



## Оригинальные статьи

Научная статья

УДК 538.9; 530.1; 539

<https://doi.org/10.17308/kcmf.2023.25/11480>

## Релятивистская модель межатомных взаимодействий в конденсированных системах

А. Ю. Захаров<sup>1</sup>✉, М. А. Захаров<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Новгородский государственный университет имени Ярослава Мудрого,  
ул. Большая Санкт-Петербургская, 41, Великий Новгород 173003, Российская Федерация

### Аннотация

Предложен метод описания динамики систем взаимодействующих атомов в терминах вспомогательного поля, которое в состоянии покоя эквивалентно заданным межатомным потенциалам, а в динамическом режиме представляет собой классическое релятивистское поле. Установлено, что для центральных межатомных потенциалов, допускающих преобразование Фурье, вспомогательное поле представляет собой суперпозицию элементарных полей, удовлетворяющих уравнению типа Клейна-Гордона-Фока с комплексными параметрами массы.

**Ключевые слова:** межатомные потенциалы, классическая релятивистская динамика, запаздывающие взаимодействия, явление необратимости, уравнение Клейна-Гордона-Фока

**Для цитирования:** Захаров А. Ю., Захаров М. А. Релятивистская модель межатомных взаимодействий в конденсированных системах. *Конденсированные среды и межфазные границы*. 2023;25(4): 494–504. <https://doi.org/10.17308/kcmf.2023.25/11480>

**For citation:** Zakharov A. Yu., Zakharov M. A. Relativistic model of interatomic interactions in condensed systems. *Condensed Matter and Interphases*. 2023;25(4): 494–504. <https://doi.org/10.17308/kcmf.2023.25/11480>

✉ Захаров Анатолий Юльевич, e-mail: [anatoly.zakharov@novsu.ru](mailto:anatoly.zakharov@novsu.ru)

© Захаров А. Ю., Захаров М. А., 2023



## 1. Введение

В настоящее время моделирование как термодинамических, так и кинетических свойств конденсированных систем выполняется главным образом в рамках нерелятивистского приближения. Малость скоростей атомных частиц по сравнению со скоростью света служит основанием для пренебрежения релятивистским эффектом запаздывания взаимодействий. В этих рамках система взаимодействующих атомов характеризуется гамильтонианом, дающим принципиальную (но пока – далеко не реальную) возможность вычисления статистической суммы или производящего функционала системы в рамках подхода Гиббса, либо решения уравнений цепочки для равновесных или неравновесных функций распределения в рамках подхода ББККИ (Боголюбова – Борна – Грина – Кирквуда – Ивона). Однако точные решения в каждом из этих вариантов для сколько-нибудь «реалистичных» межатомных потенциалов пока неизвестны. Априорные оценки погрешностей используемых приближений не существуют.

Однако проблема моделирования конденсированных систем не сводится только к решению задач в рамках статистической механики. Дело в том, что микроскопическое обоснование термодинамики в рамках статистической механики, объединяющей классическую механику Ньютона (в гамильтоновой форме) с концепцией вероятности, не является полным, безупречным и единственно возможным вариантом. Кроме того, в рамках статистической механики так и не получены ответы на многие принципиально важные вопросы.

1. Нулевое начало термодинамики (утверждение о существовании состояния термодинамического равновесия в макроскопических системах) не нашло своего обоснования в рамках статистической механики, а является постулатом так же, как и в феноменологической термодинамике [1].

2. Классическая механика сама по себе находится в явном противоречии с термодинамикой, поэтому для микроскопического обоснования термодинамики требуется выход за пределы классической механики Ньютона. В конце XIX – начале XX века этот выход был направлен в сторону концепции вероятности (Максвелл, Больцман, Гиббс, Эйнштейн, Смолуховский, П. и Т. Эренфесты, ...). Однако в 1909 г. была опубликована дискуссионная заметка Ритца и Эйнштейна [2], в которой Ритц утверждал, что причина

необратимости связана с (релятивистским) эффектом запаздывания взаимодействий, а Эйнштейн утверждал, что причиной необратимости является исключительно вероятность. Наконец, в 1956 г. Кац предложил точно решаемую механическую модель – кольцевую модель Каца [3]. Он нашел точное решение этой модели, которое детерминировано, обратимо и не содержит никаких признаков термодинамического поведения. В этой же работе показано, что введение весьма правдоподобной вероятностной поправки в модель приводит к термодинамическому поведению системы и явлению необратимости. Таким образом, причина термодинамического поведения кольцевой модели находится не только вне классической механики, но и противоречит классической механике. Поэтому союз взаимоисключающих детерминистской механики Ньютона с концепцией вероятности не представляется убедительным.

3. За последующие годы было опубликовано несколько десятков работ, результаты которых являются существенными доводами в пользу гипотезы Ритца [2]. В работах [4–7] исследованы задачи двух тел с запаздывающими взаимодействиями между ними и установлено, что в пределе  $t \rightarrow \infty$  системы необратимо переходят в состояние покоя. В работе [8] исследована динамика двухчастичного гармонического осциллятора с запаздывающим взаимодействием между частицами и установлено, что в этой системе всегда существуют нестационарные (как растущие, так и затухающие) свободные колебания. В работе [9] исследована динамика одномерной цепочки атомов с запаздывающими взаимодействиями и установлено, что стационарные свободные колебания в этой системе невозможны, т. е. неустранимое релятивистское запаздывание взаимодействий между атомами полностью разрушает классическую нерелятивистскую динамическую картину Борна. Кроме того, в этой работе установлен микроскопический динамический (т. е. свободный от вероятности) механизм достижения термодинамического равновесия в кристаллах.

4. Колмогоровская теория вероятностей основана на теории меры и является не единственной, а всего лишь одной из многих неэквивалентных между собой вероятностных моделей [10]. Вероятностные меры в фазовом пространстве (микроканонический, канонический и большой канонический ансамбли), аксиоматически введенные Гиббсом, также не единствен-

ны. В частности, даже принцип равных априорных вероятностей Гиббса в микроканоническом распределении является постулатом, применение которого не приводит к однозначному результату из-за особенностей распределения мер в многомерных (в пределе – бесконечномерных) пространствах [11,12] (в данном случае речь идет о мерах в фазовом пространстве системы).

Таким образом, основой нерелятивистской статистической механики являются две не вполне согласованные между собой концепции – ньютоновская классическая механика (в гамильтоновой форме) и концепция вероятности. Эти концепции могут быть совместимы лишь в том случае, когда известен внешний механизм стохастизации. В качестве имитации такого механизма в рамках кинетической теории могут быть использованы гипотеза молекулярного хаоса Больцмана, принцип ослабления корреляций Боголюбова, раздельный учет дальнедействующих и короткодействующих частей межчастичных потенциалов (уравнения Больцмана-Власова, Власова-Максвелла и др.), но доказательной базы для выбора какого-либо из этих вариантов не существует.

В то же время в рамках релятивистской динамики обнаруживаются признаки термодинамического поведения даже малочастичных систем без использования концепции вероятности. Поэтому моделирование релятивистской динамики систем частиц является перспективным направлением.

Цель данной работы состоит в построении классической релятивистской кинетической теории систем взаимодействующих частиц (атомов).

Работа содержит решение следующих конкретных задач.

1. Развита полевая форма релятивистской динамики системы взаимодействующих атомов.

2. Установлено, что межатомные центральные потенциалы общего вида допускают разложение по статическим потенциалам типа Клейна-Гордона-Фока, вообще говоря, с комплексными параметрами масс.

3. Разработана однозначная процедура перехода от классической нерелятивистской модели межатомных взаимодействий к релятивистскому вспомогательному полю, обеспечивающему взаимодействие между атомами.

4. Выполнен анализ качественных свойств решений уравнений динамики релятивистского вспомогательного поля.

## 2. Полевая форма межатомных взаимодействий и обоснование концепции вспомогательного поля

Рассмотрим модель конденсированной системы, состоящей из нейтральных частиц (атомов), которая в нерелятивистском приближении характеризуется двухчастичным центральным скалярным межатомным потенциалом общего вида  $v(r)$ , допускающим представление в виде интеграла Фурье:

$$v(r) = \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} \tilde{v}(k^2) e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}}, \quad (1)$$

где

$$\tilde{v}(k^2) = \int d\mathbf{r} v(r) e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}}. \quad (2)$$

Этот потенциал служит отправной точкой для перехода от статических межатомных потенциалов к вспомогательному релятивистскому динамическому полю, которое только в статическом режиме эквивалентно межатомным потенциалам.

В настоящее время известно довольно много модельных межатомных потенциалов [13–15], часть которых используются в исследованиях на основе метода молекулярной динамики [16–18].

В нерелятивистском приближении взаимодействие между атомами является мгновенным, и потому атом и создаваемое им мгновенное поле являются единым целым, имеющим конечное число степеней свободы. В релятивистской теории каждое движение атома (источника поля) приводит к эволюции его поля, скорость распространения которого не превосходит скорости света. Поэтому эволюция системы взаимодействующих атомов включает в себя как динамику частиц, так и динамику релятивистского поля, создаваемого атомами.

Таким образом, сущность нерелятивистского приближения в динамике взаимодействующих атомов заключается в том, что учитывается конечное число степеней свободы атомов и пренебрегается бесконечным множеством степеней свободы сопутствующего поля.

### 2.1. Релятивизация физики

Долгий и сложный процесс “релятивизации” всех разделов физики от классической механики до термодинамики начался вскоре после создания теории относительности. Первые работы в релятивистском обобщении кинетической теории идеальных газов были выполнены Планком [19] и Ютнером [20, 21]. Синг [22] построил

релятивистскую газодинамику идеального газа. Далее были предприняты многочисленные интенсивные попытки построения релятивистской термодинамики [23–25], релятивистской статистической механики и кинетики [26–34].

Однако до настоящего времени не удалось выработать единый подход к построению релятивистской термодинамики, релятивистской статистической механики и релятивистской кинетической теории систем, состоящих из взаимодействующих частиц [35]. Ключевая трудность заключается в поиске ковариантной формы учета взаимодействий между частицами, поскольку в релятивистской теории понятие потенциальной энергии межчастичных взаимодействий не существует [36–38]. В связи с этим в релятивистской кинетической теории была разработана модель только контактного взаимодействия между частицами: взаимодействие происходит лишь в точках пересечения их мировых линий [39–41]. Область применимости этой модели ограничена случаем предельно короткодействующего взаимодействия между частицами, что явно недостаточно для применений в теории конденсированных систем.

В релятивистской теории взаимодействие между атомами осуществляется через поле, поэтому система взаимодействующих частиц фактически состоит из двух субстанций: частиц и поля. Взаимодействие между атомами имеет электромагнитное происхождение, но для описания динамики системы взаимодействующих атомов достаточно ограничиться моделью (1) без детализации происхождения межатомных взаимодействий.

### 2.2. Уравнения для статических полей

Положим, что Фурье-трансформанта (2) межатомного потенциала (1) не имеет особенностей на полуоси  $k^2 > 0$  комплексной плоскости  $k^2$ . Следуя [42], уравнение для статического потенциала  $v(r)$ , создаваемого частицей, находящейся в начале координат  $\mathbf{r} = 0$ , будем искать в виде:

$$f(\Delta)\{v(\mathbf{r})\} = \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} f(-k^2) \tilde{v}(k^2) e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}} = -4\pi\delta(\mathbf{r}), \quad (3)$$

где  $f(\Delta)$  – искомая функция от оператора Лапласа  $\Delta$ .

Используя преобразование Фурье, найдем:

$$f(-k^2) = -\frac{4\pi}{\tilde{v}(k^2)}. \quad (4)$$

Это соотношение связывает Фурье-трансформанту статического потенциала  $\tilde{v}(k^2)$  с дифференциальным уравнением (3), описывающим соответствующее статическое поле.

В частности:

- Фурье-трансформанте кулоновского потенциала  $\tilde{v}_1(k^2) = \frac{4\pi}{k^2}$  соответствует уравнение

Пуассона:

$$\Delta\phi(\mathbf{r}) = -4\pi\delta(\mathbf{r}), \quad (5)$$

- Фурье-трансформанте потенциала Юкавы  $\tilde{v}_1(k^2) = \frac{4\pi}{k^2}$  соответствует статическое уравнение Клейна–Гордона–Фока (или уравнение Дебая–Хюккеля [43]):

$$(\Delta - \mu^2)\phi(\mathbf{r}) = -4\pi\delta(\mathbf{r}). \quad (6)$$

Таким образом, статическому межатомному потенциалу  $v(r)$ , допускающему представление в виде интеграла Фурье (1), соответствует статическое поле  $\phi(\mathbf{r})$ , которое удовлетворяет линейному уравнению:

$$(\tilde{v}(-\Delta))^{-1}\phi(\mathbf{r}) = \rho(\mathbf{r}), \quad (7)$$

где  $\rho(\mathbf{r})$  – плотность источников поля.

Общее решение этого уравнения представляет собой сумму общего решения соответствующего однородного уравнения:

$$(\tilde{v}(-\Delta))^{-1}\phi(\mathbf{r}) = 0 \quad (8)$$

и любого частного решения уравнения (7).

### 2.3. Качественный анализ решений однородного уравнения для статического поля

Согласно уравнению (8), собственное значение оператора  $(\tilde{v}(-\Delta))^{-1}$  равно нулю. С учетом соотношения (4) это означает, что при соответствующем значении  $k^2$  функция  $(\tilde{v}(k^2))^{-1}$  обращается в нуль:

$$\frac{1}{\tilde{v}(k^2)} = 0. \quad (9)$$

Это условие будем рассматривать как уравнение относительно  $k$ .

Поскольку функция  $\tilde{v}(k^2)$  при всех вещественных значениях  $k$  вещественна и не имеет особенностей, то мнимые части всех корней уравнения (9) должны быть отличны от нуля:

$$k_s = \alpha_s + i\beta_s \Rightarrow k_s^2 = (\alpha_s^2 - \beta_s^2) + 2i\alpha_s\beta_s, \beta_s \neq 0. \quad (10)$$



В частности,  $k_s$  может быть чисто мнимым (при  $\alpha_s = 0$ ), как это имеет место для потенциала Юкавы.

Введем обозначение:

$$\mu_s^2 = -k_s^2 \tag{11}$$

и приведем уравнение (9) к следующему виду:

$$\frac{1}{\tilde{v}(k^2)} = \left( \prod_s [k^2 + \mu_s^2]^{\gamma_s} \right) F(k^2) = 0, \tag{12}$$

где  $F(k^2)$  – некоторая функция, не имеющая нулей,  $\gamma_s$  – кратность корня  $\mu_s^2$ .

Поскольку  $k^2 = -\Delta$  и все операторы:

$$\hat{L}_s = [\Delta - \mu_s^2]^{\gamma_s}, \hat{L} = \prod_s [\Delta - \mu_s^2]^{\gamma_s}, F(-\Delta) \tag{13}$$

коммутируют между собой, то уравнение (8) эквивалентно семейству уравнений:

$$(\Delta - \mu_s^2)^{\gamma_s} \varphi_s(\mathbf{r}) = 0. \tag{14}$$

Чтобы избежать излишней громоздкости, в дальнейшем ограничимся случаем, когда кратность всех корней уравнения (9) равна единице  $\gamma_s = 1$ :

$$(\Delta - \mu_s^2) \varphi_s(\mathbf{r}) = 0. \tag{15}$$

Данное уравнение по форме напоминает задачу математической физики на собственные значения  $\mu_s^2$  оператора Лапласа, которые находятся из граничных условий, накладываемые на функцию  $\varphi_s(\mathbf{r})$ . Однако это сходство только внешнее. В данном случае  $\mu_s^2$  находятся не из граничных условий для функций  $\varphi_s(\mathbf{r})$ , а являются решениями уравнения (9).

В частном случае, когда  $\tilde{v}(k^2)$  – рациональная алгебраическая функция, множество операторов  $\hat{L}_s$  конечно ( $s = 1, 2, \dots, M$ ); в противном случае это множество может быть бесконечным.

Заметим, что каждая из функций  $\varphi_s(\mathbf{r})$ , удовлетворяющих уравнению (14), а также все линейные комбинации этих функций обращаются в нуль при действии на них оператором  $\hat{L}$ . Общее решение уравнения (8) есть линейная комбинация общих решений уравнений (14) с произвольными коэффициентами:

$$\varphi(\mathbf{r}) = \sum_s C_s \varphi_s(\mathbf{r}). \tag{16}$$

Таким образом, свободное вспомогательное статическое поле  $\varphi(\mathbf{r})$ , эквивалентное мгновенному центральному межатомному потенциалу, допускает представление в виде суперпозиции

**элементарных полей**  $\varphi_s(\mathbf{r})$ , удовлетворяющих уравнению (14).

В качестве примера выполним краткий анализ возможных вариантов **статических элементарных потенциалов**, зависящих от комплексного параметра  $\mu_s$  и удовлетворяющих уравнению (14). При этом не будем исключать варианты решений этого уравнения, которые на первый взгляд могут показаться «нефизическими».

В случае центральных (т. е. сферически симметричных) потенциалов общее решение уравнения (14) имеет следующий вид:

$$\varphi_s(r) = \frac{1}{r} (A_s e^{\mu_s r} + B_s e^{-\mu_s r}), \tag{17}$$

где

$$\mu_s = ik_s = -\beta_s + i\alpha_s, \quad r = |\mathbf{r}|, \tag{18}$$

а  $\alpha_s$  и  $\beta_s$  определяются формулой (10).

При  $\alpha_s = 0$  потенциал  $\varphi_s(r)$  представляет со-

бой линейную комбинацию двух членов  $\frac{e^{-\beta_s r}}{r}$  и

$\frac{e^{\beta_s r}}{r}$ , один из которых при  $r \rightarrow \infty$  стремится к

нулю (потенциал Юкавы), а второй неограниченно возрастает по абсолютной величине и может показаться «нефизическим». Однако существует прецедент межчастичного потенциала, который не стремится к нулю при  $r \rightarrow \infty$  и обеспечивает пленение кварков в рамках квантовой хромодинамики [44, 45].

В более общем случае  $\alpha_s \neq 0$  элементарные потенциалы  $\varphi_s(r)$  являются комплекснозначными функциями от координаты  $r$ , зависящими от комплексных параметров  $\mu_s$ . При этом полный потенциал (16) – линейная комбинация элементарных потенциалов – является вещественнозначной функцией. В частности, если число комплексных элементарных потенциалов равно двум, то параметры  $\mu_1, \mu_2$  взаимно сопряжены друг другу:

$$\mu_2 = \mu_1^*, \tag{19}$$

и полный вещественный статический потенциал имеет вид:

$$\varphi(r) = \frac{1}{r} \left\{ e^{-ar} [A \cos(br) + B \sin(br)] + e^{ar} [C \cos(br) + D \sin(br)] \right\}, \tag{20}$$

где  $a = \text{Re} \mu_1, b = \text{Im} \mu_1$ , а  $A, B, C, D$  – произвольные вещественные константы. Этот потенциал пред-

ставляет собой линейную комбинацию синусоидальных функций от  $r$ , амплитуды которых изменяются по экспоненциальному закону.

Заметим, что статистическая термодинамика систем с модельными потенциалами типа (20) и убывающими амплитудами осцилляций исследована в работах [46, 47]. Однако статистическая термодинамика систем с модельными потенциалами, амплитуды осцилляций которых растут при  $r \rightarrow \infty$ , не существует из-за расходимости конфигурационных интегралов. Но это обстоятельство не является препятствием для исследования динамики систем с такими модельными потенциалами.

#### 2.4. Уравнения для динамических полей

В рамках нерелятивистской теории статическое поле жестко «привязано» к породившим его частицам и не составляет отдельных степеней свободы. Ситуация радикально изменяется в рамках теории относительности: в игру вступает динамическое поле, которое создается частицами и описывается релятивистскими уравнениями движения.

Переход от статических уравнений поля к динамическим уравнениям применительно к электромагнетизму был выполнен Л. Лоренцем и Риманом [48, 49] в 1867 г. задолго до появления теории относительности. Результат заключается в замене оператора Лапласа  $\Delta$  в уравнениях Лапласа и Пуассона на оператор Даламбера  $\square$ :

$$\Delta = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \Rightarrow \Rightarrow \square = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2}. \quad (21)$$

Таким образом, после преобразования Лоренца–Римана (21) поле становится составной частью системы взаимодействующих частиц. Последствия этой трансформации заключаются в следующем.

1. Система состоит из двух подсистем, одна из которых – частицы, а вторая – динамическое поле, создаваемое этими частицами.

2. Как прямое действие атомов друг на друга, так и прямое воздействие поля на самого себя (самодействие) не существуют.

3. Единственный вид взаимодействий, который существует в системе, это взаимодействие атомов с одной стороны и полем с другой стороны. Общеизвестным примером теорий такого типа является классическая электродинамика.

4. Множество степеней свободы системы «частицы + поле, которое обеспечивает взаимодействие между частицами», бесконечно даже в случае конечного числа частиц. В результате система взаимодействующих частиц уже не является динамической системой с конечным числом степеней свободы, и задание начальных условий только для частиц недостаточно для однозначной разрешимости задачи Коши для частиц.

5. Динамика системы взаимодействующих частиц в рамках полевой картины зависит не только от уравнений движения частиц и эволюции поля, но и от граничных условия для поля.

6. В микроскопическом обосновании термодинамики на основе нерелятивистской теории с мгновенными межатомными взаимодействиями в рамках статистической механики Гиббса учтено конечное число степеней свободы и проигнорировано бесконечное (континуальное) множество полевых степеней свободы всей системы в целом.

7. Существование поля, как посредника взаимодействий между частицами, приводит как к радикальному изменению физической картины динамики системы частиц, так и соответствующего математического аппарата. В частности, в релятивистской полевой динамике не имеют места ни уравнение Лиувилля, ни теорема Пуанкаре о возвращениях, ни существование интегральных инвариантов – это те результаты аналитической механики, которые играют ключевую роль в статистической механике Гиббса.

### 3. Функции Грина элементарных полей и множественность запаздываний взаимодействий

Функция Грина оператора Клейна–Гордона  $\hat{L}_s = \square - \mu_s^2$  определяется уравнением:

$$(\square - \mu_s^2) G_s(\mathbf{r} - \mathbf{r}', t - t') = -\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \delta(t - t') \quad (22)$$

и имеет известный вид [50]:

$$G_s(\mathbf{r} - \mathbf{r}', t - t') = \frac{\delta\left(t - t' - \frac{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}{c}\right)}{4\pi|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} - \theta\left(t - t' - \frac{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}{c}\right) \mu_s \frac{J_1\left(\mu_s \sqrt{c^2(t - t')^2 - |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|^2}\right)}{4\pi\sqrt{c^2(t - t')^2 - |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|^2}}, \quad (23)$$

где  $\theta(t)$  – «ступенька» Хевисайда,  $J_1(x)$  – функция Бесселя.

Отсюда следует запаздывающий потенциал поля Клейна–Гордона [50]:

$$\varphi_s(\mathbf{r}, t) = \int d\mathbf{r}' \left[ \frac{\rho\left(\mathbf{r}', t - \frac{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}{c}\right)}{4\pi|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} - \mu_s \int_0^\infty \rho\left(\mathbf{r}', t - \frac{1}{c}\sqrt{\xi^2 + |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|^2}\right) \frac{J_1(\mu_s \xi)}{4\pi\sqrt{\xi^2 + |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|^2}} d\xi \right], \quad (24)$$

где

$$\rho(\mathbf{r}, t) = \sum_a \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_a(t)) - \quad (25)$$

мгновенная микроскопическая плотность числа частиц (атомов).

1. Первое слагаемое в правой части формулы (24) содержит однозначно определенное запаздывание  $\tau_1$  между точками  $\mathbf{r}$  и  $\mathbf{r}'$ , соответствующее волнам, распространяющимся со скоростью света  $c$ :

$$\tau_1 = \frac{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}{c}. \quad (26)$$

2. Второе слагаемое этой же формулы содержит бесконечное множество запаздываний  $\tau_2(\xi)$  между теми же точками  $\mathbf{r}$  и  $\mathbf{r}'$ , зависящее не только от расстояния между точками, но и от параметра  $\xi$ :

$$\tau_2(\xi) = \frac{\sqrt{\xi^2 + |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|^2}}{c} \geq \tau_1, \quad (0 \leq \xi < \infty), \quad (27)$$

зависящих от непрерывного параметра  $\xi$  и соответствующих волнам Клейна–Гордона, распространяющимся со скоростями от 0 до  $c$ . Отметим, что запаздывание  $\tau_2(\xi)$  может принимать сколь угодно большие значения. Это означает, что сколь угодно далекое прошлое системы оказывает прямое влияние на ее эволюцию в текущий момент времени.

Заметим, что величина  $\sqrt{\xi^2 + |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|^2}$  может быть формально математически интерпретирована как расстояние в четырехмерном пространстве  $x, y, z, \xi$  с метрикой  $d_2 = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2 + \xi^2}$ , в котором скорость распространения поля Клейна–Гордона равна скорости света  $c$ . Соответственно, проекция скорости из четырехмерного пространства  $x, y, z, \xi$  на трехмерное подпространство  $x, y, z$  может принимать любые значения от 0 до  $c$ .

Таким образом, связь между эволюцией релятивистского вспомогательного поля  $\varphi(\mathbf{r}, t)$  и

динамикой системы частиц, порождающих это поле, нелокальна как по пространственным переменным, так и по времени. Поэтому взаимодействие между частицами, переносимыми вспомогательным полем, также нелокально.

Рассмотрим вклад одной частицы из коллектива частиц (25), движущейся по закону  $\mathbf{r} = \mathbf{r}_a(t)$ , в запаздывающий потенциал Клейна–Гордона (24). Микроскопическая плотность, соответствующая одной частице, определяется выражением:

$$\rho_a\left(\mathbf{r}', t - \frac{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}{c}\right) = \delta\left(\mathbf{r}' - \mathbf{r}_a\left(t - \frac{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}{c}\right)\right). \quad (28)$$

Этот вклад состоит из двух частей.

1.

$$\begin{aligned} \varphi_s^{(1)}(\mathbf{r}, t) &= \int d\mathbf{r}' \frac{\rho\left(\mathbf{r}', t - \frac{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}{c}\right)}{4\pi|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} = \\ &= \frac{1}{4\pi\left(|\mathbf{r} - \mathbf{r}_a(\tau)| - \frac{((\mathbf{r} - \mathbf{r}_a(\tau)) \cdot \dot{\mathbf{r}}_a(\tau))}{c}\right)}, \end{aligned} \quad (29)$$

где  $\tau$  – переменная, связанная с  $t$  соотношением:

$$\tau + \frac{|\mathbf{r} - \mathbf{r}_a(\tau)|}{c} = t. \quad (30)$$

2.

$$\begin{aligned} \varphi_s^{(2)}(\mathbf{r}, t) &= \\ &= -\mu_s \int d\mathbf{r}' \int_0^\infty \frac{\rho\left(\mathbf{r}', t - \frac{1}{c}\sqrt{\xi^2 + |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|^2}\right)}{4\pi\sqrt{\xi^2 + |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|^2}} J_1(\mu_s \xi) d\xi. \end{aligned} \quad (31)$$

Выражение (29) для  $\varphi_s^{(1)}(\mathbf{r}, t)$  представляет собой запаздывающий потенциал типа Лиенара–Вихерта [50,51], зависящий от положения  $\mathbf{r}_a(\tau)$   $a$ -й частицы и ее скорости  $\dot{\mathbf{r}}_a(\tau)$  в один-единственный момент времени  $\tau$ , определяемый соотношением (30).

Выражение (31) для  $\varphi_s^{(2)}(\mathbf{r}, t)$  имеет заметно более сложную структуру. Изменим порядок интегрирования по переменным  $\xi$  и  $\mathbf{r}'$  в формуле (31) и рассмотрим интеграл по  $\mathbf{r}'$ :

$$\begin{aligned} \Psi(\xi, \mathbf{r}, t) &= \\ &= \int d\mathbf{r}' \delta\left(\mathbf{r}' - \mathbf{r}_a\left(t - \frac{1}{c}\sqrt{\xi^2 + |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|^2}\right)\right) \frac{1}{\sqrt{\xi^2 + |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|^2}}. \end{aligned} \quad (32)$$

Для того, чтобы выполнить интегрирование по  $\mathbf{r}'$ , умножим обе части этого соотношения на  $\delta\left(\tau - t + \frac{1}{c}\sqrt{\xi^2 + |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|^2}\right)$  и проинтегрируем по переменной  $\tau$ . В результате левая часть этого равенства остается неизменной, а правая часть преобразуется к следующему виду:

$$\Psi(\xi, \mathbf{r}, t) = \int d\tau \int d\mathbf{r}' \delta\left(\tau - t + \frac{1}{c}\sqrt{\xi^2 + |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|^2}\right) \times \frac{1}{\sqrt{\xi^2 + |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|^2}} \delta(\mathbf{r}' - \mathbf{r}_a(\tau)) \quad (33)$$

$$= \int d\tau \delta\left(\tau - t + \frac{1}{c}\sqrt{\xi^2 + |\mathbf{r} - \mathbf{r}_a(\tau)|^2}\right) \frac{1}{\sqrt{\xi^2 + |\mathbf{r} - \mathbf{r}_a(\tau)|^2}}.$$

Последний интеграл имеет вид:

$$J(\xi, t, \mathbf{r}) = \int d\tau \delta(F(\xi, t, \tau, \mathbf{r})) f(\xi, \mathbf{r}, \tau), \quad (34)$$

где

$$F(\xi, t, \tau, \mathbf{r}) = \tau - t + \frac{1}{c}\sqrt{\xi^2 + |\mathbf{r} - \mathbf{r}_a(\tau)|^2}, \quad (35)$$

и

$$f(\xi, \mathbf{r}, \tau) = \frac{1}{\sqrt{\xi^2 + |\mathbf{r} - \mathbf{r}_a(\tau)|^2}}. \quad (36)$$

Интеграл (34) вычисляется по известной формуле:

$$J(\xi, t, \mathbf{r}) = \sum_k \frac{f(\xi, \mathbf{r}, \tau_k)}{|F'_\tau(\xi, t, \tau_k, \mathbf{r})|}, \quad (37)$$

где  $\tau_k$  – корни уравнения:

$$F(\xi, t, \tau, \mathbf{r}) = \tau - t + \frac{1}{c}\sqrt{\xi^2 + |\mathbf{r} - \mathbf{r}_a(\tau)|^2} = 0 \quad (38)$$

относительно  $\tau$ . Покажем, что это уравнение имеет единственный корень, зависящий от  $\xi$  и  $t$ . Для этого найдем частную производную функции  $F(\xi, t, \tau, \mathbf{r})$  по переменной  $\tau$ :

$$F'_\tau(\xi, t, \tau, \mathbf{r}) = 1 - \frac{1}{c} \frac{(\mathbf{r} - \mathbf{r}_a(\tau)) \dot{\mathbf{r}}_a(\tau)}{\sqrt{\xi^2 + |\mathbf{r} - \mathbf{r}_a(\tau)|^2}}. \quad (39)$$

Из неравенства:

$$F'_\tau(\xi, t, \tau, \mathbf{r}) > 0 \quad (40)$$

и асимптотик функции  $F(\xi, t, \tau, \mathbf{r})$  при  $\tau \rightarrow \pm\infty$  следует, что решение уравнения (38) относительно  $\tau$  существует и единственно:

$$\tau = \tau(\xi, t). \quad (41)$$

Таким образом, при любых значениях  $\xi$  между  $t$  и  $\tau$  существует взаимно-однозначное соответствие:

$$t = t(\xi, \tau), \quad \tau = \tau(\xi, t). \quad (42)$$

Подставляя (41), (39), (37) и (36) в (33), найдем:

$$\Psi(\xi, \mathbf{r}, t) = \frac{1}{\sqrt{\xi^2 + |\mathbf{r} - \mathbf{r}_a(\tau(\xi, t))|^2} - \frac{(\mathbf{r} - \mathbf{r}_a(\tau(\xi, t))) \dot{\mathbf{r}}_a(\tau(\xi, t))}{c}}. \quad (43)$$

В результате выражение для  $\varphi_s^{(2)}(\mathbf{r}, t)$  преобразуется к следующему виду:

$$\varphi_s^{(2)}(\mathbf{r}, t) = -\frac{\mu_s}{4\pi} \int_0^\infty \frac{J_1(\mu_s \xi)}{\left( \sqrt{\xi^2 + |\mathbf{r} - \mathbf{r}_a(\tau(\xi, t))|^2} - \frac{(\mathbf{r} - \mathbf{r}_a(\tau(\xi, t))) \dot{\mathbf{r}}_a(\tau(\xi, t))}{c} \right)} d\xi. \quad (44)$$

Заметим, что использование этого представления для количественного анализа запаздывающего потенциала поля Клейна–Гордона предполагает знание функции  $\tau(\xi, t)$ , которая формально определяется как решение уравнения (38) относительно  $\tau$ . Это уравнение трансцендентно, и найти точное аналитическое решение его в общем случае вряд ли возможно. Однако при определенных условиях может быть найдено приближенное решение, которое сколь угодно мало отличается от точного.

Между выражениями (29) для  $\varphi_s^{(1)}(\mathbf{r}, t)$  и (44) для  $\varphi_s^{(2)}(\mathbf{r}, t)$  имеется принципиальное различие.

1. Потенциал  $\varphi_s^{(1)}(\mathbf{r}, t)$  в точке  $\mathbf{r}$  в момент времени  $t$  зависит от мгновенного положения  $\mathbf{r}_a(\tau)$  и мгновенной скорости  $\dot{\mathbf{r}}_a(\tau)$  порождающей частицы в единственный момент времени  $\tau$ , определяемый условием (30).

2. Потенциал  $\varphi_s^{(2)}(\mathbf{r}, t)$  в точке  $\mathbf{r}$  в момент времени  $t$  зависит от бесконечного ряда положений  $\mathbf{r}_a(\tau(\xi, t))$  и бесконечного ряда мгновенных скоростей  $\dot{\mathbf{r}}_a(\tau(\xi, t))$  порождающей частицы во все моменты времени, определяемые условием (38) и параметризуемые переменной  $0 \leq \xi < \infty$ .

Другими словами, наблюдатель, находящийся в точке  $\mathbf{r}$  в момент времени  $t$  и использующий для наблюдения поле  $\varphi_s^{(1)}(\mathbf{r}, t)$ , видит точечный источник этого поля.

Тот же наблюдатель, находящийся в точке  $\mathbf{r}$  в момент времени  $t$  и использующий для наблю-



дения поле  $\varphi_s^{(2)}(\mathbf{r}, t)$ , вместо точечного источника этого поля видит бесконечно много источников, заполнивших всю траекторию источника от удаленного прошлого до точки  $\mathbf{r} = \mathbf{r}_a(t - \tau(\xi, t))|_{\xi=0}$ .

#### 4. Обсуждение и выводы

Основные принципы, лежащие в основе этой работы, состоят в следующем.

1. Межатомные взаимодействия имеют полевую природу. Поэтому любая реальная система состоит из частиц и поля, создаваемого этими частицами и передающего взаимодействия между этими частицами.

2. В случае покоящихся атомов взаимодействие между ними можно описать межатомными потенциалами, а в случае движущихся атомов взаимодействие описывается вспомогательным скалярным релятивистским полем.

3. Вспомогательное скалярное поле представляет собой суперпозицию элементарных полей, каждое из которых характеризуется своей, вообще говоря, комплексной массой и удовлетворяет уравнению Клейна–Гордона–Фока. Параметры элементарных полей однозначно выражаются через характеристики статических межатомных потенциалов.

4. В силу конечности масс элементарных полей скорость распространения полей Клейна–Гордона–Фока может принимать любые значения, меньшие скорости света. Это приводит к тому, что запаздывание взаимодействий между частицами может достигать сколь угодно больших значений.

5. Запаздывание взаимодействий между частицами является реальным физическим механизмом, приводящим к необратимости динамики как многочастичных, так и малочастичных систем.

#### Заявленный вклад авторов

Все авторы сделали эквивалентный вклад в подготовку публикации.

#### Конфликт интересов

Авторы заявляют, что у них нет известных финансовых конфликтов интересов или личных отношений, которые могли бы повлиять на работу, представленную в этой статье.

#### Список литературы

1. Уленбек Дж., Форд Дж. *Лекции по статистической механике*. М.: Мир; 1965. 307 с.
2. Ritz W., Einstein A. Zum gegenwärtigen Stand des Strahlungsproblems. *Physikalische Zeitschrift*. 1909; 10(9): 323–324.

3. Кас М. Some remarks on the use of probability in classical statistical mechanics. *Bull. de l'Académie Royale de Belgique (Classe des Sciences)*. 1956;42(5): 356–361. <https://doi.org/10.3406/barb.1956.68352>

4. Synge J. L. The electromagnetic two-body problem. *Proceedings of the Royal Society of London. Series A. Mathematical and Physical Sciences*. 1940;177(968): 118–139. <http://dx.doi.org/10.1098/rspa.1940.0114>

5. Driver R. D. A two-body problem of classical electrodynamics: the one-dimensional case. *Annals of Physics*. 1963;21(1): 122–142. [http://dx.doi.org/10.1016/0003-4916\(63\)90227-6](http://dx.doi.org/10.1016/0003-4916(63)90227-6)

6. Hsing D. K. Existence and uniqueness theorem for the one-dimensional backwards two-body problem of electrodynamics. *Physical Review D*. 1977;16(4): 974–982. <https://doi.org/10.1103/physrevd.16.974>

7. Hoag J. T.; Driver R. D. A delayed-advanced model for the electrodynamics two-body problem. *Nonlinear analysis: Theory, Methods & Applications*. 1990;15(2): 165–184. [https://doi.org/10.1016/0362-546x\(90\)90120-6](https://doi.org/10.1016/0362-546x(90)90120-6)

8. Zakharov A. Yu. On physical principles and mathematical mechanisms of the phenomenon of irreversibility. *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*. 2019;525: 1289–1295. <https://doi.org/10.1016/j.physa.2019.04.047>

9. Zakharov A. Y., Zakharov M. A. Microscopic dynamic mechanism of irreversible thermodynamic equilibration of crystals. *Quantum Reports*. 2021;3(4): 724–730. <https://doi.org/10.3390/quantum3040045>

10. Khrennikov A. Yu. *Interpretations of probability*. Berlin – New York: Walter de Gruyter; 2009. 237 p. <https://doi.org/10.1515/9783110213195>

11. Borel E. *Introduction géométrique à quelques théories physiques*. Paris: Gauthier-Villars; 1914. 147 p.

12. Леви П. *Конкретные проблемы функционального анализа*. М.: Наука, 1967; 511 с.

13. Rowlinson J. S. C. *A scientific history of intermolecular forces*. Cambridge: Cambridge University Press; 2002. 343 p.

14. Kaplan I. G. *Intermolecular interactions: physical picture, computational methods and model potentials*. Chichester: Wiley; 2006. 375 p. <https://doi.org/10.1002/047086334x>

15. Stone A. *The theory of intermolecular forces*. Oxford: Oxford University Press; 2013. 352 p. <https://doi.org/10.1093/acprof:oso/9780199672394.001.0001>

16. *Метод молекулярной динамики в физической химии* / Сб. статей под ред. Ю. К. Товбина. М.: Наука, 1996; 169 с.

17. Kamberaj H. *Molecular dynamics simulations in statistical physics: theory and applications*. Cham: Springer; 2020. 470 p. <https://doi.org/10.1007/978-3-030-35702-3>
18. Kun Zhou, Bo Liu. *Molecular dynamics simulation: fundamentals and applications*. Amsterdam: Elsevier; 2022. 374 p. <https://doi.org/10.1016/b978-0-12-816419-8.00006-4>
19. Planck M. Zur Dynamik bewegter Systeme. *Annalen der Physik*. 1908;331(6): 1–34. <https://doi.org/10.1002/andp.19083310602>
20. Jüttner F. Das Maxwell'sche Gesetz der Geschwindigkeitsverteilung in der Relativtheorie. *Annalen der Physik*. 1911;339(5): 856–882. <https://doi.org/10.1002/andp.19113390503>
21. Jüttner F. Die Dynamik eines bewegten Gases in der Relativtheorie. *Annalen der Physik*. 1911;340(6): 145–161. <https://doi.org/10.1002/andp.19113400608>
22. Synge J. L. *The relativistic gas*. Amsterdam: North-Holland; 1957. 119 p.
23. Tolman R. C. Thermodynamics and relativity. *Bulletin of the American Mathematical Society*. 1933;39(2): 49–74. <https://doi.org/10.1090/s0002-9904-1933-05559-3>
24. ter Haar D., Wergeland H. Thermodynamics and statistical mechanics in the special theory of relativity. *Physics Reports*. 1971;1(2): 31–54. [https://doi.org/10.1016/0370-1573\(71\)90006-8](https://doi.org/10.1016/0370-1573(71)90006-8)
25. Nakamura T. K. Three views of a secret in relativistic thermodynamics. *Progress of Theoretical Physics*. 2012;128(3): 463–475. <https://doi.org/10.1143/ptp.128.463>
26. Chernikov N. A. Derivation of the equations of relativistic hydrodynamics from the relativistic transport equation. *Physics Letters*. 1963;5(2): 115–117. [https://doi.org/10.1016/s0375-9601\(63\)91750-x](https://doi.org/10.1016/s0375-9601(63)91750-x)
27. de Groot S. R., van Leeuwen W. A., van Weert Ch. G. *Relativistic kinetic theory: principles and applications*. Amsterdam: North-Holland; 1980. 433 p.
28. Trump M. A., Schieve W. C. *Classical relativistic many-body dynamics*. Dordrecht: Springer; 1999. 375 p. <https://doi.org/10.1007/978-94-015-9303-8>
29. Cercignani C., Kremer G. M. *The relativistic Boltzmann equation: theory and applications*. Basel: Birkhäuser; 2002. 394 p. <https://doi.org/10.1007/978-3-0348-8165-4>
30. Hakim R. *Introduction to relativistic statistical mechanics: classical and quantum*. New Jersey: World Scientific; 2011. 566 p. <https://doi.org/10.1142/7881>
31. Kuz'menkov L. S. Field form of dynamics and statistics of systems of particles with electromagnetic interaction. *Theoretical and Mathematical Physics*. 1991;86(2): 159–168. <https://doi.org/10.1007/bf01016167>
32. Liboff R. *Kinetic theory: classical quantum and relativistic descriptions*. New York: Springer; 2003. 587 p.
33. Balescu R., Kotera T. On the covariant formulation of classical relativistic statistical mechanics. *Physica*. 1967;33(3): 558–580. [https://doi.org/10.1016/0031-8914\(67\)90204-2](https://doi.org/10.1016/0031-8914(67)90204-2)
34. Schieve W. C. Covariant relativistic statistical mechanics of many particles. *Foundations of Physics*. 2005;35(8): 1359–1381. <https://doi.org/10.1007/s10701-005-6441-9>
35. Lusanna L. From relativistic mechanics towards relativistic statistical mechanics. *Entropy*. 2017;19(9): 436. <https://doi.org/10.3390/e19090436>
36. Currie D. G. Interaction contra classical relativistic Hamiltonian particle mechanics. *Journal of Mathematical Physics*. 1963;4(12): 1470–1488. <https://doi.org/10.1063/1.1703928>
37. Currie D. G., Jordan T. F., Sudarshan E. C. G. Relativistic invariance and Hamiltonian theories of interacting particles. *Reviews of Modern Physics*. 1963;35(2): 350–375. <https://doi.org/10.1103/revmodphys.35.350>
38. Leutwyler H. A no-interaction theorem in classical relativistic Hamiltonian particle mechanics. *Nuovo Cimento*. 1965;37(2): 556–567. <https://doi.org/10.1007/bf02749856>
39. Dirac P. A. M. Forms of relativistic dynamics. *Reviews of Modern Physics*. 1949,21(3): 392–399. <https://doi.org/10.1103/revmodphys.21.392>
40. van Dam H., Wigner E. P. Classical relativistic mechanics of interacting point particles. *Physical Review*. 1965;138(6B): 1576–1582. <https://doi.org/10.1103/physrev.138.b1576>
41. van Dam H., Wigner E. P. Instantaneous and asymptotic conservation laws for classical relativistic mechanics of interacting point particles. *Physical Review*. 1966;142(4): 838–843. <https://doi.org/10.1103/physrev.142.838>
42. Zakharov A. Y., Zubkov V. V. Field-theoretical representation of interactions between particles: classical relativistic probability-free kinetic theory. *Universe*. 2022;8(281): 1–11. <http://dx.doi.org/10.3390/universe8050281>
43. Debye P., Hückel E. Zur Theorie der Elektrolyte. *Physikalische Zeitschrift*. 1923;24(9): 185–206.
44. Ali A., Kramer G. JETS and QCD: a historical review of the discovery of the quark and gluon jets and its impact on QCD. *The European Physical Journal*

*H.* 2011;36: 245–326. <https://doi.org/10.1140/epjh/e2011-10047-1>

45. Sazdjian H. The interplay between compact and molecular structures in tetraquarks. *Symmetry*. 2022;14: 515. <https://doi.org/10.3390/sym14030515>

46. Loktionov I. K. Application of two-parameter oscillating interaction potentials for specifying the thermophysical properties of simple liquids. *High Temperature*. 2012;50(6): 708–716. <https://doi.org/10.1134/S0018151X12050094>

47. Loktionov I. K. Studying equilibrium thermophysical properties of simple liquids based on a four-parameter oscillating interaction potential. *High Temperature*. 2014;52(3): 390–402. <https://doi.org/10.1134/S0018151X14020151>

48. Lorenz L. On the identity of the vibrations of light with electrical currents. *The London, Edinburgh, and Dublin Philosophical Magazine and Journal of Science*. 1867;34(230): 287–301. <https://doi.org/10.1080/14786446708639882>

49. Riemann B. A contribution to electrodynamics. *The London, Edinburgh, and Dublin Philosophical Magazine and Journal of Science*. 1867;34(231): 368–372. <https://doi.org/10.1080/14786446708639897>

50. Иваненко Д. Д.; Соколов А. А. *Классическая теория поля*. М: ГИТТЛ, 1949; 480 с.

51. Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. *Теория поля*. М.: Наука, 1988; 510 с.

### Информация об авторах

Захаров Анатолий Юльевич, д. ф.-м. н., профессор, профессор кафедры общей и экспериментальной физики, Новгородский государственный университет имени Ярослава Мудрого (Великий Новгород, Российская Федерация).

<https://orcid.org/0000-0002-7850-0086>

[anatoly.zakharov@novsu.ru](mailto:anatoly.zakharov@novsu.ru)

Захаров Максим Анатольевич, д. ф.-м. н., доцент, профессор кафедры физики твердого тела и микроэлектроники, Новгородский государственный университет имени Ярослава Мудрого (Великий Новгород, Российская Федерация).

<https://orcid.org/0000-0002-9144-340X>

[maxim.zakharov@novsu.ru](mailto:maxim.zakharov@novsu.ru)

Поступила в редакцию 28.09.2023; одобрена после рецензирования 10.10.2023; принята к публикации 16.10.2023; опубликована онлайн 25.12.2023.