

Сведения о выполненных работах
в период с 27.07.2022 г. по 30.06.2023 г.

по проекту «**Математическое моделирование статистической механики
взаимодействующих закрученных частиц и ее приложения**»,
поддержанному Российским научным фондом

Соглашение № 21-71-10066

Руководитель: Капарулин Дмитрий Сергеевич, канд. физ.-мат. наук

Разработана квазиклассическая теория киральных эффектов во вращающемся классическом релятивистском газе массивных спиновых частиц. Построена модель идеального газа релятивистских спиновых частиц, находящегося во вращающемся цилиндре с фиксированными параметрами температуры и угловой скорости. Пространство состояний одной частицы реализовано в виде прямого произведения $R^6 \times S^2$, в котором фактор R^6 описывает поступательные степени свободы, а S^2 описывает пространство состояний спина. Инвариантная мера на фазовом пространстве как произведение мер на линейно пространстве и двумерной сфере. Построен вращающийся ансамбль фиксированной угловой скорости и найдена одночастичная функция распределения по координатам, импульсам и направлениям спина, обобщающая распределение Максвелла-Ютнера в поле центробежных сил. Вычислена статистическая сумма газа и получено уравнение состояния в координатах температура – угловая скорость угловой момент при заданной температуре системы. Установлено, что наибольшая величина киральных эффектов (порядка 10^{-10} по относительной величине) в классическом релятивистском газе достигается при температурах порядка температуры вырождения, выше которой она монотонно снижается.

Изучена статистическая механика идеального газа безмассовых спиновых частиц с непрерывной спиральностью, движущегося в 1+2-мерном пространстве Минковского. Построено фазовое пространство состояний одной частицы R^4 , в котором в качестве координат выбраны положения и импульсы частицы. Дополнительные переменные для описания спина не вводились, так как спин не имеет физических степеней свободы в данной модели. Построен вращающийся ансамбль фиксированной угловой скорости и найдена одночастичная функция распределения по координатам и импульсам, а также статистическая сумма. Получены уравнения состояния в координатах угловой момент-угловая скорость, при исследовании которого обнаружен феномен скачкообразного изменения углового момента при переходе от состояния покоя в состояние с ненулевой угловой скоростью, свидетельствующий о наличии фазового перехода. Зафиксирован феномен частичного не-вращения, при котором для системы возможно только одно из двух возможных в трехмерном пространстве направлений вращения, тогда как для угловой скорости противоположного знака статистическая сумма расходится. Феномен фазового перехода при нулевой угловой скорости, а также явление частичного не-вращения для данной модели ранее не были известны.

Исследована термодинамика вращающегося классического неидеального спинового газа, состоящего из частиц с ненулевым магнитным моментом и взаимодействием по диполь-дипольному механизму. Найдено уравнение состояния системы в координатах намагниченность-угловой момент и установлено что, в зависимости от температуры, выбранному значению угловой скорости может одно или три значения намагниченности газа. Показано, что случай одного решения наблюдается при высоких температурах, и он соответствует парамагнитному состоянию. Случай трех корней наблюдается при температуре ниже критического значения, и он соответствует состоянию с ненулевой спонтанной намагниченностью, который удобно рассматривать как ферромагнитное состояние. Вычислена температура Кюри, при которой происходит фазовый переход от ферромагнитного состояния к парамагнитному состоянию, в зависимости от массы частиц и величины гиромагнитного отношения. В случае газов элементарных частиц температура Кюри превышает температуру вырождения только при очень высоких концентрациях (для электронов – порядка 10^{40}) и температурах порядка миллиардов градусов. Таким образом, данный эффект может наблюдаться в звездах.

Сформулирована и решена задача о вращательной динамике двух взаимодействующих наноторов. Построена математическая модель системы, состоящей из двух наноторов, содержащих по 79 атомов, и взаимодействующих посредством сил Ван-дер-Ваальса.

Исследовано явление переворота оси вращения (так называемый π -переворот). Проведена серия экспериментов, при которой в начальный момент времени оси симметрии наноторов были совмещены, а ближайшие атомы (из разных наноторов) находились на расстоянии 0,5 нм друг от друга, а поступательное движение центров масс отсутствовало. Обнаружено, что при угловых скоростях 0 и 100 рад/нс был обнаружен эффект переворота, при котором наноторы периодически обменивались местами с периодом порядка 0,1 нс. При более высоких угловых скоростях (200 и 500 рад/нс) переворот оси вращения не наблюдался. Изучено влияние асимметрии начального положения, вызванной наклоном и смещением осей вращения наноторов на динамику системы. Обнаружено, что переворот наблюдается только при малых значениях параметра асимметрии, тогда как при больших его значениях он отсутствует. Таким образом, показано, что в движении двух молекулярных торов, взаимодействующих силами Ван-дер-Ваальса, может наблюдаться эффект переворота оси вращения.

Проведен численный эксперимент по наблюдению киральных эффектов в системе, содержащей кристалл фуллерита, при конечной температуре. В отсутствие макроскопического вращения обнаружено, что при $T = 300$ К угловая скорость вращения вокруг фиксированной и изменяется в пределах от 0 до 670 рад/нс, что согласуется экспериментальными значениями частоты вращения порядка 100 ГГц. В случае наличия макроскопического вращения зафиксированы медленные изменения вращательного движения фуллеренов порядка 10 пс. Установлено, что увеличение угловой скорости системы увеличивает величину проекции угловой скорости фуллерена на эту ось, что согласуется с распределением Гиббса для

вращающейся системы. Также доказано, что макроскопическое вращение фуллерита приводит к накоплению энергии во вращательных степенях свободы атомов и изменению направлений вращения и угловых скоростей. Численные эксперименты не обнаружили перехода системы фуллеренов в «ферромагнитное состояние», поскольку для этого необходима очень высокая концентрация молекул.

Построена математическая модель киральной тепловой машины, действующей по циклу Карно и использующей в качестве рабочего тела единичный фуллерен C₆₀. Написан программный код, описывающий динамику модели. В ходе численного эксперимента было зафиксировано явления обмена энергией и угловым моментом вращательного движения между фуллереном и окружением, чем была доказана возможность использования киральных эффектов в данной модели. Определено время релаксации углового момента, которое оказалось порядка 10 нс. Оценена максимально допустимая величина охлаждения на участке адиабатического торможения, которая при начальной температуре порядка 300К, и угловой скорости порядка 10^{14} Гц оказалась порядка 20 К. Измерение температуры было проведено на основании подсчета кинетической энергии атомов гелия, играющих роль газового термометра. Полученная величина изменения температуры соответствует максимально достижимому коэффициенту полезного действия тепловой машины порядка 7 %.

Изучена возможность создания тепловой машины на ультра-холодном фуллерене. Вычислена статистическая сумма и термодинамический потенциал системы при низких температурах (ниже температуры теплового возбуждения вращательных степеней свободы). Показано, что, в случае использования в качестве рабочего тела тяжелых торофуллеренов порядка C₅₀₀) вращение с технически достижимыми скоростями (порядка 100000 оборотов в минуту) может индуцировать переходы между различными вращательными состояниями. Продемонстрировано, что данные переходы приводят к изменению энтропии на величину $\ln 2$ (для асимметричного вытянутого волчка), $\ln 3$ (для асимметричного сплюснутого волчка) на 1 молекулу рабочего тела. Сделан вывод о большой величине киральных эффектов в данной модели.