

### 小体系计算

RPA计算

GW计算

①

倒介电函数  
 $\epsilon^{-1}(r, r')$

屏蔽库仑相互  
作用 $W(r, r')$

准粒子带隙修正

②

### 原始大体系计算

机器学习  
哈密顿量

波函数  
能带

①

### ② 相互作用核 ( $K_{kcv, k'c'v'}$ )计算

交换项贡献  
 $V_{kcv, k'c'v'}(K^x)$

直接项贡献  
 $W_{kcv, k'c'v'}(K^d)$

### ③ BSE计算

BSE哈密顿量

激子波函数  
 $A^S_{kcv}$

### 偏移大体系计算

机器学习  
哈密顿量

波函数  
能带

①

### ③ 有限差分计算

哈密顿量对  
原子坐标微分  
 $\langle \psi_{mk} | \partial_R H_0 | \psi_{nk} \rangle$

非绝热耦合  
 $d_{mnk}$

### ④ 激发态力计算

相互作用核对  
原子坐标微分  
 $\partial_R K_{kcv, k'c'v'}$

激发能对  
原子坐标微分  
 $\partial_R \Omega^S$

偏移  
原子