

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:

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

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

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:

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

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

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

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

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:

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

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:

$$Q(\beta) = \text{Sp} \hat{\rho}(\beta). \quad (7)$$

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

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

Здесь $\mathbf{R}'$ обозначает набор штрихованных 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:

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

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

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

В дальнейших выводах мы часто будем использовать “соотношение полноты”:

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

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

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

$$\mathbf{R} \cdot \mathbf{G} \equiv \mathbf{r}_1 \mathbf{g}_1 + \mathbf{r}_2 \mathbf{g}_2 + \dots + \mathbf{r}_N \mathbf{g}_N. \quad (13)$$

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

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

$$\hat{\mathbf{p}}_i |\mathbf{G}\rangle = \mathbf{g}_i |\mathbf{G}\rangle. \quad (14)$$

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

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

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 $\hat{G}(\beta)$:

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

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

$$\hat{G}(\beta) = \exp \left(-\frac{1}{2} [\beta\hat{V}, \beta\hat{K}] + \frac{1}{12} ([\beta\hat{V}, [\beta\hat{V}, \beta\hat{K}]] + [\beta\hat{K}, [\beta\hat{K}, \beta\hat{V}]] + \dots) \right), \quad (17)$$

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 :

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

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

$$\begin{aligned} -(\hat{K} + \hat{V})e^{-\beta(\hat{K} + \hat{V})} &= \\ &= -(\hat{K} + \hat{V}) \exp(-\beta\hat{V}) \exp(-\beta\hat{K}) \hat{G}(\beta) = \\ &= -\hat{K} \exp(-\beta\hat{V}) \exp(-\beta\hat{K}) \hat{G}(\beta) - \\ &\quad - \hat{V} \exp(-\beta\hat{V}) \exp(-\beta\hat{K}) \hat{G}(\beta). \end{aligned} \quad (19)$$

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

$$\begin{aligned} e^{-\beta\hat{V}}e^{-\beta\hat{K}}\frac{d\hat{G}(\beta)}{d\beta} &= \\ &= e^{-\beta\hat{V}}\hat{K}e^{-\beta\hat{K}}\hat{G}(\beta) - \hat{K}e^{-\beta\hat{V}}e^{-\beta\hat{K}}\hat{G}(\beta) = \\ &= e^{-\beta\hat{V}}(\hat{K} - e^{\beta\hat{V}}\hat{K}e^{-\beta\hat{V}})e^{-\beta\hat{K}}\hat{G}(\beta). \end{aligned} \quad (20)$$

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

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

Далее используется разложение экспоненты в ряд Тейлора:

$$e^{\pm\beta\hat{V}} = \hat{1} \pm \beta\hat{V} + \frac{\beta^2}{2}\hat{V}^2 + \dots \quad (22)$$

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

$$\begin{aligned} e^{\beta\hat{V}}\hat{K}e^{-\beta\hat{V}} &= \hat{K} + \beta[\hat{V}, \hat{K}] + \\ &+ \frac{\beta^2}{2}[\hat{V}, [\hat{V}, \hat{K}]] + \frac{\beta^3}{6}[\hat{V}, [\hat{V}, [\hat{V}, \hat{K}]]] + \dots \end{aligned} \quad (23)$$

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 А). 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]:

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

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

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

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

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

Из определения (16):

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

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

$$\begin{aligned} \hat{G}(\beta) = \hat{1} + \int_0^\beta \beta_1 \frac{d}{d\beta_1} \left(e^{\beta_1\hat{K}}\hat{V}e^{-\beta_1\hat{K}} \right) \hat{G}(\beta) d\beta_1 = \hat{1} + \int_0^\beta \beta_1 \frac{d}{d\beta_1} \left(e^{\beta_1\hat{K}}\hat{V}e^{-\beta_1\hat{K}} \right) \hat{1} d\beta_1 + \\ + \int_0^\beta \beta_1 \frac{d}{d\beta_1} \left(e^{\beta_1\hat{K}}\hat{V}e^{-\beta_1\hat{K}} \right) \int_0^{\beta_1} \beta'_1 \frac{d}{d\beta'_1} \left(e^{\beta'_1\hat{K}}\hat{V}e^{-\beta'_1\hat{K}} \right) \hat{1} d\beta'_1 d\beta_1 + \dots \end{aligned} \quad (28)$$

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

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

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

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

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 $e^{-\beta\hat{K}}$:

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

$$\hat{\rho}(\beta) = e^{-\beta \hat{V}} e^{-\beta \hat{K}} + \frac{1}{16\pi^3 D} \sum_{i=1}^N \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^N e_i e_j \int d\mathbf{t} v(\mathbf{t}) e^{-\beta \hat{V}} \int_0^\beta d\beta_1 \frac{d}{d\beta_1} \left(e^{(\beta_1 - \beta) \hat{K}} e^{i\mathbf{t}(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j)} e^{-(\beta_1 - \beta) \hat{K}} \right) e^{-\beta \hat{K}} d\beta_1. \quad (38)$$

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

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

$\hat{F}_{ij}$ 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:

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

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

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

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 $\Psi(\mathbf{R})$:

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

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

$$\begin{aligned} \nabla_i^2 e^{i\mathbf{t}(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j)} \Psi(\mathbf{R}) &= -t^2 e^{i\mathbf{t}(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j)} \Psi(\mathbf{R}) + \\ &+ 2ie^{i\mathbf{t}(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j)} \mathbf{t} \nabla_i \Psi(\mathbf{R}) + e^{i\mathbf{t}(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j)} \nabla_i^2 \Psi(\mathbf{R}), \end{aligned} \quad (43)$$

$$\begin{aligned} \nabla_j^2 e^{i\mathbf{t}(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j)} \Psi(\mathbf{R}) &= -t^2 e^{i\mathbf{t}(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j)} \Psi(\mathbf{R}) - \\ &- 2ie^{i\mathbf{t}(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j)} \mathbf{t} \nabla_j \Psi(\mathbf{R}) + e^{i\mathbf{t}(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j)} \nabla_j^2 \Psi(\mathbf{R}). \end{aligned} \quad (44)$$

Суммируя все это, получаем:

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

или в операторной форме:

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

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

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

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

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

Теперь подставим уравнение (48) в (38):

$$\hat{\rho}(\beta) = e^{-\beta \hat{V}} e^{-\beta \hat{K}} + \frac{1}{16\pi^3 D} \sum_{i=1}^N \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^N e_i e_j \int d\mathbf{t} v(\mathbf{t}) e^{i\mathbf{t}(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j)} e^{-\beta \hat{V}} \int_0^\beta d\beta_1 \frac{d}{d\beta_1} \left(e^{\frac{\hbar(\beta_1 - \beta)}{m} \mathbf{t}(\hat{\mathbf{p}}_i - \hat{\mathbf{p}}_j) + \frac{\hbar^2(\beta_1 - \beta)}{m} t^2} \right) e^{-\beta \hat{K}} d\beta_1. \quad (49)$$

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:

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

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

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

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

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

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

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

Итак, уравнение (50) переходит в:

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

Так как

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

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

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

Первый интеграл — δ -функция Дирака:

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

Следующие два интеграла также являются δ -функциями:

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

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):

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

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):

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

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

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

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

Окончательно получаем:

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

Преобразуем выражение в квадратных скобках [...] в экспоненте:

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

и получим уравнение (21) в [1]:

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

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

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

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

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

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

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

3.3. Преобразование матрицы плотности в уравнении (73)

Далее производим замену переменных в интеграле:

$$\alpha = \beta_1/\beta, \quad \beta d\alpha = d\beta_1. \quad (74)$$

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

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

Производя следующие преобразования:

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

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

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

и получить уравнение (22) в [1]:

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

Введем обозначение:

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

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

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

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

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

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:

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

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

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

Подставляя это выражение в уравнение (86), получаем:

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

4. ВЫВОД ПСЕВДОПОТЕНЦИАЛА КЕЛЬБГА

4.1. Диагональный псевдопотенциал Кельбга

Рассмотрим диагональный матричный элемент матрицы плотности:

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

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

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

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

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

Теперь подставим Фурье-компоненту кулоновского потенциала:

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

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

координатах:

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

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):

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

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

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

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

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

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 А: Обрезание ряда в уравнении (24)

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

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

Вычислим $[\hat{V}, \hat{K}]$:

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

Рассмотрим каждое слагаемое по отдельности:

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

В результате дифференцирования образуются три составляющих:

$$\begin{aligned} \nabla_i^2 v(\mathbf{r}_j) \Psi(\mathbf{R}) &= \Psi(\mathbf{R}) (\nabla_i^2 v(\mathbf{r}_i)) \delta_{ij} + \\ &+ 2(\nabla_i v(\mathbf{r}_i)) (\nabla_i \Psi(\mathbf{R})) \delta_{ij} + v(\mathbf{r}_j) \nabla_i^2 \Psi(\mathbf{R}), \end{aligned} \quad (A4)$$

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

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

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

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

Снова рассмотрим каждое слагаемое отдельно:

$$\begin{aligned} [v(\mathbf{r}_j), (\nabla_i v(\mathbf{r}_i)) \nabla_i] \Psi(\mathbf{R}) &= \\ &= v(\mathbf{r}_j) (\nabla_i v(\mathbf{r}_i)) \nabla_i \Psi(\mathbf{R}) - (\nabla_i v(\mathbf{r}_i)) \nabla_i v(\mathbf{r}_j) \Psi(\mathbf{R}). \end{aligned} \quad (A7)$$

В результате дифференцирования образуются два вклада:

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

Тогда

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

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

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

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)