Apèndix C

Desenvolupament analític de la contribució a l'energia de les correlacions a tres cossos.

Per incloure les interaccions a tres cossos es modifica la funció d'ona introduint a la part Jastrow un factor que inclou les coordenades d'una tercera partícula. Aquest terme té la següent forma:

$$\prod_{l} e^{-\frac{\lambda}{4}\vec{G}(l)^2} \prod_{i<j} e^{\frac{\lambda}{2}\chi(r_{ij})^2 r_{ij}^2}$$

on, per a la quantitat $\vec{G}$, la definició és única:

$$\vec{G}(l) = \sum_{i \neq l} \chi(r_{il}) \vec{r}_{il}$$

però en canvi la funció χ pot definir-se amb tall o sense, essent les respectives expressions: $\chi(r_{il}) = e^{-\left(\frac{r_{il}-r_t}{r_\omega}\right)^2}$ i $\chi(r_{il}) = \left(\frac{r-R_t}{R_t}\right)^3 e^{-\left(\frac{r_{il}-s_t}{\omega_t}\right)^2}$

amb $r_t = 0.80\sigma$ i $r_\omega = 0.41\sigma$, i entenent que $\vec{r}_{il} = \vec{r}_i - \vec{r}_l$.

Definint la quantitat $\mathrm{v}(r_{ij}) = \frac{1}{2} u(r_{ij}) - \frac{\lambda}{2} \chi^2(r_{ij}) r_{ij}^2$ i reagrupant, s'obté una forma molt habitual de presentar aquesta funció d'ona:

$$\Psi_t = \prod_{i<j} e^{-\mathrm{v}(r_{ij})} \prod_{l} e^{-\frac{\lambda}{4}\vec{G}(l)^2}$$

Per a calcular l'energia cinètica provinent d'aquesta part de la funció d'ona s'ha de calcular:

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

C.1. Càlcul del terme $\left(\frac{\nabla_i^a \Psi_t}{\Psi_t}\right)$

Aquest terme es correspon amb la meitat del valor de la component *a* de la força que actua sobre la partícula *i*. A continuació es detallen els passos més importants per a deduir-ne la seva expressió analítica.

a) Identitats usades en el desenvolupament.

$$\frac{\partial r_{lj}}{\partial r_i^a} = \frac{r_{lj}^a}{r_{lj}}\left(\delta_{li} - \delta_{ji}\right)$$

$$\frac{\partial \mathrm{v}\left(r_{lj}\right)}{\partial r_i^a} = \frac{\partial \mathrm{v}\left(r_{lj}\right)}{\partial r_{lj}}\frac{\partial r_{lj}}{\partial r_i^a} = \mathrm{v}'\left(r_{lj}\right)\frac{r_{lj}^a}{r_{lj}}\left(\delta_{li} - \delta_{ji}\right) = \mathrm{v}'\left(r_{ij}\right)\frac{r_{ij}^a}{r_{ij}} - \mathrm{v}'\left(r_{il}\right)\frac{r_{il}^a}{r_{il}}$$

$$\frac{\partial \vec{r}_{kl}}{\partial r_i^a} = \frac{\partial}{\partial r_i^a}\left(\vec{r}_k - \vec{r}_l\right) = \frac{\vec{r}_k^{\,a}}{r_k^a}\delta_{ki} - \frac{\vec{r}_l^{\,a}}{r_l^a}\delta_{li}$$

b) Desenvolupament.

$$\frac{\partial}{\partial r_i^a}\Psi_t = \frac{\partial}{\partial r_i^a}\left[\prod_{l<j} e^{-\mathrm{v}\left(r_{lj}\right)}\prod_l e^{-\frac{\lambda}{4}\vec{G}(l)\vec{G}(l)}\right] = \left[\sum_{l<j} -\frac{\partial \mathrm{v}\left(r_{lj}\right)}{\partial r_i^a} + \sum_l -2\frac{\lambda}{4}\vec{G}(l)\frac{\partial \vec{G}(l)}{\partial r_i^a}\right]\Psi$$

tractem per separat cadascun dels termes que apareixen:

$$\sum_{l<j} -\frac{\partial \mathrm{v}\left(r_{lj}\right)}{\partial r_i^a} = -\sum_{l<j}\mathrm{v}'\left(r_{ij}\right)\frac{r_{ij}^a}{r_{ij}} + \mathrm{v}'\left(r_{il}\right)\frac{r_{il}^a}{r_{il}} = -\sum_j \mathrm{v}'\left(r_{ij}\right)\frac{r_{ij}^a}{r_{ij}}$$

$$\frac{\partial \vec{G}(l)}{\partial r_i^a} = \frac{\partial}{\partial r_i^a}\sum_{k\neq l}\chi\left(r_{lk}\right)\vec{r}_{kl} = \sum_{k\neq l}\left(\chi'\left(r_{kl}\right)\vec{r}_{kl}\frac{r_{kl}^a}{r_{kl}}\left(\delta_{ki} - \delta_{li}\right) + \chi\left(r_{kl}\right)\left(\frac{\vec{r}_k^{\,a}}{r_k}\delta_{ki} - \frac{\vec{r}_l^{\,a}}{r_l}\delta_{li}\right)\right)$$

$$\sum_l -\frac{\lambda}{2}\vec{G}(l)\frac{\partial \vec{G}(l)}{\partial r_i^a} =$$

$$= -\frac{\lambda}{2}\sum_{l\neq i}\left(\vec{G}(l)\chi'\left(r_{il}\right)\vec{r}_{il}\frac{r_{il}^a}{r_{il}} - \vec{G}(i)\chi'\left(r_{li}\right)\vec{r}_{li}\frac{r_{li}^a}{r_{li}} + \vec{G}(l)\chi\left(r_{il}\right)\frac{\vec{r}_i^{\,a}}{r_i^a} - \vec{G}(i)\chi\left(r_{li}\right)\frac{\vec{r}_i^{\,a}}{r_i^a}\right) =$$

$$= -\frac{\lambda}{2}\sum_{l\neq i}\left(\left(\vec{G}(l) - \vec{G}(i)\right)\vec{r}_{il}\chi'\left(r_{il}\right)\frac{r_{il}^a}{r_{il}} + \left(G^a(l) - G^a(i)\right)\chi\left(r_{il}\right)\right)$$

Finalment, unint les expressions obtingudes obtenim:

$$\frac{1}{\Psi_t}\frac{\partial}{\partial r_i^a}\Psi_t = -\sum_j \mathrm{v}'\left(r_{ij}\right)\frac{r_{ij}^a}{r_{ij}} - \frac{\lambda}{2}\sum_{j\neq i}\left(\left(\vec{G}(j) - \vec{G}(i)\right)\vec{r}_{ij}\chi'\left(r_{ij}\right)\frac{r_{ij}^a}{r_{ij}} + \left(G^a(j) - G^a(i)\right)\chi\left(r_{ij}\right)\right)$$

$$F_i^a = -2\sum_j \mathrm{v}'\left(r_{ij}\right)\frac{r_{ij}^a}{r_{ij}} + \lambda\sum_{j\neq i}\left(\left(\vec{G}(i)-\vec{G}(j)\right)\vec{r}_{ij}\chi'\left(r_{ij}\right)\frac{r_{ij}^a}{r_{ij}} + \left(G^a(i)-G^a(j)\right)\chi\left(r_{ij}\right)\right)$$

C.2. Càlcul del terme $\nabla_i^a\left(\frac{\nabla_i^a\Psi_t}{\Psi_t}\right)$.

Hem d'aplicar l'operador ∇_i^a al resultat anterior.

Com que la derivada és molt llarga és convenient dividir l'expressió i aplicar per separat l'operador a cadascun dels termes. Finalment es poden reunir tots els termes per a obtenir una expressió prou compacta.

Mirant l'anterior resultat es veu ràpidament que hi ha tres grans sumands, que anomenaré S_1,S_2 i S_3:

$$S_1 = -\sum_{j\neq i}\mathrm{v}'\left(r_{ij}\right)\frac{r_{ij}^a}{r_{ij}}$$

$$S_2 = \sum_{j\neq i}\left(\left(\vec{G}(i)-\vec{G}(j)\right)\vec{r}_{ij}\chi'\left(r_{ij}\right)\frac{r_{ij}^a}{r_{ij}}\right) = \sum_{j\neq i}\left(\left(G^b(i)-G^b(j)\right)r_{ij}^b\chi'\left(r_{ij}\right)\frac{r_{ij}^a}{r_{ij}}\right)$$

$$S_3 = \sum_{j\neq i}\left(\left(G^a(i)-G^a(j)\right)\chi\left(r_{ij}\right)\right)$$

els dos últims sumants convindra també subdividir-los per a major claredat en l'obtenció del resultat.

El terme S_2 està escrit expressament en dos formes equivalents. Tot i semblar més compacta la notació vectorial, l'escriptura adoptant el conveni d'Einstein és més convenient per a fer-ne les derivacions i traduir-les després a un programa de càlcul.

a) Càlcul de $\nabla_i^a S_1$

$$T_1^a(i) \equiv \nabla_i^a S_1 = -\nabla_i^a\left[\sum_{j\neq i}\mathrm{v}'\left(r_{ij}\right)\frac{r_{ij}^a}{r_{ij}}\right] = -\sum_{j\neq i}\left[\frac{\partial \mathrm{v}'\left(r_{ij}\right)}{\partial r_i^a}\frac{r_{ij}^a}{r_{ij}} + \mathrm{v}'\left(r_{ij}\right)\frac{\partial}{\partial r_i^a}\left(\frac{r_{ij}^a}{r_{ij}}\right)\right] =$$

$$= -\sum_{j\neq i}\left[\mathrm{v}''\left(r_{ij}\right)\left(\frac{r_{ij}^a}{r_{ij}}\right)^2 + \mathrm{v}'\left(r_{ij}\right)\left(\frac{1}{r_{ij}} - \frac{r_{ij}^{a\,2}}{r_{ij}^3}\right)\right]$$

igualtat que es pot obtenir tenint en compte els següents resultats:

$$\frac{\partial \mathrm{v}'\left(r_{ij}\right)}{\partial r_i^a} = \mathrm{v}''\left(r_{ij}\right)\frac{\partial r_{ij}}{\partial r_i^a} = \mathrm{v}''\left(r_{ij}\right)\frac{r_{ij}^a}{r_{ij}}$$

$$\frac{\partial}{\partial r_i^a}\left(\frac{r_{ij}^a}{r_{ij}}\right)=\frac{1}{r_{ij}^2}\left(\frac{\partial r_{ij}^a}{\partial r_i^a}r_{ij}-\frac{\partial r_{ij}}{\partial r_i^a}r_{ij}^a\right)=\frac{1}{r_{ij}^2}\left(r_{ij}-\frac{r_{ij}^a r_{ij}^a}{r_{ij}}\right)$$

i quan es fa la suma sobre les tres components a, T_1^a es converteix en:

$$T_1(i)=-\sum_{j\neq i}\left[\mathrm{v}''(r_{ij})+\mathrm{v}'(r_{ij})\frac{2}{r_{ij}}\right]$$

b) Càlcul de $\nabla_i^a S_2$

$$T_2^a(i)\equiv\nabla_i^a S_2=\nabla_i^a\left[\sum_{j\neq i}\left(G^b(i)-G^b(j)\right)r_{ij}^b\chi'(r_{ij})\frac{r_{ij}^a}{r_{ij}}\right]=$$

$$=\sum_{j\neq i}\frac{\partial}{\partial r_i^a}\left[\left(G^b(i)-G^b(j)\right)r_{ij}^b\right]\chi'(r_{ij})\frac{r_{ij}^a}{r_{ij}}+\sum_{j\neq i}\left(G^b(i)-G^b(j)\right)r_{ij}^b\frac{\partial}{\partial r_i^a}\left[\chi'(r_{ij})\frac{r_{ij}^a}{r_{ij}}\right]\equiv A+B$$

Calculem-ne el primer sumatori:

$$A=\frac{\partial}{\partial r_i^a}\left[\left(G^b(i)-G^b(j)\right)r_{ij}^b\right]=\frac{\partial}{\partial r_i^a}\left(G^b(i)-G^b(j)\right)r_{ij}^b+\left(G^b(i)-G^b(j)\right)\frac{\partial r_{ij}^b}{\partial r_i^a}=$$

$$=\frac{\partial}{\partial r_i^a}\left(G^b(i)-G^b(j)\right)r_{ij}^b+\left(G^b(i)-G^b(j)\right)\frac{r_i^b}{r_i^a}\delta_{ab}$$

apliquem la definició de G i derivem:

$$G^b(i)=\sum_{k\neq i}\chi(r_{ki})r_{ki}^b\quad,\ G^b(j)=\sum_{k'\neq j}\chi(r_{k'j})r_{k'j}^b$$

$$\frac{\partial G^b(i)}{\partial r_i^a}=\frac{\partial}{\partial r_i^a}\left(\sum_{k\neq i}\chi(r_{ki})r_{ki}^b\right)=\sum_{k\neq i}\left(\chi'(r_{ki})\frac{\partial r_{ki}}{\partial r_i^a}r_{ki}^b+\chi(r_{ki})\frac{\partial r_{ki}^b}{\partial r_i^a}\right)=$$

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

$$\frac{\partial G^b(j)}{\partial r_i^a}=\frac{\partial}{\partial r_i^a}\left(\sum_{k'\neq j}\chi(r_{k'j})r_{k'j}^b\right)=\sum_{k'\neq j}\left(\chi'(r_{k'j})\frac{\partial r_{k'j}}{\partial r_i^a}r_{k'j}^b+\chi(r_{k'j})\frac{\partial r_{k'j}^b}{\partial r_i^a}\right)=$$

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

i ara podem usar aquests resultats per obtenir l'expressió del primer sumant de $T_2^a(i)$.

$$A=\sum_{j\neq i}\frac{\partial}{\partial r_i^a}\left[\left(G^b(i)-G^b(j)\right)r_{ij}^b\right]\chi'(r_{ij})\frac{r_{ij}^a}{r_{ij}}=$$

$$=\sum_{j\neq i}\sum_{k\neq i}\left(\chi'(r_{ik})\frac{r_{ik}^a}{r_{ik}}r_{ki}^b r_{ij}^b\chi'(r_{ij})\frac{r_{ij}^a}{r_{ij}}-\chi(r_{ik})\delta_{ab}r_{ij}^b\chi'(r_{ij})\frac{r_{ij}^a}{r_{ij}}\right)-$$

$$-\sum_{j\neq i}\left(\chi'(r_{ji})\frac{r_{ji}^a}{r_{ji}}r_{ij}^b r_{ij}^b\chi'(r_{ij})\frac{r_{ij}^a}{r_{ij}}+\chi(r_{ij})\delta_{ab}r_{ij}^b\chi'(r_{ij})\frac{r_{ij}^a}{r_{ij}}\right)+$$

$$+\sum_{j\neq i}\left(G^b(i)-G^b(j)\right)\delta_{ab}\chi'(r_{ij})\frac{r_{ij}^a}{r_{ij}}=$$

$$=-\sum_{j\neq i}\chi'(r_{ij})\frac{r_{ij}^a}{r_{ij}}r_{ij}^b\sum_{k\neq i}\chi'(r_{ik})\frac{r_{ik}^a}{r_{ik}}r_{ki}^b-\sum_{k\neq i}\chi(r_{ik})\sum_{j\neq i}\chi'(r_{ij})\frac{r_{ij}^a}{r_{ij}}\delta_{ab}r_{ij}^b-\sum_{j\neq i}\left(\chi'(r_{ij})\frac{r_{ij}^a}{r_{ij}}r_{ij}^b\right)^2-$$

$$-\sum_{j\neq i}\chi(r_{ij})\delta_{ab}r_{ij}^b\chi'(r_{ij})\frac{r_{ij}^a}{r_{ij}}+\sum_{j\neq i}\left(G^b(i)-G^b(j)\right)\delta_{ab}\frac{r_{ij}^a}{r_{ij}}\chi'(r_{ij})$$

Aquest és un resultat referit a la component a de la partícula i. L'índex b és un índex mut. Per a obtenir l'energia cal sumar sobre totes les components, a. Fem la suma, deixant indicades les components en els casos convenients per al càlcul numèric, en el ben entès però, que els índexs repetits porten implícita la suma. L'objectiu és obtenir l'expressió més convenient per a facilitar-ne la implementació en un programa.

$$\sum_a A=-\sum_{j\neq i}\chi'(r_{ij})\frac{r_{ij}^a r_{ij}^b}{r_{ij}}\sum_{k\neq i}\chi'(r_{ik})\frac{r_{ik}^a r_{ki}^b}{r_{ik}}-\sum_{k\neq i}\chi(r_{ik})\sum_{j\neq i}\chi'(r_{ij})r_{ij}-\sum_{j\neq i}\left(\chi'(r_{ij})r_{ij}\right)^2-$$

$$-\sum_{j\neq i}\chi(r_{ij})\chi'(r_{ij})r_{ij}+\sum_{j\neq i}\left(G^b(i)-G^b(j)\right)r_{ij}^b\frac{\chi'(r_{ij})}{r_{ij}}$$

Calculem ara el segon sumatori, el que hem anomenat B:

$$B=\sum_{j\neq i}\left(G^b(i)-G^b(j)\right)r_{ij}^b\frac{\partial}{\partial r_i^a}\left[\chi'(r_{ij})\frac{r_{ij}^a}{r_{ij}}\right]=$$

$$=\sum_{j\neq i}\left(G^b(i)-G^b(j)\right)r_{ij}^b\left(\chi''(r_{ij})\frac{\partial r_{ij}}{\partial r_i^a}\frac{r_{ij}^a}{r_{ij}}+\chi'(r_{ij})\frac{\partial}{\partial r_i^a}\left(\frac{r_{ij}^a}{r_{ij}}\right)\right)=$$

$$=\sum_{j\neq i}\left(G^b(i)-G^b(j)\right)r_{ij}^b\left(\chi''(r_{ij})\left(\frac{r_{ij}^a}{r_{ij}}\right)^2+\chi'(r_{ij})\frac{1}{r_{ij}^2}\left(r_{ij}-\frac{r_{ij}^a r_{ij}^a}{r_{ij}}\right)\right)$$

i fent com abans la suma sobre components obtenim:

$$\sum_a B=\sum_{j\neq i}\left(G^b(i)-G^b(j)\right)r_{ij}^b\left(\chi''(r_{ij})+\chi'(r_{ij})\frac{2}{r_{ij}}\right)$$

Podem escriure ara l'expressió completa del terme T_2. En el resultat que segueix ja està feta la suma sobre components x,y,z , de manera que el valor ja només depèn de i.

$$T_2(i)=\sum_a T_2^a(i)=\sum_a A+\sum_a B$$

$$T_2(i)=-\left(\sum_{j\neq i}\chi'(r_{ij})\frac{r_{ij}^a r_{ij}^b}{r_{ij}}\right)^2-\left(\sum_{k\neq i}\chi(r_{ik})\right)\left(\sum_{j\neq i}\chi'(r_{ij})r_{ij}\right)-\sum_{j\neq i}\left(\chi'(r_{ij})r_{ij}\right)^2-\sum_{j\neq i}\chi(r_{ij})\chi'(r_{ij})r_{ij}+$$

$$+\sum_{j\neq i}\left(G^b(i)-G^b(j)\right)r_{ij}^b\left(\chi''(r_{ij})+\chi'(r_{ij})\frac{3}{r_{ij}}\right)$$

c) Càlcul de ∇_i^a S₃

$$T_3^a(i)=\nabla_i^a S_3=\nabla_i^a\left[\sum_{j\neq i}\left(\left(G^a(i)-G^a(j)\right)\chi(r_{ij})\right)\right]=$$

$$=\sum_{j\neq i}\nabla_i^a\left(G^a(i)-G^a(j)\right)\chi(r_{ij})+\sum_{j\neq i}\left(G^a(i)-G^a(j)\right)\chi(r_{ij})\frac{\partial r_{ij}}{\partial r_i^a}\equiv C+D$$

Aplicant les derivades de G trobades a l'apartat b) es pot trobar el sumant C:

$$C=\sum_{j\neq i}\nabla_i^a\left(G^a(i)-G^a(j)\right)\chi(r_{ij})=$$

$$=\sum_{j\neq i}\sum_{k\neq i}\left(\chi'(r_{ik})\frac{r_{ik}^a}{r_{ik}}r_{ki}^a-\chi(r_{ik})\right)\chi(r_{ij})-$$

$$-\sum_{j\neq i}\left(\chi'(r_{ji})\frac{r_{ji}^a}{r_{ji}}r_{ij}^a\chi(r_{ij})+\chi(r_{ij})\chi(r_{ij})\right)=$$

$$=-\sum_{j\neq i}\chi(r_{ij})\sum_{k\neq i}\chi'(r_{ik})\frac{r_{ki}^a r_{ki}^a}{r_{ik}}-\sum_{j\neq i}\chi(r_{ij})\sum_{k\neq i}\chi(r_{ik})-\sum_{j\neq i}\chi(r_{ij})\chi'(r_{ij})\frac{r_{ij}^a r_{ij}^a}{r_{ij}}-\sum_{j\neq i}\chi^2(r_{ij})$$

i sumant sobre les components:

$$\sum_a C=-\sum_{j\neq i}\chi(r_{ij})\sum_{k\neq i}\chi'(r_{ik})r_{ik}-3\left(\sum_{j\neq i}\chi(r_{ij})\right)^2-\sum_{j\neq i}\chi(r_{ij})\chi'(r_{ij})r_{ij}-3\sum_{j\neq i}\chi^2(r_{ij})$$

El sumant D és de càlcul immediat:

$$D=\sum_{j\neq i}\left(G^a(i)-G^a(j)\right)\chi'(r_{ij})\frac{\partial r_{ij}}{\partial r_i^a}=\sum_{j\neq i}\left(G^a(i)-G^a(j)\right)\chi'(r_{ij})\frac{r_{ij}^a}{r_{ij}}$$

$$\sum_a D=\sum_{j\neq i}\left(\vec{G}(i)-\vec{G}(j)\right)\vec{r}_{ij}\frac{\chi'(r_{ij})}{r_{ij}}$$

Finalment

$$T_3(i)=\sum_a T_3^a(i)=-\sum_{j\neq i}\chi(r_{ij})\sum_{k\neq i}\chi'(r_{ik})r_{ik}-3\left(\sum_{j\neq i}\chi(r_{ij})\right)^2-\sum_{j\neq i}\chi(r_{ij})\chi'(r_{ij})r_{ij}-$$

$$-3\sum_{j\neq i}\chi^2(r_{ij})+\sum_{j\neq i}\left(\vec{G}(i)-\vec{G}(j)\right)\vec{r}_{ij}\,\frac{\chi'(r_{ij})}{r_{ij}}$$

C.3. Resultat final.

$$E_{cin}(i)=\sum_a\left[\left(\frac{\nabla_i^a\Psi_t}{\Psi_t}\right)\cdot\left(\frac{\nabla_i^a\Psi_t}{\Psi_t}\right)+\nabla_i^a\left(\frac{\nabla_i^a\Psi_t}{\Psi_t}\right)\right]=$$

$$=\frac{1}{4}\sum_a F_i^a F_i^a-\sum_{j\neq i}\left[\mathrm{v}''(r_{ij})+\mathrm{v}'(r_{ij})\frac{2}{r_{ij}}\right]-$$

$$-\frac{\lambda_t}{2}\sum_{j\neq i}\left[2\chi(r_{ij})\chi'(r_{ij})r_{ij}+3\chi^2(r_{ij})+\left(\chi'(r_{ij})r_{ij}\right)^2\right]+$$

$$+\frac{\lambda_t}{2}\sum_{j\neq i}\left(\vec{G}(i)-\vec{G}(j)\right)\vec{r}_{ij}\left(4\frac{\chi'(r_{ij})}{r_{ij}}+\chi''(r_{ij})\right)+$$

$$-\frac{\lambda_t}{2}2\sum_{j\neq i}\chi'(r_{ij})r_{ij}\sum_{k\neq i}\chi(r_{ik})-3\frac{\lambda_t}{2}\sum_{j\neq i}\chi(r_{ij})\sum_{k\neq i}\chi(r_{ik})+$$

$$-\frac{\lambda_t}{2}\sum_{j\neq i}\chi'(r_{ij})\frac{r_{ij}^a r_{ij}^b}{r_{ij}}\sum_{l\neq i}\chi'(r_{il})\frac{r_{il}^a r_{il}^b}{r_{il}}$$