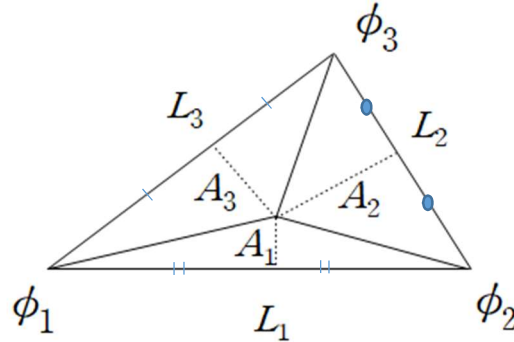


HW2

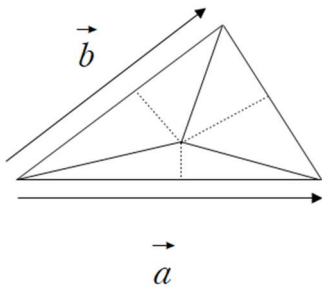
20211119 박 건 호



삼각형 구조를 만들기 위해서 세 개의 점을 지정하는 과정이 먼저 진행되어야 합니다. 따라서, ϕ_1 을 영점으로 각 점을 순서대로 (0,0), (6,0), (4,4) 로 지정하여 삼각형 구조를 구성했습니다 (모두 nm라고 가정). 따라서 좌표를 활용하여 각각의 L을 구하면, 다음과 같습니다.

$$L_1 = 1nm, \quad L_2 = 1nm, \quad L_3 = 1.4142nm$$

외심점을 활용하여 전체 Area를 구하기 위해서는 외적을 활용했습니다. 전체 삼각형의 면적은 각 Vector의 외적을 통해서 결과를 확인하여 다음과 같습니다.



$$S = \frac{1}{2} |\vec{a} \times \vec{b}| = 0.5 \text{ nm}^2$$

$$S = \frac{L_1 L_2 L_3}{4 \times (\text{외접원 반지름})}, \text{ 외접원 반지름 } R = 0.7071nm$$

구한 전체 삼각형의 면적과 총 3개의 내부 삼각형의 각각의 높이인 A에 대한 관계식도 구할 수 있는데, 이는 다음과 같습니다. 이 식을 세 가지 경우에 대해서 적용할 수 있고, 따라서 내부에 위치한 각각의 내부 삼각형의 높이를 구할 수 있습니다.

$$R^2 = A_1^2 + \left(\frac{L_1}{2}\right)^2 \rightarrow A_1 = \sqrt{R^2 - \left(\frac{L_1}{2}\right)^2}$$

$$A_1 = 0.5nm, \quad A_2 = 0.5nm, \quad A_3 = 0nm$$

또한, 이를 활용한다면 각각의 Vertex가 가지는 Control-volume을 얻을 수 있습니다.

Control-volume

$$\Omega_1: \frac{A_1 L_1 + A_3 L_3}{4} \quad \Omega_2: \frac{A_1 L_1 + A_2 L_2}{4} \quad \Omega_3: \frac{A_2 L_2 + A_3 L_3}{4}$$

$$\Omega_1 = 0.125 \text{ nm}^2, \quad \Omega_2 = 0.25 \text{ nm}^2, \quad \Omega_3 = 0.125 \text{ nm}^2$$

여기까지가 Geometry에 대한 정보였습니다.

최종적으로 Potential을 구하기 위해서, 해당 구조를 고려한 Laplace 방정식을 세워 보면 다음과 같습니다.

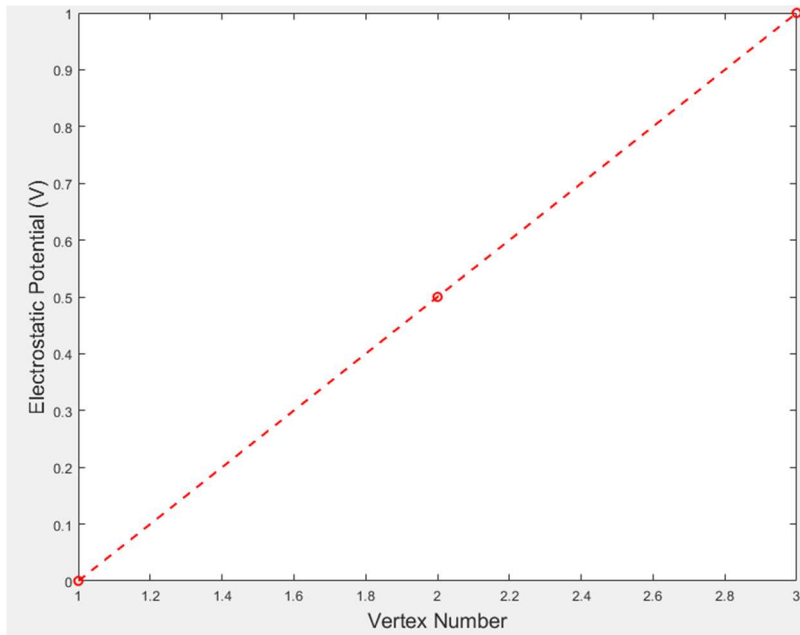
$$\text{Vertex 1} : -\left(\frac{A_1}{L_1} + \frac{A_3}{L_3}\right)\phi_1 + \frac{A_1}{L_1}\phi_2 + \frac{A_3}{L_3}\phi_3$$

$$\text{Vertex 2} : \frac{A_1}{L_1}\phi_1 - \left(\frac{A_1}{L_1} + \frac{A_2}{L_2}\right)\phi_2 + \frac{A_2}{L_2}\phi_3$$

$$\text{Vertex 3} : \frac{A_3}{L_3}\phi_1 + \frac{A_2}{L_2}\phi_2 - \left(\frac{A_2}{L_2} + \frac{A_3}{L_3}\right)\phi_3$$

하지만, Vertex 1, Vertex 3 을 Dirichlet Boundary condition으로 설정하여 Vertex 1 = 0, Vertex 3 = 1 로 설정하여 실제 matrix의 해를 구했습니다. 그 결과 Vertex 2 의 Potential을 구할 수 있었습니다.

Result

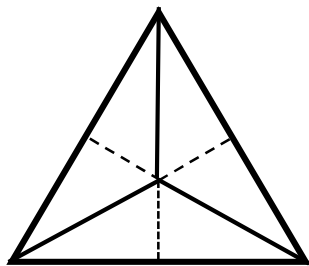


이 경우에는, Vertex 2 의 Potential : 0.5 V로 Vertex 1= 0 V , Vertex 3 = 1 V 사이에 위치하는 것을 확인했습니다.

같은 방식으로 Test example 등을 실행했습니다.

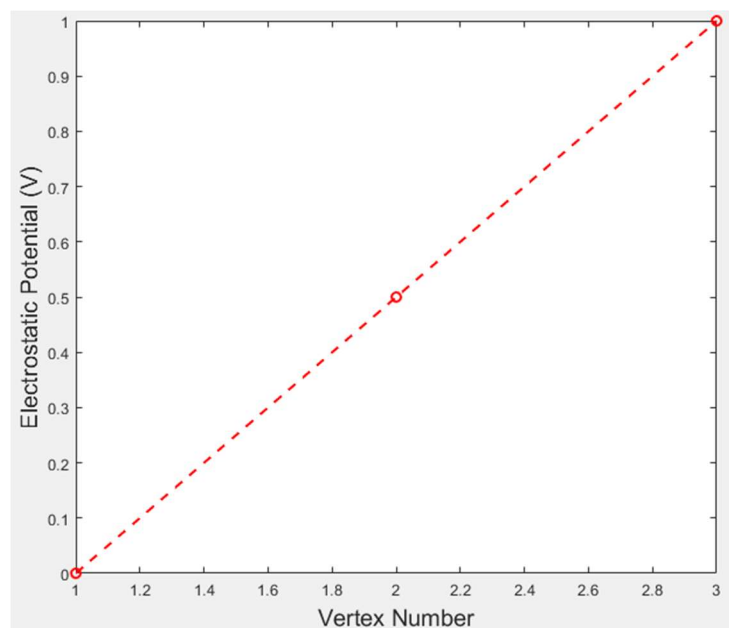
Test example

- 1) 모든 길이가 6인 정삼각형 : $(0,0)$, $(6,0)$, $(3, 3\sqrt{3})$

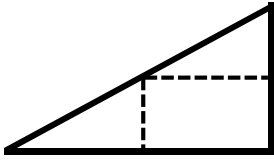


$$S = \frac{1}{2} |\vec{a} \times \vec{b}| = 15.5885 \text{ nm}^2$$

$$\Omega_1, \Omega_2, \Omega_3 = 5.1962 \text{ nm}^2 \quad // \quad \phi_2 = 0.5 \text{ V}$$



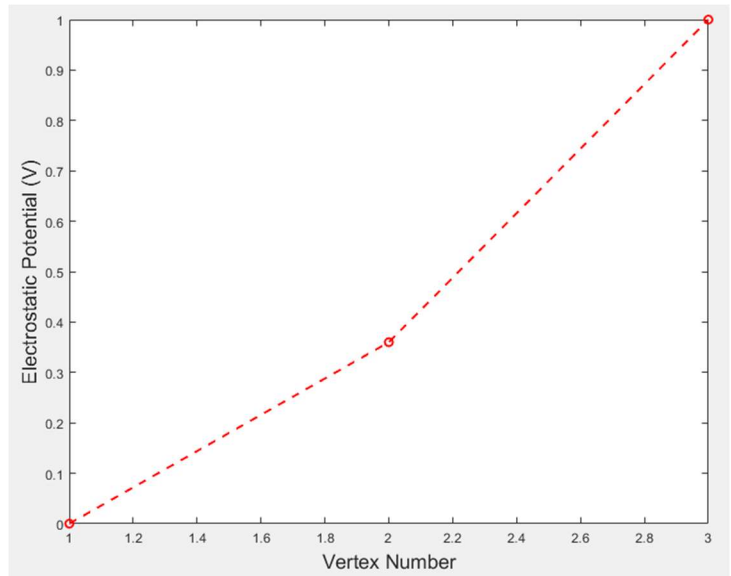
2) 직각 삼각형 : (0,0), (3, 0), (3,4)



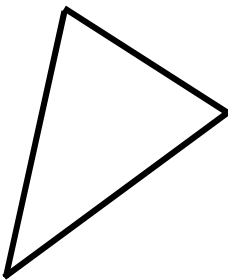
$$S = \frac{1}{2} |\vec{a} \times \vec{b}| = 6 \text{ nm}^2$$

$$\Omega_1 = 1.5 \text{ nm}^2, \quad \Omega_2 = 3.0 \text{ nm}^2$$

$$\Omega_3 = 1.5 \text{ nm}^2 \quad // \quad \phi_2 = 0.3600 \text{ V}$$



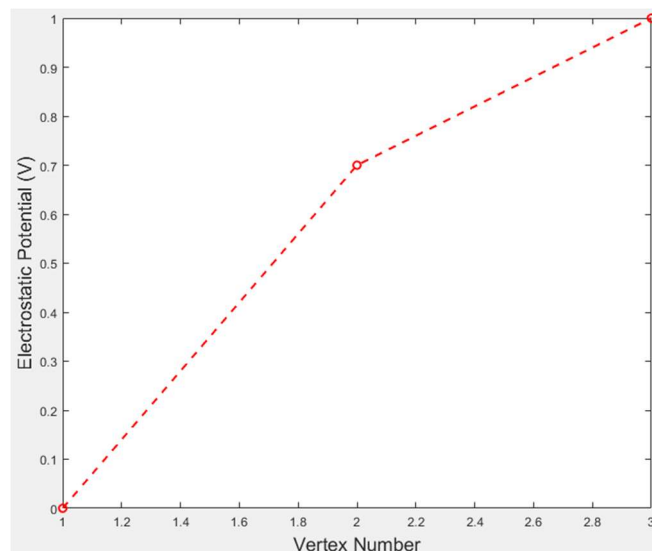
3) 예각 삼각형 : (2, 1), (3, 5), (5, 2)



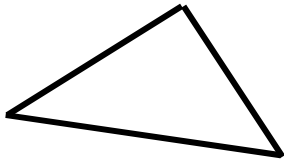
$$S = \frac{1}{2} |\vec{a} \times \vec{b}| = 2 \text{ nm}^2$$

$$\Omega_1 = 1.7159 \text{ nm}^2, \quad \Omega_2 = 1.6136 \text{ nm}^2$$

$$\Omega_3 = 2.1705 \text{ nm}^2 \quad // \quad \phi_2 = 0.70 \text{ V}$$



4) (1,2), (6,0), (4,4)



$$S = \frac{1}{2} |\vec{a} \times \vec{b}| = 8 \text{ nm}^2$$

$$\Omega_1 = 2.2813 \text{ nm}^2, \quad \Omega_2 = 2.1719 \text{ nm}^2$$

$$\Omega_3 = 3.5469 \text{ nm}^2 \quad // \quad \phi_2 = 0.8462 \text{ V}$$

