

ФИЗИКА КОНДЕНСИРОВАННОГО СОСТОЯНИЯ

УДК 530: 530.12

DOI: 10.34680/2076-8052.2023.5(134).727-734

ГРНТИ 29.01+29.05.19

Специальность ВАК 1.3.8

Научная статья

РЕЛЯТИВИСТСКАЯ МОДЕЛЬ МЕЖАТОМНЫХ ВЗАИМОДЕЙСТВИЙ

Захаров А. Ю., Захаров М. А.

*Новгородский государственный университет имени Ярослава Мудрого
(Великий Новгород, Россия)*

Аннотация Предложен метод релятивистского описания динамики систем взаимодействующих частиц через вспомогательное поле, которое в статическом режиме эквивалентно заданным межатомным потенциалам, а в динамическом режиме является классическим релятивистским полем. Установлено, что для статических межатомных потенциалов общего вида вспомогательное поле представляет собой композицию элементарных полей, удовлетворяющих уравнениям типа Клейна-Гордона. Каждое элементарное поле характеризуется комплексным параметром - аналогом вещественной массы в уравнении Клейна-Гордона. Взаимодействие между частицами через вспомогательное поле, нелокально как по пространственным переменным, так и по времени. Исследованы качественные свойства решений уравнений, описывающих вспомогательное поле. Установлены релятивистские механизмы как термодинамического поведения, так и синергетических эффектов в малочастичных системах.

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

Для цитирования: Захаров А. Ю., Захаров М. А. Релятивистская модель межатомных взаимодействий // Вестник НовГУ. 2023. 5(134). 727-734. DOI: 10.34680/2076-8052.2023.5(134).727-734

Research Article

RELATIVISTIC MODEL OF INTERATOMIC INTERACTIONS

Zakharov A. Yu., Zakharov M. A.

Yaroslav-the-Wise Novgorod State University (Veliky Novgorod, Russia)

Abstract In this paper, we propose a method for relativistic description of the dynamics of systems of interacting particles through an auxiliary field which in the static mode is equivalent to given interatomic potentials, and in the dynamic mode is a classical relativistic field. It has been established that for static interatomic potentials of a general form, the auxiliary field is a composition of elementary fields satisfying the Klein-Gordon type equations. Each elementary field is characterized by a complex parameter which is an analogue of the real mass in the Klein-Gordon equation. The interaction between particles through an auxiliary field is nonlocal both in spatial variables and in time. The qualitative properties of solutions to equations describing the auxiliary field are studied. Relativistic mechanisms of both the thermodynamic behavior and synergetic effects in few-particle systems have been established.

Keywords: classical relativistic dynamics, static interatomic potentials, delayed interactions, phenomenon of irreversibility, Klein-Gordon equation

For citation: Zakharov A. Yu., Zakharov M. A. Relativistic model of interatomic interactions // Vestnik NovSU. 2023. 5(134). 727-734. DOI: 10.34680/2076-8052.2023.5(134).727-734

Введение

Проблема описания межатомных взаимодействий в рамках релятивистской теории обусловлена тем, что нерелятивистская динамика без дополнительных

допущений не в состоянии быть полноценным микроскопическим обоснованием термодинамики. Кроме того, после появления теории относительности возникла необходимость согласования всех существующих разделов физики с принципами теории относительности. Электродинамику удалось привести к релятивистской форме сравнительно быстро (именно электродинамика, созданная в XIX веке, была предпосылкой к созданию теории относительности). Появилась и успешно развивается релятивистская квантовая теория. Однако проблема релятивизации термодинамики оказалась чрезвычайно сложной и до сих пор не решена [1, 2]. Релятивизация феноменологической термодинамики предполагает поиск и обоснование закона преобразования термодинамических функций при переходе от одной системы отсчёта к другой. Предложенные в разные годы варианты релятивистской термодинамики [3-5] не представляются убедительными и не получили существенного дальнейшего развития.

Начиная с 1920-х годов были попытки построения релятивистской статистической механики, результаты которых приведены в работах [6-11]. Однако, использование совместно с теорией относительности концепции вероятности, которая даже в нерелятивистской механике порождает немало сомнений, очень усложняет ситуацию. В частности, возникает вопрос о законе преобразования вероятности в теории относительности.

Наконец, вероятность сама по себе не является физической величиной и не допускает прямую верификацию [12]. Кроме того, в теории вероятностей имеются внутренние несогласованности [13], приводящие к принципиальной невозможности однозначного определения вероятности на основе аксиоматики Колмогорова [14, 15].

Динамика классических релятивистских систем взаимодействующих частиц относится к числу давно сформулированных, но пока не решённых проблем. Суть проблемы заключается в поиске релятивистски инвариантного описания взаимодействий между частицами. В работах [16-18] показано, что прямое взаимодействие между частицами несовместимо с релятивистской инвариантностью гамильтониана системы даже в случае двух частиц. В релятивистской теории взаимодействие между частицами осуществляется через поле, поэтому система взаимодействующих частиц фактически состоит из двух субстанций: частиц и поля.

В работах [19, 20] введено понятие вспомогательного поля, которое в случае покоящихся частиц эквивалентно статическим межатомным потенциалам, а в динамическом режиме является самостоятельной субстанцией, передающей воздействием частиц друг на друга. Проблема нахождения этого поля была решена в важном, но очень ограниченном случае, когда Фурье-трансформанта статического межатомного потенциала является рациональной функцией от квадрата волнового вектора. Данная работа посвящена обобщению этого метода на случай произвольного центрального межатомного потенциала $v(r)$.

Теоретико-полевое представление межатомных взаимодействий

Положим, что взаимодействие между покоящимися частицами описывается скалярный центральный двухчастичным потенциалом $v(r)$, допускающем представление через интеграл Фурье:

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

где $r = |\mathbf{r}|$, $k = |\mathbf{k}|$. Предположим, что Фурье-трансформанта межатомного потенциала не имеет особенностей на полуоси $k^2 > 0$ комплексной плоскости k^2 . Следуя [19], будем искать уравнение статического потенциала $v(r)$, создаваемого точечной частицей, находящейся в начале координат $\mathbf{r} = 0$, в виде

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

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

Используя преобразование Фурье, находим

$$f(-k^2) = -\frac{4\pi}{\tilde{v}(k^2)}. \quad (3)$$

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

Таким образом, атомному потенциалу $v(r)$, который допускает представление в виде интеграла Фурье (1), соответствует статическое поле $\varphi(\mathbf{r})$, удовлетворяющее линейному уравнению

$$(\tilde{v}(-\Delta))^{-1} \varphi(\mathbf{r}) = \rho(\mathbf{r}), \quad (4)$$

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

Общее решение этого уравнения есть сумма общего решения соответствующего статического однородного уравнения

$$(\tilde{v}(-\Delta))^{-1} \varphi(\mathbf{r}) = 0 \quad (5)$$

и любого частного решения уравнения (4).

Согласно уравнению (5), собственное значение оператора $(\tilde{v}(-\Delta))^{-1}$ равно нулю.

С учетом соотношения (3) это означает, что для соответствующего значения k^2 функция $(\tilde{v}(k^2))^{-1}$ обращается в нуль:

$$\frac{1}{\tilde{v}(k^2)} = 0. \quad (6)$$

Будем рассматривать это условие как уравнение для k^2 .

Поскольку функция $\tilde{v}(k^2)$ для всех вещественных значений k действительна и

не имеет особенностей, то мнимые части всех корней уравнения (6) отличны от нуля:

$$k_s = \alpha_s + i\beta_s \Rightarrow k_s^2 = (\alpha_s^2 - \beta_s^2) + 2i\alpha_s\beta_s, \quad \beta_s \neq 0. \quad (7)$$

В частности, k_s может быть чисто мнимым (при $\alpha_s = 0$), как в случае потенциала Юкавы.

Введём обозначение

$$\mu_s^2 = -k_s^2 \quad (8)$$

и приведём уравнение (6) к следующему виду

$$\frac{1}{\tilde{v}(k^2)} = \left(\prod_s [k^2 + \mu_s^2]^{\gamma_s} \right) F(k^2) = 0, \quad (9)$$

где $F(k^2)$ — некоторая функция, не имеющая нулей, γ_s — кратность корня μ_s^2 .

$$\hat{L}_s = [\Delta - \mu_s^2]^{\gamma_s}, \quad \hat{L} = \prod_s [\Delta - \mu_s^2]^{\gamma_s}, \quad F(-\Delta) \quad (10)$$

коммутируют друг с другом, то уравнение (5) эквивалентно семейству уравнений

$$(\Delta - \mu_s^2)^{\gamma_s} \varphi_s(\mathbf{r}) = 0. \quad (11)$$

Ограничимся случаем, когда кратность всех корней уравнения (6) равна единице $\gamma_s = 1$:

$$(\Delta - \mu_s^2) \varphi_s(\mathbf{r}) = 0. \quad (12)$$

Это уравнение по форме напоминает задачу математической физики о собственных значениях μ_s^2 оператора Лапласа, которые находятся из граничных условий, наложенных на функцию $\varphi_s(\mathbf{r})$. Однако это сходство лишь внешнее. В нашем случае μ_s^2 находятся не из граничных условий для функций $\varphi_s(\mathbf{r})$, а являются решениями уравнения (6). 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 любая линейная комбинация функций $\varphi_s(\mathbf{r})$ удовлетворяет уравнению

$$\hat{L} \left(\sum_s C_s \varphi_s(\mathbf{r}) \right) = 0. \quad (13)$$

Таким образом, свободное вспомогательное статическое поле $\varphi(\mathbf{r})$ эквивалентно мгновенному центральному межатомному потенциалу и может быть представлено как суперпозиция **элементарных полей** $\varphi_s(\mathbf{r})$ удовлетворяющих уравнению (11).

В качестве примера проведем краткий анализ возможных вариантов **статических элементарных потенциалов**, зависящих от комплексных параметров μ_s и удовлетворяющих уравнению (11). Заметим, что некоторые решения этого уравнения на первый взгляд могут показаться “нефизическими”. Однако

рассмотрению подлежат все решения уравнения (11).

В случае центральных (т.е. сферически симметричных) потенциалов общее решение уравнения (11) имеет следующий вид:

$$\varphi_s(r) = \frac{1}{r} (A_s e^{\mu_s r} + B_s e^{-\mu_s r}), \quad (14)$$

где

$$\mu_s = i k_s = -\beta_s + i \alpha_s, \quad r = |\mathbf{r}|; \quad (15)$$

α_s и β_s определяются по формуле (7).

При $\alpha_s = \text{Im } \mu_s = 0$ потенциал $\varphi_s(r)$ представляет собой линейную комбинацию двух слагаемых $\frac{e^{-\beta_s r}}{r}$ и $\frac{e^{\beta_s r}}{r}$, один из которых стремится к нулю при $r \rightarrow \infty$ (потенциал Юкавы), а второй неограниченно возрастает по абсолютной величине и может показаться "нефизическим". Однако существует прецедент межчастичного потенциала, не стремящегося к нулю при $r \rightarrow \infty$ и обеспечивающего удержание кварков в рамках квантовой хромодинамики [21, 22].

В общем случае $\alpha_s \neq 0$ элементарные потенциалы $\varphi_s(r)$ являются комплексными функциями координаты r , зависящими от комплексных параметров μ_s . В этом случае полный потенциал (13) представляет собой линейную комбинацию элементарных потенциалов, которая является вещественной функцией. В частности, если число комплексных элементарных потенциалов равно двум, то параметры μ_1, μ_2 взаимно сопряжены друг с другом.

$$\mu_2 = \mu_1^*. \quad (16)$$

Тогда полный статический потенциал веществен и имеет вид

$$\varphi(r) = \frac{1}{r} \{ e^{-ar} [A \cos(br) + B \sin(br)] + e^{ar} [C \cos(br) + D \sin(br)] \}, \quad (17)$$

где $a = \text{Re } \mu_1$, $b = \text{Im } \mu_1$ и A, B, C, D являются произвольными вещественными константами. Этот потенциал представляет собой суперпозицию синусоидальных функций от r , амплитуды которых изменяются экспоненциально.

Здесь уместно отметить, что статистическая термодинамика систем с модельными потенциалами типа (17) и убывающими амплитудами колебаний изучалась в работах [23, 24]. Однако статистическая термодинамика систем с модельными потенциалами, амплитуды колебаний которых возрастают с ростом $r \rightarrow \infty$, не существует из-за расходимости конфигурационных интегралов, что никоим образом не является препятствием для изучения динамики систем с такими «нефизическими» модельными потенциалами.

Динамическое вспомогательное поле

Уравнения (4) и (5) описывают статическое вспомогательное поле, т.е. поле, создаваемое покоящимися частицами. Для описания динамики системы

взаимодействующих частиц необходимо перейти к динамическим уравнениям для вспомогательного поля, т.е. к релятивистским уравнениям. Впервые такой переход для уравнений Лапласа и Пуассона в рамках электродинамики был реализован почти одновременно Лоренцем [25] и Риманом [26] и состоит в замене в статических уравнениях оператора Лапласа Δ на оператор Даламбера $\square$:

$$\Delta = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \Rightarrow \square = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2}, \quad (18)$$

где c – скорость света.

В результате такой замены все уравнения для элементарных статических полей переходят в известные уравнения Клейна-Гордона, а динамика системы взаимодействующих атомов состоит из релятивистских уравнений динамики частиц и уравнения динамики вспомогательного поля $\varphi(\mathbf{r}, t)$.

Учёт принципа причинности приводит к отбору запаздывающих взаимодействий и отбрасыванию опережающих взаимодействий между атомами. Запаздывание взаимодействий является физическим свободным от вероятности механизмом явления необратимости, приводящего к термодинамическому поведению системы взаимодействующих частиц [27].

Заключение

Основные результаты этой работы, состоят в следующем.

1. Разработан общий метод нахождения вспомогательного поля, которое в статическом режиме эквивалентно заданным межатомным потенциалам, а в динамическом режиме представляет собой релятивистское поле, обеспечивающее взаимодействие между атомами.

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

Благодарности

Мы признательны Я. И. Грановскому и В. В. Зубкову за стимулирующие дискуссии.

Список литературы / References

1. Ares de Parga G., López-Carrera B. Relativistic Statistical Mechanics vs. Relativistic Thermodynamics // Entropy. 2011. 13(9). 1664-1693. DOI: 10.3390/e13091664
2. Lusanna L. From Relativistic Mechanics towards Relativistic Statistical Mechanics // Entropy. 2017. 19(9). 436. DOI: 10.3390/e19090436
3. Tolman R. C. Thermodynamics and relativity // Bulletin of the American Mathematical Society. 1933. 39(2). 49-74. DOI: 10.1090/S0002-9904-1933-05559-3

4. Ott H. Lorentz-Transformation der Wärme und der Temperatur // Zeitschrift für Physik. 1963. 175(1). 70-104. DOI: 10.1007/BF01375397
5. Nakamura T. K. Three Views of a Secret in Relativistic Thermodynamics // Progress of Theoretical Physics. 2012. 128(3). 463-475. DOI: 10.1143/PTP.128.463
6. ter Haar D., Wergeland H. Thermodynamics and statistical mechanics in the special theory of relativity // Physics Reports. 1971. 1(2). 31-54. DOI: 10.1016/0370-1573(71)90006-8
7. de Groot S. R., van Leeuwen W. A., van Weert Ch. G. Relativistic Kinetic Theory: Principles and Applications. New York, North-Holland Pub. Co., 1980. 417 p.
8. Trump M. A., Schieve W. C. Classical Relativistic Many-Body Dynamics. Dordrecht, Springer, 1999. 375 p.
9. Cercignani C., Kremer G.M.. The Relativistic Boltzmann Equation: Theory and Applications. Basel, Birkhäuser, 2002. 394 p.
10. Liboff R. Kinetic Theory: Classical Quantum and Relativistic Descriptions. New York, Springer, 2003. 587 p.
11. Hakim R. Introduction to Relativistic Statistical Mechanics: Classical and Quantum. New Jersey, World Scientific, 2011. 566 p.
12. Newton R. G. From Clockwork to Crapshoot: A History of Physics; Harvard University Press, London, UK, 2007. P. 179.
13. Ulam S. M. Zur Maßtheorie in der allgemeinen Mengenlehre // Fundamenta Mathematicae. 1930. 16(2). 140-150. DOI: 10.4064/fm-16-1-140-150
14. Khrennikov A. Yu. Interpretations of probability / 2nd rev. and extended ed. Berlin, Walter de Gruyter, 2009. 217 p.
15. Khrennikov A. Yu. Probability and Randomness: Quantum Versus. London, Imperial College Press, 2016. 282 p.
16. Currie D. G. Interaction contra classical relativistic Hamiltonian particle mechanics ie // Journal of Mathematical Physical. 1963. 4(12). 1470-1488. DOI: 10.1063/1.1703928
17. 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. DOI: 10.1103/RevModPhys.35.350
18. Leutwyler H. A no-interaction theorem in classical relativistic Hamiltonian particle mechanics // Nuovo Cimento. 1965. 37(2). 556-567. DOI: 10.1007/BF02749856
19. Zakharov A. Y., Zubkov V. V. Field Form of the Dynamics of Classical Many- and Few-Body Systems: From Microscopic Dynamics to Kinetics, Thermodynamics and Synergetics // Quantum Reports. 2022. 4(4). 533-543. DOI: 10.3390/quantum4040038
20. Zakharov A. Y., Zubkov V. V. Field-Theoretical Representation of Interactions between Particles: Classical Relativistic Probability-Free Kinetic Theory // Universe. 2022. 8(5). 281. DOI: 10.3390/universe8050281
21. 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(2). 245-326. DOI: 10.1140/epjh/e2011-10047-1
22. Sazdjian H. The Interplay between Compact and Molecular Structures in Tetraquarks // Symmetry. 2022. 14. 515. DOI: 10.3390/sym14030515
23. 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. DOI: 10.1134/S0018151X12050094
24. 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. DOI: 10.1134/S0018151X14020151

25. 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. DOI: 1080/14786446708639882

26. Riemann B. A contribution to electrodynamics // The London, Edinburgh, and Dublin Philosophical Magazine and Journal of Science. 1867. 34(231). 368-372. DOI: 10.1080/14786446708639897

27. Zakharov A. Y., Zakharov M. A. Microscopic Dynamic Mechanism of Irreversible Thermodynamic Equilibration of Crystals // Quantum Reports. 2021. 3(4). 724-730. DOI: 10.3390/quantum3040045

Информация об авторах

Захаров Анатолий Юльевич – доктор физико-математических наук, профессор, главный научный сотрудник, Новгородский государственный университет имени Ярослава Мудрого (Великий Новгород, Россия), ORCID: 0000-0002-7850-0086, Anatoly.Zakharov@novsu.ru

Захаров Максим Анатольевич – доктор физико-математических наук, доцент, профессор, Новгородский государственный университет имени Ярослава Мудрого (Великий Новгород, Россия), ORCID: 0000-0002-9144-340X, Maxim.Zakharov@novsu.ru