

УДК 517.9, 004.94

ИССЛЕДОВАНИЕ РАЗРУШЕНИЯ ВАН-ДЕР-ВААЛЬСОВЫХ КЛАСТЕРОВ В ГОРЯЧЕМ ГАЗЕ ПРИ УПРУГИХ СТОЛКНОВЕНИЯХ

Ким С.Е. (Университет ИТМО)

Научный руководитель – к.ф.-м.н. Попов Е.Н.

(Университет ИТМО)

Введение. Целью работы является исследование разрушения Ван-дер-Ваальсовых атомных кластеров в горячем газе при упругих столкновениях. Численная модель позволяет вычислить вероятность разрушения кластера при одиночном столкновении и сделать оценку концентрации двухатомных кластеров, которая зависит от скоростей синтеза и разрушения таковых.

Основная часть. Одним из важных эффектов длительной связи атомов в разреженном газе является спин-обменное взаимодействие между атомами благородного газа и щелочного металла. Обмен между спином электрона щелочного металла и ядром благородного газа не может произойти за время двухатомного столкновения, время которого оценивается в доли пикосекунд. В то же время, при трёхатомном столкновении может произойти захват атома благородного газа в область отрицательного потенциала щелочного атома, который создаётся силами Ван-дер-Ваальса. Кластер существует, пока не будет разрушен другим атомом при столкновении, за счёт чего длительность спин-обменного взаимодействия увеличивается на несколько порядков. Формирование двухатомного кластера и спин-обменное взаимодействие внутри него описано в работах [1, 2, 3, 4].

В настоящей работе проводится модельное исследование процесса разрушения двухатомного кластера при его столкновении с другими атомами. Задача представляет собой интерес, поскольку на сегодняшний день не существует строгой теории разрушения Ван-дер-Ваальсовых кластеров, кроме того, предлагаемая численная модель позволяет не только пронаблюдать процесс разрушения, но и получить оценки плотности вероятности таких разрушений при различных компонентах газовой смеси.

Численные исследования. Входными данными для нашей динамической модели являлись скорости и координаты сотни атомных пар, ранее полученных нами при исследовании синтеза Ван-дер-Ваальсовых кластеров. Для наблюдения разрушения выбранный кластер помещался в начало координат, после чего на него налетал атом-разрушитель, кинематические характеристики которого задавались случайно, исходя из распределения Больцмана. Многократное повторение процесса столкновения атома-разрушителя с Ван-дер-Ваальсовым кластером позволило собрать статистику случаев, при которых кластер был разрушен или остался в связанном состоянии.

Выводы. Обработав полученную статистику, мы обнаружили два эффекта: при увеличении массы атома-разрушителя при неизменной температуре газовой смеси происходит увеличение вероятности сохранения кластера при столкновении. Так же численная модель показала, что больше половины случаев «выживания» кластера при столкновении сопровождается заменой одного из атомов на атом-разрушитель. Второй эффект наводит на мысль о существовании механизма спин-обменного взаимодействия, в котором внутри газа находится много промежуточных кластеров, являющихся ресурсом для формирования кластеров уже со щелочным атомом.

Список использованных источников:

1. Franz F. A., Franz J. R. Excited-state mixing in the optical pumping of alkali-metal vapors

//Physical Review. – 1966. – T. 148. – №. 1. – C. 82.

2. Happer W. et al. Polarization of the nuclear spins of noble-gas atoms by spin exchange with optically pumped alkali-metal atoms //Physical Review A. – 1984. – T. 29. – №. 6. – C. 3092.

3. Walker T. G. Fundamentals of spin-exchange optical pumping //Journal of Physics: Conference Series. – IOP Publishing, 2011. – T. 294. – №. 1. – C. 012001.

4. Walter D. K., Happer W., Walker T. G. Estimates of the relative magnitudes of the isotropic and anisotropic magnetic-dipole hyperfine interactions in alkali-metal–noble-gas systems //Physical Review A. – 1998. – T. 58. – №. 5. – C. 3642.