

## ФИЗИКА КОНДЕНСИРОВАННОГО СОСТОЯНИЯ

УДК 537.8, 539.2, 517.9

DOI: 10.34680/2076-8052.2025.1(139).91-99

Поступила в редакцию / Received 16.02.2025

ГРНТИ 29.05.23

Специальность ВАК 1.3.8.

Принята к публикации / Accepted 09.04.2025

*Научная статья*

### КЛАССИЧЕСКАЯ РЕЛЯТИВИСТСКАЯ ДИНАМИКА СИСТЕМЫ ВЗАИМОДЕЙСТВУЮЩИХ АТОМОВ: ГАМИЛЬТОНОВА ФОРМА

Захаров А. Ю.

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

**Аннотация.** Работа содержит обобщение нерелятивистской классической гамильтоновой динамики системы взаимодействующих частиц на случай релятивистской теории. Взаимодействие между атомами учитывается в рамках концепции ковариантного вспомогательного поля, которое только в нерелятивистском пределе эквивалентно мгновенным межатомным потенциалам. Установлено, что вспомогательное поле является суперпозицией элементарных полей, каждое из которых удовлетворяет уравнениям типа Клейна-Гордона-Фока. Представлены вещественная и комплексная формы релятивистского гамильтониана системы взаимодействующих частиц с учётом полевых степеней свободы. Гамильтониан содержит три вклада, соответствующие свободным частицам, свободным полям типа Клейна-Гордона-Фока и взаимодействиям между частицами и полями. Исходя из вариационной постановки задач релятивистской молекулярной динамики, получена точная замкнутая релятивистская система уравнений, описывающая эволюцию системы атомов и вспомогательного поля в рамках гамильтоновой картины. Выполнен анализ качественных свойств решений уравнений динамики системы.

**Ключевые слова:** *межатомные потенциалы; концепция вспомогательного поля; классическая релятивистская динамика; гамильтониан; канонические уравнения; уравнение Клейна-Гордона-Фока.*

**Для цитирования:** Захаров А. Ю. Классическая релятивистская динамика системы взаимодействующих атомов: Гамильтонова форма // Вестник НовГУ. 2025. 1 (139). 91–99. DOI: 10.34680/2076-8052.2025.1(139).91-99

*Research Article*

### CLASSICAL RELATIVISTIC DYNAMICS OF A SYSTEM OF INTERACTING ATOMS: HAMILTONIAN FORM

Zakharov A. Yu.

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

**Abstract.** The paper contains a generalization of the nonrelativistic classical Hamiltonian dynamics of a system of interacting particles to the case of a relativistic theory. The interaction between atoms is taken into account within the concept of a covariant auxiliary field, which is equivalent to instantaneous interatomic potentials only in the nonrelativistic limit. It is established that the auxiliary field is a superposition of elementary fields, each of which satisfies the Klein-Gordon-Fock type equations. The real and complex forms of the relativistic Hamiltonian of a system of interacting particles are presented, taking into account the field degrees of freedom. The Hamiltonian contains three contributions corresponding to free particles, free fields of the Klein-Gordon-Fock type, and interactions between particles and fields. Based on the variational formulation of problems of relativistic molecular dynamics, an exact closed relativistic system of equations is obtained, describing the evolution of a system of atoms and an auxiliary field within the framework of the Hamiltonian picture. An analysis of the qualitative properties of solutions of the equations of the system's dynamics is performed.

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

**For citation:** Zakharov A. Yu. classical relativistic dynamics of a system of interacting atoms: Hamiltonian form // Vestnik NovSU. 2025. 1 (139). 91–99. DOI: 10.34680/2076-8052.2025.1(139).91-99

## Введение

Релятивистский эффект запаздывания межатомных взаимодействий является реальным физическим механизмом, приводящих к термодинамическому поведению системы частиц [1]. Однако, описание релятивистской динамики взаимодействующих атомов в терминах, обычно используемых в теории конденсированного состояния вещества мгновенных межатомных потенциалов [2–6], несовместимо с фундаментальными принципами теории относительности: представление о мгновенных межатомных потенциалах допустимо лишь в статическом случае покоящихся атомов, когда запаздывание взаимодействий не проявляется. Поэтому в релятивистской динамике системы взаимодействующих атомов вместо *мгновенных* межатомных потенциалов следует использовать полевую картину взаимодействий между атомами [7]. При этом в нерелятивистском пределе полевая картина должна быть эквивалентной статическим межатомным потенциалам.

Для реализации этой программы требуется решить следующие проблемы.

1. Разработать метод нахождения *релятивистского ковариантного вспомогательного поля*, которое в статическом режиме эквивалентно заданному межатомному потенциалу  $v(r)$ . Эта проблема сформулирована и решена для класса статических модельных потенциалов, Фурье-трансформанта  $\tilde{v}(k^2)$  которых является рациональной алгебраической функцией от волнового числа  $k$  [7].

2. Установление уравнений Лагранжа релятивистской динамики системы атомов и вспомогательного поля, обеспечивающего межатомные взаимодействия. Эта проблема решена для указанного класса модельных межатомных потенциалов с помощью вариационного принципа [7]: получено кинетическое уравнение для системы взаимодействующих атомов в терминах микроскопической (т. е. не усреднённой) функции распределения и выведены уравнения динамики вспомогательного поля.

3. Нахождение уравнений релятивистской динамики системы атомов и вспомогательного поля к гамильтоновой форме. Исследование качественных свойств решений уравнений Гамильтона, установление интегральных инвариантов.

Цель данной работы состоит в обобщении нерелятивистской канонической классической механики Гамильтона с прямыми взаимодействиями между частицами на классическую релятивистскую теорию системы, состоящей из атомов и вспомогательного поля, обеспечивающего взаимодействие между атомами.

### Гамильтониан системы, состоящей из атомов и вспомогательного поля

Лагранжиан системы «атомы + вспомогательное поле» имеет вид [7]

$$\begin{aligned} L(\mathbf{R}_a(t), \dot{\mathbf{R}}_a(t); \{\varphi_s(\mathbf{r}, t)\}, \{\dot{\varphi}_s(\mathbf{r}, t)\}, \{\nabla\varphi_s(\mathbf{r}, t)\}) = \\ = \sum_a \frac{m\dot{\mathbf{R}}_a^2(t)}{2} - \sum_{s=1}^n \gamma_s \int d\mathbf{r} \left( \sum_a \delta(\mathbf{r} - \mathbf{R}_a(t)) \right) \varphi_s(\mathbf{r}, t) + \\ + \sum_{s=1}^n \frac{\kappa_s}{2} \int d\mathbf{r} \left[ \left( \frac{\partial \varphi_s(\mathbf{r}, t)}{c \partial t} \right)^2 - (\nabla \varphi_s(\mathbf{r}, t))^2 - \mu_s^2 \varphi_s^2(\mathbf{r}, t) \right], \end{aligned} \quad (1)$$

где  $\mathbf{R}_a(t)$  – радиус-вектор  $a$ -й точечной частиц как функция времени  $t$ ,  $m$  – масса частицы,  $\varphi_s(\mathbf{r}, t)$  –  $s$ -е элементарное вспомогательное скалярное поле, характеризующееся юкавской массой  $\mu_s$ . Параметры  $\mu_s$  определяются особыми точками Фурье-трансформанты  $\tilde{v}(k^2)$  статического межатомного потенциала на комплексной плоскости волнового числа  $k$  [1].

Первый член в правой части этой формулы – лагранжиан свободных частиц в пренебрежении лоренцевым множителем, третий член – лагранжианы свободных элементарных вспомогательных полей, второй член – определяет взаимодействия между точечными частицами и элементарными полями,  $\gamma_s$  и  $\kappa_s$  – размерные параметры.

Отсюда следуют уравнения Лагранжа, описывающие эволюцию системы атомов и вспомогательных полей:

$$\begin{cases} m\ddot{\mathbf{R}}_a(t) + \sum_s \gamma_s \nabla \varphi_s(\mathbf{R}_a(t)) = 0; \\ (\square - \mu_s^2) \varphi_s(\mathbf{r}, t) = \frac{\gamma_s}{\kappa_s} \sum_a \delta(\mathbf{r} - \mathbf{R}_a(t)). \end{cases} \quad (2)$$

Перейдем от полей  $\varphi_s(\mathbf{r}, t)$  к их Фурье-компонентам  $\tilde{v}_s(\mathbf{k}, t)$  по правилу [8, 9]

$$\varphi_s(\mathbf{r}, t) = \sum_{\mathbf{k}} \tilde{\varphi}_s(\mathbf{k}, t) e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}}, \quad \tilde{\varphi}_s(\mathbf{k}, t) = \frac{1}{V} \int \varphi_s(\mathbf{r}, t) e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}} d\mathbf{r}. \quad (3)$$

В отличие от  $\varphi_s(\mathbf{r}, t)$ , переменные  $\tilde{\varphi}_s(\mathbf{k}, t)$ , вообще говоря, комплекснозначны и связаны между собой соотношениями

$$\tilde{\varphi}_s(-\mathbf{k}, t) = \tilde{\varphi}_s^*(\mathbf{k}, t). \quad (4)$$

Найдём функцию Лагранжа в новом представлении

$$\begin{aligned} L(\mathbf{R}_a(t), \dot{\mathbf{R}}_a(t); \tilde{\varphi}_s(\mathbf{k}, t), \dot{\tilde{\varphi}}_s(\mathbf{k}, t)) = \\ = \sum_a \frac{m\dot{\mathbf{R}}_a^2(t)}{2} - \sum_{s=1}^n \gamma_s \sum_{\mathbf{k}} \tilde{\varphi}_s(\mathbf{k}, t) \sum_a e^{i\mathbf{k}\mathbf{R}_a(t)} \\ + \sum_{s=1}^n \frac{V\kappa_s}{2} \sum_{\mathbf{k}} \left[ \frac{1}{c^2} \frac{\partial \tilde{\varphi}_s(\mathbf{k}, t)}{\partial t} \frac{\partial \tilde{\varphi}_s(-\mathbf{k}, t)}{\partial t} - (k^2 + \mu_s^2) \tilde{\varphi}_s(\mathbf{k}, t) \tilde{\varphi}_s(-\mathbf{k}, t) \right]. \end{aligned} \quad (5)$$

Последнее слагаемое в этой формуле напоминает выражение для функции Лагранжа системы свободных осцилляторов с теми лишь отличиями, что

- координаты  $\tilde{\varphi}_s(\mathbf{k}, t)$  являются **комплекснозначными функциями**;
- функция Лагранжа содержит «перекрёстные члены» типа  $\tilde{\varphi}_s(\mathbf{k}, t) \tilde{\varphi}_s(-\mathbf{k}, t)$  и

$$\frac{\partial \tilde{\varphi}_s(\mathbf{k}, t)}{\partial t} \frac{\partial \tilde{\varphi}_s(-\mathbf{k}, t)}{\partial t}.$$

Возможны два эквивалентных, но отличающихся по форме варианта представления гамильтониана системы «атомы + вспомогательное поле».

1. Представление в виде функции комплексных полевых переменных.

2. Представление в виде функции вещественных полевых переменных, каковыми являются вещественные и мнимые части соответствующих комплексных переменных.

### **Комплексное представление гамильтониана**

Импульсы атомов  $\mathbf{P}_a(t)$  и вспомогательных полей  $p_s(\mathbf{k}, t)$  определим соотношениями

$$\begin{cases} \mathbf{P}_a(t) = \frac{\partial L}{\partial \dot{\mathbf{R}}_a(t)} = m\dot{\mathbf{R}}_a(t); \\ p_s(\mathbf{k}, t) = \frac{\partial L}{\partial \left( \frac{\partial \tilde{\varphi}_s(\mathbf{k}, t)}{\partial t} \right)} = \frac{V\kappa_s}{2c^2} \dot{\tilde{\varphi}}_s(-\mathbf{k}, t). \end{cases} \quad (6)$$

Выполним преобразование Лежандра и найдём гамильтониан системы, состоящей из атомов и создаваемых ими полей

$$\begin{aligned} H(\mathbf{R}_a(t), \mathbf{P}_a(t); \tilde{\varphi}_s(\mathbf{k}, t), p_s(\mathbf{k}, t)) = \\ = \sum_a \frac{\mathbf{P}_a^2(t)}{2m} + \sum_{s=1}^n \gamma_s \sum_{\mathbf{k}} \tilde{\varphi}_s(\mathbf{k}, t) \sum_a e^{i\mathbf{k}\mathbf{R}_a(t)} + \\ + \sum_{s=1}^n \sum_{\mathbf{k}} \left[ \frac{2c^2}{V\kappa_s} p_s(\mathbf{k}, t) p_s(-\mathbf{k}, t) + \frac{V\kappa_s}{2} (k^2 + \mu_s^2) \tilde{\varphi}_s(\mathbf{k}, t) \tilde{\varphi}_s(-\mathbf{k}, t) \right]. \end{aligned} \quad (7)$$

Первое слагаемое в правой части этой формулы есть кинетическая энергия атомов, второе – энергия взаимодействия между атомами и вспомогательным полем  $\varphi(\mathbf{r}, t)$ :

$$\sum_{s=1}^n \gamma_s \sum_{\mathbf{k}} \tilde{\varphi}_s(\mathbf{k}, t) \sum_a e^{i\mathbf{k}\mathbf{R}_a(t)} = \sum_a \varphi(\mathbf{R}_a(t), t), \quad (8)$$

а третье слагаемое есть гамильтониан системы свободных массивных (из-за параметров  $\mu_s$ ) осцилляторов с комплексными полевыми координатами  $\tilde{\varphi}_s(\pm\mathbf{k}, t)$  и импульсами  $p_s(\pm\mathbf{k}, t)$ .

### **Вещественное представление гамильтониана**

Из определения (3) следует, что канонические координаты  $\tilde{\varphi}_s(\mathbf{k}, t)$  и импульсы  $p_s(\mathbf{k}, t)$  вспомогательных полей  $\varphi_s(\mathbf{r}, t)$  являются комплекснозначными, в то время как гамильтониан полей (7) веществен. В связи с этим целесообразно выражение (7) привести к вещественной форме.

Поскольку

$$\tilde{\varphi}_s^*(\mathbf{k}, t) = \tilde{\varphi}_s(-\mathbf{k}, t) \quad (9)$$

и

$$p_s^*(\mathbf{k}, t) = p_s(-\mathbf{k}, t), \quad (10)$$

то

$$\tilde{\varphi}_s(\pm\mathbf{k}, t) = q_s^+(\mathbf{k}, t) \pm i q_s^-(\mathbf{k}, t) \quad (11)$$

и

$$p_s(\pm\mathbf{k}, t) = p_s^+(\mathbf{k}, t) \pm i p_s^-(\mathbf{k}, t), \quad (12)$$

где все новые переменные  $q_s^+(\mathbf{k}, t)$ ,  $q_s^-(\mathbf{k}, t)$ ,  $p_s^+(\mathbf{k}, t)$ ,  $p_s^-(\mathbf{k}, t)$  вещественны.

Подставляя выражения (11) и (12) в (7), найдём выражение для гамильтониана системы в вещественной форме:

$$\begin{aligned} H(\mathbf{R}_a(t), \mathbf{P}_a(t); q_s^\pm(\mathbf{k}, t), p_s^\pm(\mathbf{k}, t)) = & \sum_a \frac{P_a^2(t)}{2m} + \\ & + \sum_{s=1}^n \gamma_s \sum_{\mathbf{k}, a} [q_s^+(\mathbf{k}, t) \cos(\mathbf{k}\mathbf{R}_a(t)) - q_s^-(\mathbf{k}, t) \sin(\mathbf{k}\mathbf{R}_a(t))] + \\ & + \sum_{s=1}^n \sum_{\mathbf{k}} \left[ \frac{2c^2}{V\kappa_s} \{ [p_s^+(\mathbf{k}, t)]^2 + [p_s^-(\mathbf{k}, t)]^2 \} + \right. \\ & \left. + \frac{V\kappa_s}{2} (k^2 + \mu_s^2) \{ [q_s^+(\mathbf{k}, t)]^2 + [q_s^-(\mathbf{k}, t)]^2 \} \right]. \end{aligned} \quad (13)$$

## Канонические уравнения эволюции системы атомов и вспомогательного поля

Полная система уравнений, описывающих динамику атомов и вспомогательного поля, следует из гамильтониана системы. Каждому из двух вариантов представления гамильтониана соответствует своя форма уравнений динамики системы: комплексный вариант (7) более компактен с математической точки зрения, а вещественный вариант (13) имеет более наглядную физическую интерпретацию.

### Комплексная форма уравнений динамики

Уравнения динамики атомов имеют вид:

$$\begin{cases} R_a(t) = \frac{\partial H}{\partial P_a(t)} = \frac{P_a(t)}{m}; \\ \dot{P}_a(t) = -\frac{\partial H}{\partial R_a(t)} = -i(\sum_{s=1}^n \gamma_s \sum_k \tilde{\varphi}_s(\mathbf{k}, t) e^{ikR_a(t)} \mathbf{k}). \end{cases} \quad (14)$$

Исключая  $P_a(t)$  из этих уравнений, найдём

$$\ddot{R}_a(t) = -\frac{i}{m} \sum_{s=1}^n \gamma_s \sum_k \tilde{\varphi}_s(\mathbf{k}, t) e^{ikR_a(t)} \mathbf{k}. \quad (15)$$

Уравнения динамики элементарных вспомогательных полей имеют вид:

$$\begin{cases} \dot{\tilde{\varphi}}_s(\mathbf{k}, t) = \frac{\partial H}{\partial p_s(\mathbf{k}, t)} = \frac{2c^2}{v_{\kappa_s}} p_s(-\mathbf{k}, t); \\ \dot{p}_s(\mathbf{k}, t) = -\frac{\partial H}{\partial \tilde{\varphi}_s(\mathbf{k}, t)} = -\gamma_s \sum_a e^{ikR_a(t)} - \frac{v_{\kappa_s}}{2} (k^2 + \mu_s^2) \tilde{\varphi}_s(-\mathbf{k}, t). \end{cases} \quad (16)$$

Исключая  $p_s(\mathbf{k}, t)$  из этих уравнений, получим

$$\ddot{\tilde{\varphi}}_s(\mathbf{k}, t) + c^2(k^2 + \mu_s^2) \tilde{\varphi}_s(\mathbf{k}, t) = -\frac{2c^2}{v_{\kappa_s}} \gamma_s \sum_a e^{ikR_a(t)}. \quad (17)$$

Объединяя уравнения (15) и (17), найдём полную систему уравнений, описывающих динамику системы атомов и создаваемых ими вспомогательных полей

$$\begin{cases} \ddot{R}_a(t) = -\frac{i}{m} \sum_{s=1}^n \gamma_s \sum_k \tilde{\varphi}_s(\mathbf{k}, t) e^{ikR_a(t)} \mathbf{k}; \\ \ddot{\tilde{\varphi}}_s(\mathbf{k}, t) + c^2(k^2 + \mu_s^2) \tilde{\varphi}_s(\mathbf{k}, t) = -\frac{2c^2}{v_{\kappa_s}} \gamma_s \sum_a e^{ikR_a(t)}. \end{cases} \quad (18)$$

Эта система уравнений описывает динамику системы, состоящей из атомов и вспомогательных полей.

### **Вещественная форма уравнений динамики**

Используя уравнения Гамильтона для вещественной формы гамильтониана (13), найдём следующую систему уравнений

$$\begin{cases} \ddot{\mathbf{R}}_a(t) = \frac{1}{m} \sum_{s,k} \gamma_s [q_s^+(\mathbf{k}, t) \sin(\mathbf{kR}_a(t)) + q_s^-(\mathbf{k}, t) \cos(\mathbf{kR}_a(t))] \mathbf{k}; \\ \ddot{q}_s^+(\mathbf{k}, t) + c^2(k^2 + \mu_s^2) q_s^+(\mathbf{k}, t) = -\frac{2c^2}{V_{\kappa_s}} \gamma_s \sum_a \cos(\mathbf{kR}_a(t)); \\ \ddot{q}_s^-(\mathbf{k}, t) + c^2(k^2 + \mu_s^2) q_s^-(\mathbf{k}, t) = -\frac{2c^2}{V_{\kappa_s}} \gamma_s \sum_a \sin(\mathbf{kR}_a(t)). \end{cases} \quad (19)$$

Первое из уравнений этой системы описывает динамику  $a$ -го атома, погружённого во вспомогательные поля  $\varphi_s$ , задаваемые их Фурье-компонентами  $q_s^+(\mathbf{k}, t)$ ,  $q_s^-(\mathbf{k}, t)$ . Второе и третье из уравнений этой системы описывают динамику осцилляторов – Фурье-компонент  $q_s^+(\mathbf{k}, t)$ ,  $q_s^-(\mathbf{k}, t)$  вспомогательных полей, которые являются «посредниками» в передаче взаимодействий между атомами.

Динамика системы взаимодействующих атомов в рамках полевой картины взаимодействий полностью определяется:

- уравнениями (18) или (19), которые эквивалентны между собой;
- начальными условиями для всех атомов;
- начальными и граничными условиями для всех вспомогательных полей.

Для однозначной разрешимости системы уравнений (7) или (13) требуется выполнение всех трёх условий. В этом смысле сама по себе релятивистская динамика системы «атомы + поля» является полностью детерминистской и обратимой. Однако, задания начальных условий *только для атомов*, как это делается в рамках нерелятивистской классической теории, и игнорирование бесконечного множества полевых степеней свободы приводит к неединственности (или непредсказуемости) решения системы уравнений. Этот факт в какой-то степени может объяснить (но не оправдать!) использование концепции вероятности в рамках классической кинетической теории и статистической механики.

## **Результаты, перспективы и открытые проблемы**

### ***Результаты***

- Получено точное выражение для релятивистского гамильтониана системы взаимодействующих атомов в рамках концепции вспомогательного ковариантного скалярного поля.
- Выведена полная система канонических уравнений Гамильтона, описывающих релятивистскую динамику системы взаимодействующих атомов и эволюцию полей.

### ***Перспективы***

- Построение свободной от вероятностных гипотез релятивистской кинетической теории.
- Построение релятивистской термодинамики.

### ***Открытые проблемы***

Развитие прямых методов математической физики – аналогов метода Ритца – применительно к уравнениям релятивистской динамики атомов и вспомогательных полей.

- Построение микроскопической теории систем с синергетической динамикой.
- Установления связи между характеристиками атомов и вспомогательных полей с термодинамическими функциями и переменными.

### **Благодарности**

Я признателен Я. И. Грановскому, М. А. Захарову и В. В. Зубкову за многочисленные дискуссии.

### **Список литературы / References**

1. Zakharov A. Yu. On the microscopic origin of thermodynamics and kinetics. Status and prospects // Physics Letters A. 2025. 534 (11). 130227-130227. DOI: 10.1016/j.physleta.2025.130227
2. Rowlinson J. S. C. A scientific history of intermolecular forces. Cambridge: Cambridge University Press, 2002. 343 p.
3. Kaplan I. G. Intermolecular Interactions: Physical Picture, Computational Methods and Model Potentials. Chichester: Wiley, 2006. 375 p.
4. Stone A. The theory of intermolecular forces. Oxford: Oxford University Press, 2013. 352 p.



5. Kun Zhou, Bo Liu. Molecular dynamics simulation: fundamentals and applications. Amsterdam: Elsevier, 2022. 374 p.
6. Kamberaj H. Molecular dynamics simulations in statistical physics: theory and applications. Cham: Springer, 2020. 470 p.
7. Zakharov A. Yu., 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. Goldstein H., Poole C., Safko J. Classical mechanics. New York: Addison Wesley, 2011. 665 p.
9. Ter Haar D. Elements of Hamiltonian mechanics. 2d ed. Amsterdam: North Holland, 1964. 201 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