



УНИВЕРСИТЕТ ИТМО

Исследование синтеза слабосвязанных двухчастичных кластеров в горячем газе

Автор: Ким Станислав R4196

Научный руководитель: Попов Евгений Николаевич к.ф.-м.н

Актуальность

- Данная задача представляет большой интерес в задачах, в которых рассматриваются горячие атомные ансамбли;
- Нет четкого критерия тройного столкновения.

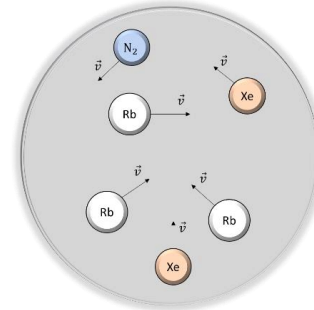


Рис. 1. Пример области.

Цели и задачи

- ✓ Изучить литературу;
- ✓ Создать «симулятор» столкновения атомов:
 - Сформулировать физическую и математическую постановку задачи;
 - Реализовать программный комплекс.

Изученное

- ✓ Совокупность из огромного количества молекул и атомов в пространстве имеет закономерности, которые не свойственны атомам по отдельности.
- ✓ Понятия «Эффективного сечения» и «средней длины свободного пробега»
- ✓ Спин-обменное взаимодействие (spin-exchange pumping)

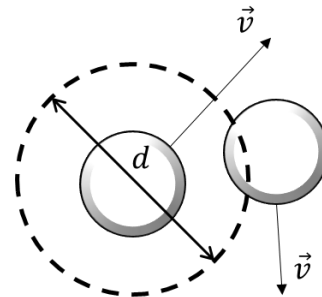


Рис. 2. Пример столкновения двух молекул.

Физическая постановка задачи

- ✔ Даны три атома с массами m_1, m_2, m_3 начальными положениями r_1, r_2, r_3 и начальными скоростями $\vec{v}_1, \vec{v}_2, \vec{v}_3$. Потенциал взаимодействиями между телами задается как Ван-дер-Вальсовый потенциал. Необходимо рассчитать траекторию перемещения тел за время t

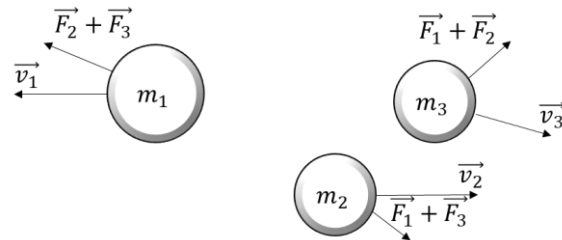


Рис. 3. Три взаимодействующих атома.

Математическая постановка

Задаем СДУ:

$$\begin{cases} \frac{d^2 \vec{r}_1}{dt^2} = \frac{\vec{F}_{12} + \vec{F}_{13}}{m_1} \\ \frac{d^2 \vec{r}_2}{dt^2} = \frac{\vec{F}_{21} + \vec{F}_{23}}{m_2} \\ \frac{d^2 \vec{r}_3}{dt^2} = \frac{\vec{F}_{31} + \vec{F}_{32}}{m_3} \end{cases}$$

Начальные условия:

$$\vec{r}_1|_{t=0} = \vec{r}_{10}, \vec{r}_2|_{t=0} = \vec{r}_{20}, \vec{r}_3|_{t=0} = \vec{r}_{30}, \vec{v}_1|_{t=0} = \vec{v}_{10}, \vec{v}_2|_{t=0} = \vec{v}_{20}, \vec{v}_3|_{t=0} = \vec{v}_{30}$$

Ван-дер-Вальсовый потенциал:

$$U = \sigma \left(\left(\frac{\varepsilon}{r} \right)^{12} - \left(\frac{\varepsilon}{r} \right)^6 \right)$$

Закон сохранения энергии

$$E_{ki} = \frac{m_i v_i^2}{2}, i = \overline{1,3}$$

$$E_{k1} + E_{k2} + E_{k3} + U_{12} + U_{23} + U_{13} = \text{const}$$

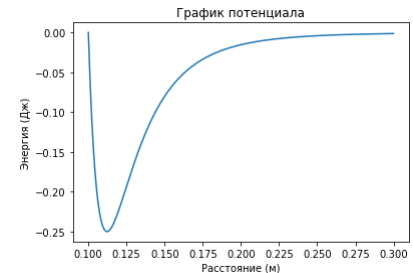


Рис. 4. График Ван-дер-Ваальсового потенциала.

Результаты

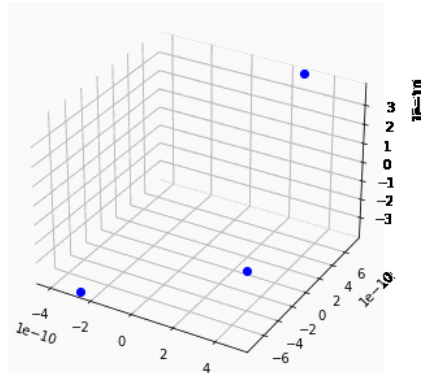
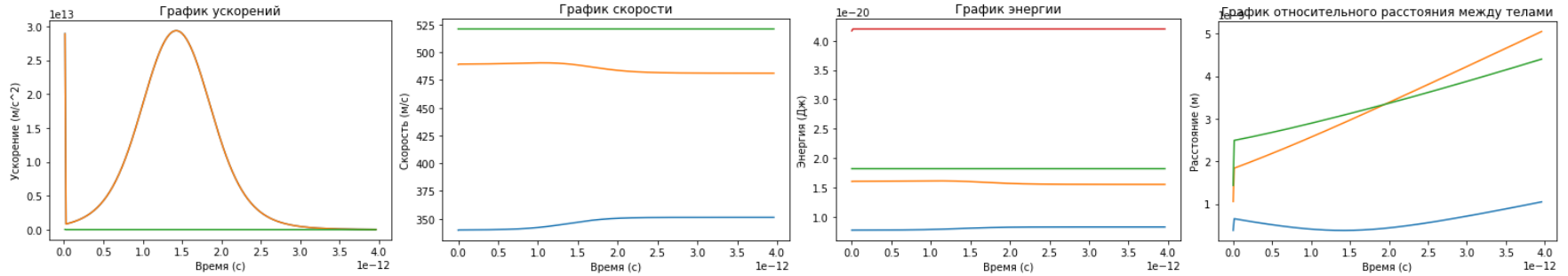


Рис. 5. Графики исследования

Планы

- ✓ Реализовать автоматическую генерацию начальных положений и скорость частиц;
- ✓ Исследовать параметры тройного столкновения;
- ✓ Генерировать начальные положения, скорости частиц атомов Хе, N₂ и Rb согласно статистическим распределениям.

Обзор литературы

- ✓ Bouchiat M. A., Brossel J., Pottier L. Interpretation of experimental results on the relaxation of optically pumped Rb in collisions with Kr atoms //Physical Review Letters. – 1967. – Т. 19. – №. 15. – С. 817;
- ✓ Herman R. M. Theory of spin exchange between optically pumped rubidium and foreign gas nuclei //Physical Review. – 1965. – Т. 137. – №. 4A. – С. A1062;
- ✓ Kelley M., Branca R. T. Theoretical models of spin-exchange optical pumping: Revisited and reconciled //Journal of Applied Physics. – 2021. – Т. 129. – №. 15. – С. 154901;
- ✓ Vallance C. An Introduction to the Gas Phase. – Morgan & Claypool Publishers, 2017.
- ✓ Walker T. G. Fundamentals of spin-exchange optical pumping //Journal of Physics: Conference Series. – IOP Publishing, 2011. – Т. 294. – №. 1. – С. 012001;
- ✓ Сивухин Д. В. Общий курс физики. Том II. Термодинамика и молекулярная физика. – 2014.

Спасибо за внимание!

IT'sMO *re than a*
UNIVERSITY