

F6060 Programování zkouška – termín 19. 6. 2024

1. Madelungova konstanta NaCl

Při určování vazebné energie iontového krystalu, jako je třeba krystal NaCl z obrázku napravo,¹ si můžeme zjednodušeně představit, že ionty nesou efektivní náboje Q_i (i je index iontu) a interagují spolu coulombovskou interakcí. Vazebnou energii pak lze vyjádřit vztahem

$$E_{\text{vaz}} = \sum_{\text{páry iontů } i, j} \frac{Q_i Q_j}{4\pi\epsilon_0 r_{ij}},$$

kde Q_i a Q_j jsou náboje nesené ionty i a j a r_{ij} je jejich vzájemná vzdálenost. Pro případ krystalu NaCl jsou náboje iontů rovny $+Q$ pro Na^+ a $-Q$ pro Cl^- a krystalová mřížka se vyznačuje pravidelným střídáním kladných a záporných iontů. S přihlédnutím k tomu, že všechny ionty v nekonečné mřížce mají stejné okolí, lze vazebnou energii vztaženou na jeden iont vypočítat jako

$$E = \frac{Q^2}{4\pi\epsilon_0 a} M, \quad \text{kde } M = \sum_{\substack{n_1, n_2, n_3 \in \mathbb{Z} \\ (n_1, n_2, n_3) \neq (0, 0, 0)}} \frac{(-1)^{n_1+n_2+n_3}}{\sqrt{n_1^2 + n_2^2 + n_3^2}}.$$

Veličina a je vzdálenost nejbližších sousedů a při sumaci vynecháváme příspěvek s $(n_1, n_2, n_3) = (0, 0, 0)$, který by odpovídal interakci iontu se sebou samým. Konstanta M určená uspořádáním mřížky se nazývá Madelungovou konstantou na počest německého fyzika Erwina Madelunga, který ji zavedl.

1. Vaším prvním úkolem bude numerické vyčíslení Madelungovy konstanty přímou sumací. Mohlo by se zdát, že je to snadný úkol, suma pro M je ovšem v důsledku pomalého poklesu coulombovského potenciálu se vzdáleností jen podmíněně konvergentní a úspěch závisí na způsobu sčítání. Konvergence, byť pomalé, lze docílit, pokud sčítáme přes krychlové oblasti se středem v $(0, 0, 0)$ a tyto oblasti postupně zvětšujeme. Formálně zapsáno bude hodnota Madelungovy konstanty rovna limitě výrazu

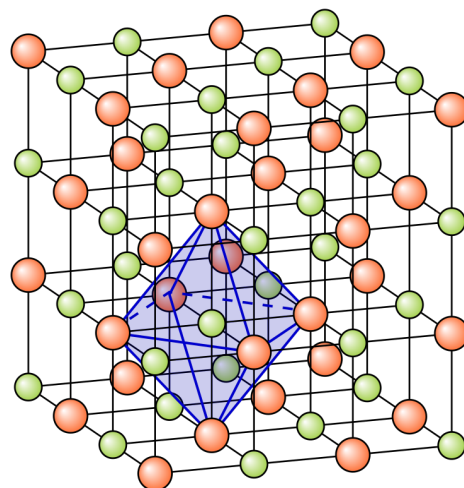
$$M_N = \sum_{n_1=-N}^{+N} \sum_{n_2=-N}^{+N} \sum_{n_3=-N}^{+N} \frac{(-1)^{n_1+n_2+n_3}}{\sqrt{n_1^2 + n_2^2 + n_3^2}}$$

pro N jdoucí do nekonečna. Při sčítání musíme samozřejmě vynechat příspěvek s $(n_1, n_2, n_3) = (0, 0, 0)$. Vypočtete hodnoty M_N pro $N = 1, 2, 3, \dots, 50$ a vykreslete závislost M_N na N do grafu. Můžete zkusit odhadnout, k jaké hodnotě M získaná posloupnost konverguje.

2. Madelungova konstanta pro strukturu NaCl se dá mnohem efektivněji vyčísřit pomocí vztahu

$$M = -12\pi \sum_{k=0}^{\infty} \sum_{l=0}^{\infty} \frac{1}{\cosh^2[\frac{\pi}{2} \sqrt{(2k+1)^2 + (2l+1)^2}]}$$

získaného poměrně komplikovaným postupem využívajícím Mellinovu integrální transformaci. Vyčíslete M s využitím uvedeného vztahu, ve kterém omezíte sumace přes k i l do předepsaného N . Opět vykreslete závislost přibližné hodnoty M na N pro hodnoty N pokrývající $1, 2, 3, \dots, 50$ a porovnejte tuto závislost s výsledkem prvního bodu.



¹Obrázek je převzatý z <https://commons.wikimedia.org/wiki/Crystal>

2. Průlet mrakem

V této úloze vyšetříte srážky mezi objektem sférického tvaru a mrakem částic, kterým objekt prolétá. Pro jednoduchost budeme uvažovat jen o dvourozměrné situaci a nezahrneme vzájemné silové působení, objekt i částice se tedy budou pohybovat rovnoměrně a přímočaře v rovině xy , jak je naznačeno v obrázku. Polohy a rychlosti částic mraku jsou obsaženy v souboru `particles.txt`. Jeho pět sloupců obsahuje popořadě index částice i , její souřadnice x_i , y_i a složky rychlosti v_{xi} a v_{yi} , vše v okamžiku $t = 0$. Načtete tento soubor a vyhodnoťte, které částice se v budoucnu srazí s objektem s poloměrem R , který se v čase $t = 0$ nachází v poloze $(x, y) = L(\cos \varphi, \sin \varphi)$ a má rychlost $(v_x, v_y) = -v(\cos \varphi, \sin \varphi)$. Vstupními údaji pro váš program tedy budou – kromě obsahu souboru `particles.txt` – ještě hodnoty R , L , v a φ (otestování provedeme s $R = 0.2$, $L = 2$, $v = 2$ a $\varphi = 0$). Pro posouzení možnosti srážky použijeme následující snadno odvoditelné pomocné vztahy:

Dva rovnoměrně přímočaře se pohybující objekty A a B , které mají v čase $t = 0$ počáteční polohy \mathbf{r}_A a \mathbf{r}_B a rychlosti \mathbf{v}_A a \mathbf{v}_B , jsou si nejbližší (to jest mají nejmenší vzájemnou vzdálenost) v čase

$$t_{\min} = -\frac{\Delta \mathbf{r} \cdot \Delta \mathbf{v}}{(\Delta \mathbf{v})^2}$$

a mají přitom vzdálenost

$$d_{\min} = \sqrt{(\Delta \mathbf{r})^2 - \frac{(\Delta \mathbf{r} \cdot \Delta \mathbf{v})^2}{(\Delta \mathbf{v})^2}}.$$

Ve vztazích bylo užito zkráceného značení $\Delta \mathbf{r} = \mathbf{r}_A - \mathbf{r}_B$, $\Delta \mathbf{v} = \mathbf{v}_A - \mathbf{v}_B$. Druhá mocnina vektoru odpovídá skalárnímu součinu vektoru se sebou samým, např. $(\Delta \mathbf{v})^2 = \Delta \mathbf{v} \cdot \Delta \mathbf{v}$.

Aplikací výše uvedených vztahů s $\Delta \mathbf{r} = (x_i - L \cos \varphi, y_i - L \sin \varphi)$ a $\Delta \mathbf{v} = (v_{xi} + v \cos \varphi, v_{yi} + v \sin \varphi)$ určete pro jednotlivé částice t_{\min} a d_{\min} . Předpokládejme, že částice mraku mají zanedbatelné rozměry a k jejich srážce s objektem tak dojde, pokud je příslušná hodnota d_{\min} menší nebo rovna poloměru R . Započítáváme přitom jen srážky následující po $t = 0$, to jest příslušné t_{\min} musí být kladné. Výstupem programu bude počet částic, které se s objektem za uvedených podmínek srazí. Nepovinně se můžete pokusit i o grafické znázornění mraku v $t = 0$ s vyznačením částic, které čeká srážka s objektem. Vzhledem k velkému množství částic je vhodné například barevné odlišení jako v obrázku.

