

Д. О. Поліщук

ББГКІ ієрархія Фермі та Бозе багаточастинкових систем

(Представлено академіком НАН України А. Г. Загороднім)

Виводиться ієрархія ББГКІ для Фермі та Бозе багаточастинкових систем на основі ієрархії Неймана для кореляційних операторів. Побудовано розв'язок задачі Коші сформульованої ієрархії у випадку n -частинкового потенціалу взаємодії для початкових даних з простору послідовностей ядерних операторів.

В останні роки спостерігається значний прогрес у розвитку математичної теорії ієрархії рівнянь ББГКІ [1, 2] квантових багаточастинкових систем. Один з прикладів — строгий вивід квантових кінетичних рівнянь, що описують Бозе конденсат [3–6].

В оригінальних роботах Боголюбова [1, 2] розв'язок задачі Коші для ієрархії ББГКІ будувався у формі ряду ітерацій. Таке представлення розв'язку також використовується і в сучасних працях [7, 8]. У випадку статистики Максвелла–Больцмана розв'язок ієрархії ББГКІ побудовано у формі розкладу за кластерами частинок, еволюція яких описується кумулянтами груп операторів рівнянь Неймана [9] (або редукованими кумулянтами [10]). Такі розклади для розв'язку були побудовані на основі нерівноважного канонічного ансамблю [10, 11].

У роботі запропоновано альтернативний метод опису еволюції станів квантових багаточастинкових систем. Стани системи квантових частинок визначаються в термінах кореляційних операторів, еволюція яких описується ієрархією нелінійних рівнянь Неймана. На основі розв'язку цієї ієрархії визначено s -частинкові (маргінальні) оператори густини, які задовольняють ієрархію рівнянь ББГКІ [2].

Розглянемо квантову систему нефіксованого (випадкового, але скінченного) числа однакових (безспінових) частинок з масою $m = 1$ у просторі \mathbb{R}^ν , $\nu \geq 1$ (в термінології статистичної механіки така система відома як нерівноважний великий канонічний ансамбль [11]), які задовольняють статистику Фермі–Дірака або Бозе–Ейнштейна. З кожною частинкою асоціюємо гільбертів простір \mathcal{H} , $\mathcal{H}^{\otimes n}$ — тензорний добуток n гільбертових просторів \mathcal{H} .

Нехай \mathfrak{S}_n — група перестановок множини $\{1, 2, \dots, n\}$. Кожній перестановці $\pi \in \mathfrak{S}_n$ зіставимо ізоморфізм p_π простору $\mathcal{H}^{\otimes n}$ у себе: оператор p_π відображає $\psi_1 \otimes \psi_2 \otimes \dots \otimes \psi_n \in \mathcal{H}^{\otimes n}$ у $\psi_{\pi(1)} \otimes \psi_{\pi(2)} \otimes \dots \otimes \psi_{\pi(n)} \in \mathcal{H}^{\otimes n}$. Введемо оператори симетризації \mathcal{S}_n^+ та антисиметризації \mathcal{S}_n^- , визначені на $\mathcal{H}^{\otimes n}$ таким чином:

$$\mathcal{S}_n^\pm := \frac{1}{n!} \sum_{\pi \in \mathfrak{S}_n} (\pm 1)^{|\pi|} p_\pi, \quad (1)$$

де $|\pi| = 0$, якщо перестановка парна, $|\pi| = 1$, якщо перестановка непарна. Образ \mathcal{H}_n^+ оператора \mathcal{S}_n^+ є симетричним тензорним добутком n гільбертових просторів \mathcal{H} , відповідно, образ \mathcal{H}_n^- оператора \mathcal{S}_n^- є антисиметричним тензорним добутком n гільбертових просторів \mathcal{H} .

Простори $\mathcal{F}_{\mathcal{H}}^{\pm} = \bigoplus_{n=0}^{\infty} \mathcal{H}_n^{\pm}$, де $\mathcal{H}_0 = \mathbb{C}$, — простори Фока над гільбертовим простором \mathcal{H} , які асоційовані з відповідними системами нефіксованого числа Бозе та Фермі частинок.

Гамільтоніан системи $H = \bigoplus_{n=0}^{\infty} H_n$ — це самоспряжений оператор з областю визначення $\mathcal{D}(H) = \left\{ \psi = \bigoplus \psi_n \in \mathcal{F}_{\mathcal{H}}^{\pm} \mid \psi_n \in \mathcal{D}(H_n) \in \mathcal{H}_n^{\pm}, \sum_n \|H_n \psi_n\|^2 < \infty \right\} \subset \mathcal{F}_{\mathcal{H}}^{\pm}$. На підпросторі нескінченно диференційовних симетричних (або антисиметричних) функцій з компактними носіями $\psi_n \in L_0^{2,\pm}(\mathbb{R}^{\nu n}) \subset L^{2,\pm}(\mathbb{R}^{\nu n})$ n -частинковий Гамільтоніан H_n діє згідно з формулою ($H_0 = 0$)

$$H_n \psi_n = -\frac{\hbar^2}{2} \sum_{i=1}^n \Delta_{q_i} \psi_n + \sum_{k=1}^n \sum_{i_1 < \dots < i_k=1}^n \Phi^{(k)}(q_{i_1}, \dots, q_{i_k}) \psi_n, \quad (2)$$

де $\Phi^{(k)}$ — k -частинковий потенціал взаємодії, який задовольняє умови Като [10], $\hbar = 2\pi\hbar$ — постійна Планка.

Стани системи належать простору $\mathfrak{L}^1(\mathcal{F}_{\mathcal{H}}^{\pm}) = \bigoplus_{n=0}^{\infty} \mathfrak{L}^1(\mathcal{H}_n^{\pm})$ послідовностей $f = (I, f_1, \dots, f_n, \dots)$ ядерних операторів $f_n \equiv f_n(1, \dots, n) \in \mathfrak{L}^1(\mathcal{H}_n^{\pm})$, які задовольняють таку умову симетрії: $f_n(1, \dots, n) = f_n(i_1, \dots, i_n)$, якщо $\{i_1, \dots, i_n\} \in \{1, \dots, n\}$, з нормою

$$\|f\|_{\mathfrak{L}^1(\mathcal{F}_{\mathcal{H}}^{\pm})} = \sum_{n=0}^{\infty} \|f_n\|_{\mathfrak{L}^1(\mathcal{H}_n^{\pm})} = \sum_{n=0}^{\infty} \text{Tr}_{1, \dots, n} |f_n(1, \dots, n)|.$$

Символом \mathfrak{L}_0^1 позначимо всюди щільну в $\mathfrak{L}^1(\mathcal{F}_{\mathcal{H}}^{\pm})$ множину фінітних послідовностей вироджених операторів [10] з нескінченно диференційовними ядрами з компактними носіями. Зауважимо, що простори $\mathfrak{L}^1(\mathcal{F}_{\mathcal{H}}^{\pm})$ містять більш загальні послідовності операторів, ніж ті, якими визначаються стани систем частинок.

Введемо такі позначення: $Y_P \equiv \{X_1, \dots, X_{|P|}\}$ — це множина, елементами якої є $|P|$ множин, що попарно не перетинаються $X_i \subset Y \equiv \{1, \dots, s\}$ розбиття $P: Y = \bigcup_{i=1}^{|P|} X_i$. Оскільки $Y_P \equiv \{X_1, \dots, X_{|P|}\}$, Y_1 — це множина, що складається з одного елемента $Y = \{1, \dots, s\}$ розбиття P ($|P| = 1$). Щоб підкреслити, що множина $\{1, \dots, s\}$ є зв'язною підмножиною (змінні, що характеризують кластер з s елементів) розбиття P ($|P| = 1$), ми також позначаємо множину Y_1 символом $\{1, \dots, s\}_1$. В окремих випадках кластер може складатися лише з одного елемента.

У множині індексів визначено відображення декластеризації $\Theta: Y_P \rightarrow Y$, тобто

$$\Theta(Y_P) := Y. \quad (3)$$

Наприклад, у випадку множини $X_c = \{Y_1, s+1, \dots, s+n\}$ справедлива рівність $\Theta(X_c) = X \equiv \{1, \dots, s+n\}$.

Стани систем з гамільтоніаном (2) будемо описувати послідовностями $g(t) = (I, g_1(t, Y_1), \dots, g_{1+n}(t, X_c), \dots) \in \mathfrak{L}^1(\mathcal{F}_{\mathcal{H}}^{\pm})$ кореляційних операторів кластерів частинок, еволюція яких визначається задачею Коші для ієрархії рівнянь Неймана:

$$\frac{d}{dt} g_{1+n}(t, X_c) = -\mathcal{N}_{s+n}(X) g_{1+n}(t, X_c) + \mathcal{S}_{s+n}^{\pm} \sum_{\substack{P: X_c = \bigcup_i X_i, \\ |P| > 1}} \sum_{\substack{Z_1 \subset \Theta(X_1), \\ |Z_1| \geq 1}} \dots$$

$$\dots \sum_{\substack{Z_{|P|} \subset \Theta(X_{|P|}), \\ |Z_{|P|}| \geq 1}} \left(-\mathcal{N}_{\text{int}}^{\left(\sum_{i=1}^{|P|} |Z_i|\right)}(Z_1, \dots, Z_{|P|}) \right) \prod_{X_i \subset P} g_{|X_i|}(t, X_i), \quad (4)$$

$$g_{1+n}(t, X_c)|_{t=0} = g_{1+n}(0, X_c), \quad n \geq 1, \quad (5)$$

де оператори \mathcal{S}_{s+n}^{\pm} визначаються формулою (1), $X = \{1, \dots, s+n\}$, \sum_P — сума за всіма розбиттями множини $X_c = \{Y_1, s+1, \dots, s+n\}$ на $|P|$ непорожніх підмножин $X_i \subset X_c$, що попарно не перетинаються, $\sum_{Z_j \subset \Theta(X_j)}$ — сума за всіма підмножинами $Z_j \subset \Theta(X_j)$. Якщо

$f_n \in \mathfrak{L}_0^1(\mathcal{H}_n^{\pm}) \subset \mathcal{D}(\mathcal{N}_n) \subset \mathfrak{L}^1(\mathcal{H}_n^{\pm})$, оператор Неймана \mathcal{N}_n діє згідно з формулою

$$\mathcal{N}_n f_n = -\frac{i}{\hbar} (f_n H_n - H_n f_n),$$

та

$$\mathcal{N}_{\text{int}}^{(k)} f_n = -\frac{i}{\hbar} (f_n \Phi^{(k)} - \Phi^{(k)} f_n).$$

Визначимо s -частинкові (маргінальні) оператори густини за допомогою кореляційних операторів, що задовольняють ієрархію (4), такою формулою:

$$F_s(t, Y) := \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \text{Tr}_{s+1, \dots, s+n} g_{1+n}(t, X_c), \quad (6)$$

де $Y = \{1, \dots, s\}$, $X_c = \{Y_1, s+1, \dots, s+n\}$. Ряд (6) є збіжним за нормою просторів $\mathfrak{L}^1(\mathcal{F}_{\mathcal{H}}^{\pm})$, якщо $g_{1+n}(t) \in \mathfrak{L}^1(\mathcal{H}_{s+n}^{\pm})$. Покажемо, що еволюція маргінальних операторів густини (6) визначається ланцюжком рівнянь Боголюбова [1].

Для спрощення виводу розглянемо випадок двочастинкового потенціалу взаємодії, тобто доданки $\mathcal{N}_{\text{int}}^{(l)}$ з $l > 2$ у рівняннях (4) дорівнюють нулю. Продиференціюємо обидві частини розкладу (6) у сенсі поточкової збіжності в $\mathfrak{L}^1(\mathcal{F}_{\mathcal{H}}^{\pm})$ за часовою змінною та врахуємо рівняння (4). Тоді, беручи до уваги той факт, що

$$\mathcal{N}_{s+n}(X) = \mathcal{N}_s(Y) + \mathcal{N}_n(X \setminus Y) + \sum_{i_1 \subset Y} \sum_{i_2 \subset X \setminus Y} (\mathcal{N}_{\text{int}}^{(2)}(i_1, i_2)),$$

та рівність

$$\text{Tr}_{s+1, \dots, s+n} (-\mathcal{N}_n(X \setminus Y)) g_{1+n}(t, X_c) = 0,$$

отримуємо

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} F_s(t, Y) = & \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \text{Tr}_{s+1, \dots, s+n} \left(\left(-\mathcal{N}_s(Y) + \sum_{i_1 \in Y} \sum_{i_2 \in X \setminus Y} (-\mathcal{N}_{\text{int}}^{(2)}(i_1, i_2)) \right) g_{1+n}(t, X_c) + \right. \\ & \left. + \mathcal{S}_{s+n}^{\pm} \sum_{P: X_c = X_1 \cup X_2} \sum_{i_1 \in \Theta(X_1)} \sum_{i_2 \in \Theta(X_2)} (-\mathcal{N}_{\text{int}}^{(2)}(i_1, i_2)) g_{|X_1|}(t, X_1) g_{|X_2|}(t, X_2) \right). \end{aligned}$$

Згідно з означенням (6), перший доданок у правій частині рівності дорівнює $(-\mathcal{N}_s F_s(t))$. Використовуючи властивість симетрії операторів $g_{1+n}(t)$ по індексах, що характеризують підпростори, в яких обчислюється частковий слід, маємо

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} F_s(t, Y) &= -\mathcal{N}_s(Y) F_s(t, Y) + \text{Tr}_{s+1} \sum_{i \in Y} (-\mathcal{N}_{\text{int}}^{(2)}(i, s+1)) \times \\ &\times \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \text{Tr}_{s+2, \dots, s+n+1} \left(g_{2+n}(t, X_c, s+1+n) + \mathcal{S}_{s+n+1}^{\pm} \sum_{k=1}^{n+1} \frac{n!}{(k-1)!(n+1-k)!} \times \right. \\ &\left. \times g_k(t, s+n+2-k, \dots, s+n+1) g_{2+n-k}(t, Y_1, s+1, \dots, s+n-k+1) \right). \end{aligned} \quad (7)$$

Внаслідок зазначеної симетрії операторів $g_{1+n}(t)$, $n \geq 1$, відносно перестановки індексів $s+1, \dots, s+1+n$, справедлива рівність

$$\begin{aligned} g_{1+n}(t, \{1, \dots, s+1\}_1, s+2, \dots, s+1+n) &= g_{n+2}(t, \{1, \dots, s\}_1, s+1, \dots, s+1+n) + \\ &+ \mathcal{S}_{s+n+1}^{\pm} \sum_{k=1}^{n+1} \frac{n!}{(k-1)!(n-k+1)!} g_k(t, s+n+2-k, \dots, s+n+1) \times \\ &\times g_{2+n-k}(t, \{1, \dots, s\}_1, s+1, \dots, s+1+n-k). \end{aligned}$$

Тоді рівність (7) набуває вигляду

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} F_s(t, Y) &= -\mathcal{N}_s(Y) F_s(t, Y) + \text{Tr}_{s+1} \sum_{i \in Y} (-\mathcal{N}_{\text{int}}^{(2)}(i, s+1)) \times \\ &\times \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \text{Tr}_{s+2, \dots, s+n+1} g_{1+n}(t, \{1, \dots, s+1\}_1, s+2, \dots, s+n+1), \end{aligned}$$

і, згідно з означенням (6), ми остаточно виводимо

$$\frac{d}{dt} F_s(t, Y) = -\mathcal{N}_s(Y) F_s(t, Y) + \text{Tr}_{s+1} \sum_{i \in Y} (-\mathcal{N}_{\text{int}}^{(2)}(i, s+1)) F_{s+1}(t, Y, s+1).$$

Ці рівності для $s \geq 1$ будемо трактувати як ієрархію квантових еволюційних рівнянь, з якої визначаються маргінальні оператори густини. Така ієрархія рівнянь була вперше введена Боголюбовим у роботі [2] з рівняння Неймана для систем фіксованого числа частинок. У випадку n -частинкового потенціалу взаємодії ієрархія рівнянь ББГКІ виводиться подібним чином.

Початкова задача для ієрархії ББГКІ квантової системи частинок з гамільтоніаном (2) має вигляд

$$\frac{d}{dt} F_s(t, Y) = -\mathcal{N}_s(Y) F_s(t, Y) + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n!} \text{Tr}_{s+1, \dots, s+n} \sum_{\substack{Z \subset Y, \\ Z \neq \emptyset}} (-\mathcal{N}_{\text{int}}^{(|Z|+n)}(Z, X \setminus Y)) F_{s+n}(t, X), \quad (8)$$

$$F_s(t) \Big|_{t=0} = F_s(0), \quad s \geq 1. \quad (9)$$

Побудуємо розв'язок задачі Коші (8), (9) у випадку початкових даних, що задовольняють умову хаосу [11]. Така умова означає, що в початковий момент часу в системі відсутні кореляції, тобто початкові дані (5) мають вигляд

$$g(0) = (I, g_1(0, Y_1), 0, 0, \dots), \quad (10)$$

що в термінах маргінальних операторів густини (6) означає

$$F_s(0, Y) = g_1(0, Y_1), \quad (11)$$

де $Y = \{1, \dots, s\}$, $Y_1 = \{1, \dots, s\}_1$.

Нехай $\mathfrak{A}_{1+n}(t, X_c)$ — кумулянт $(1+n)$ -го, $n \geq 0$, порядку груп операторів рівнянь Неймана

$$\mathcal{G}_n(-t)f_n = e^{-\frac{i}{\hbar}tH_n} f_n e^{\frac{i}{\hbar}tH_n},$$

який визначається формулою

$$\mathfrak{A}_{1+n}(t, X_c)f_{s+n} := \sum_{P: X_c = \bigcup_k Z_k} (-1)^{|P|-1} (|P|-1)! \prod_{Z_k \subset P} \mathcal{G}_{|\Theta(Z_k)|}(-t, \Theta(Z_k))f_{s+n}, \quad (12)$$

де H_n — гамільтоніан (2), $f_n \in \mathcal{L}^1(\mathcal{H}_n^\pm)$, відображення декластеризації Θ визначено формулою (3) та $X_c = \{Y_1, s+1, \dots, s+n\}$.

У випадку систем Бозе або Фермі частинок розв'язок задачі Коші для ієрархії рівнянь Неймана (4) для початкових даних (10) має вигляд

$$g_{1+n}(t, X_c) = \mathfrak{A}_{1+n}(t, X_c) \mathcal{S}_{s+n}^\pm \prod_{i \in X_c} g_1(0, i), \quad (13)$$

де $\mathfrak{A}_{1+n}(t, X_c)$ визначається формулою (12), а оператори \mathcal{S}_{s+n}^\pm — формулою (1). У випадку статистики Максвелла–Больцмана розв'язок ієрархії рівнянь Неймана для початкових даних, що задовольняють умову хаосу, побудовано в [12].

Згідно з формулою (13) та означенням (6) маємо

$$F_s(t, Y) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \text{Tr}_{s+1, \dots, s+n} \mathfrak{A}_{1+n}(t, X_c) \mathcal{S}_{s+n}^\pm \prod_{i \in X_c} g_1(0, i).$$

Оскільки справедлива рівність (11), тобто $g_1(0, i) = \prod_{j \in \Theta(i)} F_1(0, j)$, де $i \in X_c$, остаточно отримуємо

$$F_s(t, Y) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \text{Tr}_{s+1, \dots, s+n} \mathfrak{A}_{1+n}(t, X_c) \mathcal{S}_{s+n}^\pm \prod_{i=1}^{s+n} F_1(0, i).$$

Цим розкладом зображується розв'язок задачі Коші для ієрархії ББГКІ (8), (9) для Фермі або Бозе багаточастинкових систем з початковими даними, що задовольняють умову хаосу.

В загальному випадку справедливе таке твердження.

Теорема 1. Для початкових даних $F(0) \equiv (I, F_1(0, 1), \dots, F_n(0, 1, \dots, n), \dots) \in \mathfrak{L}_\alpha^1(\mathcal{F}_{\mathcal{H}}^\pm) = \bigoplus_{n=0}^\infty \alpha^n \mathfrak{L}^1(\mathcal{H}_n^\pm)$, при умові $\alpha > e$, для $t \in \mathbb{R}$ існує єдиний розв'язок початкової задачі (8), (9), який має вигляд

$$F_s(t, 1, \dots, s) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \text{Tr}_{s+1, \dots, s+n} \mathfrak{A}_{1+n}(t, X_c) F_{s+n}(0, 1, \dots, s+n), \quad (14)$$

де $\mathfrak{A}_{1+n}(t)$ — кумулянт $(1+n)$ -го порядку (12). Для $F(0) \in \mathfrak{L}_{\alpha,0}^1(\mathcal{F}_{\mathcal{H}}^\pm) \in \mathfrak{L}_\alpha^1(\mathcal{F}_{\mathcal{H}}^\pm)$ розклад (14) є сильним розв'язком, а для довільних початкових даних з простору $\mathfrak{L}_\alpha^1(\mathcal{F}_{\mathcal{H}}^\pm)$ — слабким розв'язком.

Вигляд розв'язку (14) ідентичний випадку статистики Максвелла–Больцмана, оскільки кумулянти груп еволюційних операторів мають однакову структуру для усіх статистик. Це є наслідком комутаційних властивостей операторів симетризації.

Зображення розв'язку у формі ряду ітерацій може бути отримано з побудованого розв'язку за допомогою аналогів формул Дюамеля для кумулянтів, які справедливі для певних класів потенціалів взаємодії.

Зауважимо, що на відміну від визначення маргінальних операторів густини в термінах нерівноважного великого канонічного ансамблю [10], на основі означення (6) можна надати строгий сенс ієрархії ББГКІ в банахових просторах, до яких належать стани нескінченно-частинкових систем [10, 11].

Автор вдячний проф. В. І. Герасименку за корисні дискусії щодо питань, розглянутих у роботі.

1. Боголюбов М. М. Лекції з квантової статистики. Питання статистичної механіки квантових систем. — Київ: Рад. школа, 1949. — 207 с.
2. Боголюбов Н. Н., Гуров К. П. Кинетические уравнения в квантовой механике // Журн. эксперим. и теорет. физики. — 1947. — **17**. — С. 614–628.
3. Fröhlich J., Graffi S., Schwarz S. Mean-field and classical limit of many-body Schrödinger dynamics for bosons // Commun. Math. Phys. — 2007. — **271**, No 3. — P. 681–697.
4. Michelangeli A. Bose–Einstein condensation: analysis of problems and rigorous results // e-print s. i. s. a. — 70/2007/мр. — 2007. — 149 p.
5. Erdős L., Schlein B., Yau H.-T. Derivation of the cubic non-linear Schrödinger equation from quantum dynamics of many-body systems // Invent. Math. — 2007. — **167**, No 3. — P. 515–614.
6. Pezzotti F., Pulvirenti M. Mean-field limit and semiclassical expansion of a quantum particle system // Ann. Henri Poincaré. — 2009. — **10**. — P. 145–187.
7. Petrina D. Ya. On solutions of Bogolyubov kinetic equations. Quantum statistics // Theor. Math. Phys. — 1972. — **13**, No 3. — P. 391–405.
8. Arnold A. Mathematical properties of quantum evolution equations // Lect. Notes Math. — 2008. — **1946**. — P. 45–109.
9. Gerasimenko V. I., Shtyk V. O. Initial-value problem for the Bogolyubov hierarchy for quantum systems of particles // Ukr. Math. J. — 2006. — **58**, No 9. — P. 1175–1191.
10. Petrina D. Ya. Mathematical foundations of quantum statistical mechanics. — Dordrecht: Kluwer, 1995. — 444 p.
11. Cercignani C., Gerasimenko V., Petrina D. Many-particle dynamics and kinetic equations. — Dordrecht: Kluwer, 1997. — 252 p.
12. Gerasimenko V. I., Shtyk V. O. Evolution of correlations of quantum many-particle systems // J. Stat. Mech. — 2008. — **3**. — P03007.

Київський національний університет
ім. Тараса Шевченка

Надійшло до редакції 11.11.2009

D. O. Polishchuk

BBGKY hierarchy of Fermi and Bose many-particle systems

The BBGKY hierarchy for the Fermi and Bose many-particle systems is derived with the use of the von Neumann hierarchy for correlation operators. The solution of a Cauchy problem of the formulated hierarchy is constructed in the space of sequences of trace-class operators in the case of an n -body interaction potential.