

Моделирование взаимодействия диполей

Тихомирова Анастасия Андреевна

Иванов Дмитрий Александрович

Основной задачей является расчет потенциальной энергии, а также визуализация взаимной ориентации диполей, при которой энергия будет наименьшей. Входными данными будут являться значения дипольного момента, а также расстояние между двумя диполями. (Дипольный момент измеряется в Дебаях (Д): $1\text{Д} = 3,33564 \cdot 10^{-30} \text{ Кл} \cdot \text{м}$, а расстояние в метрах)

I. Теория.

Диполь – это два разноименных, равных по величине точечных заряда, расположенных на фиксированном расстоянии друг от друга.

Дипольный момент – это физическая величина, которая характеризует распределение заряда в диполе. Дипольный момент выражается в векторной форме и определяется как произведение заряда на расстояние между заряженными частицами. Он указывает направление и величину поля, создаваемое диполем.

Первый диполь создает электрическое поле:

$$\vec{E} = \frac{1}{4 \pi \varepsilon_0} * \frac{3 (\vec{p}_1 * \vec{n})\vec{n} - \vec{p}_1}{r^3}$$

В этом поле второй диполь имеет потенциальную энергию:

$$W = - \vec{p}_2 \vec{E} = \frac{1}{4 \pi \varepsilon_0} * \frac{\vec{p}_1 * \vec{p}_2 - 3(\vec{p}_1 * \vec{n})(\vec{p}_2 * \vec{n})}{r^3}$$

\vec{n} – это единичный вектор, направленный от первого диполя ко второму, перепишем уравнение, добавим значение углов, между дипольными моментами θ_1, θ_2 (учтем, что угол между дипольными моментами равен $\theta_1 - \theta_2$):

$$W = - \vec{p}_2 \vec{E} = \frac{p_1 p_2}{4 \pi \varepsilon_0 r^3} * (\cos(\theta_1 - \theta_2)) - 3 \cos \theta_1 \cos \theta_2$$

Так как нам нужно выяснить, где потенциальная энергия принимает свое минимальное значение все будет зависеть от угла между дипольными моментами (так как дробь $\frac{p_1 p_2}{4 \pi \varepsilon_0 r^3}$ перед скобками будет

являться константной), для начала приравняем к нулю его первые производные по углам θ_1, θ_2 .

- Дифференцируя выражение по θ_1 , получаем уравнение:

$$-\sin(\theta_1 - \theta_2) + 3 \sin \theta_1 \cos \theta_2 = 0$$

- Дифференцируя выражение по θ_2 , получаем уравнение:

$$\sin(\theta_1 - \theta_2) + 3 \sin \theta_1 \cos \theta_2 = 0$$

Применив тригонометрическую формулу ($\sin(\theta_1 - \theta_2) = \sin \theta_1 \cos \theta_2 - \sin \theta_2 \cos \theta_1$), получаем уравнения:

$$2 \sin \theta_1 \cos \theta_2 + \sin \theta_2 \cos \theta_1 = 0$$

$$2 \sin \theta_2 \cos \theta_1 + \sin \theta_1 \cos \theta_2 = 0$$

Следовательно, получаем другую пару уравнений:

$$\sin \theta_1 \cos \theta_2 = 0$$

$$\sin \theta_2 \cos \theta_1 = 0$$

Теперь нам нужно рассмотреть два случая:

- $\sin \theta_1 = \sin \theta_2 = 0$
- $\cos \theta_1 = \cos \theta_2 = 0$

Рассмотрим оба случая отдельно:

1) Имеем четыре варианта решений:

- $\theta_1 = 0; \theta_2 = 0$
- $\theta_1 = 0; \theta_2 = \pi$
- $\theta_1 = \pi; \theta_2 = 0$
- $\theta_1 = \pi; \theta_2 = \pi$

2) Имеем также четыре варианта решений:

- $\theta_1 = \frac{\pi}{2}; \theta_2 = \frac{\pi}{2}$
- $\theta_1 = \frac{\pi}{2}; \theta_2 = \frac{3\pi}{2}$
- $\theta_1 = \frac{3\pi}{2}; \theta_2 = \frac{\pi}{2}$
- $\theta_1 = \frac{3\pi}{2}; \theta_2 = \frac{3\pi}{2}$

Дальше нам нужно проверить какие варианты ответа дают нам минимум потенциальной энергии (это можно выяснить с помощью подстановки полученных решений в уравнение $W = - \vec{p}_2 \vec{E} = \frac{p_1 p_2}{4 \pi \epsilon_0 r^3} * (\cos(\theta_1 - \theta_2)) - 3 \cos \theta_1 \cos \theta_2$) Тем самым получаем, что потенциальная энергия минимальна при $\theta_1 = \theta_2 = 0$ и $\theta_1 = \theta_2 = \pi$

Это значит, что диполи стремятся встать параллельно друг другу вдоль соединяющей их линии.

В нашем моделировании мы показали график зависимости потенциальной энергии от углов между дипольными моментами, в котором отчетливо видно, при каких значения энергия минимальна. Также мы рассчитали точное значение потенциальной энергии при заданных дипольных моментах и расстоянии между диполями.

II. Инструкция к коду.

1. Скопировать проект с гитхаба или с гугл диска;
2. Открыть проект в PyCharm или любой другой IDE для Python;
3. Запустив проект, ввести значение желаемых дипольных моментов (в Дебаях) и расстояние между ними (в метрах). Дефолтными значениями выставлены значения в 1Д и 1м.
4. На экране будет показана зависимость потенциальной энергии между диполями от углов, под которыми они находятся, а также высчитаны значения максимальной и минимальной потенциальной энергии. (По желанию график можно поворачивать)

III. Пример пользования кода (с дефолтными значениями).

