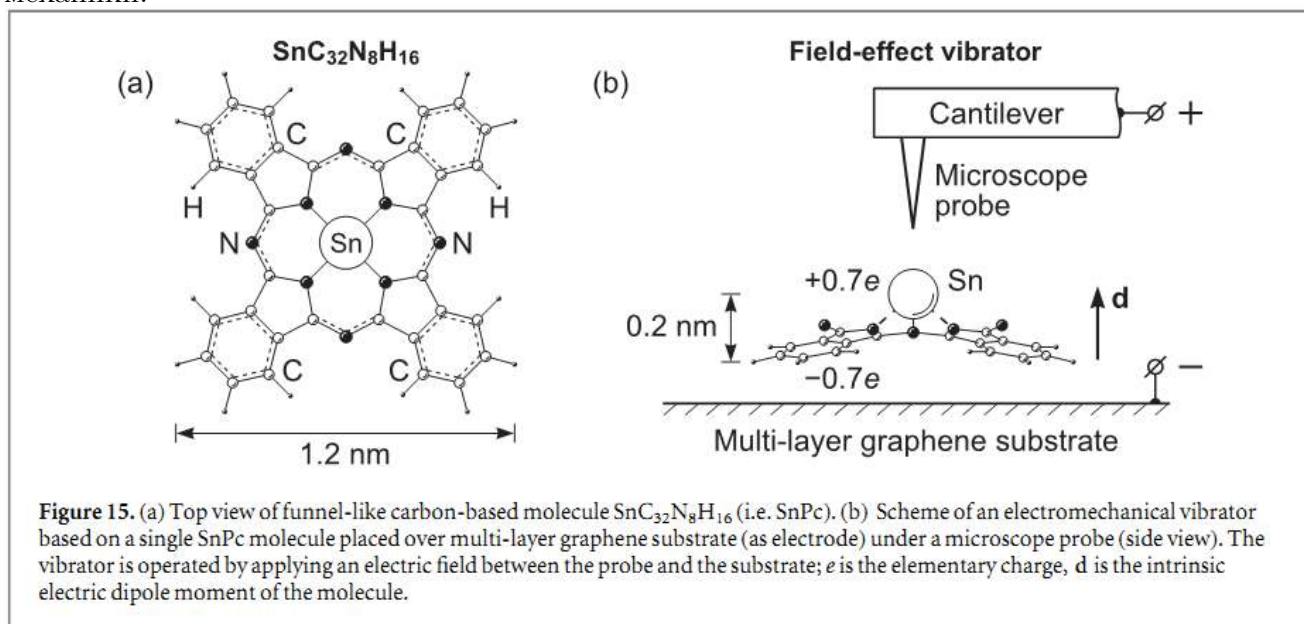


Условие

Задание 3. Молекулярный вибратор, управляемый электрическим полем.

Данное задание разработано на материалах обзорной статьи: *Synergy of physical properties of low-dimensional carbon-based systems for nanoscale device design*/ N. A. Poklonski, S.A. Vyrko, A. I. Siahlo, O. N. Poklonskaya, S. V. Ratkevich, N. N. Hieu, A. A. Kocherzhenko/ *Matter. Res. Express*, 6 (2019).

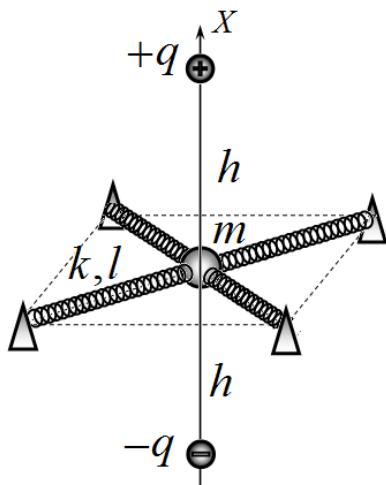
На рисунке, взятом из указанной статьи, показана схема вибратора, управляемого электрическим полем. Сложная плоская молекула (показанная на рисунке слева) содержит атом олова (Sn). Этот атом может колебаться в направлении, перпендикулярном плоскости молекулы. Частота этих колебаний может изменяться под действием электрического поля. Строгий расчет характеристик молекулярных колебаний возможен только с помощью квантовой механики.



Однако наиболее характерные особенности движения этого атома могут быть получены и в рамках классической физики. Для этого рассмотрим следующую упрощенную модель рассмотренного вибратора.

Шарик массы m (моделирующий атом олова Sn) соединен с 4 одинаковыми пружинами (моделируют химические связи атома олова с соседними атомами). Жесткость каждой пружины k , их длины в недеформированном состоянии равны l . Противоположные концы пружин закреплены в вершинах квадрата. Когда шарик находится в центре квадрата, пружины не деформированы. Шарик может двигаться вдоль прямой, перпендикулярной плоскости квадрата. Направим ось координат x вдоль этой прямой, начало отсчета совместим с центром квадрата.

На расстоянии h от центра квадрата закреплен точечный заряд $+q$, который моделирует заряд на острие зонда микроскопа (microscope probe).



Симметрично плоскости квадрата закреплен электрический заряд $-q$, который моделирует заряд-изображение в проводящей плоскости (grapheme substrate). В атомной физике силой тяжести следует пренебрегать. В данном задании анализируется движение шарика вдоль указанной оси X . Радиус шарика значительно меньше геометрических величин h, l .

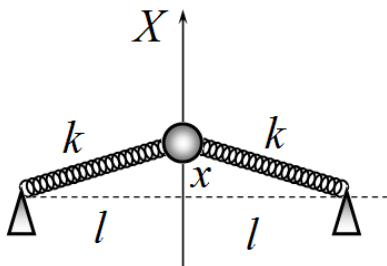
При выполнении данного задания рекомендуем использовать приближенную формулу

$$(1+z)^\gamma = 1 + \gamma z + \frac{\gamma(\gamma-1)}{2!} z^2 + \frac{\gamma(\gamma-1)(\gamma-2)}{3!} z^3 + \dots \quad (1)$$

Эта формула справедлива для малых значений безразмерной величины $z \ll 1$ и любого показателя степени γ . Каждый раз при использовании этой формулы подумайте, сколько слагаемых следует оставлять для дальнейших преобразований.

Часть 1. Силы упругости.

Пусть шарик смещается на расстояние x от центра квадрата.



1.1 Найдите зависимость суммарной силы упругости $F(x)$, действующей на шарик со стороны 4 пружин, от смещения шарика x . Напоминаем, что, когда шарик находится в центре квадрата, пружины не деформированы!

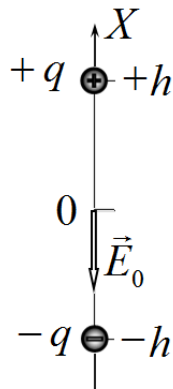
1.2 Покажите, что при $x \ll l$ формулу для суммарной силы упругости можно приближенно представить в виде

$$F = Cx^n. \quad (2)$$

Найдите значения постоянных величин C, n в этой формуле.

1.3 Укажите, будут ли колебания шарика при отсутствии электрического поля гармоническими?

Часть 2. Электрическое поле и электрические силы.



Электрическое поле создается двумя точечными зарядами $+q, -q$, расположенных на оси X симметрично относительно начала отсчета, в точках с координатами $\pm h$. 2.1 Найдите зависимость модуля напряженности электрического поля $E(x)$ на оси X от координаты x . Постройте схематический график этой зависимости. В дальнейшем вместо координаты шарика x используйте безразмерную величину $z = \frac{x}{h}$. При малых значениях $x \ll h$, полученную зависимость $E(x)$ с помощью приближенной формулы (1) можно представить в виде

$$E(z) = E_0 (1 + a_1 z + a_2 z^2 + \dots) \quad (3)$$

где E_0 - напряженность поля в начале координат, $a_1, a_2, a_3, \dots$ - численные коэффициенты. В этой формуле следует оставить столько слагаемых, сколько потребуется для дальнейших расчетов.

Старшая лига. Теоретический тур. Условия задач. 8



2.2 Выразите значение E_0 через значения q, h . Рассчитайте значения коэффициентов $a_1, a_2, a_3, \dots$.

В дальнейшем считайте величину E_0 известной. В дальнейших расчетах используйте только приближенную формулу (3) с найденными численными коэффициентами.

Под действием электрического поля напряженности E шарик поляризуется и приобретает дипольный момент, модуль которого равен

$$p = \alpha \varepsilon_0 E \quad (4)$$

где α - поляризуемость шарика (считайте ее известной), ε_0 - электрическая постоянная.

Со стороны электрического поля на электрический диполь действует сила

$$F = p \frac{dE}{dx}. \quad (5)$$

2.3 Найдите зависимость силы $G(z)$, действующей на шарик со стороны электрического поля, от положения шарика z .

2.4 Представьте полученную зависимость в приближенной виде

$$G(z) = G_1 \cdot (b_0 + b_1 z + b_2 z^2 + \dots) \quad (6)$$

где G_1 - значение функции $G(z)$ при $z = 1$. Выразите значение G_1 через величины E_0, α, h . Найдите численные значения коэффициентов $b_0, b_1, b_2, \dots$. Оставьте в этой формуле столько слагаемых, сколько необходимо для дальнейших расчетов.

Часть 3. Колебания шарика.

3.1 Представьте зависимость силы упругости от положения шарика (2) в виде

$$F(z) = F_1 \cdot z^n \quad (7)$$

где F_1 - значение функции при $z = 1$. Выразите значение F_1 через заданные параметры модельной системы.

При включении электрического поля положение равновесия шарика смещается. Обозначим координату положения равновесия z_0

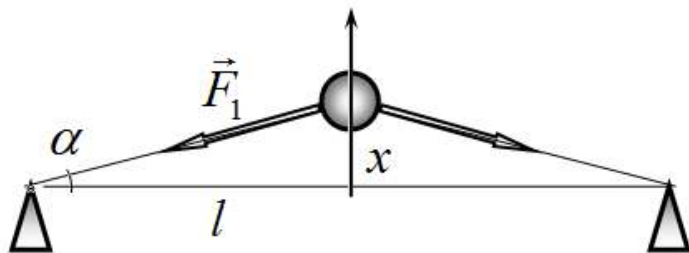
3.2 Выразите значения координаты положения равновесия z_0 через параметры системы F_1 и G_1 .

3.3 Найдите максимальное значение напряженности электрического поля в начале координат $E_{0\max}$, при котором шарик может совершать колебания.

3.4 Рассчитайте частоту ν малых колебаний шарика вблизи положения равновесия z_0 , если напряженность электрического поле в начале координат $E_0 < E_{0\max}$. Выразите значения частоты ν через параметры F_1, G_1, z_0, m .

Решение

Задание 3. Молекулярный вибратор, управляемый электрическим полем.



Часть 1. Силы упругости.

1.1 Суммарная сила упругости равна

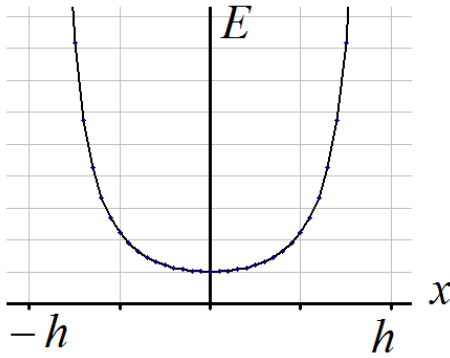
$$\begin{aligned} F &= 4F_1 \sin \alpha = \\ &= 4k \left(\sqrt{l^2 + x^2} - l \right) \frac{x}{\sqrt{l^2 + x^2}}. \end{aligned} \quad (1)$$

1.2 При $x \ll l$ преобразуем к виду

$$\begin{aligned} F &= 4k \left(\sqrt{l^2 + x^2} - l \right) \frac{x}{\sqrt{l^2 + x^2}} = 4kl \left(\sqrt{1 + \frac{x^2}{l^2}} - 1 \right) \frac{x}{\sqrt{l^2 + x^2}} \approx \\ &\approx 4kl \cdot \frac{x^2}{2l^2} \cdot \frac{x}{\sqrt{l^2 + x^2}} \approx \frac{2k}{l^2} x^3 \end{aligned} \quad (2)$$

1.3 Так как возвращающая сила не пропорциональна смещению, то колебания не будут гармоническими. Отметим, что выражение для силы упругости имеет 3 порядок малости, поэтому и электрические силы следует рассчитывать до 3 порядка малости.

Часть 2. Электрическое поле и электрические силы.



2.1 Напряженность электрического поля находим с помощью закона Кулона

$$E(x) = \frac{q}{4\pi\epsilon_0} \left(\frac{1}{(h-x)^2} + \frac{1}{(h+x)^2} \right) = \frac{q}{2\pi\epsilon_0} \frac{h^2 + x^2}{(h^2 - x^2)^2}. \quad (3)$$

Схематический график этой зависимости показан на рисунке.

2.2 Так как электрическая сила зависит от производной этой функции, то нужно проводить разложение до 4 порядка малости ($z = \frac{x}{h}$):

$$E(z) = \frac{q}{2\pi\epsilon_0 h^2} \frac{1+z^2}{(1-z^2)^2} \approx \frac{q}{2\pi\epsilon_0 h^2} (1+z^2)(1+2z^2+3z^4) \approx \frac{q}{2\pi\epsilon_0 h^2} (1+3z^2+5z^4) \quad (4)$$

Напряженность в начале координат

$$E_0 = \frac{q}{2\pi\epsilon_0 h^2}. \quad (5)$$



2.3 Зависимость электрической силы от координаты описывается формулой (с точностью до 3 порядка малости)

$$G(x) = p \frac{dE}{dx} = \alpha\epsilon_0 E \frac{dE}{dx} = \frac{\alpha\epsilon_0}{h} E \frac{dE}{dz} = \frac{\alpha\epsilon_0}{h} E_0^2 (1+3z^2+5z^4) (6z+20z^3) = \frac{\alpha\epsilon_0}{h} E_0^2 (6z+38z^3) \quad (6)$$

2.4 Перепишем эту формулу в необходимом виде

$$G(x) = \frac{\alpha\epsilon_0}{h} E_0^2 (6z+38z^3) = 44 \frac{\alpha\epsilon_0}{h} E_0^2 \left(\frac{6}{44} z + \frac{38}{44} z^3 \right) \quad (7)$$

Поэтому

$$G_1 = 44 \frac{\alpha\epsilon_0}{h} E_0^2; \quad b_1 = \frac{3}{22}; \quad b_3 = \frac{19}{22}. \quad (8)$$

Часть 3. Колебания шарика.

3.1 Перепишем формулу (2) в виде

$$F = \frac{2k}{l^2} x^3 = \frac{2kh^3}{l^2} z^3. \quad (9)$$

Следовательно,

$$F_1 = \frac{2kh^3}{l^2}. \quad (10)$$

3.2 Уравнение равновесия имеет вид:

$$G_1 \left(\frac{3}{22}z + \frac{19}{22}z^3 \right) = F_1 z^3 \quad (11)$$

Из этого уравнения следует, что координата точки равновесия равна

$$z_0 = \pm \sqrt{\frac{3G_1}{22F_1 - 19G_1}}. \quad (12)$$

Отметим, что положения равновесия $z = 0$ является неустойчивым.

3.3 Положения равновесия (12) существуют при $22F_1 - 19G_1 > 0$.

Или

$$G_1 < \frac{22F_1}{19} \Rightarrow 44 \frac{\alpha \varepsilon_0}{h} E_0^2 < \frac{22}{19} \frac{2kh^3}{l^2} \Rightarrow E_0 < \sqrt{\frac{kh^4}{19\alpha \varepsilon_0 l^2}}. \quad (13)$$

3.4 Для определения частоты малых колебаний представим координату z в виде $z = z_0 + \delta$ (где $\delta \ll z_0$). Тогда уравнение движения шарика будет иметь вид

$$m\ddot{x} = mh\ddot{z} = G(z_0 + \delta) - F(z_0 + \delta). \quad (14)$$



В этом уравнении следует провести разложение до первого порядка малости величины δ :

$$G(z) = \frac{G_1}{22} (3(z_0 + \delta) + 19(z_0 + \delta)^3) = \frac{G_1}{22} (3z_0 + 19z_0^3) + \frac{1}{22} G_1 (3 + 57z_0^2) \delta$$

$$F(z) = \frac{2k}{l^2} x^3 = F_1(z_0 + \delta)^3 \approx F_1 z_0^3 + 3F_1 z_0^2 \delta$$

Тогда уравнение (14) становится уравнением гармонических колебаний:

$$\begin{aligned} mh\ddot{\delta} &= \frac{G_1}{22} (3z_0 + 17z_0^3) + \frac{1}{22} G_1 (3 + 57z_0^2) \delta - F_1 z_0^3 - 3F_1 z_0^2 \delta \Rightarrow \\ \ddot{\delta} &= -\frac{3F_1 z_0^2 - \frac{1}{22} G_1 (3 + 57z_0^2)}{mh} \delta \end{aligned} \quad (15)$$

Частота, которых равна

$$\nu = \frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{3F_1 z_0^2 - \frac{1}{22} G_1 (3 + 57z_0^2)}{mh}}. \quad (16)$$

$$\sqrt{1 + \frac{x^2}{l^2}}$$