Domača naloga iz matematične fizike

Maks Kamnikar

September 27, 2020

Naloga:
Štiri enako dolge ravne prevodne nano-žičke staknemo v kvadraten okvir in nanj nanesemo nekaj elektronov.
Kako se razporedijo?
Kakšno je električno polje okvira?
Ali limitira s številom elektronov k stalni obliki?

Moja naloga je poiskati optimalno razporeditev elektronov na kvadratnem okvirju. To je takšna razporeditev, pri kateri je skupna potencialna energija sistema elektronov najmanjša.

Za potencialno energijo i-tega elektrona v polju j-tega elektrona velja sorazmernost

$$W_{i,j} \propto \frac{1}{\left|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j\right|}.$$

Torej je potencialna energija i-tega elektrona v polju vseh ostalih elektronov

$$W_i = \sum_{j \neq i} W_{i,j}.$$

Iščem razporeditev elektronov pri kateri bo vsota vseh njihovih potencialnih energij

$$W = \sum_i W_i \propto \sum_i \sum_{j \neq i} \frac{1}{\left|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j\right|}$$

najmanjša.

Elektron na kvadratnem nosilcu je v lokalnem minimumu potenciala, ko nanj deluje sila, ki ima neničelno kvečjemu komponento pravokotno na nosilec, in elektrona ne potiska vzdolž nosilca. Sila j-tega elektrona na i-ti elektron vzdolž stranice na kateri leži i-ti elektron je

$$F_{i,j} = \mathbf{F}_{i,j} \cdot \hat{\mathbf{a}}_i = \frac{e_0^2}{4\pi\varepsilon_0 \left|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j\right|^2} \frac{\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j}{\left|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j\right|} \cdot \hat{\mathbf{a}}_i \propto \frac{\cos\varphi_{i,j}}{\left|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j\right|^3},$$

kjer je $\hat{\mathbf{a}}_i$ enotski vektor vzporeden s stranico na kateri leži i-ti elektron, $\varphi_{i,j}$ pa kot med vektorjema $\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j$ in $\hat{\mathbf{a}}_i$. Oziroma

$$F_{i,j} \propto \frac{\Delta y}{(\Delta x_{i,j}^2 + \Delta y_{i,j}^2)^2},$$

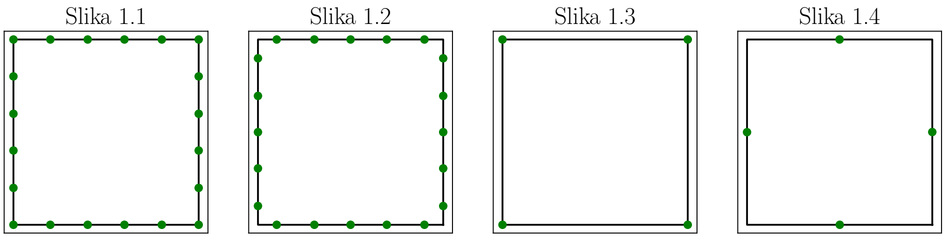
kjer je $\Delta x_{i,j}^2 + \Delta y_{i,j}^2 = \left|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j\right|^2 = (x_i - x_j)^2 + (y_i - y_j)^2$, $\cos\varphi_{i,j} = \frac{\Delta y}{\sqrt{\Delta x_{i,j}^2 + \Delta y_{i,j}^2}}$.
Iskal sem tako razporeditev elektronov po okvirju, da velja neenakost

$$F_i = \sum_{j \neq i} F_{i,j} \leq \varepsilon$$

za vsak $i = 1, 2, ..., n$, kjer je n število elektronov na okvirju in $\varepsilon > 0, \varepsilon \ll 1$.

To razporeditev sem iskal tako, da sem simuliral n elektronov na kvadratnem okvirju, pri čemer sem premikal elektrone vzdolž stranic okvirja v smeri rezultante sil nanje. Simulacijo sem končal, ko so bile sile na elektrone s komponento vzdolž stranic dovolj majhne za želeno numerično natančnost ($F_i \leq \varepsilon$), oz. ko sta si bili stanji dveh zaporednih korakov simulacije dovolj podobni.

Da bi s simulacijo našel le stabilna ravnovesna stanja, sem sistem, ko je pristal v morebitnem labilnem stanju izmaknil iz njega in preveril, da se ravnovesje spet vzpostavi v istih točkah. To sem storil tako, da sem vsakemu delcu, ki ni ležal v oglišču kvadratnega nosilca, naključno spremenil pozicijo vzdolž stranice na kateri je ležal. Psevdonaključna Pythonova knjižnica `random`, ki sem jo uporabljal, je dovolj naključna za ta namen, saj je verjetnost, da bi sistem s to perturbacijo ponesreči premaknil ravno v neko drugo labilno stanje, zanemarljiva. Stabilno ravnovesno stanje ni eno, ampak zaradi simetrije obstaja 8 stabilnih, energetsko enakovrednih, optimalnih stanj. 4 zaradi zrcaljenj in 4 zaradi rotacij.



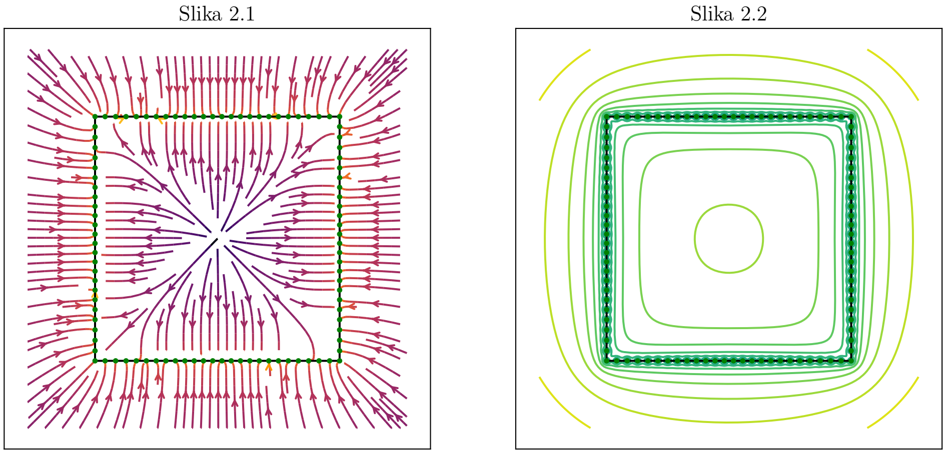
Slika 1: Primeri različnih stabilnih in labilnih ravnovesij.

Slika 1.1 in 1.2 prikazujeta dve distribuciji dvajsetih elektronov, ki sta obe stabilni, kljub temu pa obe nimata iste potencialne energije. Najnižje energije imajo sistemi z delci v ogliščih kvadratnega nosilca, saj imajo tako večje medsebojne razdalje. Slika 1.3 prikazuje stabilno ravnovesno stanje za štiri delce, Slika 1.4 pa labilno stanje sistema štirih elektronov.

Zanimala so me stanja z minimalno energijo, se pravi tista, ki imajo čimveč delcev v ogliščih kvadrata. Da sem zagotovil, da se bo sistem res znašel v takem stanju, sem elektrone pred začetkom simulacije nanesel na kvadratni okvir tako, da sem vsaj en elektron vedno postavil v eno od oglišč; razporedil sem jih enakomerno po polarnem kotu začenši s kotom $\frac{\pi}{4}$. Polarni kot i-tega elektrona θ_i v sistemu n elektronov je torej

$$\theta_i = \frac{2\pi}{n}(i-1) + \frac{\pi}{4}.$$

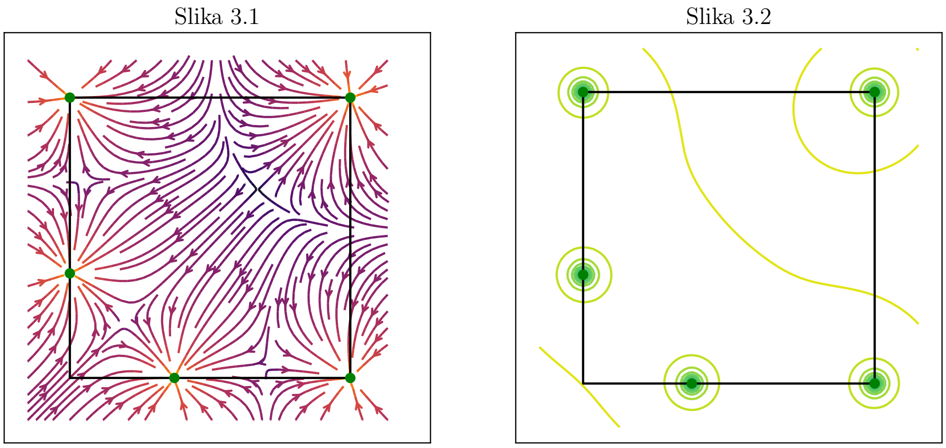
Zdaj so elektroni našli svoje ravnovesne položaje, mi pa se sprašujemo, če je kaj zanimivega v električnem polju okoli teh elektronov. Vemo da je sila na i-ti elektron $\mathbf{F}_i = \mathbf{E}e_0$, prav tako pa zaradi ravnovesnega pogoja drži $F_i \leq \varepsilon \ll 1$. Torej je komponenta sile na i-ti elektron vzdolž stranice na kateri leži zanemarljiva. Posledica tega je, da je neničelna lahko kvečjemu komponenta sile pravokotna na stranico kvadrata. Torej so silnice električnega polja v točki vsakega elektrona usmerjene ven iz kvadrata, normalno na njegove stranice.



Slika 2: Silnice električnega polja sistema stotih elektronov in njegove ekvipotencialne ploskve.

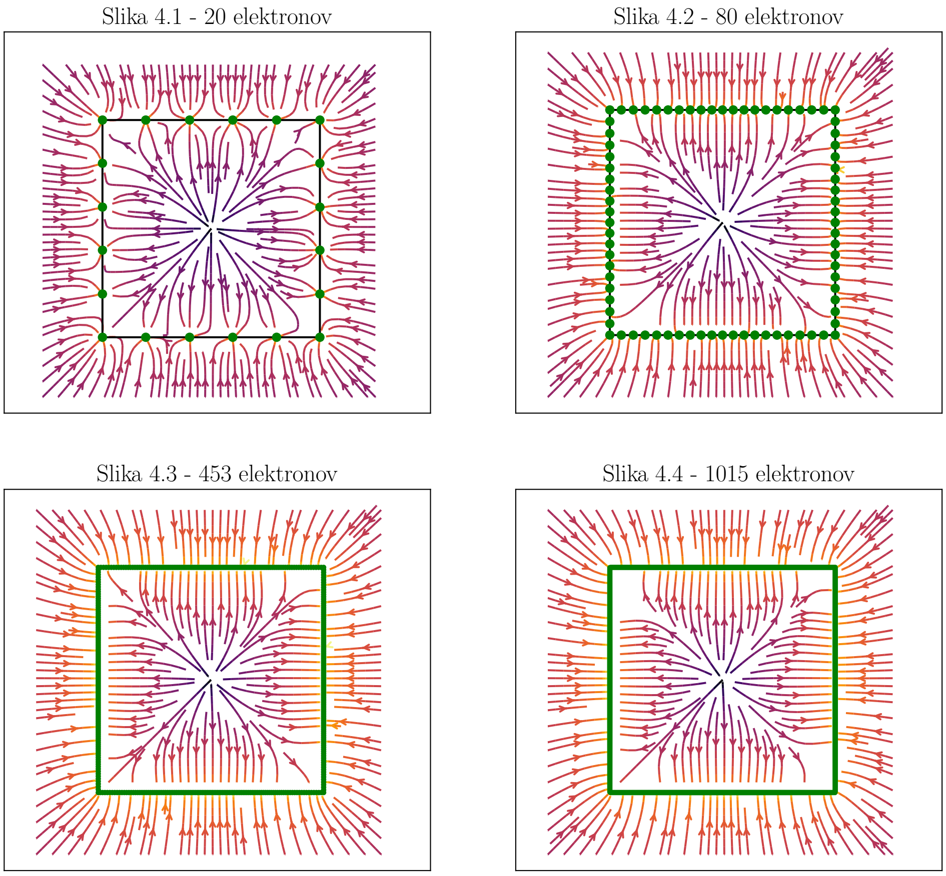
Na Sliki 2.1 vidimo, da nas teorija ni pustila na cedilu in, da so silnice polja res normalne na stranice kvadrata. Silnice prebadajo ekvipotencialne ploskve pravokotno ($\mathbf{E} = -\nabla V$), zato lahko iz Slike 2.2 potrdimo kar smo ugotovili iz Slike 2.1. Seveda so silnice normalne na stranico kvadrata le v tistih točkah, kjer leži elektron, v limiti zvezno porazporejenega naboja pa to velja za vsako točko na kvadratnem okvirju.

Trditev, da silnice električnega polja prebadajo stranice oz. izvirajo iz stranic kvadratnega okvirja normalno nanj, velja le v limiti neskončno elektronov oziroma kadar je po prevodniku naboj razporejen zvezno. Za veliko število elektronov na okvirju še kar dobro velja, da so silnice pravokotne na okvir, za majhno število delcev pa ta trditev obupno odpove.



Slika 3: Silnice električnega polja sistema petih elektronov in njegove ekvipotencialne ploskve.

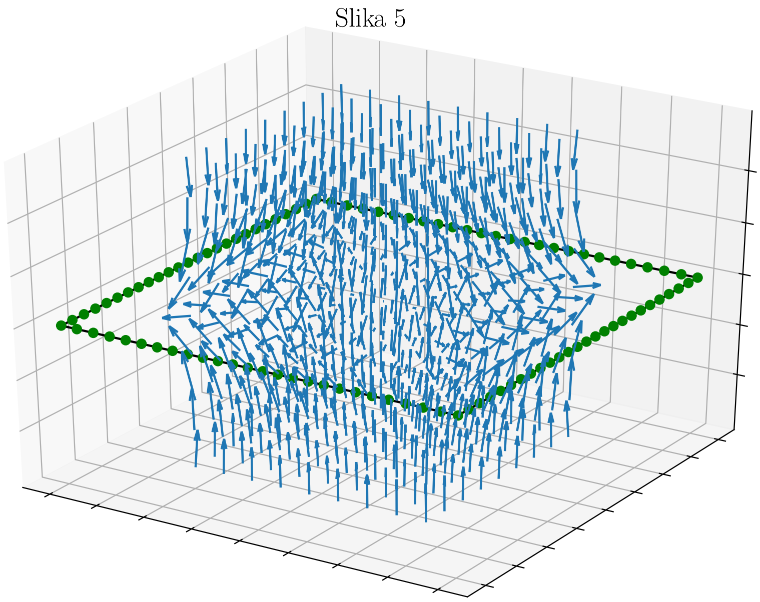
Na Sliki 3.1 jasno vidimo, da silnice električnega polja ne prebadajo stranic kvadrata pod pravim kotom. Iz Slike 3.2 pa opazimo, da ekvipotencialne ploskve niso niti približno vzporedne stranicam kvadrata.



Slika 4: Silnice električnih polj različno številčnih sistemov.

Na Sliki 4 vidimo, da električno polje okvira res limitira k neki funkciji z naraščajočim številom elektronov, saj sta Sliki 4.3 in 4.4 skoraj enaki. Če imamo v sistemu le 20 elektronov, kot jih imamo v Sliki 4.1, je očitno, da električno polje ni povsod pravokotno na kvadratni okvir, pri sistemu z 80 elektroni pa to že kar dobro drži.

Ena on bistvenih pomanklјivosti grafov, kjer na okvir gledamo v tlorisu, je ta, da ne vidimo kaj se dogaja s silnicami v smeri normalni na ploskev kvadrata. Na prvi pogled izgleda kot, da bi bil v središču kvadrata pozitiven naboj iz katerega izvirajo silnice, ki so usmerjene proti stranicam. Seveda temu ni tako. Te silnice izvirajo iz neskončnosti nad in pod ravnino kvadrata, vendar zaradi projekcije na dvodimenzionalen graf izgleda kot, da se v središču kvadrata skriva nek pozitiven naboj.



Slika 5: Silnice električnega polja sistema stotih elektronov.

Na Sliki 5 vidimo, kakšno je električno polje okvira nad in pod njim. Očitno je, da v središču kvadrata ni nobenih nabitih delcev. Seveda se polje širi neskočno v vse smeri, vendar je na sliki zaradi preglednosti narisan le ozek centralni del.