ЖУРНАЛ ФІЗИЧНИХ ДОСЛІДЖЕНЬ
т. 1, № 1 (1996) с. 1–11

JOURNAL OF PHYSICAL STUDIES
v. 1, No 1 (1996) p. 1–11

ДЕЯКІ ОСОБЛИВОСТІ ПОБУДОВИ СЛАБОРЕЛЯТИВІСТСЬКОЇ СТАТИСТИЧНОЇ МЕХАНІКИ

Л. Ф. Блажиєвський, Г. Б. Гіль, С. С. Семак
Львівський державний університет імені Івана Франка, кафедра теоретичної фізики
Україна, 290005, Львів, вул. Драгоманова, 12
(Отримано 7 березня 1996)

Аналізується традиційне формулювання слаборелятивістської статистичної механіки. Показано, що існування термодинамічної границі накладає певні обмеження на вибір наближень, необхідних для отримання явного вигляду розподілу Ґіббса і рівняння Ліувілля. Для систем з далекосяжністю ці наближення відрізняються від тих, що використовуються у канонічному формалізмі постньютонівської механіки й часто призводять до необхідності врахування далекосяжних багаточастинкових внесків, пропорційних до вищих степенів константи взаємодії. Розглянуто критерії та шляхи врахування таких внесків у випадку електромагнітної та гравітаційної слаборелятивістських взаємодій. Знайдено ефективні функцію Гамільтона і рівняння Ліувілля для слаборелятивістської системи заряджених частинок. Показано, що у слабонеоднорідному випадку багаточастинкові електромагнетні взаємодії призводять до екранування парних поперечних взаємодій і виникнення ефективної маси частинок, пов'язаної з існуванням інших частинок системи. Отримані результати узгоджуються з польовою теорією. На основі польового підходу розглянуто вплив ефектів багаточастинкового релятивістського екранування на контактні, спін–спінові та спін–орбітальні взаємодії. Знайдено релятивістські поправки до взаємодії атомів з урахуванням впливу середовища.

Ключові слова: слаборелятивістська статистична механіка, постньютонівське наближення, ефекти запізнювання взаємодії, слаборелятивістський ансамбль Ґіббса.

PACS number(s): 05.20.-y, 03. 30.+p

I. ВСТУП

В останні десятиріччя з'явилась велика кількість праць, присвячених дослідженню релятивістських ефектів у різних задачах статистичної термодинаміки і кінетики у постньютонівському наближенні. Як відомо, у цьому наближенні вже виявляється ряд характерних рис релятивізму, однак самостійні польові ступені вільності ще не враховуються. Отже, з'являється можливість розвинути схему слаборелятивістської (постньютонівської) статистичної механіки, що аналогічна нерелятивістській і ґрунтується на розподілі Ґіббса та рівнянні Ліувілля, які містять лише динамічні змінні частинок. У цьому випадку припускають, що для знаходження явного вигляду цих співвідношень можна використати результати канонічного формулювання постньютонівської класичної механіки. Багато питань такого варіанту слаборелятивістської статистичної механіки викладено у монографіях І. П. Павлоцького [1, 2] та у статті [3]. Виявляється, однак, що у випадку системи заряджених частинок застосування цього формулювання часто призводить до суттєвих проблем.

Незадовільність згаданого підходу видно вже з перших праць зі статистичної теорії слаборелятивістської плазми [4, 5], що ґрунтуються на використанні класичного аналога гамільтоніана Брейта. Отриманий у цих працях вираз для релятивістської поправки до термодинамічних функцій, що зумовлена взаємодією, виявився розбіжним, і для отримання скінченного результату авторам довелося застосувати штучне перенормування інтеґралів. Аналогічні труднощі виникають і у квантовому випадку [6]. Як показали Б. А. Трубніков та В. В. Косачов [7], появу розбіжностей можна пояснити помилковістю вихідних припущень, згідно з якими ґіббсівський розподіл слаборелятивістської плазми конструюється звичайним чином на основі гамільтоніана брейтівського типу. Запропонований ними розподіл хоч і містить вираз для енергії частинок у постньютонівському наближенні, але відрізняється складною мірою інтеґрування, яка вже не зводиться до добутку одночастинкових мір Ліувілля. Цей розподіл приводить до скінченних релятивістських поправок. Пізніше результати праці [7] неодноразово обговорювали у літературі, зокрема в [8–11]. Висновки цих праць неоднозначні. Зазначимо також, що розвинений у [7] підхід, а також його узагальнення на випадок кінетики [12, 13] відрізняються від звичайної схеми статистичної механіки: його важко застосувати у квантовому випадку.

Метою нашої праці є розгляд деяких загальних принципів побудови слаборелятивістської статистичної механіки в її традиційній формі, що ґрунтується на використанні канонічних змінних. Звичайно у постньютонівському наближенні відома функція Лагранжа, тоді як для побудови ґіббсівського розподілу необхідно знати гамільтонову функцію. У цьому випадку виникає потреба перейти від лагранжевих змінних до канонічних. Такий перехід здійснюється завжди наближено. Однак у статистиці характер необхідних для цього наближень не очевидний. Ці наближення, як буде показано, можуть відрізнятися від тих, які використовують у задачах механіки. На відміну від механіки, вихідні співвідношення статистичної теорії мають фізичний зміст (тобто результати, отримані на їхній основі, угоджуються з феноменологічною термодинамікою) тільки у термодинамчній границі $N \to \infty$, $V \to \infty$, $N/V = \text{const}$. У зв'язку з цим можна навести таке зауваження М. М. Боголюбова: "...при всякому дослідженні об'ємних властивостей реальних газів, рідин та аналогічних систем, що ґрунтуються на статистичній механіці, такий граничний перехід завжди виконується, хоч іноді явно не оговорюється" ([14], ст. 15). Природно, що необхідність врахувати існування термодинамічної границі може впливати на характер наближень, які використовують під час переходу до канонічних змінних, а отже, і на явний вигляд вихідних співвідношень слаборелятивістської механіки. Розглянемо ці питання більш детально.

II. СЛАБОРЕЛЯТИВІСТСЬКІ РОЗПОДІЛ ҐІББСА ТА РІВНЯННЯ ЛІУВІЛЛЯ

Лагранжіани постньютонівської механіки мають вигляд

$$\mathcal{L} = \mathcal{L}_0(\dot{q}, q) + \Delta\mathcal{L}(\dot{q}, q), \tag{2.1}$$

де $\mathcal{L}_0$ — функція Лагранжа нерелятивістської теорії; $\Delta\mathcal{L}$ — релятивістська поправка, що враховує кінематичні релятивістські ефекти. У цьому випадку $\Delta\mathcal{L} \sim 1/c^2$ (c — швидкість світла у вакуумі). Для переходу від лагранжевих змінних $\dot{q}, q$ до канонічних π, q необхідно розв'язати систему рівнянь $\pi = \partial\mathcal{L}/\partial\dot{q}$ відносно $\dot{q}$. Внаслідок складної залежності $\Delta\mathcal{L}$ від $\dot{q}$ це можна зробити тільки наближено, врахувавши, наприклад, внески від $\Delta\mathcal{L}$ за теорією збурень. Підставивши отриманий результат у вираз для енергії $\dot{q}\partial\mathcal{L}/\partial\dot{q} - \mathcal{L} \equiv E(\dot{q}, q)$, знайдемо функцію Гамільтона. У лінійному за $\Delta\mathcal{L}$ наближенні вона описується формулою

$$\mathcal{H}(\pi, q) = \mathcal{H}_0(\pi, q) - \Delta\mathcal{L}(\frac{\partial\mathcal{H}_0}{\partial\pi}, q), \tag{2.2}$$

де $\mathcal{H}_0$ — функція Гамільтона, що відповідає лагранжіану $\mathcal{L}_0$.

Отже, малі поправки в $\mathcal{L}$ та $\mathcal{H}$ розрізняються, по суті, лише знаками. Цей добре відомий результат можна отримати й іншими способами (див. [15]). Формула (2.2) є в основі канонічного формалізму постньютонівської класичної механіки. Її можна використати і в квантовій механіці.

Покажемо тепер, що існують випадки, коли наближення, в якому отриманий гамільтоніан (2.2), не узгоджується з результатами, отриманими в термодинамічній границі. Розглянемо модельну систему з лагранжіаном

$$\mathcal{L}_m = \frac{1}{2}\sum_j \dot{q}_j^2 + \frac{\varepsilon}{2}\sum_{j\neq l}\Phi(j,l)\ \dot{q}_j\dot{q}_l, \tag{2.3}$$

де $\Phi(j,l) = \Phi(l,j) = \Phi(q_j, q_l)$, ε — малий параметр; другий доданок має характерний вигляд слаборелятивістської поправки на запізнення взаємодії. Система рівнянь, що пов'язують швидкості з канонічними імпульсами, має вигляд

$$\dot{q}_j + \varepsilon \sum_{l(l\neq j)} \Phi(j,l)\ \dot{q}_l = \pi_j. \tag{2.4}$$

Використавши метод послідовних наближень, неважко показати, що її розв'язок описують формули

$$\dot{q}_j = \pi_j - \sum_l R_{jl}\ \pi_l, \tag{2.5}$$

$$R_{jl} = \varepsilon\Phi(j,l)(1-\delta_{jl}) \tag{2.6}$$
$$-\sum_{s\geq 1}(-\varepsilon)^{s+1}\sum_{i_1\neq i_2\neq\ldots}\sum_{\neq i_s}\Phi(j,i_1)\Phi(i_1,i_2)\ldots\Phi(i_s,l),$$

де δ_{jl} — символ Кронекера. Підставивши (2.5), (2.6) у формулу для енергії (у нашій моделі вона збігається з лагранжіаном), одержимо функцію Гамільтона

$$\mathcal{H}_m = \frac{1}{2}\sum_j (1-R_{jj})\pi_j^2 - \frac{1}{2}\sum_{j\neq l} R_{jl}\pi_j\pi_l. \tag{2.7}$$

Формально це точний вираз. Наближення, що відповідає формулі (2.2), отримують шляхом заміни в (2.7) ряду для R_{jl} першим (лінійним за ε) його доданком. У цьому випадку звичайно припускають, що

$$|R^{(s+1)}| < |R^{(s)}|,\ R^{(s)}|_{s\to\infty} \to 0, \tag{2.8}$$

де через $R^{(s)}$ позначається s-й доданок ряду (2.6). Виявляється, однак, що ці умови реалізуються не завжди.

Нехай $\Phi(j,l) = |q_j - q_l|^{-\alpha}$, ($\alpha > 0$), об'єм системи $V = L^d$ (d — вимірність простору). Нам достатньо показати, що для будь-якої заданої конфігурації частинок може порушуватись умова $R^{(s)}|_{s\to\infty} \to 0$, що є необхідною для збіжності ряду (2.6). Введемо величини $\tilde{R}^{(s)}$, які отримують з $R^{(s)}$ заміною всіх $|q_j - q_l|$ максимальною відстанню порядку L. Не важко зауважити, що для будь-якої конфіґурації частинок мінімальне значення $|R^{(s)}|$ більше від $|\tilde{R}^{(s)}|$. Тому при $s \to \infty$

$$|R^{(s)}| > |\tilde{R}^{(s)}| = (\varepsilon/L^\alpha)^s N^{s-1} \tag{2.9}$$
$$\equiv \frac{1}{n}(\varepsilon n)^s L^{s(d-\alpha)-d},$$

де $n = N/L^d$. У термодинамічній границі $n = const$, $N \to \infty$, $L \to \infty$. При $\alpha < d$, незважаючи на наявність малого параметра ε, права частина нерівності

(2.9) може бути як завгодно великою. Це означає, що необхідна умова збіжності $R^{(s)}|_{s\to\infty} \to 0$ не виконується, і ряд (2.6) обривати не можна. Крім того, параметр розвинення є більшим від $n\varepsilon L^{d-\alpha}$ і також може необмежено зростати, що, відповідно, призводить до порушення умови $|R^{(s+1)}| < |R^{(s)}|$. Отже, при $\alpha < d$ наближення (2.2), взагалі кажучи, не прийнятне. У цьому випадку для побудови ґіббсівського розподілу у гамільтоновій функції (2.7) необхідно врахувати всі члени ряду R_{jl}. Відповідно до умови існування термодинамічної границі такий ряд дає скінченний внесок у макроскопічні середні величини. При цьому його суму можна розглядати як аналітичне продовження з області малих значень параметра розвинення (менших від одиниці) на область великих значень. Якщо $\alpha > d$, то співвідношення (2.9) не суперечить умовам (2.8), і збіжність ряду (2.6) може забезпечуватись малістю параметра ε. Тоді гамільтоніани (2.2) та (2.7) відрізняються лише малими доданками.

Зазначимо, що наші висновки про структуру наближених гамільтоніанів статистичної теорії не суперечать результатам механіки. В останньому випадку N, без сумніву, ніяк не пов'язане з L. Тому при $\varepsilon \ll 1$ умови (2.8) часто виконуються, і замість (2.7), (2.6) можна використати наближення (2.2).

У реальних фізичних системах кількість частинок і об'єм звичайно є скінченні. У зв'язку з цим перехід до термодинамічної границі є умовним. Тому для систем, де кількість частинок і об'єм достатньо великі, щоб був застосовним статистичний опис, і водночас достатньо малі, щоб параметр розвинення ряду (2.6) був менший від одиниці, може виявитись фізично адекватною і постньютонівська статистична механіка, що ґрунтується на лінійному наближенні (2.2). Зрозуміло, однак, що у цьому випадку при $\alpha < d$ розбіжності усуваються штучно. Крім того, з погляду математичної реалізації процедури переходу до термодинамічної границі такий опис є недостатньо послідовним.

Ця специфіка теорії впливає і на структуру слаборелятивістського рівняння Ліувілля. У випадку використання канонічних змінних це очевидно, оскільки у рівнянні є похідні $\partial\mathcal{H}/\partial\pi$, $\partial\mathcal{H}/\partial q$:

$$\frac{\partial F}{\partial t} + \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \pi}\frac{\partial F}{\partial q} - \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial q}\frac{\partial F}{\partial \pi} = 0. \tag{2.10}$$

Середні значення, що відповідають фізичним величинам $A(\dot q, q, t)$, можна визначити з виразу

$$\langle A\rangle = \int d\pi dq A\left(\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \pi}, q, t\right) F(\pi, q, t). \tag{2.11}$$

Розглянемо випадок лагранжевих змінних. Рівняння для функції розподілу і формулу для середніх отримують з відповідних співвідношень канонічного формулювання шляхом заміни змінних $\pi = \partial\mathcal{L}/\partial\dot q$ і описують виразами

$$\frac{\partial \tilde f}{\partial t} + \dot q\frac{\partial \tilde f}{\partial q} + \frac{\partial}{\partial \dot q}(\ddot q \tilde f) = 0, \tag{2.12}$$

$$\langle A\rangle = \int d\dot q dq A(\dot q, q, t)\tilde f(\dot q, q, t).$$

Прискорення частинок $\ddot q(\dot q, q, t)$ визначають з класичних рівнянь руху Лагранжа–Ейлера. Зокрема, для моделі (2.3) маємо

$$\ddot q_j + \varepsilon \sum_{l(l\neq j)} \Phi(j,l)\ddot q_l = -\varepsilon \sum_{l(l\neq j)} \dot q_l^2 \frac{\partial \Phi(j,l)}{\partial q_l}. \tag{2.13}$$

Така система рівнянь відрізняється від (2.4) лише виглядом правої частини. Природно, що зберігаються всі висновки, зроблені раніше щодо її розв'язку.

У слаборелятивістській теорії часто використовують й інші форми рівняння Ліувілля. Зокрема, як незалежні змінні замість швидкостей $\dot q$ часто зручно вибрати кінематичні імпульси $p = \partial\mathcal{L}_{id}/\partial\dot q$. Тоді формули (2.10)–(2.12) зводяться до вигляду

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \left\{\frac{\partial \mathcal{H}_{id}}{\partial p}\frac{\partial}{\partial q} + \frac{\partial}{\partial p}\dot p(p,q,t)\right\} f = 0, \tag{2.14}$$

$$\langle A\rangle = \int dp dq A(\frac{\partial \mathcal{H}_{id}}{\partial p}, q, t) f(p, q, t),$$

де $\mathcal{L}_{id}$ та $\mathcal{H}_{id}$ — лагранжіан та гамільтоніан вільних частинок. Зв'язок функцій $F, \tilde f$ та f очевидний. Сили $\dot p(p,q,t)$ визначають з класичних рівнянь руху заміною змінних. Відзначимо, що в (2.14), на відміну від (2.12), міра інтегрування є лоренц–інваріантною.

Розглянутий модельний приклад відповідає векторним частинкам. У загальному випадку слаборелятивістська поправка на взаємодію містить також доданки, квадратичні за швидкістю окремої частинки [16]:

$$\Delta\mathcal{L}_m = \frac{\varepsilon}{2}\sum_{j\neq l}\Phi(j,l)[\dot q_j \dot q_l + \frac{a}{2}(\dot q_j^2 + \dot q_l^2)], \quad a = \mathrm{const}.$$

(Для прикладу вкажемо на лагранжіани Кеннеді [1] та Айнштайна–Інфельда–Гоффмана [17]). Під час переходу до канонічних змінних квадратичні доданки враховуються точно. У цьому випадку у формулах (2.4)–(2.6) величини $\Phi(j,l), \pi_j$ потрібно замінити на

$$\tilde\Phi(j,l) = \frac{\Phi(j,l)}{1+\varepsilon a\sum_i \Phi(j,i)}, \ \tilde{\pi_j} = \frac{\pi_j}{1+\varepsilon a \sum_i \Phi(j,i)}.$$

Оскільки $\tilde\Phi(j,l) < 1$, то ряд (2.6) можна обривати. Однак тепер виникають ускладнення при розвиненні у ряди знаменників, оскільки у цьому випадку також необхідно враховувати існування термодинамічної границі. Не важко бачити, що для даних взаємодій при $\alpha < d$ таке розвинення, взагалі кажучи, неможливе. Гамільтонова функція буде складним чином залежати від параметра ε.

Отже, термодинамічний граничний перехід накладає певні обмеження на вибір наближень, які використовують для з'ясування явного вигляду вихідних співвідношень — ґіббсівського розподілу та рівняння Ліувілля — традиційної схеми слаборелятивістської статистичної механіки. Як випливає з описаного, ці обмеження фактично зумовлені не релятивізмом, а характером взаємодій. У випадку короткосяжного запізнення ($\alpha > d$) наближення канонічного формалізму постньютонівської механіки часто не суперечать термодинамічній границі і, відповідно, їх можна використати у статистичній теорії. Однак якщо запізнення є далекосяжним (випадок $0 < \alpha < d$)), то під час переходу до канонічних змінних і визначення прискорень необхідно враховувати, взагалі кажучи, всі члени ряду теорії збурень за степенями запізнюючої взаємодії. У цьому випадку послідовна статистична теорія не може ґрунтуватись на співвідношеннях канонічного формулювання постньютонівської механіки.

III. СИСТЕМА ЗАРЯДЖЕНИХ ЧАСТИНОК

Для прикладу розглянемо систему заряджених частинок. У постньютонівському наближенні вона описується лагранжіаном Дарвіна

$$L_D = \sum_j \frac{m}{2}\mathbf{v}_j^2(1+\frac{\mathbf{v}_j^2}{4c^2}) \tag{3.1}$$

$$-\frac{1}{2}\sum_{j\neq l}\frac{e^2}{r_{jl}}(1-\frac{1}{2c^2}\delta_{jl}^{\mu\nu}v_j^\mu v_l^\nu),$$

$$\delta_{jl}^{\mu\nu} = \delta_{\mu\nu} + n_{jl}^\mu n_{jl}^\nu,\ \mathbf{n}_{jl} = \mathbf{r}_{jl}/r_{jl},\ \mathbf{r}_{jl} = \mathbf{r}_j - \mathbf{r}_l.$$

Зрозуміло, що за грецькими символами, які повторюються, проводиться підсумовування ($\mu,\ \nu = 1,\ 2,\ 3$). На відміну від (2.3), тут мала поправка є також і у вільній частині лагранжіана. Цей доданок, маючи одночастинковий характер, слабо чутливий до термодинамічного граничного переходу. Тому в обчисленнях достатньо обмежитись його врахуванням тільки у лінійному наближенні. Зважаючи на сказане, можна показати, що рівняння типу (2.4), які визначають швидкості ($X_j^\mu = v_j^\mu$) або сили ($X_j^\mu = \dot{p}_j^\mu$), набудуть вигляду

$$X_j^\mu + \frac{e^2}{2mc^2}\sum_{l(l\neq j)}\frac{1}{r_{jl}}\delta_{jl}^{\mu\nu}X_l^\nu = Y_j^\mu, \tag{3.2}$$

причому в першому випадку

$$Y_j^\mu = (1+(\mathbf{p}_j/mc)^2)^{-1/2}P_j^\mu/m,$$

а в другому

$$Y_j^\mu = \sum_l F_{jl}^\mu, \quad \mathbf{F}_{jl} = \sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}_{jl}}\frac{4\pi e^2 i}{Vk^2} \tag{3.3}$$

$$\times\{-\mathbf{k} + \frac{1}{m^2c^2}[\mathbf{p}_j[\mathbf{k}\mathbf{p}_l]] - \frac{(\mathbf{k}\mathbf{p}_l)}{m^2c^2k^2}[\mathbf{k}[\mathbf{k}\mathbf{p}_l]]\},$$

де $\mathbf{P}_j$ та $\mathbf{p}_j$ — канонічний і кінематичний імпульси. Оскільки запізнення далекосяжне, то записуючи розв'язок рівняння (3.2) формулами типу (2.5), (2.6), необхідно враховувати всі члени розвинення (2.6). Знайдені розв'язки приводять до складних виразів для функції Гамільтона та рівняння Ліувілля, що містять багаточастинкові релятивістські взаємодії або сили. Оскільки при застосуваннях завжди доводиться мати справу з наближеннями, то природно використовувати такі самі наближення для спрощення цих виразів. Зокрема, для систем з далекосяжною взаємодією суттєві результати можна отримати вже у наближенні хаотичних фаз. У цьому наближенні під час обчислень беруть до уваги лише взаємодії з однаковим переданим імпульсом. Для їх врахування достатньо усереднити ряд (2.6) за системою невзаємодіючих частинок, що еквівалентно заміні в (2.6) сумувань за індексами частинок на інтеґрування за об'ємами з вагою N/V. Застосувавши перетворення Фур'є

$$\delta_{jl}^{\mu\nu}/2r_{jl} = \sum_{\mathbf{k}}\frac{4\pi}{Vk^2}l_{\mu\nu}^{\perp}e^{\mathbf{k}\mathbf{r}_{jl}},$$

$$l_{\mu\nu}^{\perp} = \delta_{\mu\nu} - k_\mu k_\nu/k^2,$$

можна показати, що після цього ряд (2.6) набуде вигляду знакозмінної геометричної прогресії. У результаті знаходимо, що у наближенні хаотичних фаз розв'язок рівнянь (3.2) описують формули

$$X_j^\mu = (\delta_{\mu\nu} - R_{jj}^{\mu\nu})Y_j^\nu - \sum_{l(l\neq j)}R_{jl}^{\mu\nu}Y_l^\nu, \tag{3.4}$$

$$R_{jj}^{\mu\nu} = -\frac{4\pi e^2}{Vm}\sum_{\mathbf{k}}\frac{\omega_0^2}{(ck)^2}\frac{l_{\mu\nu}^{\perp}}{(ck)^2+\omega_0^2} = -\frac{2e^2}{3mc^3}\omega_0\delta_{\mu\nu},$$

$$R_{jl}^{\mu\nu} = \frac{4\pi e^2}{Vm} \sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}_{jl}} \frac{l_{\mu\nu}^{\perp}}{(ck)^2 + \omega_0^2} = e^2 \Phi^{\mu\nu}(\frac{\omega_0}{c} r_{jl})/mc^2 r_{jl},$$

де

$$\Phi^{\mu\nu}(x) = (\delta_{\mu\nu} - n_\mu n_\nu)e^{-x} + (\delta_{\mu\nu} - 3n_\mu n_\nu)(\frac{e^{-x}}{x} + \frac{e^{-x}}{x^2} - \frac{1}{x^2}), \ \mathbf{n} = \mathbf{r}/r, \ \omega_0^2 = 4\pi e^2 N/Vm. \tag{3.5}$$

Отримані результати дають змогу побудувати функцію Гамільтона, в якій багаточастинкові релятивістські взаємодії замінені ефективними двочастинковими. Її можна записати у вигляді [18]

$$H = \sum_j H_j^* + \frac{1}{2} \sum_{j \neq l} H_{jl}, \tag{3.6}$$

$$H_j^* = \frac{\mathbf{P}_j^2}{2m^*} - \frac{\mathbf{P}_j^4}{8m^3c^2}, \ \frac{1}{m^*} = \frac{1}{m}(1 + \frac{2e^2\omega_0}{3mc^3}),$$

$$H_{jl} = \sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}_{jl}} \frac{4\pi e^2}{Vk^2}(1 - \frac{1/m^2c^2}{1 + \omega_0^2/k^2c^2} l_{\mu\nu}^{\perp} P_j^\mu P_l^\nu)$$

$$= \frac{e^2}{r_{jl}} \left(1 - \frac{1}{(mc)^2} P_j^\mu P_l^\nu \Phi^{\mu\nu}(\chi_c r_{jl})\right), \ \chi_c^{-1} = c/\omega_0.$$

Якщо цікавитись процесами, для яких $r_{jl} << \chi_c^{-1}$, то $\Phi^{\mu\gamma}$ можна розвинути у ряд за степенями $\chi_c r_{jl}$ і обмежитись внесками, квадратичними за параметром 1/c. У цьому випадку з гамільтонової функції (3.6) одержимо класичний аналог гамільтоніана Брейта, що ґрунтується на наближенні (2.2). Однак у цілому вирази (3.6) суттєво відрізняються від брейтівського аналога. По-перше, в (3.6) ефективна релятивістська взаємодія екранується на відстані χ_c^{-1}. Як бачимо з (3.5), в H_{jl}, крім членів з екрануючою експонентою, є доданок $P_j^\mu P_l^\nu(\delta_{\mu\nu} - 3n_\mu n_\nu)/r^3$, що характерний для дипольної взаємодії. При усередненні за напрямками вектора $\mathbf{r}_{jl}$ цей доданок зникає. Тобто ефективна релятивістська взаємодія екранується тільки у середньому. Друга особливість гамільтоніана (3.6) полягає у тому, що його вільна частина залежить від ефективної маси m^*, яка з'являється завдяки врахуванню діагональної частини тензора R_{jl}. Доданок $\Delta m = m - m^*$ пропорційний до $(e/c)^3$. Він, звісно, не пов'язаний з ефектами випромінювання, оскільки у вихідному виразі (3.1) ці ефекти не враховуються. Як і екранування взаємодії, такий доданок вказує на те, що ефективний гамільтоніан (3.6) неаналітичний за параметром $1/c^2$. Аналогічні залежності будуть і у співвідношеннях, які отримують у випадку його застосування. Цей висновок відповідає загальній специфіці статистичних систем з далекосяжністю. Добре відомо, що термодинамічні та структурні характеристики таких систем відрізняються неаналітичною залежністю від константи взаємодії. У нашому випадку у вихідних співвідношеннях (лагранжіані (3.1) або гамільтоніані з багаточастинковою взаємодією) у доданках, пов'язаних із взаємодією, швидкість світла фігурує тільки у поєднанні типу e^2/c^2 з константою взаємодії e^2. Природно, що таке саме поєднання буде фігурувати і в наслідках теорії. Тому не виправдані критичні зауваження, зроблені у працях [8, 9, 11] з приводу поправок типу $1/c^3$.

Використання ефективного гамільтоніана (3.6) для обчислення термодинамічних функцій не приводить (на відміну від брейтівського гамільтоніана) до розбіжностей. Це добре видно на прикладі класичної статсуми. У наближенні хаотичних фаз поправка на взаємодію до її логарифма визначається сумою кільцевих внесків $\langle H_{12}H_{23}\ldots H_{n1}\rangle_0$ (див. [19]). Виконавши необхідні обчислення, цю поправку можна описати виразом

$$\frac{1}{2}\sum_{\mathbf{k}}\sum_{n\geq 2}\frac{1}{n}(-\frac{\chi^2}{k^2})^n + \sum_{\mathbf{k}}\sum_{n\geq 2}\frac{1}{n}(\frac{\chi_c^2}{k^2+\chi_c^2})^n.$$

Тут перша сума являє собою відомий результат нерелятивістської теорії у дебаївському наближенні (χ^{-1} — класичний радіус Дебая). Друга визначає релятивістську поправку. Оскільки $\chi_c^2/(k^2+\chi_c^2) < 1$ при всіх $\mathbf{k}$, то обчислення суми за n не викликає труднощів. На відміну від цього, застосування класичного аналога гамільтоніана Брейта приводить до ряду $\sum_{n\geq 2}(\chi_c^2/k^2)^n/n$, розбіжність якого очевидна. Для визначення повної релятивістської поправки на взаємодію у наближенні хаотичних фаз необхідно додати внесок, зумовлений відмінністю m^* від m. Він дорівнює $(m^* - m)\partial \ln Z_0/\partial m$ (Z_0 — статсума нерелятивістського ідеального газу). Загальний результат можна записати у вигляді

$$-\sum_{\mathbf{k}}\left\{\frac{\chi_c^2}{k^2} + \ln(1 - \frac{\chi_c^2}{k^2+\chi_c^2})\right\}.$$

Цей вираз збігається з результатом праці [20], в якій розвинуто функціональне формулювання слаборелятивістської статистичної механіки, що не пов'язане з використанням гамільтонової функції. Релятивістська поправка до вільної енергії, яку звідси отримують, дорівнює $V\chi_c^3/6\pi\beta$ (β^{-1} — статистична температура), що відповідає [7].

Знайдемо тепер рівняння Ліувілля. Згідно з (3.4), (3.3) сила, що діє на частинку, визначається формулою

$$\dot{p}_j^\mu = (1 + \frac{2e^2\omega_0}{3mc^3}) \sum_{l(l\neq j)} F_{jl}^\mu - \sum_{s,l(s\neq l,j)} R_{js}^{\mu\nu} F_{sl}^\nu. \qquad (3.7)$$

Перший доданок тут можна переписати у вигляді суми двочастинкових перенормованих сил $\mathbf{F}_{jl}^*$, які відрізняються від (3.3) тільки тим, що у кулонівській частині сили e^2 замінюється на $e^{*2} = e^2(1 + +2e^2\omega_0/3mc^3)$. Слаборелятивістська частина сили пропорційна $1/c^2$ і тому її перенормування не суттєве. Зазначимо, що після переходу у (3.7) до прискорень e^{*2} заміниться на e^{*2}/m і перенормований множник можна віднести до маси, прийнявши $e^{*2}/m = e^2/m^*$, де m^* те саме, що й у (3.6).

Другий доданок у (3.7) складніший. Він містить парні ($l = j$) і тричастинкові (всі індекси різні) сили. Потрібно наголосити, що хоча R_{js} пропорційне $1/c^2$, тут не можна обмежуватися врахуванням лише кулонівської частини сили $\mathbf{F}_{jl}$. Слаборелятивістська поправка також суттєва. Як видно з (3.4), (3.5), на великих відстанях $R_{js} \sim 1/r_{js}^3$. Тому в термодинамічній границі мінімальне значення $|R_{js}|$ дорівнює $e^2/m\omega_0^2L^3 \sim 1/N$. Звідси випливає, що $\sum R \sim 1$, тобто другий доданок у (3.7) потрібно зберегти поряд з першим. Використавши цей вираз для сили у формулах (2.13), легко знайдемо слаборелятивістське рівняння Ліувілля. Не виписуючи результату, зазначимо, що система рівнянь для частинкових функцій розподілу, яку отримують на його основі, складніша від нерелятивістської. У кожному з рівнянь буде пов'язано не дві, а три послідовні функції розподілу. Рівняння такого типу, які отримують, однак, у рамках першого порядку теорії збурень за $1/c^2$ (стосовно (3.7) це означає, що $\omega_0 = 0$), розглянуті у працях [21,22].

Виявляється, що можна побудувати простіше рівняння Ліувілля, ніж згадане вище, якщо замінити (3.7) деякою ефективною силою парного характеру. Для цього у другому доданку формули (3.7) замінимо суму за s її середнім значенням за системою невзаємодіючих частинок, тобто використаємо наближення хаотичних фаз. Прийнявши до уваги формули (3.4), (3.3), зазначимо, що у це середнє дає внесок тільки останній доданок сили $\mathbf{F}_{sl}$. (Внески від кулонівського та магнетостатичного доданків зникають згідно з умовами $l_{\mu\nu}^\perp k_\nu = 0$ та $\langle \mathbf{p}_s \rangle = 0$). Отримаємо

$$\sum_s R_{js}^{\mu\nu} F_{sl}^\nu \simeq -\sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}_{jl}} \frac{4\pi e^2\omega_0^2 i}{Vm^2c^2k^4} \frac{(\mathbf{k}\mathbf{p}_l)[\mathbf{k}[\mathbf{k}\mathbf{p}_l]]_\mu}{(ck)^2 + \omega_0^2}.$$

Цей вираз об'єднується з аналогічним членом першої суми формули (3.7). У кінцевому підсумку знайдемо, що ефективну двочастинкову силу описують вирази

$$\dot{p}_j^\mu = \sum_{l(l\neq j)} G_{jl}^\mu, \qquad (3.8)$$

$$\mathbf{G}_{jl} = \frac{1}{V}\sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}_{jl}}(\mathbf{g}_1 + \mathbf{g}_2(j,l) + \mathbf{g}_3(l)),$$

$$\mathbf{g}_1 = -i\frac{4\pi e^{*2}}{k^2}\mathbf{k}, \quad \mathbf{g}_2(j,l) = i\frac{4\pi e^2}{(mck)^2}[\mathbf{p}_j[\mathbf{k}\mathbf{p}_l]],$$

$$\mathbf{g}_3(l) = -i\frac{4\pi e^2}{(mk)^2}\frac{(\mathbf{k}\mathbf{p}_l)[\mathbf{k}[\mathbf{k}\mathbf{p}_l]]}{(ck)^2 + \omega_0^2}.$$

Величини $\mathbf{g}_1, \mathbf{g}_2$ і $\mathbf{g}_3$ є фур'є–амплітудами кулонівської, магнетостатичної та запізнюючої сил. Як бачимо, запізнююча сила екранується, а кулонівська залежить від ефективного заряду. У цьому полягає відмінність формул (3.8) від аналогічних виразів, які отримують на основі теорії збурень у лінійному наближенні за параметром $1/c^2$.

Співвідношення (3.8), (2.14) дають змогу записати слаборелятивістське рівняння Ліувілля системи заряджених частинок у вигляді

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \sum_j (\mathbf{v}_j(\mathbf{p})\frac{\partial f}{\partial \mathbf{r}_j}) + \sum_{j\neq l}(\mathbf{G}_{jl}\frac{\partial f}{\partial \mathbf{p}_j}) = 0, \qquad (3.9)$$

де $\mathbf{v}_j(\mathbf{p}) = (1 - (\mathbf{p}_j/mc)^2/2)\mathbf{p}_j/m$. Ми врахували також, що $(\partial\dot{\mathbf{p}}/\partial\mathbf{p}) = 0$. Рівняння (3.9) отримане у наближенні хаотичних фаз. За загальним зовнішнім виглядом воно не відрізняється від рівняння Ліувілля нерелятивістської теорії. Нерелятивістський загальний вигляд будуть мати й отримані з (3.9) рівняння для частинкових функцій розподілу. Така аналогія дає змогу легко узагальнити добре розвинуті методи нерелятивістської теорії плазми на слаборелятивістський випадок. На основі функції Гамільтона (3.6) неважко записати і рівняння Ліувілля типу (2.10), що відповідає канонічним змінним. У цьому випадку вираз для узагальненої сили $\dot{\mathbf{P}}_j = -\partial H/\partial\mathbf{q}_j$, так само як для (3.8) та швидкості $\dot{\mathbf{q}}_i = \partial H/\partial\mathbf{P}_i$, має ефективний двочастинковий вигляд.

IV. РЕЗУЛЬТАТИ ПОЛЬОВОЇ ТЕОРІЇ. ВРАХУВАННЯ СПІНОВИХ ВЗАЄМОДІЙ

Покажемо, що формули (3.6) можна отримати з польової теорії на основі тих самих міркувань, що приводять до лагранжіана Дарвіна. Останній, як відомо, отримують з інтеґралу дії для частинок та поля

$$S = S_f + S_p + S_{int} = \int dt\ L \qquad (4.1)$$

за допомогою підстановки в S_{int} квазістатичних розв'язків польових рівнянь. Щоб одні і ті ж члени не враховували двічі, результат потрібно зменшити у два рази. Для нашої мети важливо відзначити, що множник $1/2$ отримується автоматично, якщо згадані вище розв'язки підставити також у квазістатичну частину S_f. Це пов'язане з тим, що для лінійної теорії (незалежно від квазістатичного наближення) на "траєкторіях поля", що задовольняють класичні рівняння руху, виконується рівність $S_f + S_{int} = S_{int}/2$. Для одержання гамільтонової функції замість (4.1) можна виходити з дії, що записана у змішаному представленні, де поле описується лагранжевими змінними, а частинки — канонічними. З точністю до $1/c^2$ включно, маємо

$$\tilde{S} = \frac{1}{8\pi}\int dt \int d^3r\{(-grad\phi - \frac{1}{c}\partial\mathbf{A}/\partial t)^2 - (rot\mathbf{A})^2\} + \int dt \sum_j \{(\mathbf{P}_j\dot{\mathbf{r}}_j) - [\frac{1}{2m}(\mathbf{P}_j - \frac{e}{c}\mathbf{A})^2 - \frac{\mathbf{P}_j^4}{8m^3c^2} + e\phi]\}, \quad (4.2)$$

де $\mathbf{A}, \phi$ — потенціали електромагнетного поля. На відміну від випадку, коли частинки описуються лагранжевими змінними, в (4.2) члени, квадратичні за $\mathbf{A}$, є не лише у польовій частині дії, але й у членах взаємодії. Це відображається на формі рівнянь поля. У кулонівському калібруванні їх записують у вигляді

$$\Delta\phi(\mathbf{r},t) = -4\pi\sum_j e\delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}_j), \quad (4.3)$$

$$(\Delta - \frac{1}{c^2}\frac{\partial^2}{\partial t^2})\mathbf{A}(\mathbf{r},t) = -\frac{4\pi}{c}\sum_j \frac{e}{m}(\mathbf{P}_j - \frac{e}{c}\mathbf{A}(\mathbf{r},t))\delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}_j) + \frac{1}{c}grad\frac{\partial\phi(\mathbf{r},t)}{\partial t}.$$

Застосувавши до цих рівнянь перетворення Фур'є стосовно координат, одержимо

$$\phi_{\mathbf{k}} = \frac{4\pi e}{k^2}\sum_j e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}_j}, \quad (4.4)$$

$$k^2\mathbf{A}_{\mathbf{k}} + \frac{1}{c^2}\partial^2\mathbf{A}_{\mathbf{k}}/\partial t^2 = \frac{4\pi}{c}\mathbf{j}_{\mathbf{k}} - \frac{4\pi e^2}{Vc^2}\sum_j\sum_q \mathbf{A}_{\mathbf{q}}e^{i(\mathbf{q}-\mathbf{k})\mathbf{r}_j}, \quad (4.5)$$

$$j^{\mu}_{\mathbf{k}} = \sum_j \frac{e}{m} l^{\perp}_{\mu\nu}P^{\nu}_j e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}_j}.$$

Зазначимо, що у випадку вільного поля з (4.5) випливає добре відоме дисперсійне співвідношення $\omega^2 = \omega_0^2 + k^2c^2$ для поперечних хвиль у плазмі. У наближенні хаотичних фаз у сумі за $\mathbf{q}$ враховується тільки доданок з $\mathbf{q} = \mathbf{k}$. Тоді

$$(k^2 + \frac{\omega_0^2}{c^2} + \frac{1}{c^2}\frac{\partial^2}{\partial t^2})\mathbf{A}_{\mathbf{k}}(t) = \frac{4\pi}{c}\mathbf{j}_{\mathbf{k}}. \quad (4.6)$$

Звідси, нехтуючи полями випромінювання, знаходимо

$$A^{\mu}_{\mathbf{k}} = \frac{4\pi e/mc}{k^2 + \omega_0^2/c^2}\sum_j l^{\perp}_{\mu\nu}P^{\nu}_j e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}_j}. \quad (4.7)$$

Формули (4.4), (4.7) є слаборелятивістськими квазістатичними розв'язками рівнянь поля у наближенні хаотичних фаз. У такому ж наближенні дія (4.2) набуває вигляду

$$\tilde{S} = \int dt \frac{1}{8\pi V}\sum_{\mathbf{k}}\left\{-(k^2 + \frac{\omega_0^2}{c^2})\left|\mathbf{A}_{\mathbf{k}}\right|^2 + k^2\left|\phi_{\mathbf{k}}\right|^2\right\} + \int dt \sum_j \left\{(\mathbf{P}_j\dot{\mathbf{r}}_j) - H^0_j - H^{'}_j\right\}, \quad (4.8)$$

$$H^0_j = \frac{\mathbf{P}_j^2}{2m} - \frac{\mathbf{P}_j^4}{8m^3c^2}, \quad H^{'}_j = \frac{e}{V}\sum_{\mathbf{k}}\left(\phi_{\mathbf{k}} - \frac{1}{mc}(\mathbf{P}_j\mathbf{A}_{\mathbf{k}})\right)e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}_j}.$$

Підставляючи замість $\phi_{\mathbf{k}}$, $\mathbf{A_k}$ їхні значення, отримаємо

$$\tilde{S} = \int dt \left\{ \sum_j (\mathbf{P}_j \dot{\mathbf{r}}_j) - \tilde{H} \right\}, \ \tilde{H} = \sum_j H_j^0 + \frac{1}{2} \sum_{j,l} H_{jl}. \tag{4.9}$$

Тут H_{jl} має той самий вигляд, що й у виразі (3.6). Однак $\tilde{H}$ не збігається з (3.6). Це пояснюється тим, що в (4.8), (4.7) параметр m має зміст "голої" маси частинки. Для переходу до фізичних мас необхідно виконати перенормування, вводячи для кожної з частинок відповідний контрчлен δm_j. У випадку знаходження постньютонівського лагранжіана описаним вище способом введення контрчленів еквівалентне вилученню самодії. Перенормування $\tilde{H}$ дещо складніше. Справді, контрчлени δm_j не повинні залежати від кількості частинок у системі. Однак члени взаємодії в H_{jl} залежать від N, оскільки N є в ω_0^2. Тому в H_{jl} множник $(1 + \omega_0^2/k^2c^2)^{-1}$ потрібно записати у вигляді $1 - (\omega_0^2/k^2c^2)/[1 + (\omega_0^2/k^2c^2)]$ і вилучити самодію тільки у доданку, що не залежить від впливу середовища (тобто не залежить від ω_0^2). Частину самодії, що залишилась, об'єднуємо з H_j^0. Після цього $\tilde{H}$ перетворюємо до вигляду (3.6).

Спосіб отримання гамільтоніана, що тут розглядаємо, дає змогу визначити також внесок спінових і контактних взаємодій. Для цього в (4.7) $H_j^{'}$ потрібно доповнити доданком [23]

$$\Delta H_j = \frac{e}{V} \sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}_j} \{ \frac{\hbar^2 k^2}{8m^2c^2} \phi_{\mathbf{k}} + \frac{i\hbar}{4m^2c^2} \phi_{\mathbf{k}} (\boldsymbol{\sigma}_j [\mathbf{k}\mathbf{P}_j]) + \frac{i\hbar}{2mc} (\boldsymbol{\sigma}_j [\mathbf{k}\mathbf{A_k}]) \}, \tag{4.10}$$

(σ_j^μ — матриці Паулі), що враховує взаємодію спіну з електромагнетним полем. Відповідно змінюються і рівняння поля. Їхні квазістатичні розв'язки тепер опишемо формулами

$$\phi_{\mathbf{k}} = \frac{4\pi e}{k^2} \sum_j e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}_j} \left\{ 1 - \frac{\hbar^2 k^2}{8m^2c^2} - \frac{i\hbar}{4m^2c^2} (\boldsymbol{\sigma}_j [\mathbf{k}\mathbf{P}_j]) \right\},$$

$$A_{\mathbf{k}}^\mu = \frac{4\pi e/mc}{k^2 + \omega_0^2/c^2} \sum_j e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}_j} l_{\mu\nu}^{\perp} \left(\mathbf{P}_j + \frac{i\hbar}{2} [\mathbf{k}\boldsymbol{\sigma}_j] \right)^\nu.$$

Повторивши попередні перетворення, отримаємо гамільтонову функцію, в якій поряд з (3.6) враховано спінові взаємодії. Їх описують виразами

$$H_{s-s} = -\frac{\pi}{2V} \left(\frac{e\hbar}{mc} \right)^2 \sum_{\mathbf{k}} \sum_{j \neq l} e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}_{jl}} \left(1 - \frac{\chi_c^2}{k^2 + \chi_c^2} \right) l_{\mu\nu}^{\perp} \sigma_j^\mu \sigma_l^\nu, \tag{4.11}$$

$$H_c = -\frac{\pi}{2V} \left(\frac{e\hbar}{mc} \right)^2 \sum_{\mathbf{k}} \sum_{j \neq l} e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}_{jl}}, \tag{4.12}$$

$$H_{s-o} = \frac{\pi}{2V} \hbar \left(\frac{e}{mc} \right)^2 \sum_{\mathbf{k}} \sum_{j \neq l} e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}_{jl}} \frac{1}{k^2} \{ (\boldsymbol{\sigma}_j [\mathbf{k}\mathbf{P}_j]) - (\boldsymbol{\sigma}_l [\mathbf{k}\mathbf{P}_l]) \}$$

$$-\frac{\pi\hbar}{V} \left(\frac{e}{mc} \right)^2 \sum_{\mathbf{k}} \sum_{j \neq l} e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}_{jl}} \frac{1}{k^2 + \chi_c^2} \{ (\boldsymbol{\sigma}_j [\mathbf{k}\mathbf{P}_j]) - (\boldsymbol{\sigma}_l [\mathbf{k}\mathbf{P}_l]) \}.$$

Наведені формули описують відповідно спін–спінові, дарвінівські (контактні) і спін–орбітальні взаємодії. Як бачимо, далекодіючі частини цих взаємодій також екрануються. Дарвінівська і контактна частини спін–спінової взаємодії (у координатному зображенні вони пропорційні $\delta(\mathbf{r}_{jl})$) не екрануються. Неекрановані й ті члени в H_{s-o}, що описують взаємодію спінів "зі своєю орбітою".

На завершення цього розділу відзначимо, що формули (3.6), (4.9) у рамках польової теорії можна отримати й іншими шляхами. Наприклад, у [24] вираз для H_{jl} з (3.6) визначили шляхом канонічного перетворення релятивістського гамільтоніана, що описує частинки і поле. Однак виконуючи перенормування, автори [24] не врахували внески, що призводять до виникнення ефективної маси m^*. У [25] вирази (3.6) отримали за допомогою усереднення статистичної матриці густини для частинок і поля за польовими змінними.

V. СИСТЕМА ВЗАЄМОДІЮЧИХ АТОМІВ

Результати попередніх розділів елементарно узагальнити на випадок системи частинок різних сортів, після чого їх можна використати для визначення слаборелятивістської функції Гамільтона та рівняння Ліувілля складних частинок — атомів, іонів, молекул. З цією метою [26] кожний з індексів, що нумерує частинки, потрібно замінити двома, один з яких нумерує стабільні комплекси, а другий — частинки даного комплексу. Координати частинок $\mathbf{r}_{aj}$ зручно записати як $\mathbf{r}_{aj} = \mathbf{r}_a + \mathbf{q}_{aj}$, де $\mathbf{r}_a$ описує положення деякої виділеної точки комплексу, а внутрішня координата $\mathbf{q}_{aj}$ визначає відстань частинок з номером aj від цієї виділеної точки. Шукані формули отримують розвиненням вихідних співвідношень у ряди за степенями $\mathbf{q}_{aj}/|\mathbf{r}_a - \mathbf{r}_b|$.

Обмежимось тут лише побудовою слаборелятивістської класичної функції Гамільтона для системи атомів. Нехай $\mathbf{r}_{a1}, \ldots, \mathbf{r}_{aZ}, \mathbf{P}_{a1}, \ldots, \mathbf{P}_{aZ}$ — координати та імпульси електронів a-го атома, Z — порядковий номер цього атома, m та m_0 — маси електрона і ядра. Координати й імпульси ядра позначені через $\mathbf{r}_{a0}$ та $\mathbf{P}_{a0}$. Приймемо

$$\mathbf{r}_{aj} = \mathbf{X}_a - \frac{m}{M}\sum_{l=1}^{Z}\mathbf{q}_{al} + \mathbf{q}_{aj},\ j = 1, 2, ..., Z,$$

$$\mathbf{r}_{a0} = \mathbf{X}_a - \frac{m}{M}\sum_{l=1}^{Z}\mathbf{q}_{al}, \tag{5.1}$$

де $M = m_0 + Zm$ — маса атома; $\mathbf{X}_a$ — координата центра інерції a-го атома, $\mathbf{q}_{aj}$ — відстань j-го електрона від ядра. Формулам (5.1) відповідає перетворення імпульсів

$$\mathbf{P}_{aj} = \frac{m}{M}\boldsymbol{\mathcal{P}}_a + \mathbf{p}_{aj},\ \mathbf{P}_{a0} = \frac{m_0}{M}\boldsymbol{\mathcal{P}}_a - \sum_{l=1}^{Z}\mathbf{p}_{al}. \tag{5.2}$$

Використавши (5.1), (5.2) і (3.6), після нескладних перетворень отримаємо

$$H = \sum_a H_a + \frac{1}{2}\sum_{a\neq b}\{\rho(\nabla_a)\rho(\nabla_b)/X_{ab} - \frac{1}{c^2}Q^\mu(\nabla_a)Q^\nu(\nabla_b)\Phi^{\mu\nu}(\chi_c X_{ab})/X_{ab}\}, \tag{5.3}$$

$$\rho(\nabla_a) = e\sum_{j=1}^{Z}\left(e^{\nabla_a\mathbf{q}_{aj}} - 1\right)exp\left(-\sum_{j=1}^{Z}\frac{m}{M}\nabla_a\mathbf{q}_{aj}\right),$$

$$\mathbf{Q}(\nabla_a) = \frac{\boldsymbol{\mathcal{P}}_a}{M}\rho(\nabla_a) + e\sum_{j=1}^{Z}\frac{\mathbf{p}_{aj}}{m}\left(e^{\nabla_a\mathbf{q}_{aj}} + Z\frac{m}{m_0}\right)\exp\left(-\sum_{\mathrm{j}=1}^{Z}\frac{\mathrm{m}}{\mathrm{M}}\nabla_{\mathrm{a}}\mathbf{q}_{\mathrm{aj}}\right), \tag{5.4}$$

$X_{ab} = |\mathbf{X}_a - \mathbf{X}_b|$, ∇_a — оператор ґрадієнта за $\mathbf{X}_a$. Релятивістський радіус екранування $1/\chi_c$ визначається співвідношенням $\chi_c^2 = 4\pi nZe^2/\tilde{m}c^2$, $\tilde{m} = mm_0/(m_0 + Zm)$ — зведена маса електрона, $n = N/V$ — концентрація атомів. Гамільтоніан вільного атома H_a записують хоча й простою, але дещо громіздкою формулою і ми її не наводимо. Зазначимо тільки, що ефективні маси $\tilde{m}^*$, m_0^*, M^*, які містяться в H_a, отримують множенням $\tilde{m}$,m_0, M на $(1 - 2Ze^2\chi_c/3\tilde{m}c^2)$.

По суті, виписані формули відрізняються від (3.6) лише позначеннями. Зробимо тепер деякі спрощення. Припустимо, що електронні оболонки атомів не перекриваються. Тоді у членах міжатомної взаємодії в (5.3), (5.4) експоненти, які містять $\mathbf{q}_{aj}$, можна розвинути у ряди. Знехтуємо також релятивістськими ефектами, що пов'язані з рухом атомів. Тоді замість (5.4) покладемо

$$\rho(\nabla_a) \simeq e\sum_j(\nabla_a\mathbf{q}_{aj}),$$

$$\mathbf{Q}(\nabla_a) =\simeq e\sum_j\frac{\mathbf{p}_{aj}}{m}\left\{\frac{m}{\tilde{m}} + (\nabla_a\mathbf{q}_{aj}) + \frac{1}{2}(\nabla_a\mathbf{q}_{aj})^2\right\}$$

і в (5.3) обмежимося лише доданками до другого порядку за ∇ включно. Крім того, для реальних значень густин атомів $\chi_c|\mathbf{q}_{aj}-\mathbf{q}_{al}| \ll 1$ і в H_a можна знехтувати релятивістським екрануванням. У кінцевому підсумку функцію Гамільтона слаборелятивістської системи атомів описують формулами

$$H = \frac{1}{2M}\sum_a \boldsymbol{\mathcal{P}}_a^2 + \sum_a (h_a + h_a^{'}) + \frac{1}{2}\sum_{a\neq b}\sum_{n=0}^{4} V_{ab}^{(n)}, \tag{5.5}$$

$$h_a = \frac{1}{2\tilde{m}^*}\sum_j \mathbf{p}_{aj}^2 + \frac{1}{2m_0^*}(\sum_j \mathbf{p}_{aj})^2 - \sum_j \frac{Ze^2}{q_{aj}} + \frac{1}{2}\sum_{j\neq l}\frac{e^2}{|\mathbf{q}_{aj}-\mathbf{q}_{al}|},$$

$$h_a^{'} = -\sum_j \frac{\mathbf{p}_{aj}^4}{8m^3c^2} - \frac{e^2}{2m^2c^2}\sum_{j\neq l} p_{aj}^{\mu} p_{al}^{\nu}(\delta_{\mu\nu} + s_\mu s_\nu)/|\mathbf{q}_{aj}-\mathbf{q}_{al}|,$$

$$V_{ab}^{(0)} = d_a^{\mu} d_b^{\nu}(\delta_{\mu\nu} - 3n_\mu n_\nu)/X_{ab}^3,$$

$$V_{ab}^{(1)} = \pi_a^{\mu}\pi_b^{\nu}\Psi^{\mu\nu},\ V_{ab}^{(2)} = (\pi_a^{\mu}\hat{L}_b^{\nu} + \pi_b^{\mu}\hat{L}_a^{\nu})\Psi^{\mu\nu},$$

$$V_{ab}^{(3)} = \frac{1}{2}(\pi_a^{\mu}\hat{D}_b^{\nu} + \pi_b^{\mu}\hat{D}_a^{\nu})\Psi^{\mu\nu},\ V_{ab}^{(4)} = \hat{L}_a^{\mu}\hat{L}_b^{\nu}\Psi^{\mu\nu},$$

де введене позначення

$$\mathbf{d}_a = e\sum_{j=1}^{Z}\mathbf{q}_{aj},\quad \pi_a = \frac{e}{\tilde{m}}\sum_{j=1}^{Z}\mathbf{p}_{aj},$$

$$\hat{\mathbf{D}}_a = \frac{e}{m}\sum_{j=1}^{Z}\mathbf{p}_{aj}(\mathbf{q}_{aj}\nabla_a)^2,$$

$$\hat{\mathbf{L}}_a = \frac{e}{m}\sum_{j=1}^{Z}\mathbf{p}_{aj}(\mathbf{q}_{aj}\nabla_a),\ \Psi^{\mu\nu} = \Phi^{\mu\nu}(\chi_c X_{ab})/X_{ab},$$

$$\mathbf{n} = (\mathbf{X}_a - \mathbf{X}_b)/|\mathbf{X}_a - \mathbf{X}_b|,\ \mathbf{s} = (\mathbf{q}_{aj}-\mathbf{q}_{al})/|\mathbf{q}_{aj}-\mathbf{q}_{al}|.$$

Пояснимо зміст окремих доданків у (5.5). Сума $h_a + h_a^{'}$ є слаборелятивістською функцією Гамільтона вільного нерухомого атома. Нетривіальність релятивістських поправок тут виявляється лише завдяки виникненню ефективних мас $\tilde{m}^*$ та m_0^*. $V_{ab}^{(0)}$ — звичайна електростатична дипольна взаємодія. Релятивістські поправки до взаємодії атомів подають членами $V_{ab}^{(n)}$, де $n = 1,...,4$. При цьому $V_{ab}^{(1)}$ описує взаємодію орбітальних струмів, $V_{ab}^{(2)}$ — орбітальних струмів з орбітальними дипольними моментами, $V_{ab}^{(3)}$ — орбітальних струмів з орбітальними квадрупольними моментами і $V_{ab}^{(4)}$ — взаємодію орбітальних дипольних моментів. На невеликих відстанях, коли $\chi_c X_{ab} \ll 1$, $\Psi^{\mu\nu} \simeq (\delta_{\mu\nu} + n_\mu n_\nu)/X_{ab}$, отримані тут функції збігаються з результатами праці [27], в якій розраховували релятивістські поправки на взаємодію для двох ізольованих атомів. Неважко бачити, що у цьому випадку $V^{(1)} \sim 1/X_{ab}$, $V^{(2)} \sim 1/X_{ab}^2$, $V^{(3)}, V^{(4)} \sim 1/X_{ab}^3$, тобто ці взаємодії далекосяжні. Зрозуміло, що в присутності середовища, то вони екрануються.

[1] И. П. Павлоцкий, *Начала слаборелятивистской статистической механики* (Высшая школа, Москва, 1983).
[2] И. П. Павлоцкий, Препринт Ин-та прикл. матем. им. М. В. Келдыша, № Т-16105, Москва, 1987.
[3] Yu. N. Orlov, I. P. Pavlotsky, Physica A **151**, 318 (1988).
[4] J. E. Krizan, P. Havas, Phys. Rev. **128**, 2916 (1962).
[5] J. E. Krizan. Phys. Rev. A **140**, 1155 (1965).
[6] T. E. Dengler, J. E. Krizan, Phys. Rev. A **2**, 2388 (1970).
[7] Б. А. Трубников, В. В. Косачев, ЖЭТФ **54**, 941 (1968).
[8] R. Lapiedra, E. Santos, Phys. Rev. D **23**, 2181 (1981).
[9] X. Barcons, R. Lapiedra, Phys. Rev. A **28**, 3030 (1983).
[10] J. E. Krizan, Phys. Rev. D **22**, 3017 (1980).
[11] J. E. Krizan, Phys. Rev. D **25**, 593 (1982).
[12] B. A. Trubnikov, Nucl. Fusion **8**, 51 (1968).
[13] B. A. Trubnikov, Nucl. Fusion **8**, 58 (1968).
[14] Н. Н. Боголюбов, *Проблемы динамической теории в*

статистической физике (МГУ, Москва, 1979).
[15] Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, *Механика* (Наука, Москва, 1988).
[16] Р. П. Гайда, Физика элем. частиц и ат. ядра **132**, 427 (1982).
[17] Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, *Теория поля* (Наука, Москва, 1973).
[18] Л. Ф. Блажиевский, Укр. физ. журн. **20**, 1273 (1975).
[19] А. Исихара, *Статистическая физика* (Мир, Москва, 1973).
[20] Л. Ф. Блажиевский, ТМФ **66**, 409 (1986).
[21] А. А. Баранов, Б. Т. Брук–Левинсон, И. П. Павлоцкий, Л. Г. Шеховцева, ДАН БССР **17**, 801 (1973).
[22] A. A. Baranov, E. T. Brook–Levinson, I. P. Pavlotsky, L. G. Shekhovtsova, Phys. Lett. A **43**, 417 (1973).
[23] А. И. Ахиезер, В. Б. Берестецкий, *Квантовая электродинамика* (Наука, Москва, 1981).
[24] R. D. Jones, A. Pytte, Phys. Fluids **23**, 269 (1980).
[25] Л. Ф. Блажиевский, Г. Б. Гиль, В. С. Янишевский, *В сб.: Вопросы квантовой теории конденсированных сред* (Штиинца, Кишинев, 1990), с. 74.
[26] С. Р. де Гроот, Л. Г. Сатторп, *Электродинамика* (Наука, Москва, 1982).
[27] W. J. Meath, J. O. Hirschfelder, J. Chem. Phys. **44**, 3197 (1966).

SOME PROBLEMS OF THE CONSTRUCTION OF WEAKLY RELATIVISTIC STATISTICAL MECHANICS

L. F. Blazhievsky, H. B. Hil', S. S. Semak
Ivan Franko Lviv State University, Chair of Theoretical Physics
12 Drahomanov Str., Lviv UA–290005, Ukraine

The traditional formulation of the weakly relativistic statistical mechanics is analyzed. It is shown that the existence of the thermodynamic limit leads to some restrictions on the choice of approximations necessary for the determination of the explicit form of Gibbs distribution and Liouville equation. For the systems with long–range interaction these approximations differ from the ones used in the canonical formulation of the post–Newtonian mechanics. The statistical mechanics approximations often of necessity take into account the long–range many particle interactions proportional to higher powers of the interaction constant. The criterions and ways of accounting for these contributions in the cases of electromagnetic and gravitational weakly relativistic interactions are considered. The effective Hamilton function and Liouville equation for the weakly relativistic systems are determined. It is shown that in the weakly nonuniform case the many particle electromagnetic interactions lead to the screening of pair transverse interactions and to the arising of the effective particle mass, connected with the existence of other particles. The obtained results are in accordance with the field theory. On the basis of the field approach the influence of the effects of many particle relativistic screening on the contact, spin-spin and spin–orbital interactions are considered. The relativistic corrections of the atom interactions are found with the accounting for medium influence.