^a + C\Big(\left(W_i\right)_b^a Z_i^b - Y_i^a\Big)$ més amunt definides, és que, tal com s'ha fet a l'apèndix B, es poden construir unes quantitats a quatre índexs T_{ij}^{ab}, que no són més que les derivades $\dfrac{\partial \tilde{r}_j^b}{\partial r_i^a}$. Recordem que l'energia cinètica és un terme de la forma: $\dfrac{1}{4} F_i^a\left(\vec{R}\right) F_i^a\left(\vec{R}\right) + \nabla_i^a \left(\dfrac{\nabla_i^a \Psi}{\Psi} \right)$, i que es pot escriure:

$$\frac{\nabla_i^a \Psi_A}{\Psi_A} = \sum_{j=1}^{n} \sum_{\alpha} \frac{\partial \varphi_\alpha\left(r_j'\right)}{\partial \tilde{r}_j^b} \overline{D}_\alpha(j) \frac{\partial \tilde{r}_j^b}{\partial r_i^a} \equiv \sum_{j=1}^{n} H_b^{jj} T_{ij}^{ab}$$

D'aquesta forma en canviar la fase únicament s'han de tornar a calcular les quantitats T_{ij}^{ab} i les seves derivades, i afegir els nous termes als anteriorment calculats. Això fa dels nous càlculs analítics un procés més sistematitzat i a l'hora en simplifica enormement la programació, ja que només cal anar a canviar les definicions d'aquests tensors.

E.5. Contribucions del sumant $C \sum_{k \neq j} \eta\left(r_{jk}\right) \sum_{l \neq j} \eta\left(r_{jk}\right) \vec{r}_{jl}$

En aquest cas:

$$T_{ij}^{ac} = \frac{\partial \tilde{r}_j^c}{\partial r_i^a} = \frac{\partial}{\partial r_i^a} \left(\sum_{k \neq j} \eta\left(r_{jk}\right) \sum_{l \neq j} \eta\left(r_{jl}\right) r_{jl}^c \right) =$$

$$=\sum_{k\neq j}\eta'(r_{jk})\frac{\partial r_{jk}}{\partial r_i^a}\cdot\sum_{l\neq j}\eta(r_{jl})r_{jl}^c+\sum_{k\neq j}\eta(r_{jk})\cdot\sum_{l\neq j}\left(\eta'(r_{jl})\frac{\partial r_{jl}}{\partial r_i^a}r_{jl}^c+\eta(r_{jl})\frac{\partial r_{jl}^c}{\partial r_i^a}\right)$$

on les derivades parcials són:

$$\frac{\partial r_{jk}}{\partial r_i^a}=\frac{r_{jk}^a}{r_{jk}}\delta_{ji}-\frac{r_{jk}^a}{r_{jk}}\delta_{ki}\qquad\frac{\partial r_{jl}^c}{\partial r_i^a}=\delta_{ac}\delta_{ji}-\delta_{ac}\delta_{li}$$

i s'obté l'expressió general:

$$T_{ij}^{ac}=\sum_{k\neq j}\eta'(r_{jk})(\delta_{ij}-\delta_{ki})\frac{r_{jk}^a}{r_{jk}}\cdot\sum_{l\neq j}\eta(r_{jl})r_{jl}^c+$$

$$+\sum_{k\neq j}\eta(r_{jk})\cdot\sum_{l\neq j}\left(\eta'(r_{jl})\frac{r_{jl}^a r_{jl}^c}{r_{jl}}(\delta_{ji}-\delta_{li})+\eta(r_{jl})\delta_{ac}(\delta_{ji}-\delta_{li})\right)$$

En el càlcul numèric resulta pràctic distingir entre els quatre possibles casos segons que els índexs siguin iguals o diferents:

Cas $\boxed{\begin{matrix}a\neq c\\ i\neq j\end{matrix}}$

$$T_{ij}^{ac}=-\eta'(r_{ji})\frac{r_{ji}^a}{r_{ji}}\cdot\sum_{l\neq j}\eta(r_{jl})r_{jl}^c+\sum_{k\neq j}\eta(r_{jk})\left(-\eta'(r_{ji})\frac{r_{ji}^a r_{ji}^c}{r_{ji}}\right)$$

$$T_{ij}^{ac}=\eta'(r_{ji})\frac{r_{ij}^a}{r_{ji}}\cdot\sum_{l\neq j}\eta(r_{jl})r_{jl}^c-\eta'(r_{ji})\frac{r_{ji}^a r_{ji}^c}{r_{ji}}\sum_{k\neq j}\eta(r_{jk})$$

Cas $\boxed{\begin{matrix}a=c\\ i\neq j\end{matrix}}$

$$T_{ij}^{aa}=-\eta'(r_{ji})\frac{r_{ji}^a}{r_{ji}}\cdot\sum_{l\neq j}\eta(r_{jl})r_{jl}^a+\sum_{k\neq j}\eta(r_{jk})\left(-\eta'(r_{ji})\frac{r_{ji}^a r_{ji}^a}{r_{ji}}-\eta(r_{ji})\right)$$

$$T_{ij}^{aa}=\eta'(r_{ji})\frac{r_{ij}^a}{r_{ji}}\cdot\sum_{l\neq j}\eta(r_{jl})r_{jl}^a-\left(\eta'(r_{ji})\frac{r_{ji}^a r_{ji}^a}{r_{ji}}+\eta(r_{ji})\right)\sum_{k\neq j}\eta(r_{jk})$$

Cas $\boxed{\begin{matrix}a\neq c\\ i=j\end{matrix}}$

$$T_{ii}^{ac}=\sum_{k\neq i}\eta'(r_{ik})\frac{r_{ik}^a}{r_{ik}}\cdot\sum_{l\neq i}\eta(r_{il})r_{il}^c+\sum_{k\neq i}\eta(r_{ik})\cdot\sum_{l\neq i}\eta'(r_{il})\frac{r_{il}^a r_{il}^c}{r_{il}}$$

Cas $\boxed{\begin{matrix}a=c\\ i=j\end{matrix}}$

$$T_{ii}^{aa}=\sum_{k\neq i}\eta'(r_{ik})\frac{r_{ik}^{a}}{r_{ik}}\cdot\sum_{l\neq i}\eta(r_{il})r_{il}^{a}+\sum_{k\neq i}\eta(r_{ik})\cdot\sum_{l\neq i}\left(\eta'(r_{il})\frac{r_{il}^{a}r_{il}^{a}}{r_{il}}+\eta(r_{il})\right)$$

Un cop calculats aquests tensors se'n calculen les seves derivades. Com abans se n'obté primer una derivada absolutament general i després es concreta en cadascun dels quatre casos possibles:

$$\nabla_i^a T_{ij}^{ac}=\frac{\partial}{\partial r_i^a}T_{ij}^{ac}=$$

$$=\sum_{k\neq j}\left[\eta''(r_{jk})\frac{\partial r_{jk}}{\partial r_i^a}\frac{r_{jk}^a}{r_{jk}}\left(\delta_{ij}-\delta_{ki}\right)+\eta'(r_{jk})\frac{\partial}{\partial r_i^a}\left(\frac{r_{jk}^a}{r_{jk}}\right)\left(\delta_{ij}-\delta_{ki}\right)\right]\cdot\sum_{l\neq j}\eta(r_{jl})r_{jl}^c+$$

$$+\sum_{k\neq j}\eta'(r_{jk})\frac{r_{jk}^a}{r_{jk}}\left(\delta_{ij}-\delta_{ki}\right)\cdot\sum_{l\neq j}\left[\eta'(r_{jl})\frac{\partial r_{jl}}{\partial r_i^a}r_{jl}^c+\eta(r_{jl})\frac{\partial r_{jl}^c}{\partial r_i^a}\right]+$$

$$+\sum_{k\neq j}\eta'(r_{jk})\frac{\partial r_{jk}}{\partial r_i^a}\cdot\sum_{l\neq j}\left[\eta'(r_{jl})\frac{r_{jl}^a r_{jl}^c}{r_{jl}}+\eta(r_{jl})\delta_{ac}\right]\left(\delta_{ji}-\delta_{li}\right)+$$

$$+\sum_{k\neq j}\eta(r_{jk})\cdot\sum_{l\neq j}\left[\eta''(r_{jl})\frac{\partial r_{jl}}{\partial r_i^a}\frac{r_{jl}^a r_{jl}^c}{r_{jl}}+\eta'(r_{jl})\frac{\partial}{\partial r_i^a}\left(\frac{r_{jl}^a r_{jl}^c}{r_{jl}}\right)+\eta'(r_{jl})\frac{\partial r_{jl}}{\partial r_i^a}\delta_{ac}\right]\left(\delta_{ji}-\delta_{li}\right)$$

Apliquem les següents identitats:

$$\frac{\partial r_{jk}}{\partial r_i^a}=\frac{r_{jk}^a}{r_{jk}}\left(\delta_{ji}-\delta_{ki}\right)\qquad\frac{\partial r_{jl}^c}{\partial r_i^a}=\delta_{ac}\left(\delta_{ji}-\delta_{ki}\right)$$

$$\frac{\partial}{\partial r_i^a}\left(\frac{r_{jk}^a}{r_{jk}}\right)=\left(\frac{1}{r_{jk}}-\frac{\left(r_{jk}^a\right)^2}{r_{jk}^3}\right)\left(\delta_{ji}-\delta_{ki}\right)$$

$$\frac{\partial}{\partial r_i^a}\left(\frac{r_{jl}^a r_{jl}^c}{r_{jl}}\right)=\left(\frac{r_{jl}^c+r_{jl}^a\delta_{ac}}{r_{jl}}-\frac{\left(r_{jl}^a\right)^2 r_{jl}^c}{r_{jk}^3}\right)\left(\delta_{ji}-\delta_{ki}\right)$$

i així l'expressió general resulta:

$$\nabla_i^a T_{ij}^{ac}=\sum_{k\neq j}\left[\eta''(r_{jk})\left(\frac{r_{jk}^a}{r_{jk}}\right)^2\left(\delta_{ij}+\delta_{ki}\right)+\eta'(r_{jk})\left(\frac{1}{r_{jk}}-\frac{r_{jk}^a}{r_{jk}^3}\right)\left(\delta_{ij}+\delta_{ki}\right)\right]\cdot\sum_{l\neq j}\eta(r_{jl})r_{jl}^c+$$

$$+2\cdot\sum_{k\neq j}\eta'\left(r_{jk}\right)\frac{r_{jk}^{a}}{r_{jk}}\left(\delta_{ij}-\delta_{ki}\right)\cdot\sum_{l\neq j}\left[\eta'\left(r_{jl}\right)\frac{r_{jl}^{a}r_{jl}^{c}}{r_{jl}^{c}}+\eta\left(r_{jl}\right)\delta_{ac}\right]\left(\delta_{ij}-\delta_{ki}\right)+$$

$$+\sum_{k\neq j}\eta\left(r_{jk}\right)\cdot\sum_{l\neq j}\left[\eta''\left(r_{jl}\right)\frac{\left(r_{jl}^{a}\right)^{2}r_{jl}^{c}}{r_{jl}^{2}}+\eta'\left(r_{jl}\right)\left(\frac{r_{jl}^{c}+\delta_{ac}r_{jl}^{a}}{r_{jl}}-\frac{\left(r_{jl}^{a}\right)^{2}r_{jl}^{c}}{r_{jl}^{3}}\right)+\eta'\left(r_{jl}\right)\frac{r_{jl}^{a}}{r_{jl}}\delta_{ac}\right]\left(\delta_{ij}+\delta_{li}\right)$$

Cas $\boxed{\begin{matrix}a\neq c\\ i\neq j\end{matrix}}$

$$\nabla_{i}^{a}T_{ij}^{ac}=\left[\eta''\left(r_{ji}\right)\left(\frac{r_{ji}^{a}}{r_{ji}}\right)^{2}+\eta'\left(r_{ji}\right)\left(\frac{1}{r_{ji}}-\frac{r_{ji}^{a}}{r_{ji}^{3}}\right)\right]\cdot\sum_{l\neq j}\eta\left(r_{jl}\right)r_{jl}^{c}-2\eta'\left(r_{ji}\right)^{2}\frac{\left(r_{ji}^{a}\right)^{2}r_{ji}^{c}}{r_{ij}^{2}}-$$

$$-\sum_{k\neq j}\eta\left(r_{jk}\right)\cdot\left[\eta''\left(r_{ij}\right)\frac{\left(r_{ij}^{a}\right)^{2}r_{ij}^{c}}{r_{ij}^{2}}+\eta'\left(r_{jl}\right)\left(\frac{r_{ij}^{c}}{r_{ij}}-\frac{\left(r_{ij}^{a}\right)^{2}r_{ij}^{c}}{r_{ij}^{3}}\right)\right]\equiv EB_{ij}^{ac}$$

Cas $\boxed{\begin{matrix}a=c\\ i\neq j\end{matrix}}$

$$\nabla_{i}^{a}T_{ij}^{aa}=\left[\eta''\left(r_{ji}\right)\left(\frac{r_{ji}^{a}}{r_{ji}}\right)^{2}+\eta'\left(r_{ji}\right)\left(\frac{1}{r_{ji}}-\frac{\left(r_{ji}^{a}\right)^{2}}{r_{ji}^{3}}\right)\right]\cdot\sum_{l\neq j}\eta\left(r_{jl}\right)r_{jl}^{a}-$$

$$-2\left[\eta'\left(r_{ji}\right)\frac{\left(r_{ji}^{a}\right)^{2}}{r_{ij}}+\eta\left(r_{ji}\right)\right]\eta'\left(r_{ji}\right)\frac{r_{ji}^{a}}{r_{ij}}-$$

$$-\sum_{k\neq j}\eta\left(r_{jk}\right)\cdot\left[\eta''\left(r_{ij}\right)\frac{\left(r_{ij}^{a}\right)^{3}}{r_{ij}^{2}}+\eta'\left(r_{ij}\right)\left(3\frac{r_{ij}^{a}}{r_{ij}}-\frac{\left(r_{ij}^{a}\right)^{3}}{r_{ij}^{3}}\right)\right]\equiv EB_{ij}^{aa}$$

Cas $\boxed{\begin{matrix}a\neq c\\ i=j\end{matrix}}$

$$\nabla_{i}^{a}T_{ii}^{ac}=\sum_{k\neq i}\left[\eta''\left(r_{ik}\right)\left(\frac{r_{ik}^{a}}{r_{ik}}\right)^{2}+\eta'\left(r_{ik}\right)\left(\frac{1}{r_{ik}}-\frac{\left(r_{ik}^{a}\right)^{2}}{r_{ik}^{3}}\right)\right]\cdot\sum_{l\neq i}\eta\left(r_{il}\right)r_{il}^{c}-$$

$$+2\cdot\sum_{k\neq i}\eta'\left(r_{ik}\right)\frac{r_{ik}^{a}}{r_{ik}}\cdot\sum_{l\neq i}\eta'\left(r_{il}\right)\frac{r_{il}^{a}r_{il}^{c}}{r_{il}^{c}}+$$

$$-\sum_{k\neq i}\eta(r_{ki})\cdot\sum_{l\neq i}\left[\eta''(r_{il})\frac{\left(r_{il}^{a}\right)^{2}r_{il}^{c}}{r_{il}^{2}}+\eta'(r_{ll})\left(\frac{r_{il}^{c}}{r_{il}}-\frac{\left(r_{il}^{a}\right)^{2}r_{il}^{c}}{r_{il}^{3}}\right)\right]\equiv EB_{ii}^{ac}$$

Cas $\boxed{\begin{array}{l}a=c\\ i=j\end{array}}$

$$\nabla_{i}^{a}T_{ii}^{aa}=\sum_{k\neq i}\left[\eta''(r_{ik})\left(\frac{r_{ik}^{a}}{r_{ik}}\right)^{2}+\eta'(r_{ik})\left(\frac{1}{r_{ik}}-\frac{\left(r_{ik}^{a}\right)^{2}}{r_{ik}^{3}}\right)\right]\cdot\sum_{l\neq i}\eta(r_{il})r_{il}^{a}+$$

$$+2\sum_{k\neq i}\eta'(r_{ik})\frac{r_{ik}^{a}}{r_{ik}}\cdot\sum_{l\neq i}\left[\eta'(r_{il})\frac{\left(r_{il}^{a}\right)^{2}}{r_{il}}+\eta(r_{il})\right]+$$

$$+\sum_{k\neq i}\eta(r_{ki})\cdot\sum_{l\neq i}\left[\eta''(r_{il})\frac{\left(r_{il}^{a}\right)^{3}}{r_{il}^{2}}+\eta'(r_{il})\left(3\frac{r_{il}^{a}}{r_{il}}-\frac{\left(r_{il}^{a}\right)^{3}}{r_{il}^{3}}\right)\right]\equiv EB_{ii}^{aa}$$

E.6. Contribucions del sumant $C\sum_{k\neq j}\beta(r_{jk})r_{jk}^{a}r_{jk}^{b}\sum_{l\neq j}\eta(r_{jl})r_{jl}^{b}$

Les noves coordenades són ara:

$$r_{j}^{*c}=\sum_{k\neq j}\beta(r_{jk})r_{jk}^{a}r_{jk}^{b}\sum_{l\neq j}\eta(r_{jl})r_{jl}^{b}$$

I per tant:

$$T_{ij}^{ac}=\frac{\partial r_{j}^{*c}}{\partial r_{i}^{a}}=\frac{\partial}{\partial r_{i}^{a}}\left(\sum_{k\neq j}\beta(r_{jk})r_{jk}^{a}r_{jk}^{b}\sum_{l\neq j}\eta(r_{jl})r_{jl}^{b}\right)=$$

$$=\sum_{k\neq j}\left[\beta'(r_{jk})\frac{\partial r_{jk}}{\partial r_{i}^{a}}r_{jk}^{c}r_{jk}^{b}\beta(r_{jk})\frac{\partial}{\partial r_{i}^{a}}\left(r_{jk}^{c}r_{jk}^{b}\right)\right]\cdot\sum_{l\neq j}\eta(r_{jl})r_{jl}^{b}+$$

$$+\sum_{k\neq j}\beta(r_{jk})r_{jk}^{c}r_{jk}^{b}\cdot\sum_{l\neq j}\left[\eta'(r_{jl})\frac{\partial r_{jl}}{\partial r_{i}^{a}}r_{jl}^{b}+\eta(r_{jl})\frac{\partial r_{jl}^{b}}{\partial r_{i}^{a}}\right]$$

Com en el cas anterior es particularitza per als quatre diferents casos. Deixant a banda els passos intermitjos s'obté:

Cas $\boxed{\begin{array}{l}a\neq c\\ i\neq j\end{array}}$

$$T_{ij}^{ac}=\left[\beta'(r_{ji})\frac{r_{jk}^a r_{jk}^b r_{jk}^c}{r_{jk}}+\beta(r_{ij})\delta_{ab}r_{ji}^c\right]\cdot\sum_{l\neq j}\eta(r_{jl})r_{jl}^b-$$

$$+\left[\eta'(r_{ji})\frac{r_{ij}^a r_{ij}^b}{r_{ij}}+\eta(r_{ij})\delta_{ab}\right]\cdot\sum_{k\neq j}\beta(r_{jk})r_{jk}^c r_{jk}^b$$

Cas $\boxed{\begin{matrix}a=c\\ i\neq j\end{matrix}}$

$$T_{ij}^{aa}=\left[\beta'(r_{ji})\frac{r_{ij}^a r_{ij}^a r_{ij}^b}{r_{ij}}+\beta(r_{ij})\left(r_{ij}^b+r_{ij}^a\delta_{ab}\right)\right]\cdot\sum_{l\neq j}\eta(r_{jl})r_{jl}^b-$$

$$-\left[\eta'(r_{ji})\frac{r_{ij}^a r_{ij}^b}{r_{ij}}+\eta(r_{ij})\delta_{ab}\right]\cdot\sum_{k\neq j}\beta(r_{jk})r_{jk}^a r_{jk}^b$$

Cas $\boxed{\begin{matrix}a\neq c\\ i=j\end{matrix}}$

$$T_{ii}^{ac}=\sum_{k\neq i}\left[\beta'(r_{ik})\frac{r_{ik}^a r_{ik}^b r_{ik}^c}{r_{jk}}+\beta(r_{ik})r_{ik}^c\delta_{ab}\right]\cdot\sum_{l\neq i}\eta(r_{il})r_{il}^b+$$

$$+\sum_{k\neq i}\beta(r_{ik})r_{ik}^c r_{ik}^b\cdot\sum_{l\neq i}\left[\eta'(r_{il})\frac{r_{il}^a r_{il}^b}{r_{il}}+\eta(r_{il})\delta_{ab}\right]$$

Cas $\boxed{\begin{matrix}a=c\\ i=j\end{matrix}}$

$$T_{ii}^{aa}=\sum_{k\neq i}\left[\beta'(r_{ik})\frac{r_{ik}^a r_{ik}^a r_{ik}^b}{r_{jk}}+\beta(r_{ik})\left(r_{ik}^b+r_{ik}^a\delta_{ab}\right)\right]\cdot\sum_{l\neq i}\eta(r_{il})r_{il}^b+$$

$$+\sum_{k\neq i}\beta(r_{ik})r_{ik}^a r_{ik}^b\cdot\sum_{l\neq i}\left[\eta'(r_{il})\frac{r_{il}^a r_{il}^b}{r_{il}}+\eta(r_{il})\delta_{ab}\right]$$

Calcular el laplacià comporta un càlcul més llarg. Per a obtenir l’expressió general és necessari aplicar les identitats següents (que fàcilment es poden obtenir):

$$\frac{\partial r_{jk}}{\partial r_i^a}=\frac{r_{jk}^a}{r_{jk}}\left(\delta_{ji}-\delta_{ki}\right)\qquad\frac{\partial r_{jl}^c}{\partial r_i^a}=\delta_{ac}\left(\delta_{ji}-\delta_{ki}\right)$$

$$\frac{\partial}{\partial r_i^a}\left(r_{jk}^c r_{jk}^b\right)=\left(\delta_{ac}r_{jk}^b+\delta_{ab}r_{jk}^c\right)\left(\delta_{ji}-\delta_{ki}\right)$$

$$\frac{\partial}{\partial r_i^a}\left(\frac{r_{jk}^a r_{jk}^b r_{jk}^c}{r_{jk}}\right)=\left(\frac{\left(r_{jk}^b+\delta_{ab}r_{jk}^a\right)r_{jk}^c+\delta_{ac}r_{jk}^a r_{jk}^b}{r_{jk}}-\frac{\left(r_{jk}^a\right)^2 r_{jk}^b r_{jk}^c}{r_{jk}^3}\right)\left(\delta_{ji}-\delta_{ki}\right)$$

$$\frac{\partial}{\partial r_i^a}\left(\delta_{ac}r_{jk}^b+\delta_{ab}r_{jk}^c\right)=2\delta_{ab}\delta_{ac}\left(\delta_{ji}-\delta_{ki}\right)$$

$$\frac{\partial}{\partial r_i^a}\left(\frac{r_{jl}^a r_{jl}^b}{r_{jk}}\right)=\left(\frac{r_{jl}^b+\delta_{ab}r_{jl}^a}{r_{jl}}-\frac{\left(r_{jl}^a\right)^2 r_{jl}^b}{r_{jl}^3}\right)\left(\delta_{ji}-\delta_{ki}\right)$$

Que un cop aplicades i simplificat el resultat dóna:

$$\frac{\partial}{\partial r_i^a}T_{ij}^{ac}=\sum_{k\neq j}\left\{\beta''\left(r_{jk}\right)\frac{\left(r_{jk}^a\right)^2 r_{jk}^b r_{jk}^c}{r_{jk}}+\beta'\left(r_{jk}\right)\left(\frac{\left(r_{ik}^b+\delta_{ab}r_{jk}^a\right)r_{jk}^c+r_{jk}^a r_{jk}^b}{r_{jk}}-\frac{\left(r_{jk}^a\right)^2 r_{jk}^b r_{jk}^c}{r_{jk}^3}\right)+\right.$$

$$\left.+\beta'\left(r_{jk}\right)\frac{r_{jk}^a}{r_{jk}}\left(\delta_{ac}r_{jk}^b+\delta_{ab}r_{jk}^c\right)+2\beta\left(r_{jk}\right)\delta_{ab}\delta_{ac}\right\}\left(\delta_{ji}+\delta_{ki}\right)\cdot\sum_{l\neq j}\eta\left(r_{jl}\right)r_{jl}^b+$$

$$+\sum_{k\neq j}\left[\beta'\left(r_{jk}\right)\frac{r_{jk}^a r_{jk}^b r_{jk}^c}{r_{jk}}+\beta\left(r_{jk}\right)\left(\delta_{ac}r_{jk}^b+r_{jk}^c\delta_{ab}\right)\right]\left(\delta_{ji}-\delta_{ki}\right)\cdot 2\sum_{l\neq i}\left[\eta'\left(r_{jl}\right)\frac{r_{jl}^a r_{jl}^b}{r_{jl}}+\eta\left(r_{jl}\right)\delta_{ab}\right]\left(\delta_{ji}-\delta_{li}\right)+$$

$$+\sum_{k\neq j}\beta\left(r_{jk}\right)r_{jk}^b r_{jk}^c\cdot\sum_{l\neq j}\left[\eta''\left(r_{jl}\right)\frac{\left(r_{jl}^a\right)^2 r_{jl}^b}{r_{jl}^2}+\eta'\left(r_{jl}\right)\left(\frac{r_{jl}^b+\delta_{ab}r_{jl}^a}{r_{jl}}-\frac{\left(r_{jl}^a\right)^2 r_{jl}^b}{r_{jl}^3}+\frac{r_{jl}^a}{r_{jl}}\delta_{ab}\right)\right]\left(\delta_{ji}+\delta_{li}\right)$$

I les expressions particulars per cadascun dels quatre casos són:

Cas $\boxed{\begin{array}{l} a\neq c \\ i\neq j\end{array}}$

$$EB_{ij}^{ac}\equiv\left[\beta''\left(r_{ij}\right)\frac{\left(r_{ij}^a\right)^2 r_{ij}^b r_{ij}^c}{r_{ij}}+\beta'\left(r_{ij}\right)\left(\frac{r_{ij}^b r_{ij}^c+2\delta_{ab}r_{ij}^a r_{ij}^c}{r_{ij}}-\frac{\left(r_{ij}^a\right)^2 r_{ij}^b r_{ij}^c}{r_{ij}^3}\right)\right]\sum_{l\neq j}\eta\left(r_{jl}\right)r_{jl}^b-$$

$$-2\left[\beta'\left(r_{ij}\right)\frac{r_{ij}^a r_{ij}^b r_{ij}^c}{r_{ij}}+\beta\left(r_{ij}\right)r_{ij}^c\delta_{ab}\right]\cdot\left[\eta'\left(r_{ij}\right)\frac{r_{ij}^a r_{ij}^b}{r_{ij}}+\eta\left(r_{ij}\right)\delta_{ab}\right]-$$

$$+\sum_{k\neq j}\beta\left(r_{jk}\right)r_{kj}^b r_{kj}^c\cdot\left[\eta''\left(r_{ij}\right)\frac{\left(r_{ij}^a\right)^2 r_{ij}^b}{r_{ij}^2}+\eta'\left(r_{ij}\right)\left(\frac{r_{ij}^b+2\delta_{ab}r_{ij}^a}{r_{ij}}-\frac{\left(r_{ij}^a\right)^2 r_{ij}^b}{r_{ij}^3}\right)\right]$$

Cas $\boxed{\begin{array}{l} a = c \\ i \neq j \end{array}}$

$$EB_{ij}^{aa} \equiv \left[\beta''(r_{ij}) \frac{\left(r_{ij}^a\right)^3 r_{ij}^b}{r_{ij}} + \beta'(r_{ij}) \left(\frac{3r_{ij}^a r_{ij}^b + 2\delta_{ab}\left(r_{ij}^a\right)^2}{r_{ij}} - \frac{\left(r_{ij}^a\right)^3 r_{ij}^b}{r_{ij}^3} \right) + 2\beta(r_{ij})\delta_{ab} \right] \sum_{l \neq j} \eta(r_{jl}) r_{jl}^b -$$

$$-2\left[\beta'(r_{ij}) \frac{\left(r_{ij}^a\right)^2 r_{ij}^b}{r_{ij}} + \beta(r_{ij})\left(r_{ij}^b + \delta_{ab} r_{ij}^a\right) \right] \cdot \left[\eta'(r_{ij}) \frac{r_{ij}^a r_{ij}^b}{r_{ij}} + \eta(r_{ij})\delta_{ab} \right] -$$

$$+\sum_{k \neq j} \beta(r_{jk}) r_{kj}^a r_{kj}^b \cdot \left[\eta''(r_{ij}) \frac{\left(r_{ij}^a\right)^2 r_{ij}^b}{r_{ij}^2} + \eta'(r_{ij}) \left(\frac{r_{ij}^b + 2\delta_{ab} r_{ij}^a}{r_{ij}} - \frac{\left(r_{ij}^a\right)^2 r_{ij}^b}{r_{ij}^3} \right) \right]$$

Cas $\boxed{\begin{array}{l} a \neq c \\ i = j \end{array}}$

$$EB_{ii}^{ac} \equiv \sum_{k \neq i} \left[\beta''(r_{ik}) \frac{\left(r_{ik}^a\right)^2 r_{ik}^b r_{ik}^c}{r_{ik}} + \beta'(r_{ik}) \left(\frac{r_{ik}^b r_{ik}^c + 2\delta_{ab} r_{ik}^a r_{ik}^c}{r_{ik}} - \frac{\left(r_{ik}^a\right)^2 r_{ik}^b r_{ik}^c}{r_{ik}^3} \right) \right] \sum_{l \neq k} \eta(r_{il}) r_{il}^b +$$

$$+2\sum_{k \neq i} \left[\beta'(r_{ik}) \frac{r_{ik}^a r_{ik}^b r_{ik}^c}{r_{ik}} + \beta(r_{ik}) r_{ik}^c \delta_{ab} \right] \cdot \sum_{l \neq i} \left[\eta'(r_{il}) \frac{r_{il}^a r_{il}^b}{r_{il}} + \eta(r_{il})\delta_{ab} \right] +$$

$$+\sum_{k \neq i} \beta(r_{ik}) r_{ik}^b r_{ik}^c \cdot \sum_{l \neq i} \left[\eta''(r_{il}) \frac{\left(r_{il}^a\right)^2 r_{il}^b}{r_{il}^2} + \eta'(r_{il}) \left(\frac{r_{il}^b + 2\delta_{ab} r_{il}^a}{r_{il}} - \frac{\left(r_{jl}^a\right)^2 r_{jl}^b}{r_{jl}^3} \right) \right]$$

Cas $\boxed{\begin{array}{l} a = c \\ i = j \end{array}}$

$$EB_{ii}^{aa} \equiv \sum_{k \neq i} \left[\beta''(r_{ik}) \frac{\left(r_{ik}^a\right)^3 r_{ik}^b}{r_{ik}^2} + \beta'(r_{ik}) \left(\frac{3r_{ik}^a r_{ik}^b + 2\delta_{ab}\left(r_{ik}^a\right)^2}{r_{ik}} - \frac{\left(r_{ik}^a\right)^3 r_{ik}^b}{r_{ik}^3} \right) + 2\beta(r_{ik})\delta_{ab} \right] \cdot \sum_{l \neq k} \eta(r_{il}) r_{il}^b +$$

$$+2\sum_{k \neq i} \left[\beta'(r_{ik}) \frac{\left(r_{ik}^a\right)^2 r_{ik}^b}{r_{ik}} + \beta(r_{ik})\left(r_{ik}^b + r_{ik}^a \delta_{ab}\right) \right] \cdot \sum_{l \neq i} \left[\eta'(r_{il}) \frac{r_{il}^a r_{il}^b}{r_{il}} + \eta(r_{il})\delta_{ab} \right] +$$

$$+\sum_{k \neq i} \beta(r_{ik}) r_{ik}^a r_{ik}^b \cdot \sum_{l \neq i} \left[\eta''(r_{il}) \frac{\left(r_{il}^a\right)^2 r_{il}^b}{r_{il}^2} + \eta'(r_{il}) \left(\frac{r_{il}^b + 2\delta_{ab} r_{il}^a}{r_{il}} - \frac{\left(r_{jl}^a\right)^2 r_{jl}^b}{r_{jl}^3} \right) \right]$$