

ФИЗИКА КОНДЕНСИРОВАННОГО СОСТОЯНИЯ

УДК 537.8:539.2:517.9

DOI: 10.34680/2076-8052.2024.3(137).425-435

Поступила в редакцию / Received 24.07.2024

ГРНТИ 29.19.37+29.19.04+27.39.29

Специальность ВАК 1.3.8, 2.2.2

Принята к публикации / Accepted 29.08.2024

Научная статья

ПРИНЦИПЫ РЕЛЯТИВИСТСКОЙ МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ

Захаров А. Ю.¹, Захаров М. А.¹, Зубков В. В.²

¹ Новгородский государственный университет имени Ярослава Мудрого (Великий Новгород, Россия)

² Тверской государственный университет (Тверь, Россия)

Аннотация Построена релятивистская динамическая теория системы взаимодействующих атомов на основе концепции вспомогательного поля. Вариационная постановка задач релятивистской молекулярной динамики. Получена точная замкнутая релятивистская система уравнений, описывающая эволюцию системы атомов и скалярного поля, посредством которого взаимодействуют атомы. Проведен качественный анализ решений уравнений эволюции системы.

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

Для цитирования: Захаров А. Ю., Захаров М. А., Зубков В. В. Принципы релятивистской молекулярной динамики // Вестник НовГУ. 2024. 3 (137). 425-435. DOI: 10.34680/2076-8052.2024.3(137).425-435

Research Article

PRINCIPLES OF RELATIVISTIC MOLECULAR DYNAMICS

Zakharov A. Yu.¹, Zakharov M. A.¹, Zubkov V. V.²

¹ Yaroslav-the-Wise Novgorod State University (Veliky Novgorod, Russia)

² Tver State University (Tver, Russia)

Abstract A relativistic dynamic theory of a system of interacting atoms is constructed based on the concept of an auxiliary field. Variational formulation of problems of relativistic molecular dynamics. An exact closed relativistic system of equations is obtained that describes the evolution of the system of atoms and the auxiliary field. An analysis of the qualitative properties of solutions to the system dynamics equations has been carried out.

Keywords: interatomic potentials, classical relativistic dynamics, retarded interactions, the phenomenon of irreversibility Klein-Gordon-Fock equation

For citation: Zakharov A. Yu., Zakharov M. A., Zubkov V. V. Principles of relativistic molecular dynamics // Vestnik NovSU. 2024. 3 (137). 425-435. DOI: 10.34680/2076-8052.2024.3(137).425-435

Введение

Молекулярная динамика в настоящее время является эффективным методом, позволяющим моделировать (точнее, имитировать) временную эволюцию системы взаимодействующих частиц и рассчитывать коллективные свойства систем, зависящих от этого движения. В рамках классической (не квантовой) механики суть метода заключается в отслеживании эволюции системы посредством интегрирования уравнений движения.

Как известно, все «реальные» взаимодействия между (нейтральными) атомами имеют электромагнитное происхождение. В молекулярной динамике, как правило, взаимодействие между атомами описывается мгновенными межатомными потенциалами, явный вид которых зависит от природы взаимодействующих атомов. Выбор модельного межатомного потенциала – важный первый шаг в исследовании динамики системы взаимодействующих частиц. В современной физике известно множество «модельных» межатомных потенциалов [1-3], часть которых применяют при машинном моделировании в рамках метода молекулярной динамики [4-6].

Однако, в такой постановке задач имеется несколько изначальных принципиальных (т.е. не сводящихся только к вычислениям) проблем. Важнейшей из них является проблема перехода от классической динамики системы, состоящей из взаимодействующих частиц, к термодинамике системы в целом. В настоящее время этот переход может быть реализовано с помощью «рукотворного» введения механизма стохастизации системы, включая вариант погружения ее в резервуар. Дело в том, что «мысленное» погружение исследуемой системы в резервуар основано на гипотезе, что механизм установления термодинамического равновесия внутри находится за пределами самой системы, т.е. в резервуаре.

Следует отметить, что в методе молекулярной динамики безусловно существует механизм стохастизации, обусловленный погрешностями численного решения уравнений движения частиц, включая эффект накопления погрешностей численных алгоритмов. Однако такой механизм стохастизации не является реальной причиной перехода системы частиц к равновесному термодинамическому состоянию. Нулевое начало термодинамики не может быть следствием погрешностей вычислений.

С фундаментальной физической точки зрения любая система взаимодействующих атомов состоит из двух незамкнутых подсистем, непрерывно обменивающихся энергией и импульсом. Первая подсистема – это система атомов, а вторая – это поля (вообще говоря, различной природы), порождаемые атомами и посредством которых эти атомы только и взаимодействуют. Первая подсистема характеризуется конечным числом степеней свободы, а вторая – бесконечно большим числом степеней свободы.

В рамках молекулярной динамики используется представление о мгновенных взаимодействиях между атомами, что означает пренебрежение бесконечным числом степеней свободы, связанных с подсистемой полей. Такая, основанная на классической механике, постановка задачи позволяет поставить задачу Коши для системы атомов и численно решить её с помощью ЭВМ. Вместе с тем решение задачи Коши для системы атомов, взаимодействие между которыми имеет полевое происхождение, неединственно, так как зависит не только от начальных условий для системы атомов, но и от начальных условий для полей. Другими словами, степени свободы полей приводят

к непредсказуемости динамики атомов, что в некоторой степени может прояснить возможную «природу» возникновения вероятностной концепции, свойственной кинетической теории материи.

Концепция вспомогательного поля

Будем полагать, что взаимодействие между покоящимися атомами описывается парным центральным потенциалом $v(r)$ и может быть представлено в виде интеграла Фурье

$$v(r) = \int \frac{dk}{(2\pi)^3} \tilde{v}(k^2) e^{ikr}. \quad (1)$$

Здесь $r = |\mathbf{r}|$, $k = |\mathbf{k}|$.

В общем случае эволюция системы атомов управляется вспомогательным релятивистским полем $\varphi(\mathbf{r}, t)$, через которое осуществляются межатомные взаимодействия. В свою очередь, атомы являются источниками вспомогательного поля. При этом требуется выполнение своеобразного граничного условия: в статическом случае, когда все атомы находятся в покое, вспомогательное поле тождественно статическому межатомному потенциалу $v(r)$.

Как показано в работах [7, 8], уравнение для вспомогательного поля имеет вид

$$(\tilde{v}(-\square))^{-1} \varphi(\mathbf{r}, t) = \rho(\mathbf{r}, t), \quad (2)$$

где Δ – оператор Лапласа, $\square = \Delta - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2}$ – оператор Даламбера, $\rho(\mathbf{r}, t)$ – плотность источников поля, т. е. микроскопическая плотность числа атомов

$$\rho(\mathbf{r}, t) = \sum_{s=1}^N \delta(\mathbf{r} - \mathbf{R}_s(t)). \quad (3)$$

Уравнение для свободного вспомогательного поля $\varphi^{(0)}(\mathbf{r}, t)$ следует из уравнения (2) при $\rho(\mathbf{r}, t) \equiv 0$:

$$(\tilde{v}(-\square))^{-1} \varphi^{(0)}(\mathbf{r}, t) = 0. \quad (4)$$

Общим решением уравнения (4) является линейная комбинация **элементарных вспомогательных полей** $\varphi_s^{(0)}(\mathbf{r}, t)$, удовлетворяющих уравнениям типа Клейна-Фока-Гордона

$$(\square - \mu_s^2) \varphi_s^{(0)}(\mathbf{r}, t) = 0, \quad (5)$$

где μ_s – корни уравнения

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

на комплексной плоскости переменной k .

Отсюда следует, что всякий межатомный потенциал, допускающий продолжение в релятивистскую область, является суперпозицией полей Клейна-Гордона-Фока $\varphi_s^{(0)}(\mathbf{r}, t)$, каждое из которых характеризуется комплексным параметром «массы» μ_s .

Вариационная постановка задач релятивистской молекулярной динамики

Полная система уравнений релятивистской динамики системы, состоящей из атомов и вспомогательного поля, может быть получена из вариационного принципа, т. е. принципа наименьшего действия. Функционал действия системы имеет вид [7]

$$S = -\sum_a m_a c \int ds_a - \sum_{s=1}^n \sum_a \frac{\gamma_s}{c} \int \varphi_s(x_a) ds_a + \sum_{s=1}^n \frac{\kappa_s}{2c} \int d^4x (\partial_\nu \varphi_s(x) \partial^\nu \varphi_s(x) - \mu_s^2 \varphi_s^2(x)), \quad (7)$$

где m_a и s_a – масса и мировая линия a -й частицы соответственно, γ_s – константа связи между частицей и s -м элементарным полем, κ_s – размерная константа, относящаяся к элементарному полю $\varphi_s(x_a)$.

Полная система уравнений динамики частиц и полей имеет вид

$$\begin{cases} \frac{\partial}{\partial x^\nu} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial (\partial_\nu \varphi_s(x))} - \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \varphi_s(x)} = 0; \\ \frac{d}{d\tau_a} \frac{\partial L}{\partial \dot{x}_a^\nu} - \frac{\partial L}{\partial x_a^\nu} = 0. \end{cases} \quad (8)$$

Представим два последних слагаемых в правой части выражения (7) в следующем виде:

$$\sum_a m_a c \int ds_a + \sum_{s=1}^n \sum_a \frac{\gamma_s}{c} \int \varphi_s(x_a) ds_a = c \sum_a m_a \int d\tau_a \sqrt{\dot{x}_a^\nu \dot{x}_{a\nu}} + \sum_{s=1}^n \sum_a \frac{\gamma_s}{c} \int d\tau_a \int d^4x \varphi_s(x) \sqrt{\dot{x}^\nu \dot{x}_\nu} \delta^4(x - x_a(\tau_a)). \quad (9)$$

Подставляя выражения (9) и (7) в уравнения (8), найдем следующую систему уравнений для полей

$$(\square - \mu_s^2) \varphi_s(x) = \frac{\gamma_s}{\kappa_s} \sum_a \int d\tau_a \sqrt{\dot{x}^\nu \dot{x}_\nu} \delta^4(x - x_a(\tau_a)) \equiv \frac{\gamma_s}{\kappa_s} \rho(x) \quad (10)$$

и частиц

$$\begin{aligned} & \left(1 + \frac{1}{m_a c^2} \sum_{s=1}^n \gamma_s \varphi_s(x_a)\right) \frac{dp_{\mu a}}{d\tau_a} \\ &= \frac{\partial}{\partial x_a^\mu} \left(\sum_{s=1}^n \gamma_s \varphi_s(x)\right) - \frac{p_a^\nu p_{\mu a}}{m_a^2 c^2} \frac{\partial}{\partial x_a^\nu} \left(\sum_{s=1}^n \gamma_s \varphi_s(x)\right), \end{aligned} \quad (11)$$

где

$$\rho(x) = \sum_a \int d\tau_a \sqrt{\dot{x}^\nu \dot{x}_\nu} \delta^4(x - x_a(\tau_a)) - \quad (12)$$

микроскопическая плотность числа частиц в пространстве Минковского, $p_{\nu a} = m_a u_{\nu a}$.

Уравнения (10), (11) составляют собой замкнутую систему уравнений, которая при соответствующих начальных и граничных условиях полностью и однозначно описывает динамику частиц и полей. В частности, решение уравнений (10) при заданных начальных и граничных условиях для полей, полностью определяет динамику полей $\varphi_s(x)$ при заданной динамике частиц. Суперпозиция элементарных вспомогательных полей $\varphi_s(x)$ составляет полное вспомогательное поле $\varphi(x)$, посредством которого частицы взаимодействуют между собой. В случае отсутствия границ решение системы определяется задачей Коши для полей и частиц, которая при определенных условиях имеет единственное решение.

Качественный анализ уравнений динамики частиц и вспомогательного поля

С физической точки зрения основной интерес представляет динамика частиц, а эволюция поля самостоятельного интереса не составляет. Динамика поля имеет значение лишь как промежуточное звено, определяющее траектории частиц. В принципе, это промежуточное звено может быть исключено из рассмотрения, используя общие решения линейных дифференциальных уравнений:

$$\varphi_s(x) = \varphi_s^{(0)}(x) + \varphi_s^{(1)}(x), \quad (13)$$

где $\varphi_s^{(0)}(x)$ — общее решение соответствующего однородного дифференциального уравнения (5), а $\varphi_s^{(1)}(x)$ — любое частное решение уравнения (10) для поля, порождаемого атомами.

Частное решение $\varphi_s^{(1)}(x)$ может быть найдено с помощью функций Грина оператора Клейна-Гордона. Подстановка функций $\varphi_s^{(1)}(x)$ в уравнения (11) при отсутствии внешних полей позволяет полностью исключить полевые переменные и получить замкнутую систему уравнений движения для частиц.

Динамика вспомогательного поля

Функция Грина уравнения Клейна-Фока-Гордона для элементарного поля $\varphi_s(\mathbf{r}, t)$ определяется следующим уравнением

$$(\square - \mu_s^2)G_s(\mathbf{r} - \mathbf{r}', t - t') = -\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \delta(t - t') \quad (14)$$

решение которого хорошо известно [9]

$$G_s(\mathbf{r} - \mathbf{r}', t - t') = \frac{\delta\left(t - t' - \frac{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}{c}\right)}{4\pi|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} - \theta\left(t - t' - \frac{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}{c}\right) c\mu_s \frac{J_1\left(\mu_s \sqrt{c^2(t - t')^2 - |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|^2}\right)}{4\pi\sqrt{c^2(t - t')^2 - |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|^2}}. \quad (15)$$

Здесь $\theta(t)$ – ступенчатая функция Хевисайда, а $J_1(x)$ – функция Бесселя первого рода.

Отсюда (с учетом правой части уравнения (10)) найдем точную связь между эволюцией системы частиц $\rho(\mathbf{r}, t)$ и элементарным вспомогательным полем $\varphi_s(\mathbf{r}, t)$ [10]

$$\varphi_s^{(1)}(x) = \frac{\gamma_s}{\kappa_s} \int d\mathbf{r}' \left[\frac{\rho\left(\mathbf{r}', t - \frac{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}{c}\right)}{4\pi|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} - \mu_s \frac{\gamma_s}{\kappa_s} \int_0^\infty \rho\left(\mathbf{r}', t - \frac{1}{c} \sqrt{\xi^2 + |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|^2}\right) \frac{J_1(\mu_s \xi)}{4\pi\sqrt{\xi^2 + |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|^2}} d\xi \right], \quad (16)$$

где $\rho(\mathbf{r}, t)$ – микроскопическая плотность распределения атомов:

$$\rho(\mathbf{r}, t) = \sum_a \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_a(t)). \quad (17)$$

Решение (16) определяется двумя принципиально различающимися слагаемыми. Первое слагаемое содержит минимальное время запаздывания τ_1 между точками $\mathbf{r}$ и $\mathbf{r}'$ при скорости распространения поля со скоростью света c :

$$\tau_1 = \frac{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}{c}. \quad (18)$$

Второе слагаемое содержит бесконечно много запаздываний $\tau_2(\xi)$ между теми же точками. Эти запаздывания параметризуются переменной ξ :

$$\tau_2(\xi) = \frac{\sqrt{\xi^2 + |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|^2}}{c} \geq \tau_1, \quad (0 \leq \xi < \infty), \quad (19)$$

Существенно, что времена $\tau_2(\xi)$ зависят не только от расстояния между точками, но и от параметра ξ , задающего волны Клейна-Фока-Гордона, распространяющиеся со скоростями от 0 до c . В силу того, что функция $\tau_2(\xi)$ принимает непрерывный ряд значений от времени запаздывания (18) $\tau_1 = \tau_2(\xi)|_{\xi=0}$ до $\lim_{\xi \rightarrow \infty} \tau_2(\xi) = \infty$, эволюция системы в текущий момент времени определяется абсолютно всей её предысторией. Это связано с тем, что в случае массивного поля вся мировая линия частицы внутри конуса причинности Гильберта вносит вклад в поле в точке $\mathbf{r}$ в момент времени t .

Множественность запаздываний вспомогательных полей

Рассмотрим детально запаздывающий потенциал одной частицы, движущейся по закону $\mathbf{r} = \mathbf{r}_a(t)$. Этот потенциал состоит из двух вкладов

$$\varphi_s^{(1)}(x) = \varphi_s^{(\tau)}(\mathbf{r}, t) + \varphi_s^{(\tau, \xi)}(\mathbf{r}, t). \quad (20)$$

– Первый вклад – точный аналог потенциала Лиенара-Вихерта:

$$\varphi_s^{(\tau)}(\mathbf{r}, t) = \frac{\gamma_s}{\kappa_s} \frac{1}{4\pi \left(|\mathbf{r} - \mathbf{r}_a(\tau)| - \frac{(\mathbf{r} - \mathbf{r}_a(\tau)) \cdot \dot{\mathbf{r}}_a(\tau)}{c} \right)}, \quad (21)$$

где τ – переменная, связанная с t соотношением

$$\tau + \frac{|\mathbf{r} - \mathbf{r}_a(\tau)|}{c} = t. \quad (22)$$

Вклад от поля (21) в точке $\mathbf{r}$ в момент времени t зависит от положения $\mathbf{r}_a(\tau)$ и скорости $\dot{\mathbf{r}}_a(\tau)$ порождающей его частицы в **единственный момент времени** τ , определяемый соотношением (22). Это связано с тем, что первое слагаемое в выражении для поля содержит однозначно определенное запаздывание τ_1 (18) между заданной точкой пространства $\mathbf{r}$ и полдожением частицы $\mathbf{r}_a(\tau)$ в момент времени τ .

– Второй вклад $\varphi_s^{(\tau, \xi)}(\mathbf{r}, t)$ – потенциал, определяемый не единственной точкой траектории частицы, а всей ее траекторией от бесконечно удаленного прошлого до точки, определяемой условием (22):

$$\varphi_s^{(\tau, \xi)}(\mathbf{r}, t) = -\frac{\gamma_s}{\kappa_s} \frac{\mu_s}{4\pi} \int_0^\infty \frac{J_1(\mu_s \xi)}{\sqrt{\xi^2 + |\mathbf{r} - \mathbf{r}_a(\tau(\xi, t))|^2 - \frac{(\mathbf{r} - \mathbf{r}_a(\tau(\xi, t))) \cdot \dot{\mathbf{r}}_a(\tau(\xi, t))}{c}}} d\xi. \quad (23)$$

Существенно, что этот вклад $\varphi_s^{(\tau, \xi)}(\mathbf{r}, t)$ в поле в точке $\mathbf{r}$ и в момент времени t зависит не только от бесконечного ряда положений $\mathbf{r}_a(\tau(\xi, t))$ порождающей его частицы, но и от бесконечного набора ее скоростей $\dot{\mathbf{r}}_a(\tau(\xi, t))$ в моменты времени, определяемые условием:

$$\tau + \frac{1}{c} \sqrt{\xi^2 + |\mathbf{r} - \mathbf{r}_a(\tau(\xi, t))|^2} = t. \quad (24)$$

Этот вклад параметризуется переменной ξ :

$$\tau_2(\xi) = \frac{\sqrt{\xi^2 + |\mathbf{r} - \mathbf{r}_a(\tau(\xi, t))|^2}}{c} \geq \tau_1, \quad (0 \leq \xi < \infty). \quad (25)$$

Отсюда следует, что «наблюдатель», который в момент времени t находится в точке $\mathbf{r}$ вместо реальной точечной a -ю частицы «видит» кусок траектории этой частицы $\mathbf{r}_a(t')$ в прошлые времена $-\infty < t' \leq t - \tau_1$. В результате локальное поле, создаваемое в точке

$\mathbf{r}$ в момент времени t коллективом частиц, определяется целым «клубком», состоящим из траекторий всех частиц системы. Такая картина эквивалентна фрагментации точечных частиц — источников поля — на «делокализованные» объекты. Таким образом, динамика частиц, взаимодействующих через релятивистское скалярное поле (16), нелокальна и по пространственным переменным, и по времени.

О задаче Коши для системы атомов, погруженных во вспомогательное скалярное поле

Релятивистская динамика системы, состоящей из атомов и создаваемых ими полей, определяется системой уравнений (10) и (11) вместе с начальными условиями для этих уравнений. Рассмотрим два варианта качественного исследования динамики системы.

1. Система уравнений (10) и (11) исследуется как единое целое вместе с начальными условиями для частиц и полей и граничными условиями для полей. Если условия существования и единственности решения этой системы уравнений выполнены, то в силу инвариантности уравнений движения по отношению к операции обращения времени $t \rightarrow -t$ динамика системы «частицы + поля» обратима. В этом случае начальное состояние системы однозначно определяет как ее будущее, так и ее прошлое.

2. Из системы уравнений (10) и (11) исключить полевые переменные $\varphi_s(x)$. Для этого требуется подставить решение (16) в уравнение движения для атомов. Поскольку согласно (16) функции $\varphi_s(x)$ зависят от всей предыстории динамики частиц, то уравнения, описывающие динамику атомов, являются функционально-дифференциальными уравнениями запаздывающего типа. Следовательно, задание начальных условий для подсистемы частиц недостаточно для однозначной разрешимости задачи Коши. Неоднозначность (непредсказуемость) решений задачи Коши уравнений динамики атомов обусловлена игнорированием «скрытых» полевых степеней свободы или (в другой форме) игнорированием всей «скрытой» предыстории динамики атомов. Введение нефизической концепции вероятности для объяснения неоднозначности эволюции классической системы атомов не является необходимым.

Заключение

Основные положения и выводы настоящей работы состоят в следующем.

- Каждому парному центральному межатомному потенциалу $v(r)$ соответствует однозначно определяемое дифференциальное уравнение в частных производных относительно вспомогательного статического поля $\varphi(\mathbf{r})$, создаваемого покоящимися атомами.

- Дифференциальному уравнению для статического вспомогательного поля соответствует однозначно определяемое ковариантное релятивистское динамическое

поле $\varphi(\mathbf{r}, t)$. Это поле обуславливает динамику атомов в терминах релятивистской классической теории частиц и полей. В случае неподвижных атомов это поле эквивалентно статическим межатомным потенциалам, широко используемым, например, при исследовании системы частиц в рамках молекулярной динамики.

- Вспомогательное скалярное поле как в статическом, так и в более общем динамическом случае является суперпозицией элементарных полей $\varphi_s(\mathbf{r}, t)$, каждое из которых удовлетворяет уравнениям типа Клейна-Фока-Гордона. Эволюция элементарных полей определяется мгновенной локальной плотностью числа частиц. Параметры μ_s этих элементарных полей определяются особыми точками фурье-образа межатомного статического потенциала или уравнением (6).

- Функционал действия системы атомов, взаимодействующих через вспомогательное поле, содержит вклады свободных атомов, всех свободных элементарных полей и перекрёстных взаимодействий между всеми атомами с одной стороны и всеми элементарными полями с другой стороны.

- Описание необратимой динамики атомов и эволюции вспомогательного поля основано только на релятивистских ковариантных уравнениях и принципе причинности и не требует введение искусственных предположений и конструкций.

- Массивность элементарных вспомогательных полей приводит к множественности запаздываний взаимодействий между атомами. Поэтому потенциал поля точечного источника в 4-точке $(\mathbf{r}, t)$ определяется не единственной точкой $(\mathbf{r}_a(\tau), \tau)$ мировой линии источника, удовлетворяющей условию (22), а всеми точками мировой линии, параметризуемыми переменной ξ в соответствии с условием (19).

- Задача Коши для системы «атомы + вспомогательные поля» при определенных условиях допускает существование и единственность динамики этой системы. Задание начальных условий только атомов недостаточно для однозначной разрешимости задачи Коши как для системы в целом, так и для подсистемы атомов. Это является одной из причин как необратимости, так и явления эредитарности систем.

Список литературы

1. Rowlinson J. S. Cohesion: A Scientific History of Intermolecular Forces. Cambridge: Cambridge University Press, 2002. 343 p.
2. Kaplan I. G. Intermolecular Interactions: Physical Picture, Computational Methods and Model Potentials. Chichester: Wiley, 2006. 375 p.
3. Stone A. The Theory of Intermolecular Forces. Oxford: Oxford University Press, 2013. 352 p.
4. Метод молекулярной динамики в физической химии: сборник обзоров: посвященных памяти А. Г. Гривцова / отв. редактор Ю. К. Товбин. Москва: Наука, 1996. 333 с.

5. Kamberaj H. Molecular Dynamics Simulations in Statistical Physics: Theory and Applications. Cham: Springer, 2020. 470 p.
6. Kun Zhou, Bo Liu. Molecular Dynamics Simulation: Fundamentals and Applications. Amsterdam: Elsevier, 2022. 374 p.
7. 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
8. Захаров А. Ю., Захаров М. А. Релятивистская модель межатомных взаимодействий в конденсированных системах // Конденсированные среды и межфазные границы. 2023. 25 (4). 494-504. DOI: 10.17308/kcmf.2023.25/11480
9. Морс Ф., Фешбах Г. Методы теоретической физики: в 2-х т: перевод с английского. Москва: Изд-во инстан. лит., 1958-1960. Т.1. Москва, 1958. 932 с. Т. 2. Москва, 1960. 896 с.
10. Иваненко Д. Д., Соколов А. А. Классическая теория поля: новые проблемы. Москва; Ленинград: ГИТТЛ, 1951. 480 с.

References

1. Rowlinson J. S. C. A Scientific History of Intermolecular Forces. Cambridge: Cambridge University Press, 2002. 343 p.
2. Kaplan I. G. Intermolecular Interactions: Physical Picture, Computational Methods and Model Potentials. Chichester: Wiley, 2006. 375 p.
3. Stone A. The Theory of Intermolecular Forces. Oxford: Oxford University Press, 2013. 352 p.
4. Metod molekulyarnoj dinamiki v fizicheskoy himii: sbornik obzorov: posvyashchennykh pamyati A. G. Grivtsova [The method of molecular dynamics in physical chemistry: collection of reviews: dedicated to the memory of A. G. Grivtsov]. Exec. editor Yu. K. Tovbin. Moscow: Nauka, 1996. 169 p.
5. Kamberaj H. Molecular Dynamics Simulations in Statistical Physics: Theory and Applications. Cham: Springer, 2020. 470 p.
6. Kun Zhou, Bo Liu. Molecular Dynamics Simulation: Fundamentals and Applications. Amsterdam: Elsevier, 2022. 374 p.
7. 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
8. Zakharov A. Yu., Zakharov M. A. Relativistic model of interatomic interactions in condensed systems // Kondensirovannye Sredy I Mezhfaznye Granitsy = Condensed Matter and Interphases. 2023. 25 (4). 494-504. DOI: 10.17308/kcmf.2023.25/11480

9. Morse Ph., Feshbach H. *Metody teoreticheskoy fiziki* [Methods of Theoretical Physics]: in 2 volumes: translated from English. Vol. 1. Moscow: Izd-vo Inostran. lit., 1958. 932 p. Vol. 2. Moscow, 1960. 896 p.

10. Ivanenko D. D., Sokolov A. A. *Klassicheskaya teoriya polya: novyye problemy* [Classical Field Theory: new challenges]. Moscow-Leningrad: GITTL, 1951. 480 p.

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

Зубков Виктор Викторович – кандидат физико-математических наук, доцент, доцент, Тверской государственный университет (Тверь, Россия), ORCID: 0000-0003-0745-7807, Zubkov.VV@tversu.ru