Систематический вывод функционала и псевдопотенциала Кельбга

Г. С. Демьянов[1,2] и П. Р. Левашов[1,2]
[1] Объединенный институт высоких температур РАН, Ижорская ул., 13, стр.2, Москва 125412, Россия
[2] Московский физико-технический институт (государственный университет), Институтский пер., 9, Долгопрудный 141701, Россия

E-mail: demyanov.gs@phystech.edu

Статья поступила в редакцию 2 декабря 2022 г.

Аннотация. В данной методической работе в высокотемпературном пределе систематически выведено выражение для матрицы плотности для системы частиц, взаимодействующих посредством кулоновского потенциала. Выкладки соответствуют оригинальной работе Кельбга [1], в которой решается уравнение Блоха в первом порядке теории возмущений. Особое внимание было уделено объяснению всех преобразований при выводе, чтобы упростить понимание этой нетривиальной теории. Решение Кельбга широко используется в моделировании методом Монте-Карло с интегралами по траекториям. https://doi.org/10.33849/2022106

1. ВВЕДЕНИЕ

В 1963 году [1] Кельбг вычислил матрицу плотности для кулоновской системы в первом порядке теории возмущений. Решение Кельбга является функцией, которая напоминает некоторый потенциал и является конечной на малых расстояниях. Эту функцию часто называют “потенциалом Кельбга” или “псевдопотенциалом Кельбга”; последний термин более адекватен, поскольку функция зависит и от расстояния, и от температуры. Тем не менее, решение Кельбга следует интерпретировать как некоторое выражение для двухчастичной матрицы плотности кулоновской системы при высоких температурах. В случае произвольного межчастичного потенциала разумно называть решение Кельбга функционалом Кельбга.

Псевдопотенциал Кельбга часто используется в расчетах методом Монте-Карло с интегралами по траекториям (МКИТ) [2–5]. Однако оригинальная статья Кельбга [1] содержит лишь очень краткий вывод. Таким образом, преобразования Кельбга довольно сложны для понимания. В этой работе приводится подробный систематический вывод псевдопотенциала Кельбга в диагональном и недиагональном случаях. Для проверки всех вычислений используется программа Mathematica [6].

2. ОСНОВНЫЕ ОБОЗНАЧЕНИЯ

Рассмотрим N частиц, взаимодействующих посредством парного потенциала $u_{ij}(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j)$, для которого существует преобразование Фурье. Гамильтониан системы $\hat{H}$ имеет вид:

$$\hat{H} = \hat{K} + \hat{V}, \quad \hat{K} = \sum_{i=1}^{N} \frac{\hat{\mathbf{p}}_i^2}{2m}, \quad \hat{\mathbf{p}}_i = -i\hbar\nabla_i, \tag{1}$$

$$\hat{V} = \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{N}\sum_{\substack{j=1\\ j\neq i}}^{N} u_{ij}(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j), \tag{2}$$

где $\hat{\mathbf{p}}_i$ — оператор импульса i-ой частицы, m — масса частиц, $\mathbf{r}_i$ — координата i-ой частицы. Введем также переменную для набора всех координат:

$$(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N) \equiv \mathbf{R}. \tag{3}$$

Стационарное уравнение Шрёдингера порождает собственную функцию $\Psi_\nu(\mathbf{R})$ с соответствующим значением энергии E_ν:

$$\hat{H}\Psi_\nu(\mathbf{R}) = E_\nu\Psi_\nu(\mathbf{R}), \tag{4}$$

$$\Psi_\nu(\mathbf{R}) \equiv \Psi_\nu(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N) = \langle \mathbf{R}|\Psi_\nu\rangle. \tag{5}$$

Здесь ν нумерует N-частичные состояния системы. Предполагается, что собственные функции $\Psi_\nu(\mathbf{R})$ ортонормальны и образуют полную систему.

Соединим систему с термостатом температуры T. Определим матрицу плотности или оператор плотности следующим образом:

$$\hat{\rho}(\beta) = \exp(-\beta\hat{H}) = \exp(-\beta\hat{K} - \beta\hat{V}), \tag{6}$$

где $\beta = 1/(k_B T)$ и k_B — постоянная Больцмана. Обратите внимание, что мы используем ненормированную матрицу плотности. Таким образом, статистическая сумма $Q(\beta)$ имеет вид:

$$Q(\beta) = \mathrm{Sp}\hat{\rho}(\beta). \tag{7}$$

В координатном представлении матрица плотности $\rho(\mathbf{R}, \mathbf{R}'; \beta)$ имеет вид:

$$\rho(\mathbf{R}, \mathbf{R}'; \beta) = \langle \mathbf{R}|\hat{\rho}(\beta)|\mathbf{R}'\rangle = \sum_\nu e^{-\beta E_\nu}\Psi_\nu^*(\mathbf{R})\Psi_\nu(\mathbf{R}'). \tag{8}$$

Здесь $\mathbf{R}'$ обозначает набор штрихованых координат $\mathbf{R}' = (\mathbf{r}_1', \mathbf{r}_2', \dots, \mathbf{r}_N')$ и $\Psi_\nu^*(\mathbf{R})$ является комплексным сопряжением $\Psi_\nu(\mathbf{R})$. В уравнении (8) суммирование производится по всем состояниям без симметризации или антисимметризации. Уравнение (7) в координатном представлении приобретает следующий вид:

$$Q(\beta) = \int d\mathbf{R}\rho(\mathbf{R}, \mathbf{R}; \beta), \quad d\mathbf{R} \equiv d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 \dots d\mathbf{r}_N. \tag{9}$$

Матрица плотности удовлетворяет уравнению Блоха (см. уравнение (2.53) в [7]):

$$\frac{d\hat{\rho}(\beta)}{d\beta} = -\hat{H}\hat{\rho}(\beta). \tag{10}$$

В дальнейших выводах мы часто будем использовать "соотношение полноты":

$$\hat{1} = \int d\mathbf{R}|\mathbf{R}\rangle\langle\mathbf{R}|. \tag{11}$$

Две сопряженные переменные $\mathbf{G} \equiv (\mathbf{g}_1, \mathbf{g}_2, \ldots, \mathbf{g}_N)$ и $\mathbf{R} \equiv (\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \ldots, \mathbf{r}_N)$ удовлетворяют следующим тождествам:

$$\langle\mathbf{R}|\mathbf{G}\rangle \equiv \langle\mathbf{r}_1, \ldots, \mathbf{r}_N|\mathbf{g}_1, \ldots, \mathbf{g}_N\rangle = \frac{e^{\frac{i}{\hbar}\mathbf{R}\cdot\mathbf{G}}}{(2\pi\hbar)^{3N/2}}, \tag{12}$$

$$\mathbf{R}\cdot\mathbf{G} \equiv \mathbf{r}_1\mathbf{g}_1 + \mathbf{r}_2\mathbf{g}_2 + \cdots + \mathbf{r}_N\mathbf{g}_N. \tag{13}$$

Далее будет использоваться вспомогательная координатная переменная $\mathbf{Q} = (\mathbf{q}_1, \ldots, \mathbf{q}_N)$, где $\mathbf{q}_i$ — координата i-ой частицы.

Действие оператора импульса $\hat{\mathbf{p}}_i$ на $|\mathbf{G}\rangle$ определяет переменную импульса $\mathbf{g}_i$:

$$\hat{\mathbf{p}}_i|\mathbf{G}\rangle = \mathbf{g}_i|\mathbf{G}\rangle. \tag{14}$$

Будет использовано и другое "соотношение полноты" для сопряженной (импульсной) переменной $\mathbf{G}$:

$$\hat{1} = \int \frac{d\mathbf{G}}{(2\pi\hbar)^{3N/2}}|\mathbf{G}\rangle\langle\mathbf{G}|. \tag{15}$$

3. ВЫВОД ФУНКЦИОНАЛА КЕЛЬБГА

Основная цель вывода — разделить кинетическую и потенциальную энергию в уравнении (6). Кельбг [1] вводит поправочную функцию ("Korrekturfunktion"), которая записывается в виде оператора $\hat{G}(\beta)$:

$$\exp(-\beta(\hat{K} + \hat{V})) = \exp(-\beta\hat{V})\exp(-\beta\hat{K})\hat{G}(\beta). \tag{16}$$

Соотношение Бейкера–Кэмпбелла–Хаусдорфа (БКХ) дает точную формулу для $\hat{G}(\beta)$ (см. уравнение (2.9) дополнения 2А в [8]):

$$\hat{G}(\beta) = \exp\Bigg(-\frac{1}{2}[\beta\hat{V}, \beta\hat{K}] + \\ + \frac{1}{12}([\beta\hat{V}, [\beta\hat{V}, \beta\hat{K}]] + [\beta\hat{K}, [\beta\hat{K}, \beta\hat{V}]]) + \ldots\Bigg), \tag{17}$$

где $[\hat{V}, \hat{K}]$ — коммутатор $\hat{V}$ и $\hat{K}$. Цель работы Кельбга — получить выражение для $\hat{G}(\beta)$ в первом порядке $\beta\hat{V}$. Это нельзя сделать непосредственно из уравнения (17): вклады первого порядка входят не только в первое слагаемое (с коэффициентом 1/2), но и, например, во второе (с коэффициентом 1/12).

Поэтому поступим по-другому: продифференцируем уравнение (16) по β:

$$-(\hat{K} + \hat{V})e^{-\beta(\hat{K}+\hat{V})} = -\hat{V}e^{-\beta\hat{V}}e^{-\beta\hat{K}}\hat{G}(\beta) - \\ - e^{-\beta\hat{V}}\hat{K}e^{-\beta\hat{K}}\hat{G}(\beta) + e^{-\beta\hat{V}}e^{-\beta\hat{K}}\frac{d\hat{G}(\beta)}{d\beta}. \tag{18}$$

Затем перепишем левую часть уравнения (18), используя (16):

$$-(\hat{K} + \hat{V})e^{-\beta(\hat{K}+\hat{V})} = \\ = -(\hat{K} + \hat{V})\exp(-\beta\hat{V})\exp(-\beta\hat{K})\hat{G}(\beta) = \\ = -\hat{K}\exp(-\beta\hat{V})\exp(-\beta\hat{K})\hat{G}(\beta) - \\ - \hat{V}\exp(-\beta\hat{V})\exp(-\beta\hat{K})\hat{G}(\beta). \tag{19}$$

После подстановки уравнения (19) в уравнение (18) и приведения подобных слагаемых, получаем:

$$e^{-\beta\hat{V}}e^{-\beta\hat{K}}\frac{d\hat{G}(\beta)}{d\beta} = \\ = e^{-\beta\hat{V}}\hat{K}e^{-\beta\hat{K}}\hat{G}(\beta) - \hat{K}e^{-\beta\hat{V}}e^{-\beta\hat{K}}\hat{G}(\beta) = \\ = e^{-\beta\hat{V}}\left(\hat{K} - e^{\beta\hat{V}}\hat{K}e^{-\beta\hat{V}}\right)e^{-\beta\hat{K}}\hat{G}(\beta). \tag{20}$$

Умножая уравнение (20) слева на $e^{\beta\hat{K}}e^{\beta\hat{V}}$, получаем уравнение (11) в [1]:

$$\frac{d\hat{G}(\beta)}{d\beta} = e^{\beta\hat{K}}\left(\hat{K} - e^{\beta\hat{V}}\hat{K}e^{-\beta\hat{V}}\right)e^{-\beta\hat{K}}\hat{G}(\beta). \tag{21}$$

Далее используется разложение экспоненты в ряд Тейлора:

$$e^{\pm\beta\hat{V}} = \hat{1} \pm \beta\hat{V} + \frac{\beta^2}{2}\hat{V}^2 + \ldots \tag{22}$$

Таким образом, второе слагаемое в скобках в уравнении (21) принимает вид:

$$e^{\beta\hat{V}}\hat{K}e^{-\beta\hat{V}} = \hat{K} + \beta[\hat{V}, \hat{K}] + \\ + \frac{\beta^2}{2}[\hat{V}, [\hat{V}, \hat{K}]] + \frac{\beta^3}{6}[\hat{V}, [\hat{V}, [\hat{V}, \hat{K}]]] + \ldots \tag{23}$$

Кельбг утверждает, что "ряд обрывается на члене порядка β^2 из-за структуры оператора кинетической энергии". Он не доказывает это утверждение. Тем не менее, оно верно, поскольку оператор кинетической энергии содержит только производные второго порядка; поэтому коммутатор $[\hat{V}, [\hat{V}, [\hat{V}, \hat{K}]] = 0$ (см. доказательство в приложении A). Это приводит к обнулению членов высшего порядка по β.

Подставляя уравнение (23) в уравнение (21), получаем ряд с вложенными коммутаторами или уравнение (12) в [1]:

$$\frac{d\hat{G}(\beta)}{d\beta} = -e^{\beta\hat{K}}\left\{\beta[\hat{V}, \hat{K}] + \frac{\beta^2}{2}[\hat{V}, [\hat{V}, \hat{K}]]\right\}e^{-\beta\hat{K}}\hat{G}(\beta). \tag{24}$$

Уравнение (12) в [1] является *точным.* Член порядка β^2 в уравнении (24) в дальнейшем не используется. Используем далее следующее преобразование:

$$e^{\beta\hat{K}}[\hat{K},\hat{V}]e^{-\beta\hat{K}} = \left(\hat{K}e^{\beta\hat{K}}\hat{V}e^{-\beta\hat{K}} - e^{\beta\hat{K}}\hat{V}\hat{K}e^{-\beta\hat{K}}\right) = \frac{d}{d\beta}\left(e^{\beta\hat{K}}\hat{V}e^{-\beta\hat{K}}\right), \tag{25}$$

чтобы переписать уравнение (24) в следующем виде (в первом порядке по $\hat{V}$):

$$\frac{d\hat{G}(\beta)}{d\beta} = -\beta e^{\beta\hat{K}}[\hat{V},\hat{K}]e^{-\beta\hat{K}}\hat{G}(\beta) = \beta\frac{d}{d\beta}\left(e^{\beta\hat{K}}\hat{V}e^{-\beta\hat{K}}\right)\hat{G}(\beta). \tag{26}$$

Из определения (16):

$$\hat{G}(0) = \hat{1}. \tag{27}$$

Выполняя формальное интегрирование уравнения (26) по β, получаем уравнение (13) в [1]:

$$\hat{G}(\beta) = \hat{1} + \int_0^\beta \beta_1\frac{d}{d\beta_1}\left(e^{\beta_1\hat{K}}\hat{V}e^{-\beta_1\hat{K}}\right)\hat{G}(\beta)d\beta_1 = \hat{1} + \int_0^\beta \beta_1\frac{d}{d\beta_1}\left(e^{\beta_1\hat{K}}\hat{V}e^{-\beta_1\hat{K}}\right)\hat{1}d\beta_1 +$$
$$+ \int_0^\beta \beta_1\frac{d}{d\beta_1}\left(e^{\beta_1\hat{K}}\hat{V}e^{-\beta_1\hat{K}}\right)\int_0^{\beta_1}\beta_1'\frac{d}{d\beta_1'}\left(e^{\beta_1'\hat{K}}\hat{V}e^{-\beta_1'\hat{K}}\right)\hat{1}d\beta_1'd\beta_1 + \dots. \tag{28}$$

В первом порядке теории возмущений в выражении для $\hat{G}(\beta)$ остаются первые два члена:

$$\hat{G}(\beta) = \hat{1} + \int_0^\beta \beta_1\frac{d}{d\beta_1}\left(e^{\beta_1\hat{K}}\hat{V}e^{-\beta_1\hat{K}}\right)d\beta_1. \tag{29}$$

Матрица плотности получается подстановкой уравнения (29) в (16):

$$\hat{\rho}(\beta) = e^{-\beta\hat{V}}e^{-\beta\hat{K}} +$$
$$+ e^{-\beta\hat{V}}e^{-\beta\hat{K}}\int_0^\beta \beta_1\frac{d}{d\beta_1}\left(e^{\beta_1\hat{K}}\hat{V}e^{-\beta_1\hat{K}}\right)d\beta_1. \tag{30}$$

Это основное уравнение в [1]. В остальной части статьи оно будет преобразовано к различным формам.

3.1. *Преобразование оператора плотности в уравнении* (30)

Сначала мы преобразуем интегральный член в уравнении (30), дифференцируя его по β_1 и умножая интеграл на $e^{-\beta\hat{K}}$:

$$e^{-\beta\hat{V}}e^{-\beta\hat{K}}\int_0^\beta \beta_1\frac{d}{d\beta_1}\left(e^{\beta_1\hat{K}}\hat{V}e^{-\beta_1\hat{K}}\right)d\beta_1 =$$
$$= e^{-\beta\hat{V}}e^{-\beta\hat{K}}\int_0^\beta \beta_1 e^{\beta_1\hat{K}}\left(\hat{K}\hat{V} - \hat{V}\hat{K}\right)e^{-\beta_1\hat{K}}\ \hat{1}\ d\beta_1 =$$
$$= e^{-\beta\hat{V}}\int_0^\beta \beta_1 e^{(\beta_1-\beta)\hat{K}}\left(\hat{K}\hat{V} - \hat{V}\hat{K}\right)e^{-(\beta_1-\beta)\hat{K}}e^{-\beta\hat{K}}d\beta_1. \tag{31}$$

Здесь также было использовано, что $\hat{1} = e^{\beta\hat{K}}e^{-\beta\hat{K}}$. Теперь это уравнение снова преобразуется в форму производной:

$$\int_0^\beta \beta_1 e^{(\beta_1-\beta)\hat{K}}\left(\hat{K}\hat{V} - \hat{V}\hat{K}\right)e^{-(\beta_1-\beta)\hat{K}}e^{-\beta\hat{K}}d\beta_1 =$$
$$= \int_0^\beta \beta_1\frac{d}{d\beta_1}\left(e^{(\beta_1-\beta)\hat{K}}\hat{V}e^{-(\beta_1-\beta)\hat{K}}\right)e^{-\beta\hat{K}}d\beta_1. \tag{32}$$

Наконец, уравнение (30) преобразуется в уравнение (14) в [1]:

$$\hat{\rho}(\beta) = e^{-\beta\hat{V}}e^{-\beta\hat{K}} +$$
$$+ e^{-\beta\hat{V}}\int_0^\beta \beta_1\frac{d}{d\beta_1}\left(e^{(\beta_1-\beta)\hat{K}}\hat{V}e^{-(\beta_1-\beta)\hat{K}}\right)e^{-\beta\hat{K}}d\beta_1. \tag{33}$$

Заметим, что коэффициент $e^{\beta\hat{K}}$ можно ввести под производную, так как он не зависит от β_1:

$$\frac{d}{d\beta_1}\left(e^{(\beta_1-\beta)\hat{K}}\hat{V}e^{-(\beta_1-\beta)\hat{K}}\right)e^{-\beta\hat{K}} =$$
$$= \frac{d}{d\beta_1}\left(e^{(\beta_1-\beta)\hat{K}}\hat{V}e^{-(\beta_1-\beta)\hat{K}}e^{-\beta\hat{K}}\right). \tag{34}$$

Следуя Кельбгу, перепишем межчастичный потенциал через параметры e_i и D:

$$u_{ij}(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j) = \frac{e_i e_j}{D}u(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j). \tag{35}$$

Предполагается, что e_i имеет размерность заряда, а D — длины. Разложим $u(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j)$ в интеграл Фурье:

$$u(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j) = \frac{1}{(2\pi)^3} \int d\mathbf{t} v(\mathbf{t}) e^{i\mathbf{t}(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j)}. \tag{36}$$

Здесь $v(\mathbf{t})$ является компонентой Фурье потенциала $u(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j)$. Тогда полная потенциальная энергия имеет следующий вид:

$$\hat{V} = \frac{1}{16\pi^3 D} \sum_{i=1}^{N} \sum_{\substack{j=1 \\ j\neq i}}^{N} e_i e_j \int d\mathbf{t} v(\mathbf{t}) e^{i\mathbf{t}(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j)}. \tag{37}$$

Таким образом, матрица плотности в (33) принимает вид:

$$\hat{\rho}(\beta) = e^{-\beta\hat{V}} e^{-\beta\hat{K}} + \frac{1}{16\pi^3 D} \sum_{i=1}^{N} \sum_{\substack{j=1 \\ j\neq i}}^{N} e_i e_j \int d\mathbf{t} v(\mathbf{t}) e^{-\beta\hat{V}} \int\limits_0^\beta \beta_1 \frac{d}{d\beta_1} \left(e^{(\beta_1-\beta)\hat{K}} e^{i\mathbf{t}(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j)} e^{-(\beta_1-\beta)\hat{K}} \right) e^{-\beta\hat{K}} d\beta_1. \tag{38}$$

Введем следующее обозначение, согласно уравнению (17) в [1]:

$$\hat{F}_{ij} = e^{\beta'\hat{K}} e^{i\mathbf{t}(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j)} e^{-\beta'\hat{K}}, \quad \beta' = \beta_1 - \beta. \tag{39}$$

$\hat{F}_{ij}$ соответствует выражению под производной в уравнении (38). Теперь необходимо вычислить действие $e^{\beta'\hat{K}}$ на $e^{i\mathbf{t}(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j)}$. Если $f(x)$ — некоторая функция, то:

$$f(\hat{H})\Psi_\nu(\mathbf{R}) = f(E_\nu)\Psi_\nu(\mathbf{R}). \tag{40}$$

Рассмотрим оператор $\hat{K}$ и вычислим его действие на $e^{i\mathbf{t}(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j)}$:

$$\hat{K} e^{i\mathbf{t}(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j)} = \frac{1}{2m} \sum_{n=1}^{N} \hat{\mathbf{p}}_n^2 e^{i\mathbf{t}(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j)} = \\ = \frac{1}{2m} (\hat{\mathbf{p}}_i^2 + \hat{\mathbf{p}}_j^2) e^{i\mathbf{t}(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j)} + \frac{e^{i\mathbf{t}(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j)}}{2m} \sum_{\substack{n=1 \\ n\neq i,j}}^{N} \hat{\mathbf{p}}_n^2, \tag{41}$$

чтобы затем вычислить действие $e^{\beta'\hat{K}}$ на $e^{i\mathbf{t}(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j)}$. Рассмотрим действие отдельных вкладов в уравнении (41) на некоторую волновую функцию $\Psi(\mathbf{R})$:

$$\hat{\mathbf{p}}_i^2 e^{i\mathbf{t}(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j)} \Psi(\mathbf{R}) = -\hbar^2 \nabla_i^2 e^{i\mathbf{t}(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j)} \Psi(\mathbf{R}). \tag{42}$$

Действие операторов ∇_i^2 и ∇_j^2 порождает три вклада:

$$\nabla_i^2 e^{i\mathbf{t}(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j)} \Psi(\mathbf{R}) = -t^2 e^{i\mathbf{t}(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j)} \Psi(\mathbf{R}) + \\ + 2i e^{i\mathbf{t}(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j)} \mathbf{t} \nabla_i \Psi(\mathbf{R}) + e^{i\mathbf{t}(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j)} \nabla_i^2 \Psi(\mathbf{R}), \tag{43}$$

$$\nabla_j^2 e^{i\mathbf{t}(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j)} \Psi(\mathbf{R}) = -t^2 e^{i\mathbf{t}(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j)} \Psi(\mathbf{R}) - \\ - 2i e^{i\mathbf{t}(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j)} \mathbf{t} \nabla_j \Psi(\mathbf{R}) + e^{i\mathbf{t}(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j)} \nabla_j^2 \Psi(\mathbf{R}). \tag{44}$$

Суммируя все это, получаем:

$$\hat{K} e^{i\mathbf{t}(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j)} \Psi(\mathbf{R}) = \\ = \left(\frac{\hbar^2 t^2}{m} e^{i\mathbf{t}(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j)} + e^{i\mathbf{t}(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j)} \frac{\hbar}{m} \mathbf{t}(\hat{\mathbf{p}}_i - \hat{\mathbf{p}}_j) \right) \Psi(\mathbf{R}) + \\ + e^{i\mathbf{t}(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j)} \frac{1}{2m} \sum_{n=1}^{N} \hat{\mathbf{p}}_n^2 \Psi(\mathbf{R}), \tag{45}$$

или в операторной форме:

$$\hat{K} e^{i\mathbf{t}(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j)} = e^{i\mathbf{t}(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j)} \left(\frac{\hbar^2 t^2}{m} + \frac{\hbar}{m} \mathbf{t}(\hat{\mathbf{p}}_i - \hat{\mathbf{p}}_j) + \hat{K} \right). \tag{46}$$

Теперь можно рассчитать действие $e^{\beta'\hat{K}}$ на функцию $e^{i\mathbf{t}(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j)}$ аналогично уравнению (40):

$$e^{\beta'\hat{K}} e^{i\mathbf{t}(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j)} = e^{i\mathbf{t}(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j)} e^{\beta' \frac{\hbar^2 t^2}{m} + \beta' \frac{\hbar}{m} \mathbf{t}(\hat{\mathbf{p}}_i - \hat{\mathbf{p}}_j)} e^{\beta'\hat{K}}. \tag{47}$$

Таким образом, мы получаем уравнение (18) в [1]:

$$\hat{F}_{ij} = e^{\beta'\hat{K}} e^{i\mathbf{t}(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j)} e^{-\beta'\hat{K}} = \\ = e^{i\mathbf{t}(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j)} e^{\beta' \frac{\hbar^2 t^2}{m} + \beta' \frac{\hbar}{m} \mathbf{t}(\hat{\mathbf{p}}_i - \hat{\mathbf{p}}_j)} e^{\beta'\hat{K}} e^{-\beta'\hat{K}} = \\ = e^{i\mathbf{t}(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j)} e^{\beta' \frac{\hbar^2 t^2}{m} + \beta' \frac{\hbar}{m} \mathbf{t}(\hat{\mathbf{p}}_i - \hat{\mathbf{p}}_j)}. \tag{48}$$

Теперь подставим уравнение (48) в (38):

$$\hat{\rho}(\beta) = e^{-\beta\hat{V}} e^{-\beta\hat{K}} + \frac{1}{16\pi^3 D} \sum_{i=1}^{N} \sum_{\substack{j=1 \\ j\neq i}}^{N} e_i e_j \int d\mathbf{t} v(\mathbf{t}) e^{i\mathbf{t}(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j)} e^{-\beta\hat{V}} \int\limits_0^\beta \beta_1 \frac{d}{d\beta_1} \left(e^{\frac{\hbar(\beta_1-\beta)}{m} \mathbf{t}(\hat{\mathbf{p}}_i - \hat{\mathbf{p}}_j) + \frac{\hbar^2(\beta_1-\beta)}{m} t^2} \right) e^{-\beta\hat{K}} d\beta_1. \tag{49}$$

Таким образом, мы получили уравнение (19) в [1].

3.2. Координатное представление матрицы плотности

Теперь вычислим матрицу плотности (49) в координатном представлении, то есть рассчитаем $\langle \mathbf{R}|\hat{\rho}(\beta)|\mathbf{R}'\rangle$. Для этого нужно вычислить следующий матричный элемент:

$$\langle \mathbf{R}|e^{-\beta\hat{V}}e^{\frac{\hbar(\beta_1-\beta)}{m}\mathbf{t}(\hat{\mathbf{p}}_i-\hat{\mathbf{p}}_j)}e^{-\beta\hat{K}}|\mathbf{R}'\rangle. \tag{50}$$

Сначала мы вставим координатную переменную $\mathbf{Q} \equiv (\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2, \ldots, \mathbf{q}_N)$, используя соотношение полноты, (11):

$$\langle \mathbf{R}|e^{-\beta\hat{V}}\hat{1}e^{\frac{\hbar(\beta_1-\beta)}{m}\mathbf{t}(\hat{\mathbf{p}}_i-\hat{\mathbf{p}}_j)}e^{-\beta\hat{K}}|\mathbf{R}'\rangle = \\ = \int d\mathbf{Q}\langle \mathbf{R}|e^{-\beta\hat{V}}|\mathbf{Q}\rangle\langle \mathbf{Q}|e^{\frac{\hbar(\beta_1-\beta)}{m}\mathbf{t}(\hat{\mathbf{p}}_i-\hat{\mathbf{p}}_j)}e^{-\beta\hat{K}}|\mathbf{R}'\rangle. \tag{51}$$

Для расчета $\langle \mathbf{R}|e^{-\beta\hat{V}}|\mathbf{Q}\rangle$ учтем, что:

$$\langle \mathbf{R}|\hat{V}|\mathbf{Q}\rangle = U(\mathbf{R})\delta(\mathbf{R}-\mathbf{Q}), \tag{52}$$

где $U(\mathbf{R})$ — потенциальная энергия (функция, а не оператор). Тогда:

$$\langle \mathbf{R}|e^{-\beta\hat{V}}|\mathbf{Q}\rangle = e^{-\beta U(\mathbf{R})}\delta(\mathbf{R}-\mathbf{Q}). \tag{53}$$

Итак, уравнение (50) переходит в:

$$\langle \mathbf{R}|e^{-\beta\hat{V}}e^{\frac{\hbar(\beta_1-\beta)}{m}\mathbf{t}(\hat{\mathbf{p}}_i-\hat{\mathbf{p}}_j)}e^{-\beta\hat{K}}|\mathbf{R}'\rangle = \\ = e^{-\beta U(\mathbf{R})}\langle \mathbf{R}|e^{\frac{\hbar(\beta_1-\beta)}{m}\mathbf{t}(\hat{\mathbf{p}}_i-\hat{\mathbf{p}}_j)}e^{-\beta\hat{K}}|\mathbf{R}'\rangle. \tag{54}$$

Теперь рассчитаем $\langle \mathbf{R}|e^{\frac{\hbar(\beta_1-\beta)}{m}\mathbf{t}(\hat{\mathbf{p}}_i-\hat{\mathbf{p}}_j)}e^{-\beta\hat{K}}|\mathbf{R}'\rangle$. Для этого введем еще одну координатную переменную, снова используя соотношение полноты, (11):

$$\langle \mathbf{R}|e^{\frac{\hbar(\beta_1-\beta)}{m}\mathbf{t}(\hat{\mathbf{p}}_i-\hat{\mathbf{p}}_j)}\hat{1}e^{-\beta\hat{K}}|\mathbf{R}'\rangle = \\ = \int d\mathbf{Q}\langle \mathbf{R}|e^{\frac{\hbar(\beta_1-\beta)}{m}\mathbf{t}(\hat{\mathbf{p}}_i-\hat{\mathbf{p}}_j)}|\mathbf{Q}\rangle\langle \mathbf{Q}|e^{-\beta\hat{K}}|\mathbf{R}'\rangle. \tag{55}$$

Рассмотрим первый матричный элемент $\langle \mathbf{R}|e^{\frac{\hbar(\beta_1-\beta)}{m}\mathbf{t}(\hat{\mathbf{p}}_i-\hat{\mathbf{p}}_j)}|\mathbf{Q}\rangle$ в уравнении (55). Вставим в него *сопряженную* (импульсную) переменную $\mathbf{G}$, используя соотношение полноты, (15):

$$\langle \mathbf{R}|e^{\frac{\hbar(\beta_1-\beta)}{m}\mathbf{t}(\hat{\mathbf{p}}_i-\hat{\mathbf{p}}_j)}|\mathbf{Q}\rangle = \langle \mathbf{R}|e^{\frac{\hbar\beta'}{m}\mathbf{t}\hat{\mathbf{p}}_i}\hat{1}e^{-\frac{\hbar\beta'}{m}\mathbf{t}\hat{\mathbf{p}}_j}|\mathbf{Q}\rangle = \\ = \int \frac{d\mathbf{G}}{(2\pi\hbar)^{3N/2}}\langle \mathbf{R}|e^{\frac{\hbar\beta'}{m}\mathbf{t}\hat{\mathbf{p}}_i}|\mathbf{G}\rangle\langle \mathbf{G}|e^{-\frac{\hbar\beta'}{m}\mathbf{t}\hat{\mathbf{p}}_j}|\mathbf{Q}\rangle. \tag{56}$$

Оператор импульса является эрмитовым; он действует на кет-вектор в первом случае (57) и на бра-вектор во втором (58):

$$\langle \mathbf{R}|e^{\frac{\hbar\beta'}{m}\mathbf{t}\hat{\mathbf{p}}_i}|\mathbf{G}\rangle = e^{\frac{\hbar\beta'}{m}\mathbf{t}\mathbf{g}_i}\langle \mathbf{R}|\mathbf{G}\rangle, \tag{57}$$

$$\langle \mathbf{G}|e^{-\frac{\hbar\beta'}{m}\mathbf{t}\hat{\mathbf{p}}_j}|\mathbf{Q}\rangle = e^{-\frac{\hbar\beta'}{m}\mathbf{t}\mathbf{g}_j}\langle \mathbf{G}|\mathbf{Q}\rangle. \tag{58}$$

Окончательно получаем:

$$\langle \mathbf{R}|e^{\frac{\hbar(\beta_1-\beta)}{m}\mathbf{t}(\hat{\mathbf{p}}_i-\hat{\mathbf{p}}_j)}|\mathbf{Q}\rangle = \\ = \int \frac{d\mathbf{G}}{(2\pi\hbar)^{3N/2}}e^{\frac{\hbar\beta'}{m}\mathbf{t}(\mathbf{g}_i-\mathbf{g}_j)}\langle \mathbf{R}|\mathbf{G}\rangle\langle \mathbf{G}|\mathbf{Q}\rangle = \\ = \int \frac{d\mathbf{G}}{(2\pi\hbar)^{3N}}e^{\frac{\hbar\beta'}{m}\mathbf{t}(\mathbf{g}_i-\mathbf{g}_j)}e^{\frac{i}{\hbar}\mathbf{R}\cdot\mathbf{G}}e^{-\frac{i}{\hbar}\mathbf{Q}\cdot\mathbf{G}}. \tag{59}$$

Так как

$$e^{\frac{i}{\hbar}\mathbf{R}\cdot\mathbf{G}}e^{-\frac{i}{\hbar}\mathbf{Q}\cdot\mathbf{G}} = e^{\frac{i}{\hbar}\sum\limits_{m=1}^{N}(\mathbf{r}_m-\mathbf{q}_m)\cdot\mathbf{g}_m} = \prod_{m=1}^{N}e^{\frac{i}{\hbar}(\mathbf{r}_m-\mathbf{q}_m)\cdot\mathbf{g}_m}, \quad d\mathbf{G} = \prod_{n=1}^{N}d\mathbf{g}_n, \tag{60}$$

интеграл в (59) легко берется по всем переменным, кроме $\mathbf{g}_i$ и $\mathbf{g}_j$:

$$\int \frac{d\mathbf{G}}{(2\pi\hbar)^{3N}}e^{\frac{\hbar\beta'}{m}\mathbf{t}(\mathbf{g}_i-\mathbf{g}_j)}e^{\frac{i}{\hbar}\mathbf{R}\cdot\mathbf{G}}e^{-\frac{i}{\hbar}\mathbf{Q}\cdot\mathbf{G}} = \int \frac{\prod\limits_{n=1}^{N}d\mathbf{g}_n}{(2\pi\hbar)^{3N}}e^{\frac{\hbar\beta'}{m}\mathbf{t}(\mathbf{g}_i-\mathbf{g}_j)}\prod_{m=1}^{N}e^{\frac{i}{\hbar}(\mathbf{r}_m-\mathbf{q}_m)\cdot\mathbf{g}_m} = \\ = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3N}}\left(\prod_{\substack{n=1\\n\neq i,j}}^{N}\int d\mathbf{g}_n e^{\frac{i}{\hbar}(\mathbf{r}_n-\mathbf{q}_n)\cdot\mathbf{g}_n}\right)\times\left(\int d\mathbf{g}_i e^{\frac{i}{\hbar}(\mathbf{r}_i-\mathbf{q}_i)\cdot\mathbf{g}_i}e^{\frac{\hbar\beta'}{m}\mathbf{t}\mathbf{g}_i}\right)\times\left(\int d\mathbf{g}_j e^{\frac{i}{\hbar}(\mathbf{r}_j-\mathbf{q}_j)\cdot\mathbf{g}_j}e^{-\frac{\hbar\beta'}{m}\mathbf{t}\mathbf{g}_j}\right). \tag{61}$$

Первый интеграл — δ-функция Дирака:

$$\int d\mathbf{g}_n e^{\frac{i}{\hbar}(\mathbf{r}_n-\mathbf{q}_n)\cdot\mathbf{g}_n} = (2\pi\hbar)^3\delta(\mathbf{r}_n-\mathbf{q}_n). \tag{62}$$

Следующие два интеграла также являются δ-функциями:

$$\int d\mathbf{g}_i e^{\frac{i}{\hbar}(\mathbf{r}_i-\mathbf{q}_i)\cdot\mathbf{g}_i}e^{\frac{\hbar\beta'}{m}\mathbf{t}\mathbf{g}_i} = \int d\mathbf{g}_i e^{\frac{i}{\hbar}(\mathbf{r}_i-\mathbf{q}_i-i\frac{\hbar^2\beta'}{m}\mathbf{t})\cdot\mathbf{g}_i} = (2\pi\hbar)^3\delta(\mathbf{r}_i-i\tfrac{\hbar^2\beta'}{m}\mathbf{t}-\mathbf{q}_i), \tag{63}$$

$$\int d\mathbf{g}_j e^{\frac{i}{\hbar}(\mathbf{r}_j-\mathbf{q}_j)\cdot\mathbf{g}_j} e^{-\frac{\hbar\beta'}{m}\mathbf{t}\mathbf{g}_j} = (2\pi\hbar)^3\delta(\mathbf{r}_j + i\tfrac{\hbar^2\beta'}{m}\mathbf{t} - \mathbf{q}_j). \tag{64}$$

Теперь подставим (62)–(64) в (61) для вычисления (59). Таким образом, вычислен первый элемент в уравнении (55):

$$\langle\mathbf{R}|e^{\frac{\hbar(\beta_1-\beta)}{m}\mathbf{t}(\hat{\mathbf{p}}_i-\hat{\mathbf{p}}_j)}|\mathbf{Q}\rangle = \left(\prod_{\substack{n=1\\ n\neq i,j}}\delta(\mathbf{r}_n-\mathbf{q}_n)\right)\times\delta\left((\mathbf{r}_i - i\tfrac{\hbar^2\beta'}{m}\mathbf{t})-\mathbf{q}_i\right)\delta\left((\mathbf{r}_j + i\tfrac{\hbar^2\beta'}{m}\mathbf{t})-\mathbf{q}_j\right). \tag{65}$$

Подставляя его в уравнение (55) и интегрируя по всем $\mathbf{q}_1\ldots\mathbf{q}_N$, получаем:

$$\begin{aligned}\langle\mathbf{R}|e^{\frac{\hbar(\beta_1-\beta)}{m}\mathbf{t}(\hat{\mathbf{p}}_i-\hat{\mathbf{p}}_j)}e^{-\beta\hat{K}}|\mathbf{R}'\rangle &= \\ = \int d\mathbf{Q}&\left(\prod_{\substack{n=1\\ n\neq i,j}}\delta(\mathbf{r}_n-\mathbf{q}_n)\right)\delta\left((\mathbf{r}_i - i\tfrac{\hbar^2\beta'}{m}\mathbf{t})-\mathbf{q}_i\right)\delta\left((\mathbf{r}_j + i\tfrac{\hbar^2\beta'}{m}\mathbf{t})-\mathbf{q}_j\right)\langle\mathbf{Q}|e^{-\beta\hat{K}}|\mathbf{R}'\rangle = \\ &= \langle\mathbf{r}_1,\mathbf{r}_2,\ldots,\mathbf{r}_i - i\tfrac{\hbar^2\beta'}{m}\mathbf{t},\ldots,\mathbf{r}_j + i\tfrac{\hbar^2\beta'}{m}\mathbf{t},\ldots,\mathbf{r}_N|e^{-\beta\hat{K}}|\mathbf{r}'_1,\mathbf{r}'_2,\ldots,\mathbf{r}'_i,\ldots,\mathbf{r}'_j,\ldots,\mathbf{r}'_N\rangle.\end{aligned} \tag{66}$$

Матрица плотности N невзаимодействующих частиц имеет следующий вид (см. уравнение (2.142) в [7]):

$$\langle\mathbf{r}_1,\mathbf{r}_2,\ldots,\mathbf{r}_i,\ldots,\mathbf{r}_j,\ldots,\mathbf{r}_N|e^{-\beta\hat{K}}|\mathbf{r}'_1,\mathbf{r}'_2,\ldots,\mathbf{r}'_i,\ldots,\mathbf{r}'_j,\ldots,\mathbf{r}'_N\rangle = \left(\frac{m}{2\pi\hbar^2\beta}\right)^{\frac{3N}{2}}\exp\left(-\frac{m}{2\hbar^2\beta}\sum_{n=1}^{N}(\mathbf{r}_n-\mathbf{r}'_n)^2\right). \tag{67}$$

Подставляя $\mathbf{r}_i \to \mathbf{r}_i - i\frac{\hbar^2\beta'}{m}\mathbf{t}$, $\mathbf{r}_j \to \mathbf{r}_j + i\frac{\hbar^2\beta'}{m}\mathbf{t}$ в уравнении (67), получаем матричный элемент (66):

$$\begin{aligned}&\langle\mathbf{r}_1,\mathbf{r}_2,\ldots,\mathbf{r}_i - i\tfrac{\hbar^2\beta'}{m}\mathbf{t},\ldots,\mathbf{r}_j + i\tfrac{\hbar^2\beta'}{m}\mathbf{t},\ldots,\mathbf{r}_N|e^{-\beta\hat{K}}|\mathbf{r}'_1,\mathbf{r}'_2,\ldots,\mathbf{r}'_i,\ldots,\mathbf{r}'_j,\ldots,\mathbf{r}'_N\rangle = \\ &= \left(\frac{m}{2\pi\hbar^2\beta}\right)^{3N/2}\exp\left(-\frac{m}{2\hbar^2\beta}\sum_{\substack{n=1\\ n\neq i,j}}^{N}(\mathbf{r}_n-\mathbf{r}'_n)^2 - \frac{m}{2\hbar^2\beta}\left[(\mathbf{r}_i - i\tfrac{\hbar^2\beta'}{m}\mathbf{t}-\mathbf{r}'_i)^2 + (\mathbf{r}_j + i\tfrac{\hbar^2\beta'}{m}\mathbf{t}-\mathbf{r}'_j)^2\right]\right).\end{aligned} \tag{68}$$

Преобразуем выражение в квадратных скобках $[\ldots]$ в экспоненте:

$$(\mathbf{r}_i - i\tfrac{\hbar^2\beta'}{m}\mathbf{t}-\mathbf{r}'_i)^2 + (\mathbf{r}_j + i\tfrac{\hbar^2\beta'}{m}\mathbf{t}-\mathbf{r}'_j)^2 = (\mathbf{r}_i-\mathbf{r}'_i)^2 + (\mathbf{r}_j-\mathbf{r}'_j)^2 + 2i\frac{\hbar^2\beta'}{m}\mathbf{t}(\mathbf{r}_j-\mathbf{r}'_j) - 2i\frac{\hbar^2\beta'}{m}\mathbf{t}(\mathbf{r}_i-\mathbf{r}'_i) - 2\frac{\hbar^4\beta'^2}{m^2}t^2, \tag{69}$$

и получим уравнение (21) в [1]:

$$\begin{aligned}&\langle\mathbf{r}_1,\mathbf{r}_2,\ldots,\mathbf{r}_i - i\tfrac{\hbar^2\beta'}{m}\mathbf{t},\ldots,\mathbf{r}_j + i\tfrac{\hbar^2\beta'}{m}\mathbf{t},\ldots,\mathbf{r}_N|e^{-\beta\hat{K}}|\mathbf{r}'_1,\mathbf{r}'_2,\ldots,\mathbf{r}'_i,\ldots,\mathbf{r}'_j,\ldots,\mathbf{r}'_N\rangle = \\ &= \left(\frac{m}{2\pi\hbar^2\beta}\right)^{3N/2}\exp\left(-\frac{m}{2\hbar^2\beta}\sum_{n=1}^{N}(\mathbf{r}_n-\mathbf{r}'_n)^2 - \frac{m}{2\hbar^2\beta}\left[2i\tfrac{\hbar^2\beta'}{m}\mathbf{t}(\mathbf{r}_j-\mathbf{r}'_j) - 2i\tfrac{\hbar^2\beta'}{m}\mathbf{t}(\mathbf{r}_i-\mathbf{r}'_i) - 2\tfrac{\hbar^4\beta'^2}{m^2}t^2\right]\right) = \\ &= \left(\frac{m}{2\pi\hbar^2\beta}\right)^{3N/2} e^{-\frac{m}{2\hbar^2\beta}\sum\limits_{n=1}^{N}(\mathbf{r}_n-\mathbf{r}'_n)^2}\exp\left(\tfrac{\beta'}{\beta}i\mathbf{t}(\mathbf{r}_i-\mathbf{r}'_i)\right)\exp\left(-\tfrac{\beta'}{\beta}i\mathbf{t}(\mathbf{r}_j-\mathbf{r}'_j)\right)\exp\left(\tfrac{\hbar^2\beta'^2}{\beta m}t^2\right).\end{aligned} \tag{70}$$

Чтобы получить полную матрицу плотности, необходимо вычислить матричный элемент первого слагаемого в уравнении (49):

$$\langle\mathbf{R}|e^{-\beta\hat{V}}e^{-\beta\hat{K}}|\mathbf{R}'\rangle. \tag{71}$$

Для этого вставим координатную переменную $\mathbf{Q}$ между операторами и используем уравнения (53), (67):

$$\begin{aligned}\langle\mathbf{R}|e^{-\beta\hat{V}}\hat{1}e^{-\beta\hat{K}}|\mathbf{R}'\rangle &= \int d\mathbf{Q}\langle\mathbf{R}|e^{-\beta\hat{V}}|\mathbf{Q}\rangle\langle\mathbf{Q}|e^{-\beta\hat{K}}|\mathbf{R}'\rangle = e^{-\beta U(\mathbf{R})}\langle\mathbf{R}|e^{-\beta\hat{K}}|\mathbf{R}'\rangle = \\ &= e^{-\beta U(\mathbf{R})}\left(\frac{m}{2\pi\hbar^2\beta}\right)^{3N/2} e^{-\frac{m}{2\hbar^2\beta}\sum\limits_{n=1}^{N}(\mathbf{r}_n-\mathbf{r}'_n)^2}.\end{aligned} \tag{72}$$

В итоге, мы получаем выражение для полной матрицы плотности в координатном представлении:

$$\langle \mathbf{R}|\hat{\rho}(\beta)|\mathbf{R}'\rangle = \left(\frac{m}{2\pi\hbar^2\beta}\right)^{3N/2} e^{-\frac{m}{2\hbar^2\beta}\sum\limits_{n=1}^{N}(\mathbf{r}_n-\mathbf{r}'_n)^2} e^{-\beta U(\mathbf{R})} \left\{ 1 + \frac{1}{16\pi^3 D}\sum_{i=1}^{N}\sum_{\substack{j=1\\ j\neq i}}^{N} e_i e_j \int v(\mathbf{t}) e^{i\mathbf{t}(\mathbf{r}_i-\mathbf{r}_j)} \times \right.$$
$$\left. \times \int_0^\beta \beta_1 \frac{d}{d\beta_1}\left(\exp\left(\tfrac{\beta'}{\beta} i\mathbf{t}(\mathbf{r}_i-\mathbf{r}'_i)\right)\exp\left(-\tfrac{\beta'}{\beta} i\mathbf{t}(\mathbf{r}_j-\mathbf{r}'_j)\right) e^{\frac{\hbar^2(\beta_1-\beta)}{m}t^2} \exp\left(\tfrac{\hbar^2\beta'^2}{\beta m}t^2\right)\right) d\beta_1 d\mathbf{t} \right\}. \tag{73}$$

3.3. *Преобразование матрицы плотности в уравнении* (73)

Далее производим замену переменных в интеграле:

$$\alpha = \beta_1/\beta, \quad \beta d\alpha = d\beta_1. \tag{74}$$

Тогда интеграл по β_1 в уравнении (73) принимает следующий вид:

$$\int_0^\beta \beta_1 \frac{d}{d\beta_1}\left(\exp\left(\tfrac{\beta'}{\beta} i\mathbf{t}(\mathbf{r}_i-\mathbf{r}'_i)\right)\exp\left(-\tfrac{\beta'}{\beta} i\mathbf{t}(\mathbf{r}_j-\mathbf{r}'_j)\right) e^{\frac{\hbar^2(\beta_1-\beta)}{m}t^2} \exp\left(\tfrac{\hbar^2\beta'^2}{\beta m}t^2\right)\right) d\beta_1 =$$
$$= \beta\int_0^1 \alpha\frac{d}{d\alpha}\left(\exp\left((\alpha-1)i\mathbf{t}(\mathbf{r}_i-\mathbf{r}'_i)\right)\exp\left(-(\alpha-1)i\mathbf{t}(\mathbf{r}_j-\mathbf{r}'_j)\right) e^{\frac{\hbar^2(\alpha-1)\beta}{m}t^2}\exp\left(\tfrac{\hbar^2(\alpha-1)^2\beta}{m}t^2\right)\right) d\alpha. \tag{75}$$

Производя следующие преобразования:

$$\exp\left((\alpha-1)i\mathbf{t}(\mathbf{r}_i-\mathbf{r}'_i)\right)\exp\left(-(\alpha-1)i\mathbf{t}(\mathbf{r}_j-\mathbf{r}'_j)\right) e^{\frac{\hbar^2(\alpha-1)\beta}{m}t^2}\exp\left(\tfrac{\hbar^2(\alpha-1)^2\beta}{m}t^2\right) =$$
$$= \exp\left[\alpha i\mathbf{t}(\mathbf{r}_i-\mathbf{r}'_i) - i\mathbf{t}(\mathbf{r}_i-\mathbf{r}'_i)\right]\exp\left[-\alpha i\mathbf{t}(\mathbf{r}_j-\mathbf{r}'_j) + i\mathbf{t}(\mathbf{r}_j-\mathbf{r}'_j)\right]\exp\left(\tfrac{(\alpha-1)\alpha\hbar^2\beta}{m}t^2\right) =$$
$$= \exp\left[\alpha i\mathbf{t}(\mathbf{r}_i-\mathbf{r}'_i) - \alpha i\mathbf{t}(\mathbf{r}_j-\mathbf{r}'_j)\right]\exp\left(-\tfrac{(1-\alpha)\alpha\hbar^2\beta}{m}t^2\right)\exp\left(-i\mathbf{t}(\mathbf{r}_i-\mathbf{r}'_i) + i\mathbf{t}(\mathbf{r}_j-\mathbf{r}'_j)\right), \tag{76}$$

можно переписать интеграл по $\mathbf{t}$ и α в уравнении (73):

$$\int v(\mathbf{t}) e^{i\mathbf{t}(\mathbf{r}_i-\mathbf{r}_j)}\int_0^\beta \beta_1\frac{d}{d\beta_1}\left(\exp\left(\tfrac{\beta'}{\beta} i\mathbf{t}(\mathbf{r}_i-\mathbf{r}'_i)\right)\exp\left(-\tfrac{\beta'}{\beta} i\mathbf{t}(\mathbf{r}_j-\mathbf{r}'_j)\right)\exp\left(\tfrac{\hbar^2\beta'^2}{\beta m}t^2\right)\right) d\beta_1 d\mathbf{t} =$$
$$= \int v(\mathbf{t}) e^{i\mathbf{t}(\mathbf{r}'_i-\mathbf{r}'_j)}\beta\int_0^1 \alpha\frac{d}{d\alpha}\left(e^{\alpha i\mathbf{t}(\mathbf{r}_i-\mathbf{r}'_i)-\alpha i\mathbf{t}(\mathbf{r}_j-\mathbf{r}'_j)} e^{-\frac{(1-\alpha)\alpha\hbar^2\beta}{m}t^2}\right) d\alpha d\mathbf{t} \tag{77}$$

и получить уравнение (22) в [1]:

$$\langle \mathbf{R}|\hat{\rho}(\beta)|\mathbf{R}'\rangle = \left(\frac{m}{2\pi\hbar^2\beta}\right)^{3N/2} e^{-\frac{m}{2\hbar^2\beta}\sum\limits_{n=1}^{N}(\mathbf{r}_n-\mathbf{r}'_n)^2} e^{-\beta U(\mathbf{R})}\left\{1 + \right.$$
$$\left. + \frac{\beta}{16\pi^3 D}\sum_{i=1}^{N}\sum_{\substack{j=1\\ j\neq i}}^{N} e_i e_j \int v(\mathbf{t}) e^{i\mathbf{t}(\mathbf{r}'_i-\mathbf{r}'_j)}\int_0^1 \alpha\frac{d}{d\alpha}\left(e^{i\alpha\mathbf{t}(\mathbf{r}_i-\mathbf{r}_j-\mathbf{r}'_i+\mathbf{r}'_j)} e^{-\alpha(1-\alpha)\frac{\hbar^2\beta}{m}t^2}\right) d\alpha d\mathbf{t}\right\}. \tag{78}$$

Введем обозначение:

$$\mathbf{r}_{ij} = \mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j, \quad \mathbf{r}'_{ij} = \mathbf{r}'_i - \mathbf{r}'_j. \tag{79}$$

Теперь интегрируем по частям в уравнении (78) по α:

$$\int_0^1 \alpha \frac{d}{d\alpha}\left(e^{i\alpha\mathbf{t}(\mathbf{r}_{ij}-\mathbf{r}'_{ij})}e^{-\alpha(1-\alpha)\frac{\hbar^2\beta}{m}t^2}\right)d\alpha = \alpha\left(e^{i\alpha\mathbf{t}(\mathbf{r}_{ij}-\mathbf{r}'_{ij})}e^{-\alpha(1-\alpha)\frac{\hbar^2\beta}{m}t^2}\right)\Bigg|_0^1 - \int_0^1 e^{i\alpha\mathbf{t}(\mathbf{r}_{ij}-\mathbf{r}'_{ij})}e^{-\alpha(1-\alpha)\frac{\hbar^2\beta}{m}t^2}d\alpha =$$
$$= e^{i\mathbf{t}(\mathbf{r}_{ij}-\mathbf{r}'_{ij})} - \int_0^1 e^{i\alpha\mathbf{t}(\mathbf{r}_{ij}-\mathbf{r}'_{ij})}e^{-\alpha(1-\alpha)\frac{\hbar^2\beta}{m}t^2}d\alpha. \quad (80)$$

Таким образом, добавочное слагаемое в уравнении (78) имеет форму:

$$\frac{\beta}{16\pi^3 D}\sum_{i=1}^{N}\sum_{\substack{j=1\\ j\neq i}}^{N} e_i e_j \int v(\mathbf{t})e^{i\mathbf{t}\mathbf{r}'_{ij}}\int_0^1 \alpha\frac{d}{d\alpha}\left(e^{i\alpha\mathbf{t}(\mathbf{r}_{ij}-\mathbf{r}'_{ij})}e^{-\alpha(1-\alpha)\frac{\hbar^2\beta}{m}t^2}\right)d\alpha d\mathbf{t} =$$
$$= \frac{\beta}{16\pi^3 D}\sum_{i=1}^{N}\sum_{\substack{j=1\\ j\neq i}}^{N} e_i e_j \int v(\mathbf{t})e^{i\mathbf{t}\mathbf{r}'_{ij}}e^{i\mathbf{t}(\mathbf{r}_{ij}-\mathbf{r}'_{ij})}d\mathbf{t} -$$
$$- \frac{\beta}{16\pi^3 D}\sum_{i=1}^{N}\sum_{\substack{j=1\\ j\neq i}}^{N} e_i e_j \int v(\mathbf{t})e^{i\mathbf{t}\mathbf{r}'_{ij}}\int_0^1 e^{i\alpha\mathbf{t}(\mathbf{r}_{ij}-\mathbf{r}'_{ij})}e^{-\alpha(1-\alpha)\frac{\hbar^2\beta}{m}t^2}d\alpha d\mathbf{t}. \quad (81)$$

Первое слагаемое в уравнении (81) — потенциальная энергия:

$$\frac{\beta}{16\pi^3 D}\sum_{i=1}^{N}\sum_{\substack{j=1\\ j\neq i}}^{N} e_i e_j \int v(\mathbf{t})e^{i\mathbf{t}\mathbf{r}'_{ij}}e^{i\mathbf{t}(\mathbf{r}_{ij}-\mathbf{r}'_{ij})}d\mathbf{t} = \frac{\beta}{16\pi^3 D}\sum_{i=1}^{N}\sum_{\substack{j=1\\ j\neq i}}^{N} e_i e_j \int v(\mathbf{t})e^{i\mathbf{t}\mathbf{r}_{ij}}d\mathbf{t} = \beta U(\mathbf{R}). \quad (82)$$

Рассмотрим второе слагаемое в уравнении (81) и перепишем интеграл:

$$\int v(\mathbf{t})e^{i\mathbf{t}\mathbf{r}'_{ij}}\int_0^1 e^{i\alpha\mathbf{t}(\mathbf{r}_{ij}-\mathbf{r}'_{ij})}e^{-\alpha(1-\alpha)\frac{\hbar^2\beta}{m}t^2}d\alpha d\mathbf{t} = \int_0^1 d\alpha \int v(\mathbf{t})e^{i\mathbf{t}[\alpha\mathbf{r}_{ij}+(1-\alpha)\mathbf{r}'_{ij}]}e^{-\alpha(1-\alpha)\frac{\hbar^2\beta}{m}t^2}d\mathbf{t}. \quad (83)$$

Снова введем обозначение:

$$\mathbf{d}_{ij}(\alpha) = \alpha\mathbf{r}_{ij} + (1-\alpha)\mathbf{r}'_{ij}, \quad d_{ij}(\alpha) = |\alpha\mathbf{r}_{ij} + (1-\alpha)\mathbf{r}'_{ij}|, \quad (84)$$

и перепишем интеграл в уравнении (83) по $\mathbf{t}$ следующим образом:

$$\int v(\mathbf{t})e^{i\mathbf{t}[\alpha\mathbf{r}_{ij}+(1-\alpha)\mathbf{r}'_{ij}]}e^{-\alpha(1-\alpha)\frac{\hbar^2\beta}{m}t^2}d\mathbf{t} = \int v(\mathbf{t})e^{i\mathbf{t}\mathbf{d}_{ij}(\alpha)}e^{-\alpha(1-\alpha)\frac{\hbar^2\beta}{m}t^2}d\mathbf{t}. \quad (85)$$

Тогда матрица плотности (78) принимает следующую форму:

$$\langle\mathbf{R}|\hat\rho(\beta)|\mathbf{R}'\rangle = \left(\frac{m}{2\pi\hbar^2\beta}\right)^{3N/2} e^{-\frac{m}{2\hbar^2\beta}\sum_{n=1}^{N}(\mathbf{r}_n-\mathbf{r}'_n)^2} e^{-\beta U(\mathbf{R})}\left\{1+\beta U(\mathbf{R}) - \frac{\beta}{2}\sum_{i=1}^{N}\sum_{\substack{j=1\\ j\neq i}}^{N}\frac{e_i e_j}{D}\Phi(\mathbf{r}_{ij},\mathbf{r}'_{ij};\beta)\right\}, \quad (86)$$

где

$$\Phi(\mathbf{r}_{ij},\mathbf{r}'_{ij};\beta) = \frac{1}{8\pi^3}\int_0^1 d\alpha\int v(\mathbf{t})e^{i\mathbf{t}\mathbf{d}_{ij}(\alpha)}e^{-\alpha(1-\alpha)\lambda^2 t^2}d\mathbf{t}, \quad \lambda^2 = \lambda^2(\beta) = \frac{\hbar^2\beta}{m}. \quad (87)$$

Видно, что различные потенциалы взаимодействия $v(\mathbf{t})$ порождают различные функции $\Phi(\mathbf{r}_{ij},\mathbf{r}'_{ij};\beta)$. В связи с этим, далее уравнение (87) называется *функционалом Кельбга.* Функция $\Phi(\mathbf{r}_{ij},\mathbf{r}_{ij};\beta)$ является *диагональным функционалом Кельбга.*

Рассмотрим функцию e^x. Если $x \ll 1$, то приближенно выполнено равенство $e^x \approx 1 + x$. Уравнение (86) было получено в первом порядке по $\hat{V}$. Таким образом, следующая величина должна быть намного меньше 1:

$$\left|\beta U(\mathbf{R}) - \frac{\beta}{2}\sum_{i=1}^{N}\sum_{\substack{j=1\\ j\neq i}}^{N}\frac{e_i e_j}{D}\Phi(\mathbf{r}_{ij},\mathbf{r}'_{ij};\beta)\right| \ll 1. \tag{88}$$

Уравнение (88) является условием применимости теории возмущений. Поэтому можно формально использовать эквивалентность $1+x$ и e^x для малых x:

$$1+\beta U(\mathbf{R}) - \frac{\beta}{2}\sum_{i=1}^{N}\sum_{\substack{j=1\\ j\neq i}}^{N}\frac{e_i e_j}{D}\Phi(\mathbf{r}_{ij},\mathbf{r}'_{ij};\beta) \approx e^{\beta U(\mathbf{R})}\exp\left\{-\frac{\beta}{2}\sum_{i=1}^{N}\sum_{\substack{j=1\\ j\neq i}}^{N}\frac{e_i e_j}{D}\Phi(\mathbf{r}_{ij},\mathbf{r}'_{ij};\beta)\right\}. \tag{89}$$

Подставляя это выражение в уравнение (86), получаем:

$$\langle\mathbf{R}|\hat{\rho}(\beta)|\mathbf{R}'\rangle = \left(\frac{m}{2\pi\hbar^2\beta}\right)^{3N/2} e^{-\frac{m}{2\hbar^2\beta}\sum\limits_{n=1}^{N}(\mathbf{r}_n-\mathbf{r}'_n)^2}\exp\left\{-\frac{\beta}{2}\sum_{i=1}^{N}\sum_{\substack{j=1\\ j\neq i}}^{N}\frac{e_i e_j}{D}\Phi(\mathbf{r}_{ij},\mathbf{r}'_{ij};\beta)\right\}. \tag{90}$$

4. ВЫВОД ПСЕВДОПОТЕНЦИАЛА КЕЛЬБГА

4.1. Диагональный псевдопотенциал Кельбга

Рассмотрим диагональный матричный элемент матрицы плотности:

$$\langle\mathbf{R}|\hat{\rho}(\beta)|\mathbf{R}\rangle = \\ = \left(\frac{m}{2\pi\hbar^2\beta}\right)^{\frac{3N}{2}}\exp\left\{-\frac{\beta}{2}\sum_{i=1}^{N}\sum_{\substack{j=1\\ j\neq i}}^{N}\frac{e_i e_j}{D}\Phi(\mathbf{r}_{ij},\mathbf{r}_{ij};\beta)\right\}. \tag{91}$$

Это и есть уравнение (23) в [1]. Чтобы вычислить $\Phi(\mathbf{r}_{ij},\mathbf{r}_{ij};\beta)$, проинтегрируем уравнение (87) по α:

$$\Phi(\mathbf{r}_{ij},\mathbf{r}_{ij};\beta) = \frac{1}{8\pi^3}\int d\mathbf{t}\, v(\mathbf{t})e^{i\mathbf{t}\mathbf{r}_{ij}(\alpha)}\int_0^1 d\alpha e^{-\alpha(1-\alpha)\lambda^2 t^2}, \tag{92}$$

$$\int_0^1 e^{-\alpha(1-\alpha)\lambda^2t^2}d\alpha = e^{-\lambda^2t^2/4}\sqrt{\pi}\frac{\mathrm{erfi}(\lambda t/2)}{\lambda t}, \tag{93}$$

где $\mathrm{erfi}(x) = -i\mathrm{erf}(ix)$ и $\mathrm{erf}(x)$ — функция ошибок.

Теперь подставим Фурье-компоненту кулоновского потенциала:

$$v(\mathbf{t}) = \frac{4\pi}{t^2} \tag{94}$$

в уравнение (92) и проинтегрируем по $\mathbf{t}$ в сферических координатах:

$$\Phi(\mathbf{r}_{ij},\mathbf{r}_{ij};\beta) = \frac{4\pi}{8\pi^3}\int\frac{d\mathbf{t}}{t^2}e^{i\mathbf{t}\mathbf{r}_{ij}(\alpha)}e^{-\lambda^2t^2/4}\sqrt{\pi}\frac{\mathrm{erfi}(\lambda t/2)}{\lambda t} = \\ = \frac{2}{\sqrt{\pi}}\int_0^\infty e^{-\lambda^2t^2/4}\frac{\sin(tr_{ij})}{tr_{ij}}\frac{\mathrm{erfi}(\lambda t/2)}{\lambda t}dt = \\ = \frac{1}{r_{ij}}\left(1-e^{-r_{ij}^2/\lambda^2}+\sqrt{\pi}r_{ij}/\lambda[1-\mathrm{erf}(r_{ij}/\lambda)]\right). \tag{95}$$

Выражение (95) часто называют “потенциалом Кельбга” или “псевдопотенциалом Кельбга”.

4.2. Недиагональный псевдопотенциал Кельбга

Далее снова рассмотрим уравнение (87), чтобы записать его в более компактной форме. Сначала вычислим интеграл по $\mathbf{t}$ в сферических координатах, используя уравнение (94):

$$\int v(\mathbf{t})e^{i\mathbf{t}\mathbf{d}_{ij}(\alpha)}e^{-\alpha(1-\alpha)\lambda^2t^2}d\mathbf{t} = \\ = 16\pi^2\int_0^\infty\frac{\sin(td_{ij}(\alpha))}{td_{ij}(\alpha)}e^{-\alpha(1-\alpha)\lambda^2t^2}dt = \\ = \frac{8\pi^3}{d_{ij}(\alpha)}\mathrm{erf}\left(\frac{d_{ij}(\alpha)/\lambda}{2\sqrt{\alpha(1-\alpha)}}\right). \tag{96}$$

Подставляя уравнение (96) в (87), получаем недиагональный псевдопотенциал Кельбга:

$$\Phi(\mathbf{r}_{ij},\mathbf{r}'_{ij};\beta) = \int_0^1\frac{d\alpha}{d_{ij}(\alpha)}\mathrm{erf}\left(\frac{d_{ij}(\alpha)/\lambda}{2\sqrt{\alpha(1-\alpha)}}\right). \tag{97}$$

Если частицы имеют разные массы, то нужно заменить массу в λ на приведенную:

$$\lambda^2 = \frac{\hbar^2\beta}{m} \to \frac{\hbar^2\beta}{2\mu_{ij}} = \lambda_{ij}^2, \quad \mu_{ij}^{-1} = m_i^{-1} + m_j^{-1}. \tag{98}$$

5. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В этой работе представлен подробный систематический вывод матрицы плотности для системы кулоновских частиц в высокотемпературном пределе. Приведенные выкладки следуют оригинальной работе Кельбга [1], при этом восстановлены многие детали, пропущенные в оригинальной статье. Подходы, использованные при совершении преобразований, будут полезны для исследователей в области квантовой статистической физики.

ПРИЛОЖЕНИЕ A: Обрезание ряда в уравнении (24)

В этом приложении будет вычислен коммутатор $[\hat{V},[\hat{V},[\hat{V},\hat{K}]]]$. Все выкладки произведены в координатном представлении. Перепишем потенциальную энергию $U(\mathbf{R})$ в терминах функции $v(\mathbf{r}_i)$:

$$U(\mathbf{R}) = \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{N}\sum_{\substack{j=1\\ j\neq i}}^{N} u_{ij}(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j) \equiv \sum_{i=1}^{N} v(\mathbf{r}_i). \tag{A1}$$

Вычислим $[\hat{V},\hat{K}]$:

$$[\hat{V},\hat{K}]\Psi(\mathbf{R}) = \frac{\hbar^2}{2m}\left[\sum_{i=1}^{N}\nabla_i^2, \sum_{j=1}^{N} v(\mathbf{r}_j)\right]\Psi(\mathbf{R}) = \\ = \left(\frac{\hbar^2}{2m}\right)\sum_{i=1}^{N}\sum_{j=1}^{N}\left[\nabla_i^2, v(\mathbf{r}_j)\right]\Psi(\mathbf{R}). \tag{A2}$$

Рассмотрим каждое слагаемое по отдельности:

$$\left[\nabla_i^2, v(\mathbf{r}_j)\right]\Psi(\mathbf{R}) = \nabla_i^2 v(\mathbf{r}_j)\Psi(\mathbf{R}) - v(\mathbf{r}_j)\nabla_i^2\Psi(\mathbf{R}). \tag{A3}$$

В результате дифференцирования образуются три составляющих:

$$\nabla_i^2 v(\mathbf{r}_j)\Psi(\mathbf{R}) = \Psi(\mathbf{R})(\nabla_i^2 v(\mathbf{r}_i))\delta_{ij} + \\ + 2(\nabla_i v(\mathbf{r}_i))(\nabla_i\Psi(\mathbf{R}))\delta_{ij} + v(\mathbf{r}_j)\nabla_i^2\Psi(\mathbf{R}), \tag{A4}$$

где δ_{ij} — символ Кронекера. Таким образом, получаем:

$$[\hat{V},\hat{K}] = \frac{\hbar^2}{2m}\sum_{i=1}^{N}\left\{(\nabla_i^2 v(\mathbf{r}_i)) + 2(\nabla_i v(\mathbf{r}_i))\nabla_i\right\}. \tag{A5}$$

Теперь рассчитаем $[\hat{V},[\hat{V},\hat{K}]]$:

$$[\hat{V},[\hat{V},\hat{K}]] = \\ = \frac{\hbar^2}{2m}\left[\sum_{j=1}^{N} v(\mathbf{r}_j), \sum_{i=1}^{N}\left\{(\nabla_i^2 v(\mathbf{r}_i)) + 2(\nabla_i v(\mathbf{r}_i))\nabla_i\right\}\right] = \\ = \frac{\hbar^2}{m}\left[\sum_{j=1}^{N} v(\mathbf{r}_j), \sum_{i=1}^{N}(\nabla_i v(\mathbf{r}_i))\nabla_i\right] = \\ = \frac{\hbar^2}{m}\sum_{j=1}^{N}\sum_{i=1}^{N}\left[v(\mathbf{r}_j), (\nabla_i v(\mathbf{r}_i))\nabla_i\right]. \tag{A6}$$

Снова рассмотрим каждое слагаемое отдельно:

$$[v(\mathbf{r}_j), (\nabla_i v(\mathbf{r}_i))\nabla_i]\,\Psi(\mathbf{R}) = \\ = v(\mathbf{r}_j)(\nabla_i v(\mathbf{r}_i))\nabla_i\Psi(\mathbf{R}) - (\nabla_i v(\mathbf{r}_i))\nabla_i v(\mathbf{r}_j)\Psi(\mathbf{R}). \tag{A7}$$

В результате дифференцирования образуются два вклада:

$$\nabla_i v(\mathbf{r}_j)\Psi(\mathbf{R}) = \Psi(\mathbf{R})(\nabla_i v(\mathbf{r}_i))\delta_{ij} + v(\mathbf{r}_j)(\nabla_i\Psi(\mathbf{R})). \tag{A8}$$

Тогда

$$[\hat{V},[\hat{V},\hat{K}]] = -\frac{\hbar^2}{m}\sum_{i=1}^{N}(\nabla_i v(\mathbf{r}_i))^2. \tag{A9}$$

Заметим, что $[\hat{V},[\hat{V},\hat{K}]]$ является функцией только координат $\mathbf{R}$. Таким образом, уравнение (A9) коммутирует с потенциальной энергией:

$$[\hat{V},[\hat{V},[\hat{V},\hat{K}]]] = -\frac{\hbar^2}{m}\sum_{j=1}^{N}\sum_{i=1}^{N}\left[v(\mathbf{r}_j), (\nabla_i v(\mathbf{r}_i))^2\right] = 0. \tag{A10}$$

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Kelbg G 1963 *Annalen der Physik* **467** 219–224
2. Filinov A V, Golubnychiy V O, Bonitz M, Ebeling W and Dufty J W 2004 *Phys. Rev. E* **70** 046411
3. Filinov V S, Bonitz M, Ebeling W and Fortov V E 2001 *Plasma Physics and Controlled Fusion* **43** 743–759
4. Fraser L M, Foulkes W M C, Rajagopal G, Needs R J, Kenny S D and Williamson A J 1996 *Phys. Rev. B* **53** 1814–1832
5. Dornheim T, Groth S and Bonitz M 2018 *Physics Reports* **744** 1–86
6. Inc W R Mathematica, Version 12.3.1 champaign, IL, 2021
7. Feynman R P 1972 *Statistical mechanics: a set of lectures by R. P. Feynman* Frontiers in physics notes taken by R. Kikuchi and H. A. Feiveson. Edited by Jacob Shaham
8. Kleinert H 2009 *Path integrals in quantum mechanics, statistics, polymer physics, and financial markets* (World scientific)