

ПЕРЕСБОРКА ВАН ДЕР ВААЛЬСОВЫХ ПАР ПРИ СТОЛКНОВЕНИЯХ В ЗАДАЧЕ ТРЁХ ТЕЛ

Ким С.Е., Попов Е.Н.

Университет ИТМО, Россия, 197101, г. Санкт-Петербург, Кронверкский пр., 49, лит. А;
codeilece@gmail.ru, +7 952 922 32 13; enp-tion@yandex.ru, +7 981 941 42 06

Известно, что ван дер Ваальсовы пары образуются при тройных столкновениях в горячем газе, когда один из атомов уносит избыток энергии, охлаждая два других атома, которые попадают в потенциальную яму ван дер Ваальсовых сил [1]. В данной работе мы численно моделируем динамику разрушения ван дер Ваальсовых пар, основанной на задаче трех тел [2]. Интерес представляет динамика разрушения ван дер Ваальсовой пары, при которой один из атомов в связанной паре выбивается третьим атомом, при этом занимая место выбитого атома, такое явление назовем "пересборкой". В работе проводилась оценка частоты и условий возникновения "пересборки".

Для решения поставленной задачи была заранее получена выборка ван дер Ваальсовых пар с взаимным расположением атомов и их относительными скоростями. Следующим шагом был описан и смоделирован акт столкновения атомной пары с третьим атомом. Моделирование процесса связано со сложностью поиска аналитического вычисления атомной пары по начальным условиям из-за потенциала взаимодействия, со степенями -6 и -12. Смоделировав многократно различные столкновения в условиях ван дер Ваальсового взаимодействия было замечено, что "пересборка" не является редким событием, для атомов с массой одного порядка. Мы полагаем, что это связано с особенностью введенного потенциала, так при достаточном сближении, атомы отталкиваются друг от друга, как при абсолютно упругом ударе, что позволяет интерпретировать явление "пересборки", как маятник Ньютона, где ударяющиеся объекты меняются импульсом.

Полученные результаты, можно использовать для исследования спин-обменного взаимодействия между атомами, которое происходит при условии сближения атомов на время, большее чем время двойного столкновения [3, 4].

Литература.

1. *Lu T., Chen Q.*, van der Waals potential: an important complement to molecular electrostatic potential in studying intermolecular interactions //Journal of Molecular Modeling. – 2020. – Т. 26. – №. 11. – С. 315.
2. *Nielsen E. et al.* The three-body problem with short-range interactions //Physics Reports. – 2001. – Т. 347. – №. 5. – С. 373-459.
3. *Walker T. G., Larsen M. S.*, Spin-exchange-pumped NMR gyros //Advances in atomic, molecular, and optical physics. – Academic Press, 2016. – Т. 65. – С. 373-401.
4. *Kelley M., Branca R. T.*, Theoretical models of spin-exchange optical pumping: Revisited and reconciled //Journal of Applied Physics. – 2021. – Т. 129. – №. 15.