Притяжение между парой электронов вблизи двух параллельных цепочек ионов

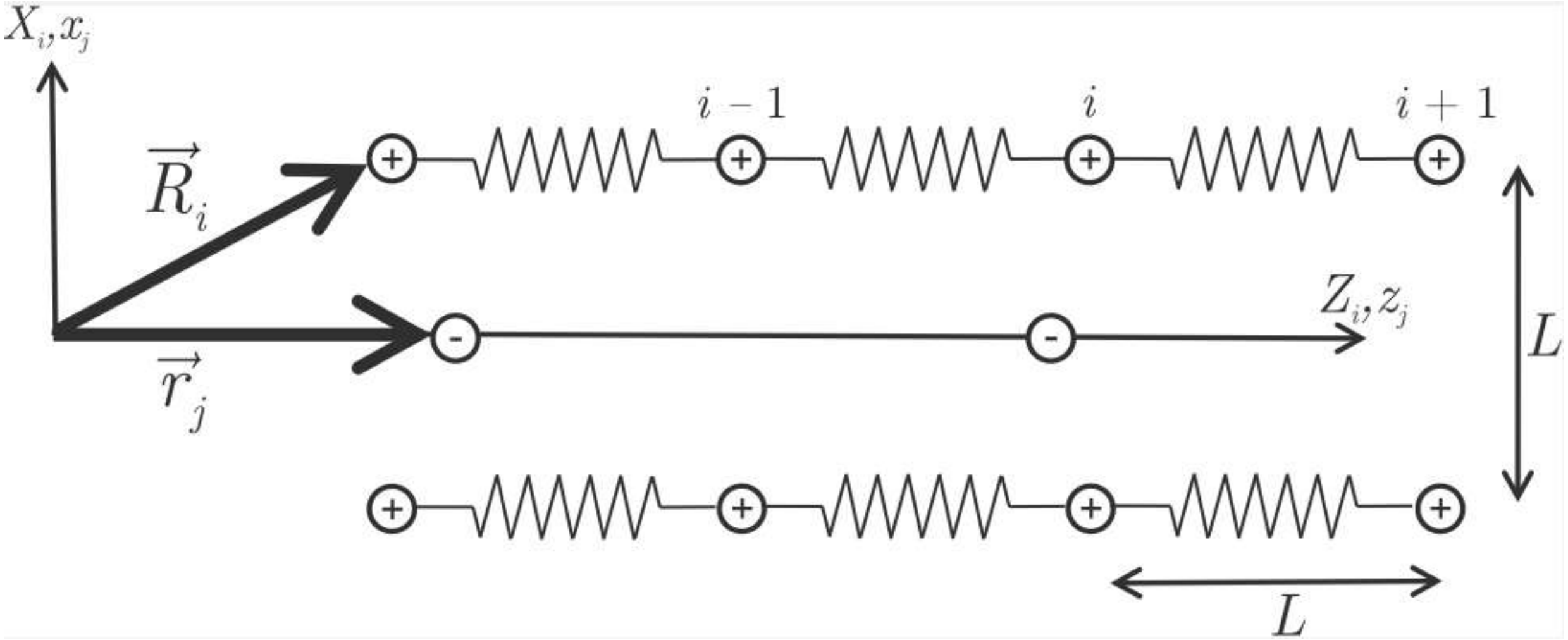
И.А. Шикота
Российский университет дружбы народов, г.Москва

Постановка задачи

Два электрона между двух цепочек ионов

L - межионное расстояние
i - номер иона
j - номер электрона

Z - координата иона
z - координата электрона



Уравнения динамики частиц

Ионы: $\frac{d^2}{d\tau^2} Z_i$

$$= -\frac{K_Z}{M} \frac{4\pi\varepsilon_0 m L^3}{e^2 d^2} (2Z_i - Z_{i+1} - Z_{i-1}) - \frac{m}{M} \sum_{j=1}^{2} \frac{Z_i - \zeta_j}{((Z_i - \zeta_j)^2 + 1/4)^{3/2}}$$

Электроны: $\frac{d^2}{d\tau^2} \zeta_j = \sum_{k \neq j} \frac{\zeta_j - \zeta_k}{|\zeta_j - \zeta_k|^3} - \sum_{i} \frac{\zeta_j - Z_i}{((Z_i - \zeta_j)^2 + 1/4)^{3/2}}$

Vinogradov, V. A., Lazareva, G. G., Turlapov, A. V., Shikota, I. A. (2026). Attraction between a pair of electrons in the vicinity of two parallel ion chains. *Lobachevskii Journal of Mathematics*, 47(9), 4368–4378.

Статичное приближение

- $\delta\mathcal{Z}$ - безразмерное смещение иона от своего положения равновесия;
- ζ_1,ζ_2 - координаты первого и второго электронов;
- остальное - известные параметры, запишем в α

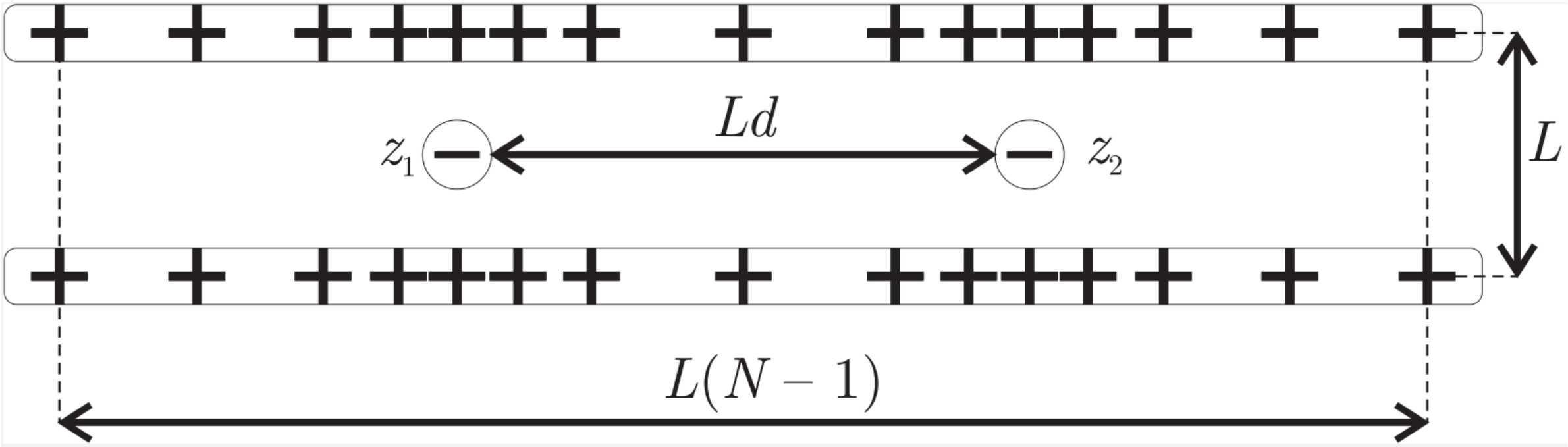
параметр α - отношение силы взаимодействия между электроном и ионом к силе взаимодействия между ионами при смещении иона на L

$$\delta\mathcal{Z}_{i-1} - 2\delta\mathcal{Z}_i + \delta\mathcal{Z}_{i+1} - \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 M\Omega_{\mathrm{D}}^2 L^3}\sum_{j=1}^{2}\frac{i+\delta\mathcal{Z}_i-\zeta_j}{\left((i+\mathcal{Z}_i-\zeta_j)^2+1/4\right)^{3/2}} = 0,$$

$$\delta\mathcal{Z}_0 = \delta\mathcal{Z}_{N-1} = 0.$$

$$\alpha \equiv \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 M\Omega_{\mathrm{D}}^2 L^3} = 0.34$$

Статичное приближение. Переход к положительно заряженному шнуру



Статичное приближение. Переход к положительно заряженному шнуру

$$\begin{cases} i \to \mathcal{Z}, \\ \delta\mathcal{Z}_i \to \mathcal{D}(\mathcal{Z}), \\ \delta\mathcal{Z}_{i+1} - 2\delta\mathcal{Z}_i + \delta\mathcal{Z}_{i-1} \to \dfrac{d^2\mathcal{D}}{d\mathcal{Z}^2}. \end{cases}$$

$\mathcal{Z}$ - координата фрагмента шнура ионов (теперь это не один конкретный ион, а часть положительно заряженного шнура)
$\mathcal{D}(\mathcal{Z})$ - отклонение фрагмента шнура ионов

Статичное приближение. Уравнение отклонений

Уравнение для определения отклонений фрагментов шнура ионов.

$$\frac{d^2D}{d\mathrm{Z}^2} = \alpha \sum_{j=1}^{2} \frac{Z + D - \zeta_j}{\left((Z + D - \zeta_j)^2 + {}^{1}/_{4}\right)^{3/2}}, D(0) = D(N-1) = 0$$

- $\mathcal{Z}$ - координата фрагмента шнура ионов (теперь это не один конкретный ион, а часть положительно заряженного шнура);
- $\mathcal{D}(\mathcal{Z})$ - отклонение фрагмента шнура ионов;
- ζ_j, - координаты электронов.

Статичное приближение. Уравнение силы и потенциала.

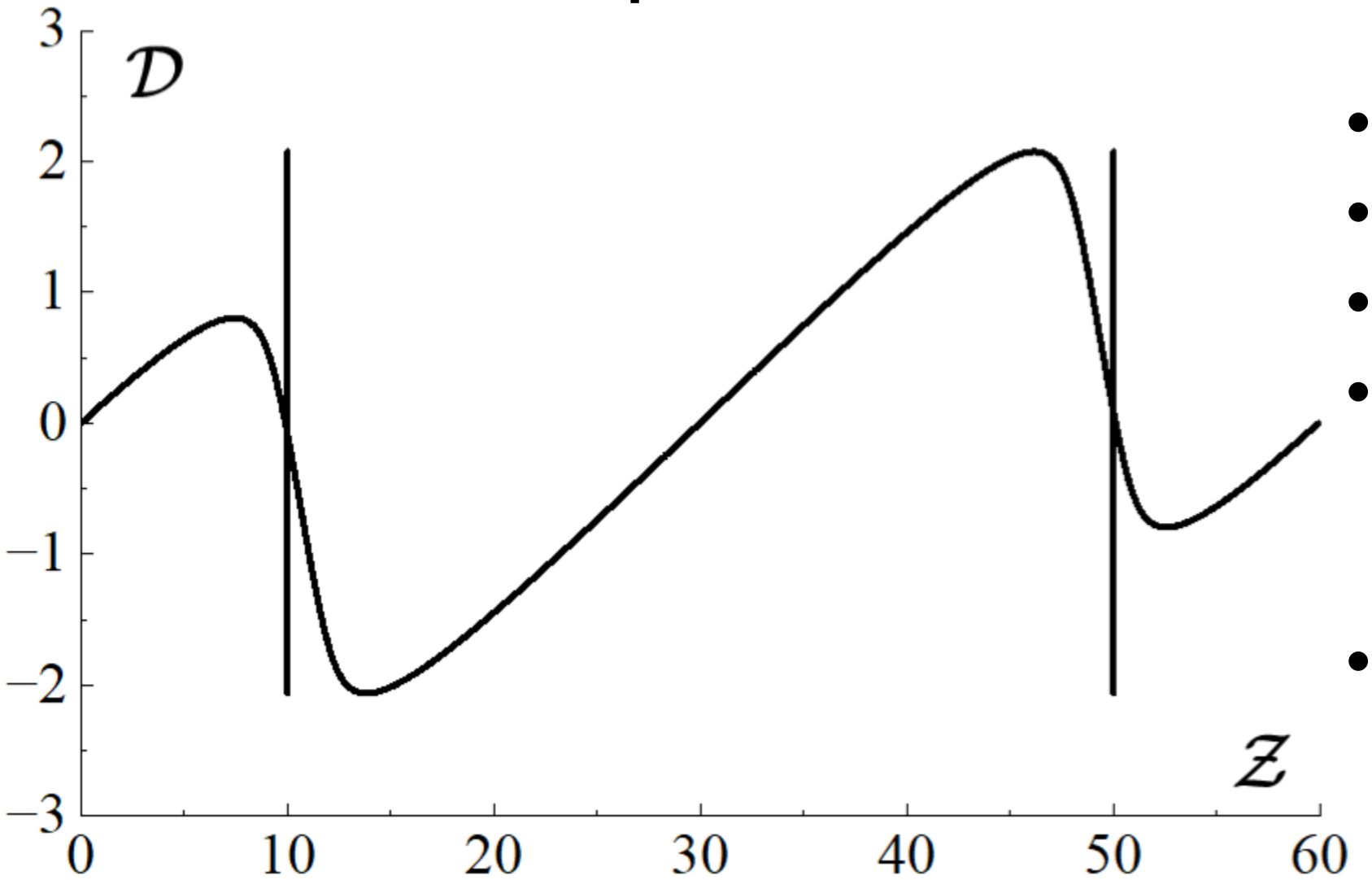
$$\tilde{F}_1(d) = -\alpha\left(\frac{1}{d^2} + 2\int_0^{N-1} \frac{\frac{N-1}{2} - \frac{d}{2} - \mathcal{Z} - \mathcal{D}(\mathcal{Z})}{\left(\left(\frac{N-1}{2} - \frac{d}{2} - \mathcal{Z} - \mathcal{D}(\mathcal{Z})\right)^2 + 1/4\right)^{3/2}} d\mathcal{Z} - \right.$$

$$\left. - \frac{4}{\sqrt{(N-1-d)^2+1}} + \frac{4}{\sqrt{(N-1+d)^2+1}}\right),$$

$$\tilde{U}(d) = \int_{+\infty}^{d} \tilde{F}_1(x)dx$$

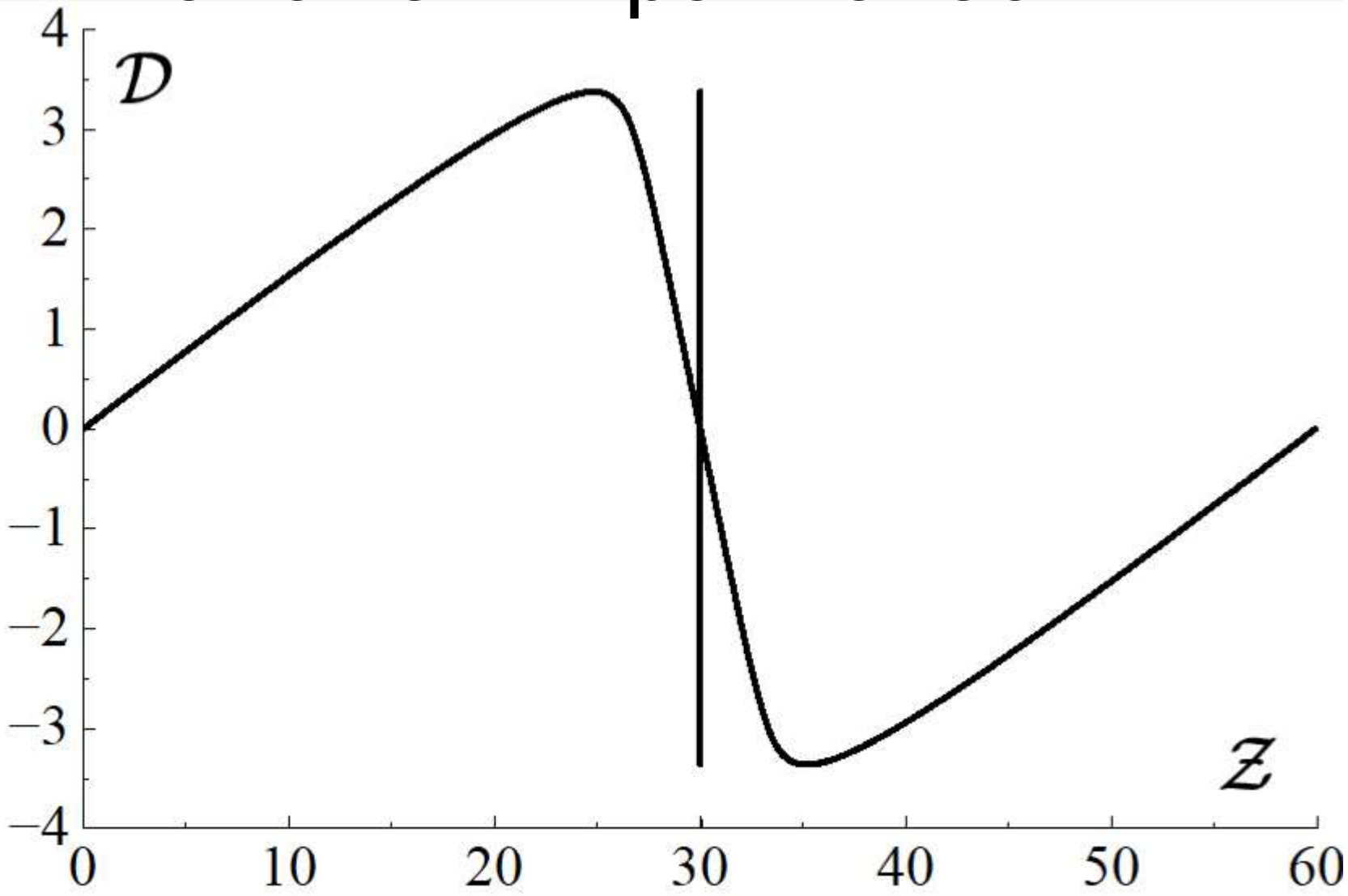
- $\tilde{F}_1(d)$ - выражение силы в зависимости от расстояния между электронами;
- d - расстояние между электронами;
- $\tilde{U}(d)$ - выражение потенциала в зависимости от расстояния между электронами

График отклонений шнура ионов от положения равновесия



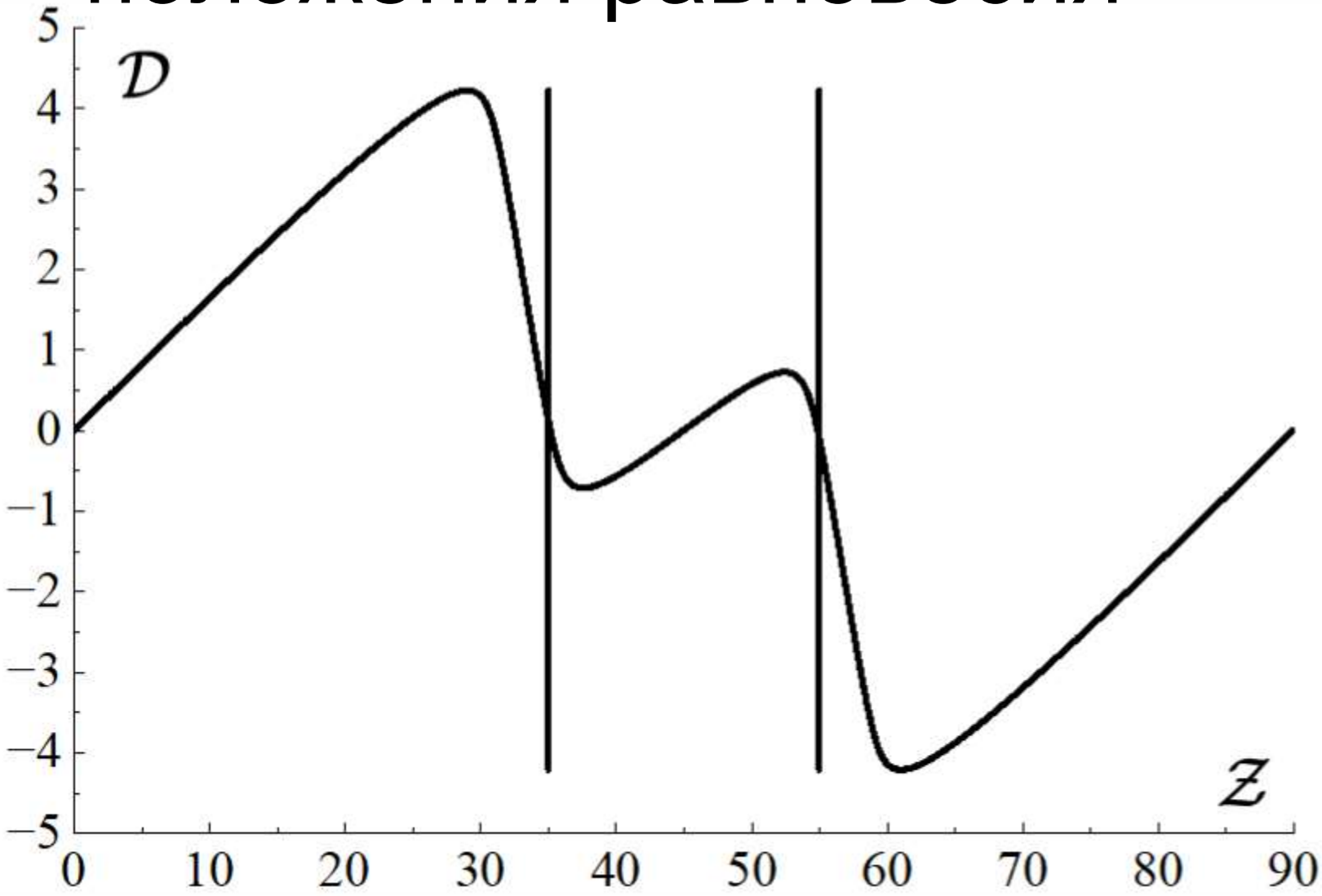
- Электрон 1 - 10
- Электрон 2 - 50
- Длина шнура 60
- Ось абсцисс - координата участка
- Ось ординат - отклонение

График отклонений шнура ионов от положения равновесия



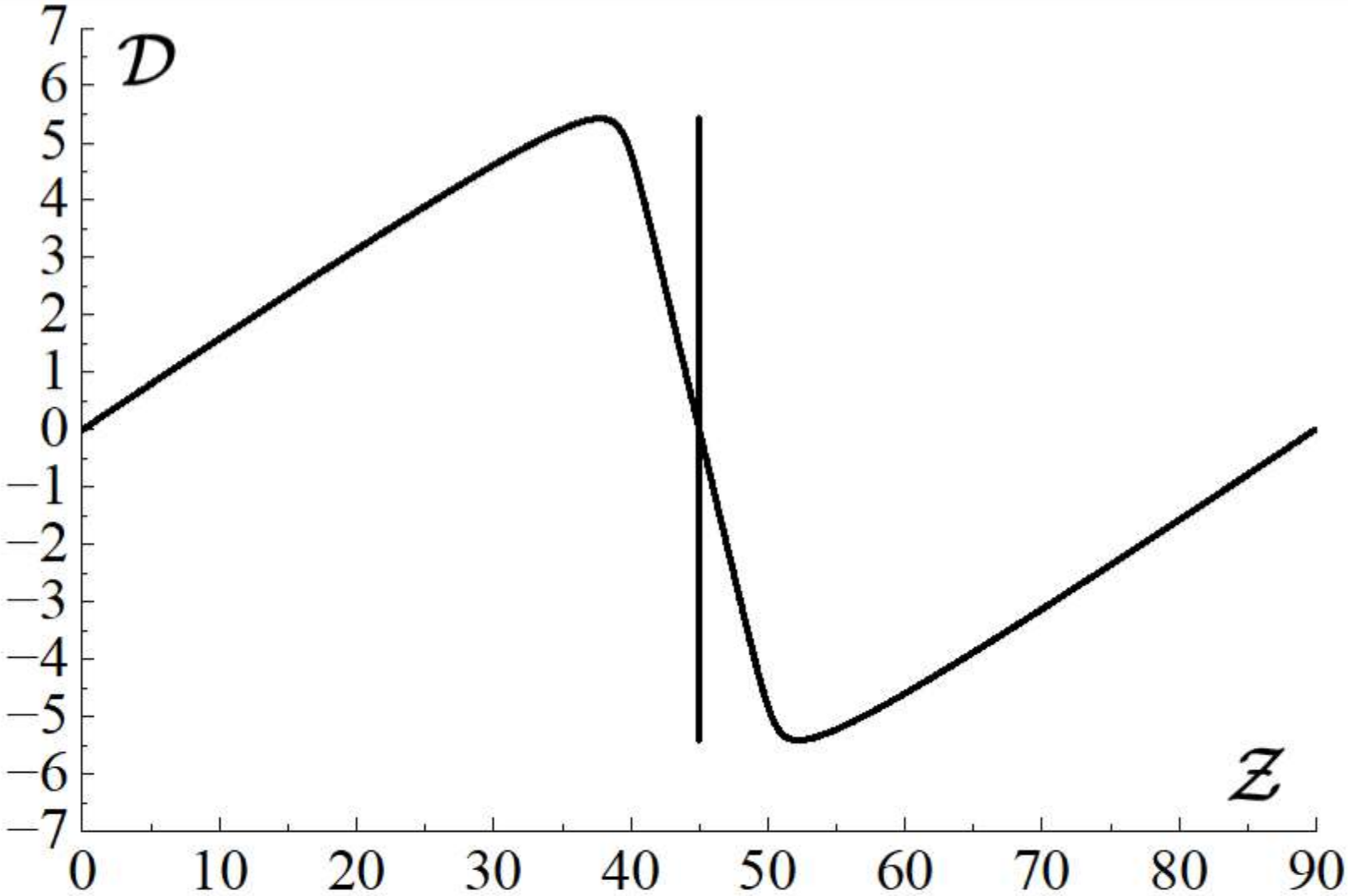
- Электрон 1 - 30
- Длина шнура 60
- Ось абсцисс - координата участка
- Ось ординат - отклонение

График отклонений шнура ионов от положения равновесия



- Электрон 1 - 35
- Электрон 2 - 55
- Длина шнура 90
- Ось абсцисс - координата участка
- Ось ординат - отклонение

График отклонений шнура ионов от положения равновесия

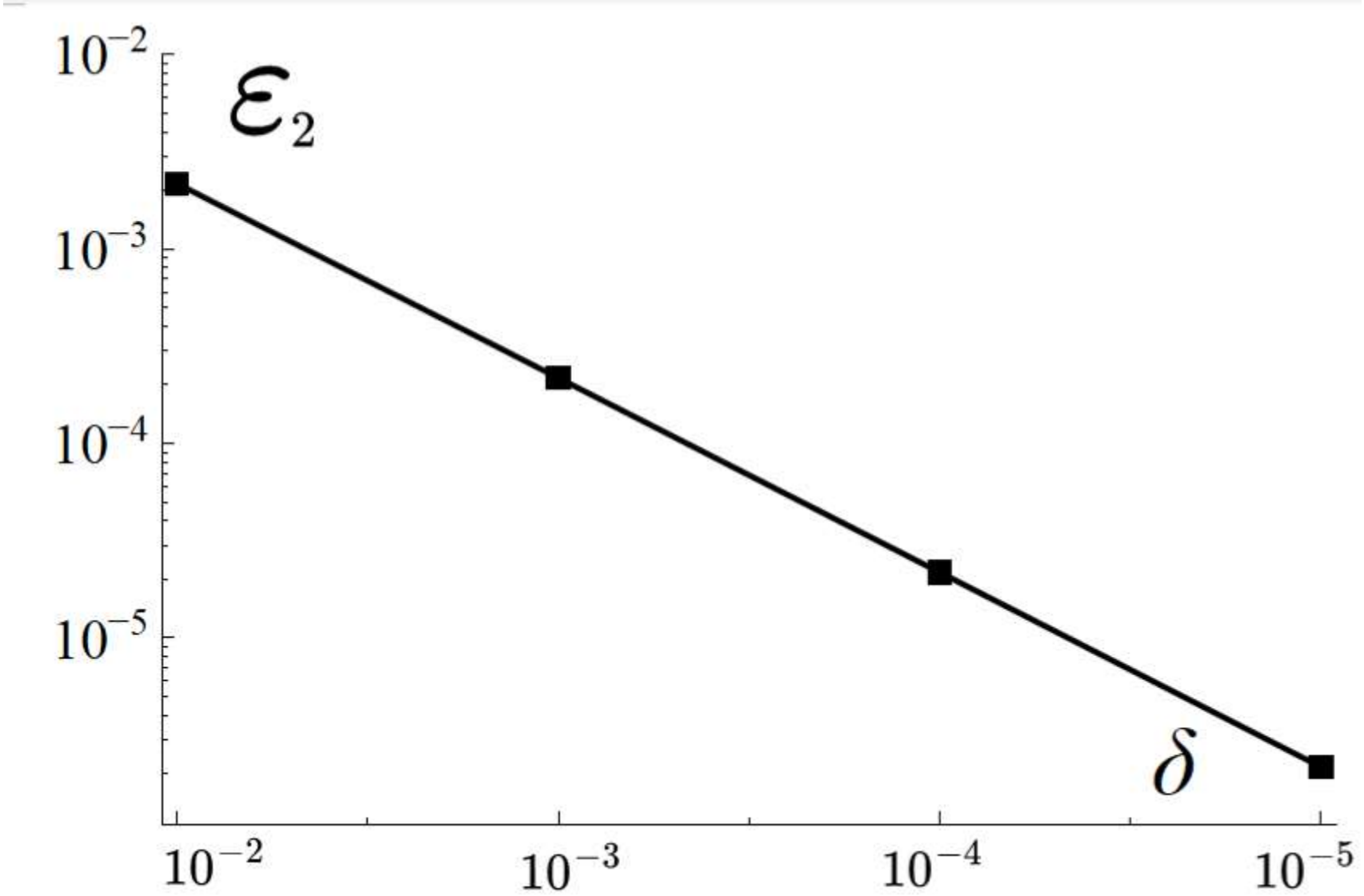


- Электрон 1 - 45
- Длина шнура 90
- Ось абсцисс - координата участка
- Ось ординат - отклонение

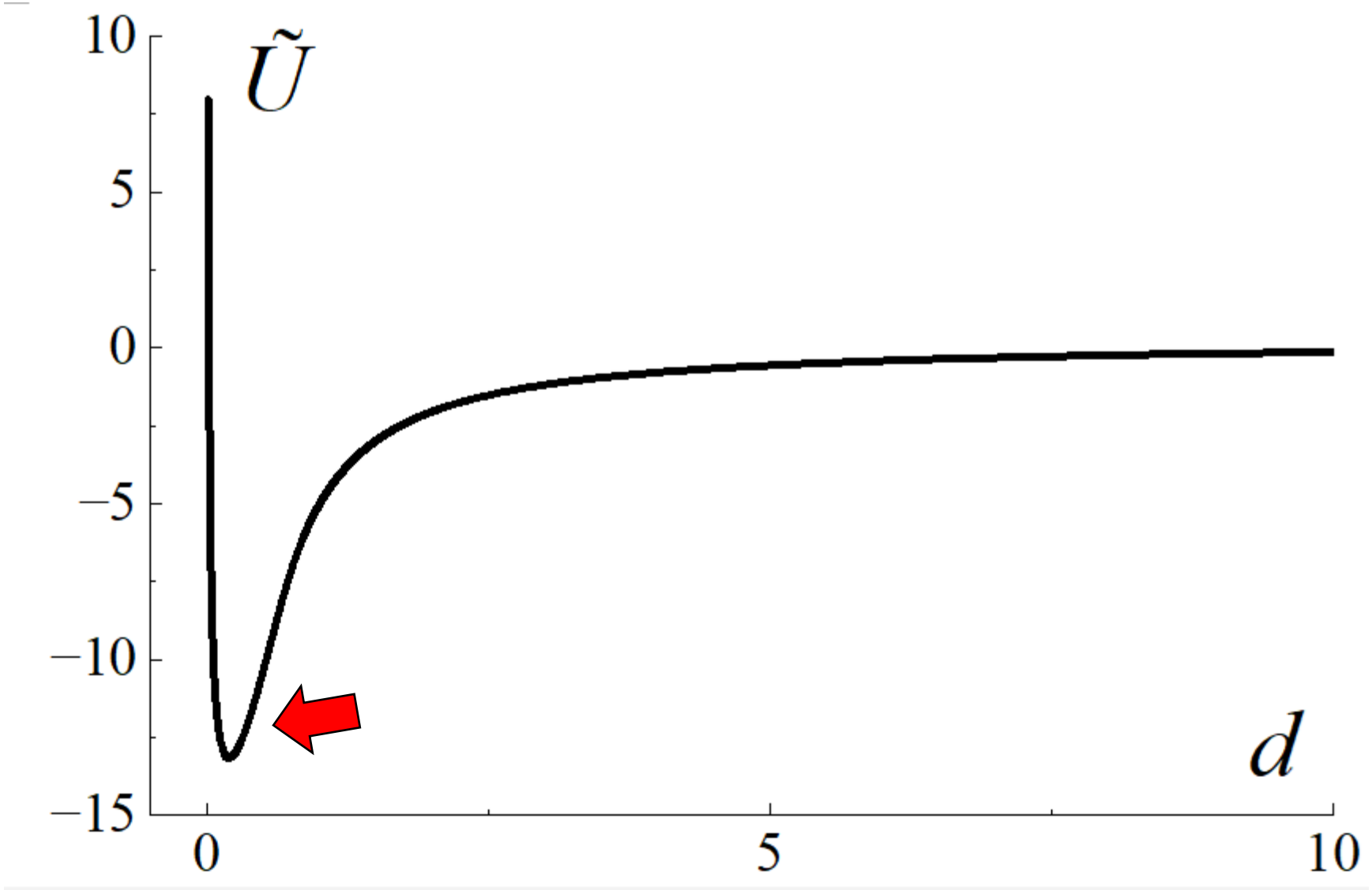
Сопоставление с аналитическим решением

K_{max}	ε_1
10^3	$7.07818 \cdot 10^{-5}$
10^4	$7.06729 \cdot 10^{-5}$
10^5	$7.06621 \cdot 10^{-5}$

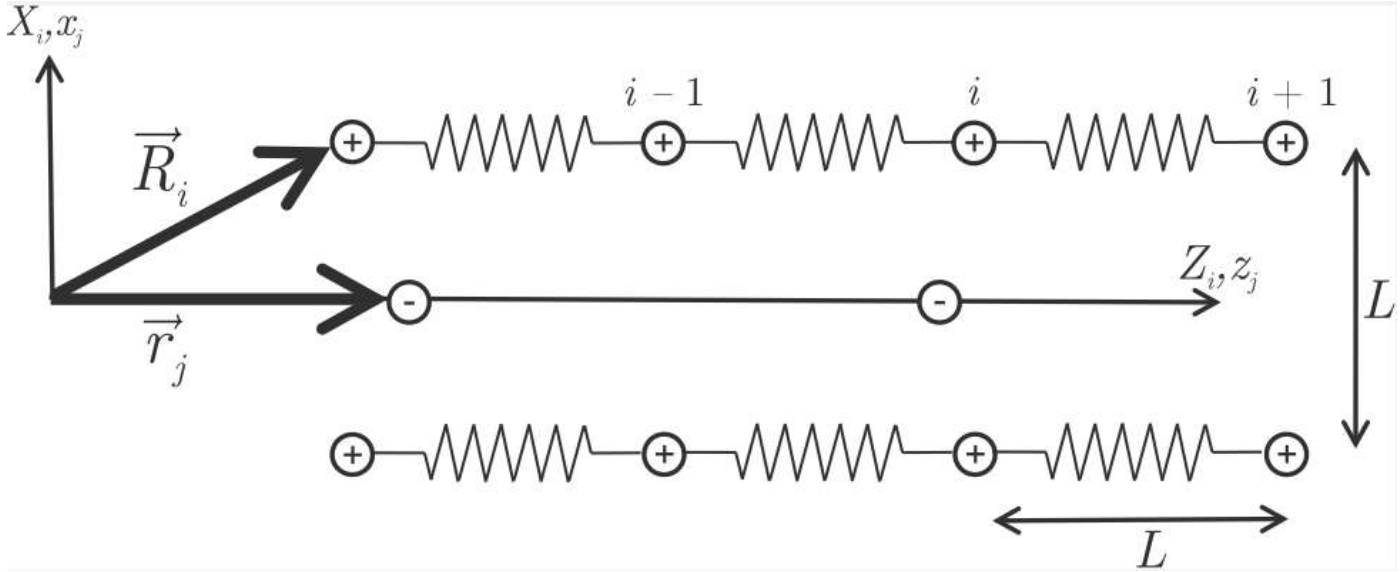
Относительная погрешность



Притягательный потенциал



Реализация динамической модели



v_i - скорость иона

F_i - сила на ион

u_j - скорость электрона

G_j - сила на электрон

Ионы: $\frac{d^2}{d\tau^2} Z_i$

$$= -\frac{K_Z 4\pi\varepsilon_0 m L^3}{M} \left(\sum_{k \neq j} \frac{Z_j - Z_k}{|\zeta_j - \zeta_k|^3} - \sum_{i=1}^{2} \frac{Z_i - \zeta_j}{((Z_i - \zeta_j)^2 + 1/4)^{3/2}} \right)$$

Электроны: $\frac{d^2}{d\tau^2} \zeta_j^2 = \sum_{k \neq j} \frac{(2Z_j - Z_{k+1} - Z_{k-1})}{|\zeta_j - \zeta_k|^3} - \sum_{i=1}^{2} \frac{Z_i - \zeta_j}{((Z_i - \zeta_j)^2 + 1/4)^{3/2}}$

Замена по длине дуги

v_i - скорость иона

F_i - сила на ион

u_j - скорость электрона

G_j - сила на электрон

$$\frac{dZ_i}{d\tau} = v_i$$

$$\frac{dv_i}{d\tau} = F_i$$

$$\frac{d\zeta_j}{d\tau} = u_j$$

$$\frac{du_j}{d\tau} = G_j$$

$$\frac{d\tau}{d\tau} = 1$$

1. $d\xi^2 = d\tau^2 + \sum_{i=1}^{N} d\,Z_i^2 + \sum_{i=1}^{N} d\,v_i^2 + \sum_{j=1}^{M} d\,\zeta_j^2 + \sum_{j=1}^{M} d\,u_j^2$ разделим на $d\tau^2$

2. $$\frac{d\xi^2}{d\tau^2} = 1 + \sum_{i=1}^{N} v_i^2 + \sum_{i=1}^{N} F_i^2 + \sum_{j=1}^{M} u_j^2 + \sum_{j=1}^{M} G_j^2$$

3. $$W = \sqrt{1 + \sum_{i=1}^{N} v_i^2 + \sum_{i=1}^{N} F_i^2 + \sum_{j=1}^{M} u_j^2 + \sum_{j=1}^{M} G_j^2}$$

Итог замены

$$\frac{d\tau}{d\tau}\cdot\frac{1}{W}=\frac{1}{W}=\frac{d\tau}{d\xi}$$

$$\frac{dZ_i}{d\tau}\cdot\frac{1}{W}=\frac{v_i}{W}=\frac{dZ_i}{d\xi}$$

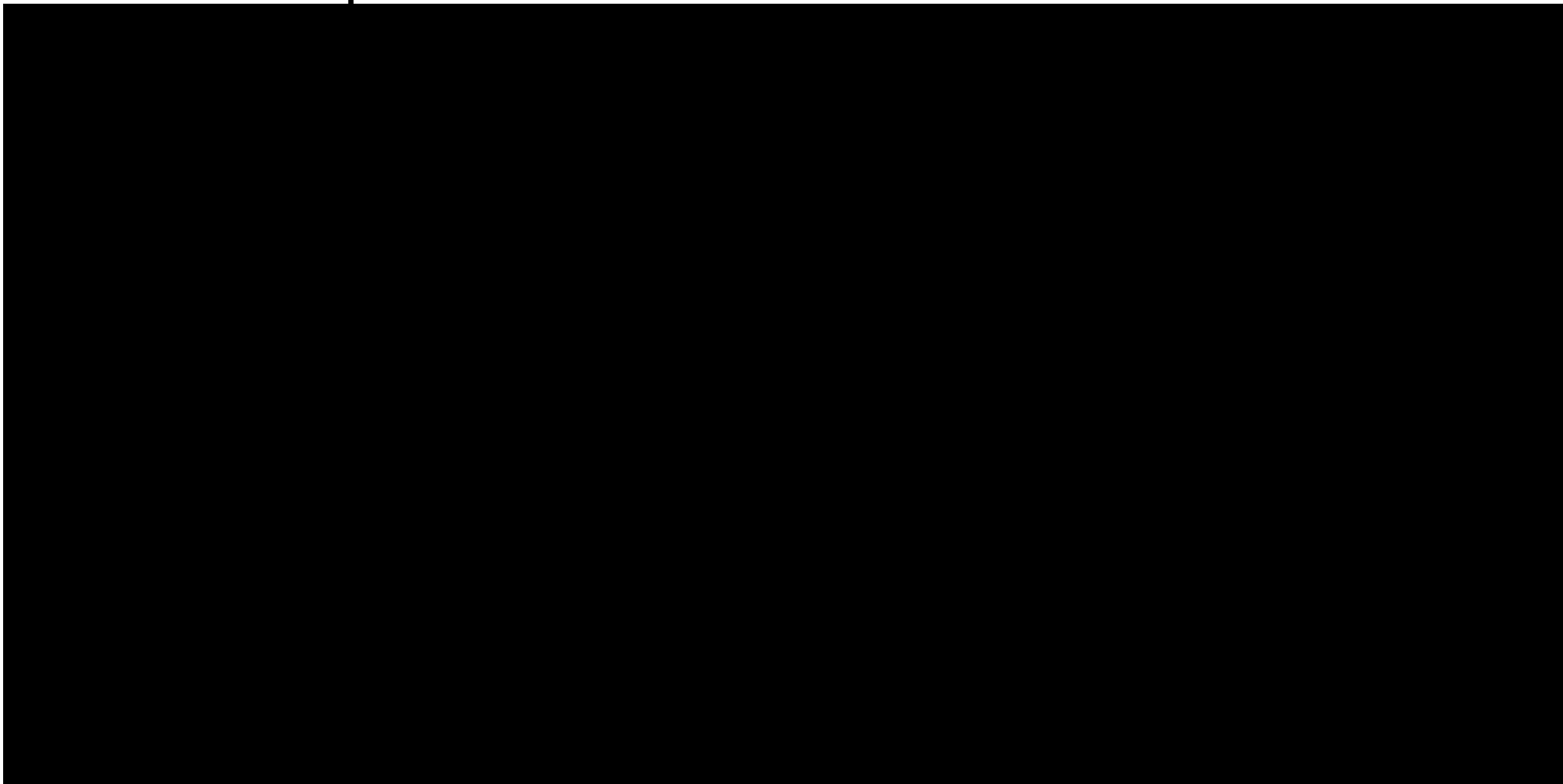
$$\frac{dv_i}{d\tau}\cdot\frac{1}{W}=\frac{F_i}{W}=\frac{dv_i}{d\xi}$$

$$\frac{d\zeta_j}{d\tau}\cdot\frac{1}{W}=\frac{u_j}{W}=\frac{d\zeta_j}{d\xi}$$

$$\frac{du_j}{d\tau}\cdot\frac{1}{W}=\frac{G_j}{W}=\frac{du_j}{d\xi}$$

Система связана - параметризация общая. Если разделять ионы и электроны, то синхронизация нарушится;

Анимация



Ионы зафиксированы. Анимация

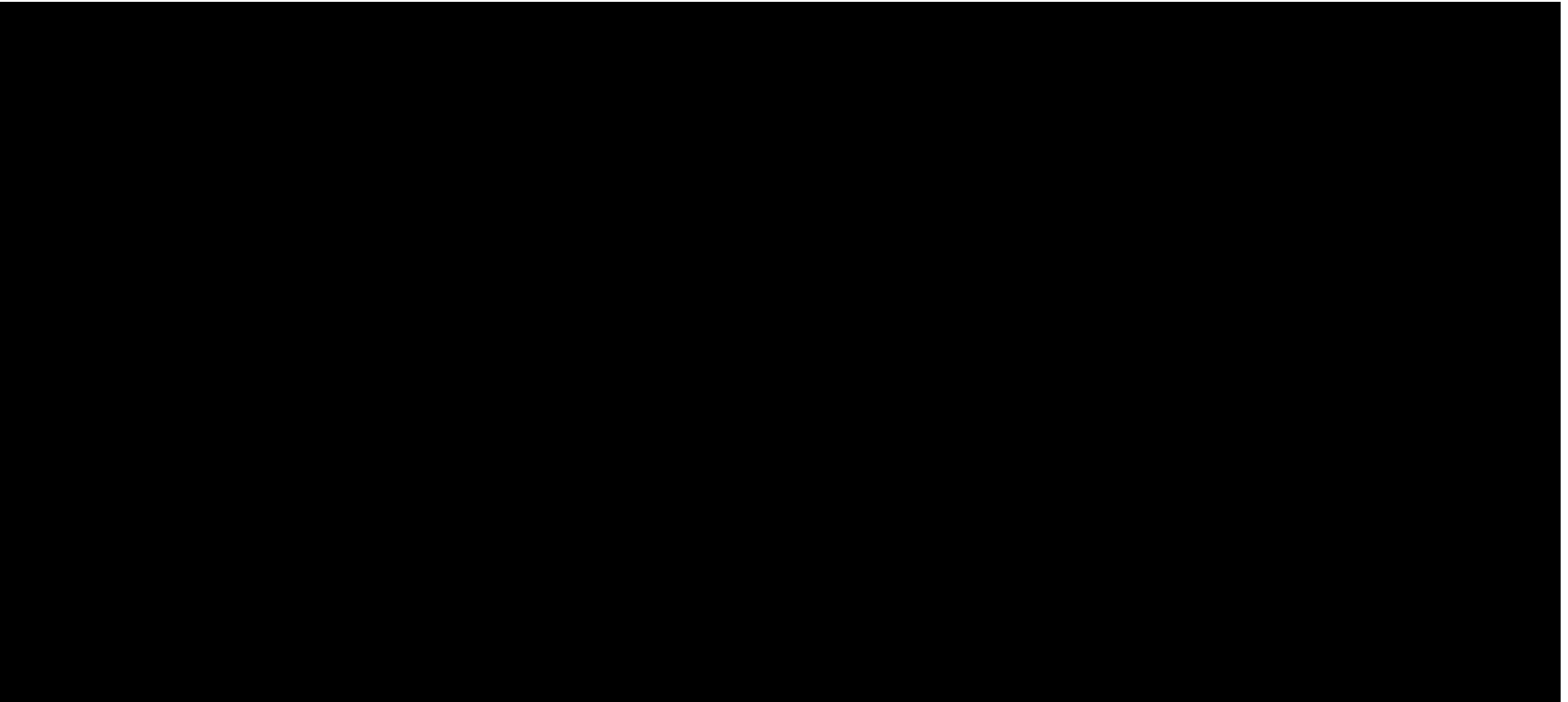
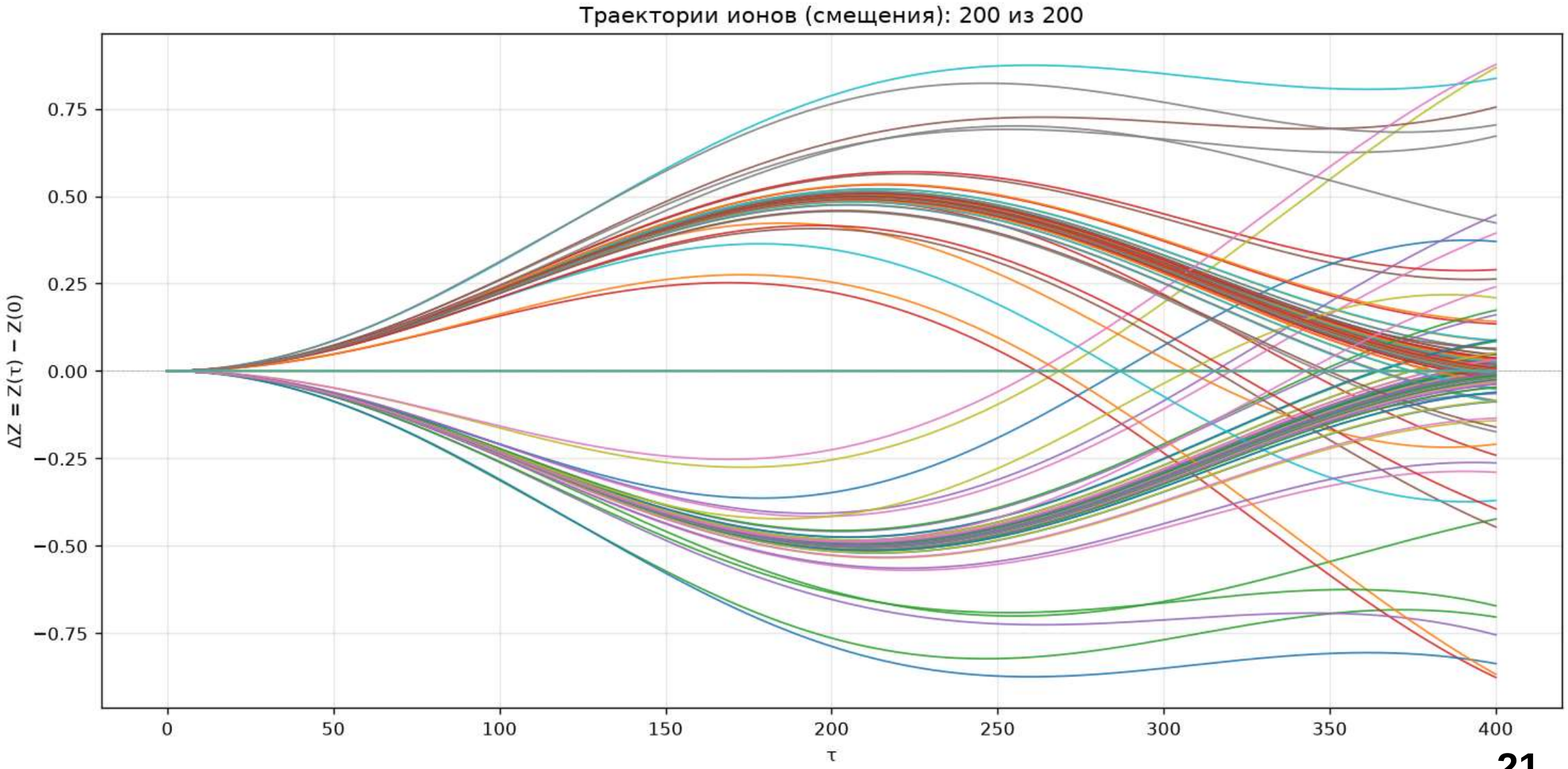


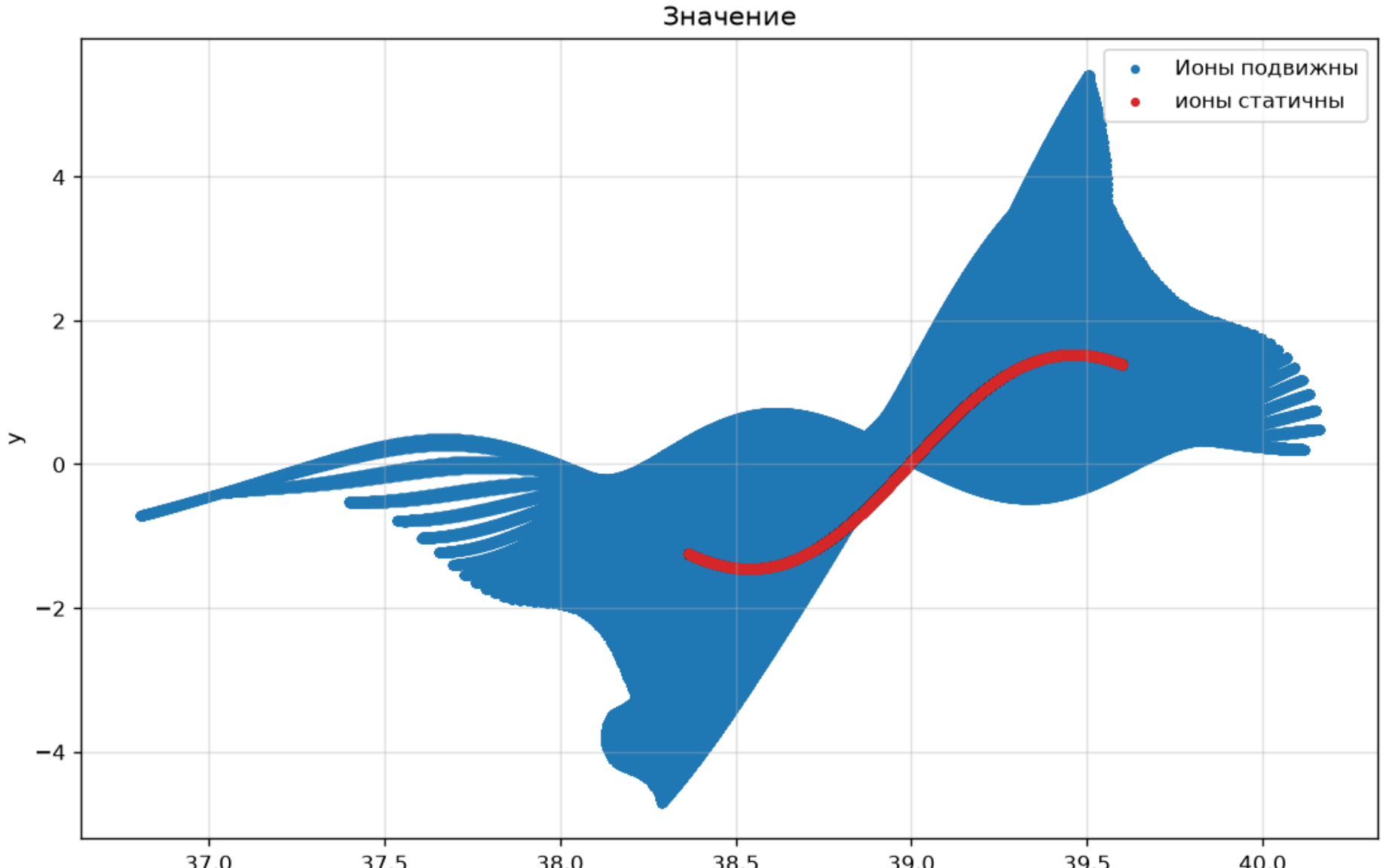
График траекторий

Линия на графике - смещение иона от положения равновесия с течением времени



Графики полученных сил

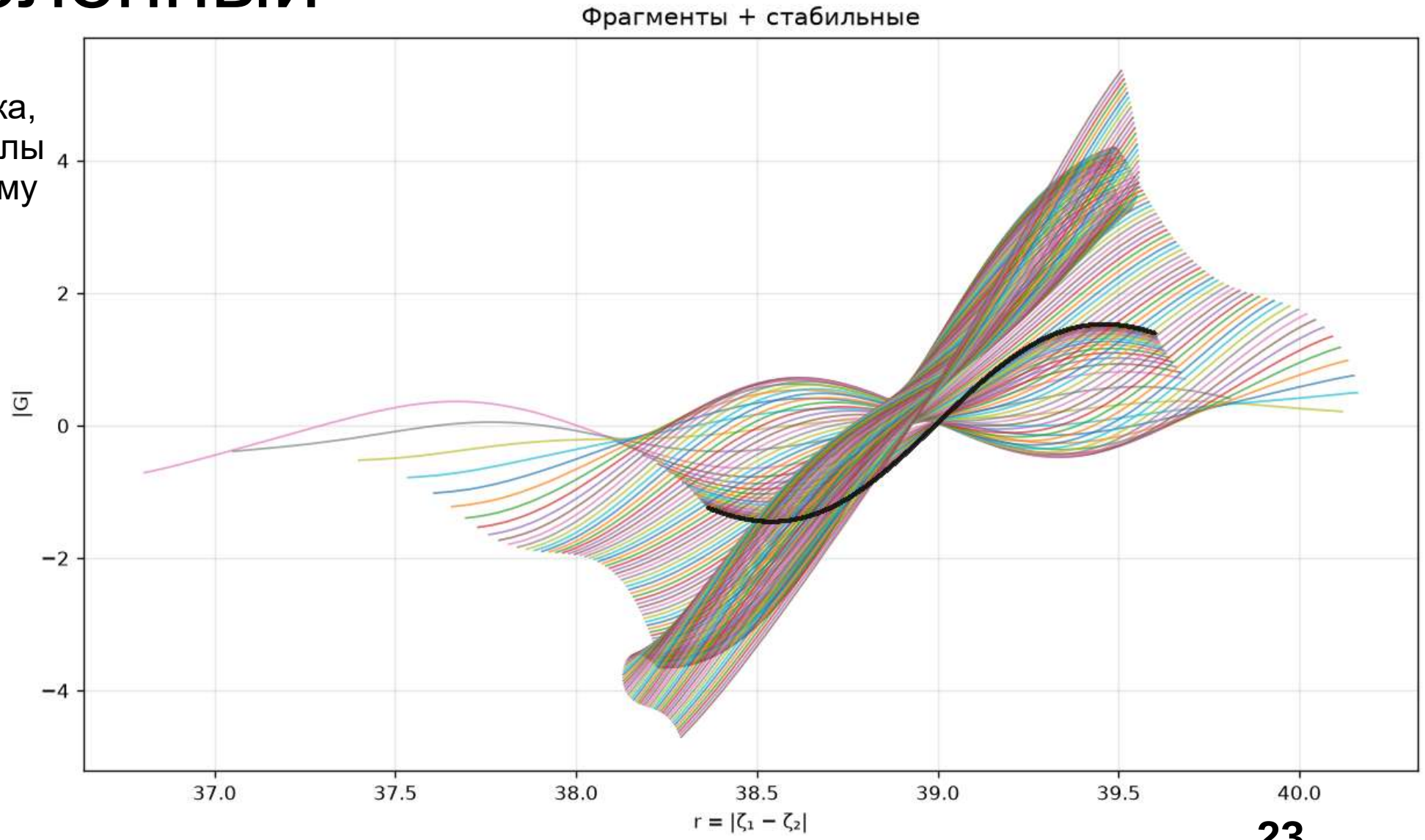
По оси x указано расстояние между электронами, а по y значение силы, действующей на электрон



- Красная — ионы фиксированы, синяя — подвижны.
- Сила на электрон зависит от расстояния между электронами и координат ионов;
- У подвижных ионов координаты меняются со временем, поэтому при равном расстоянии сила разная.

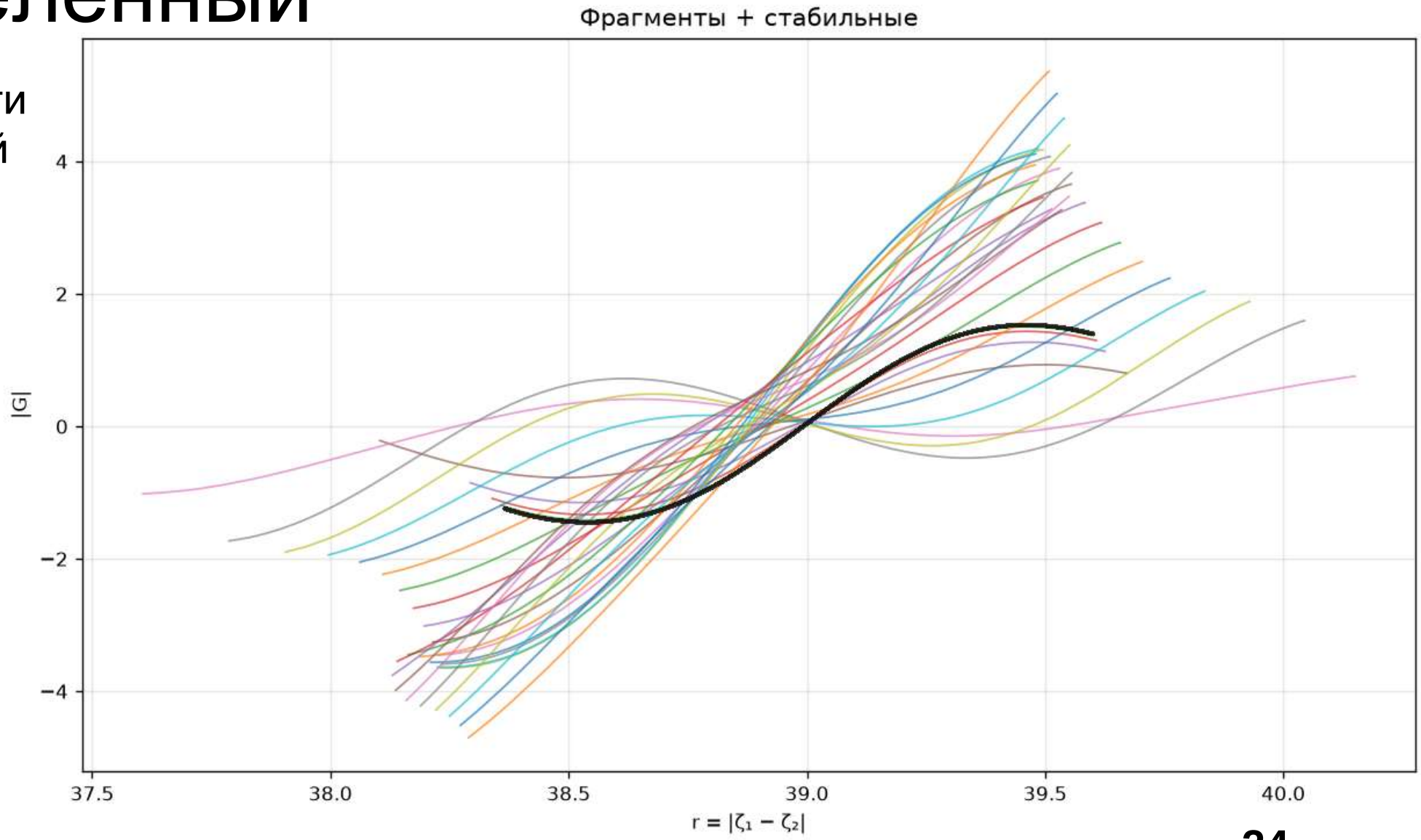
Графики полученных сил. Разделенный

Каждый фрагмент - это отделённая часть списка, в которой выделены силы соответствующие одному пролёту электронов. Каждому расстоянию будет соответствовать только одно значение силы



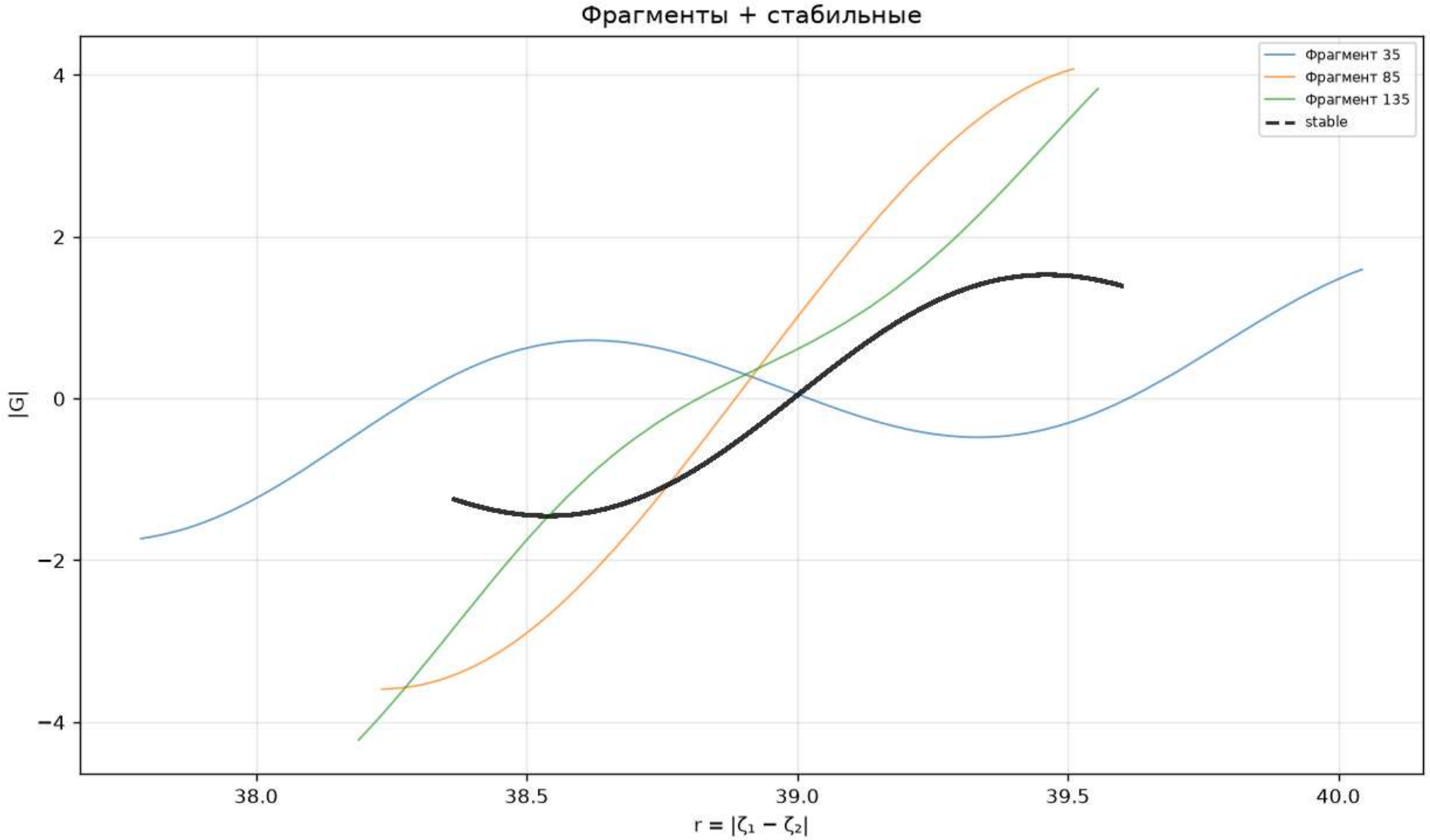
Графики полученных сил. Разделенный

- Для наглядности показан каждый 5-й фрагмент

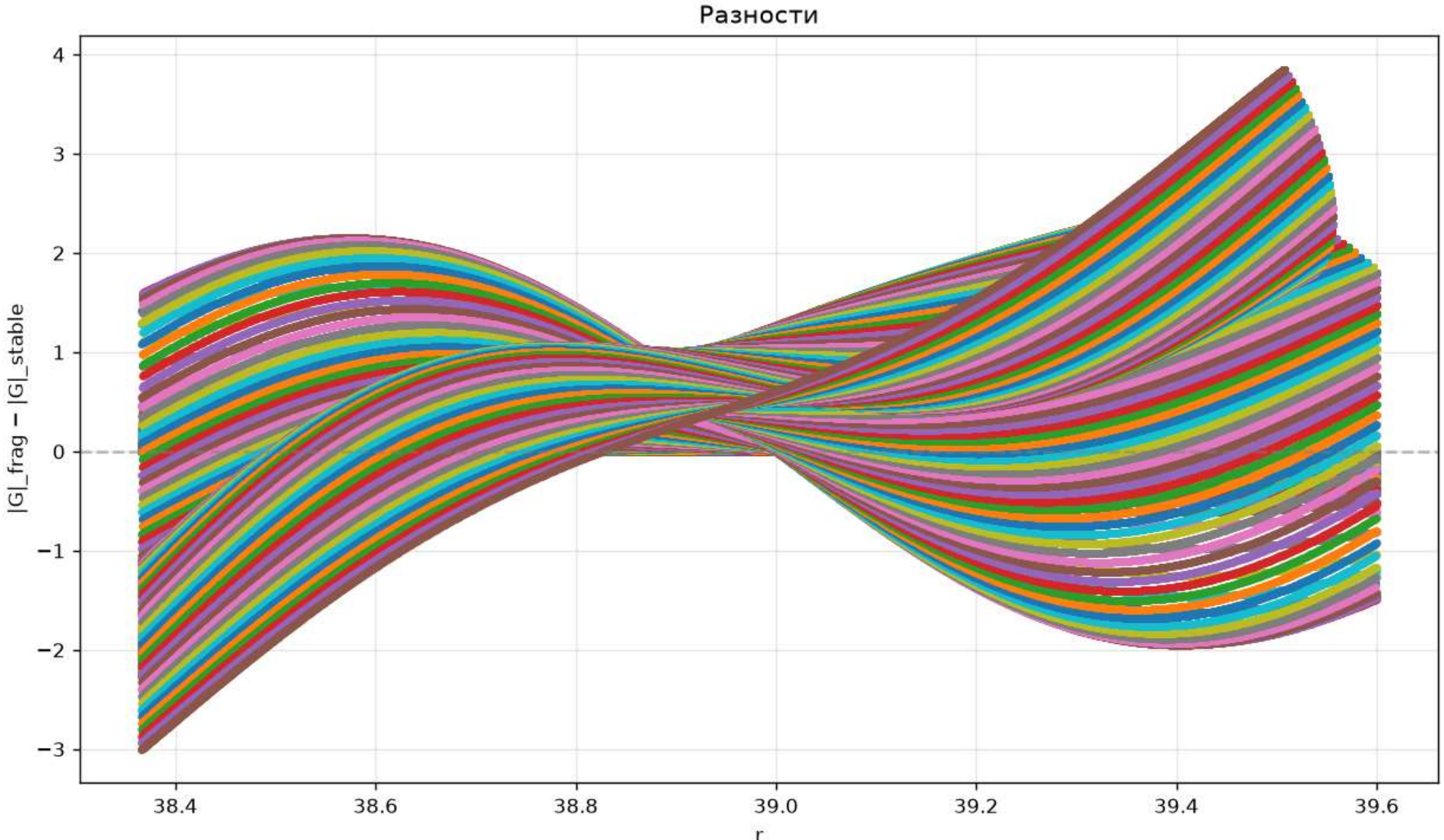


Графики полученных сил. Разделенный

- Выделено три фрагмента

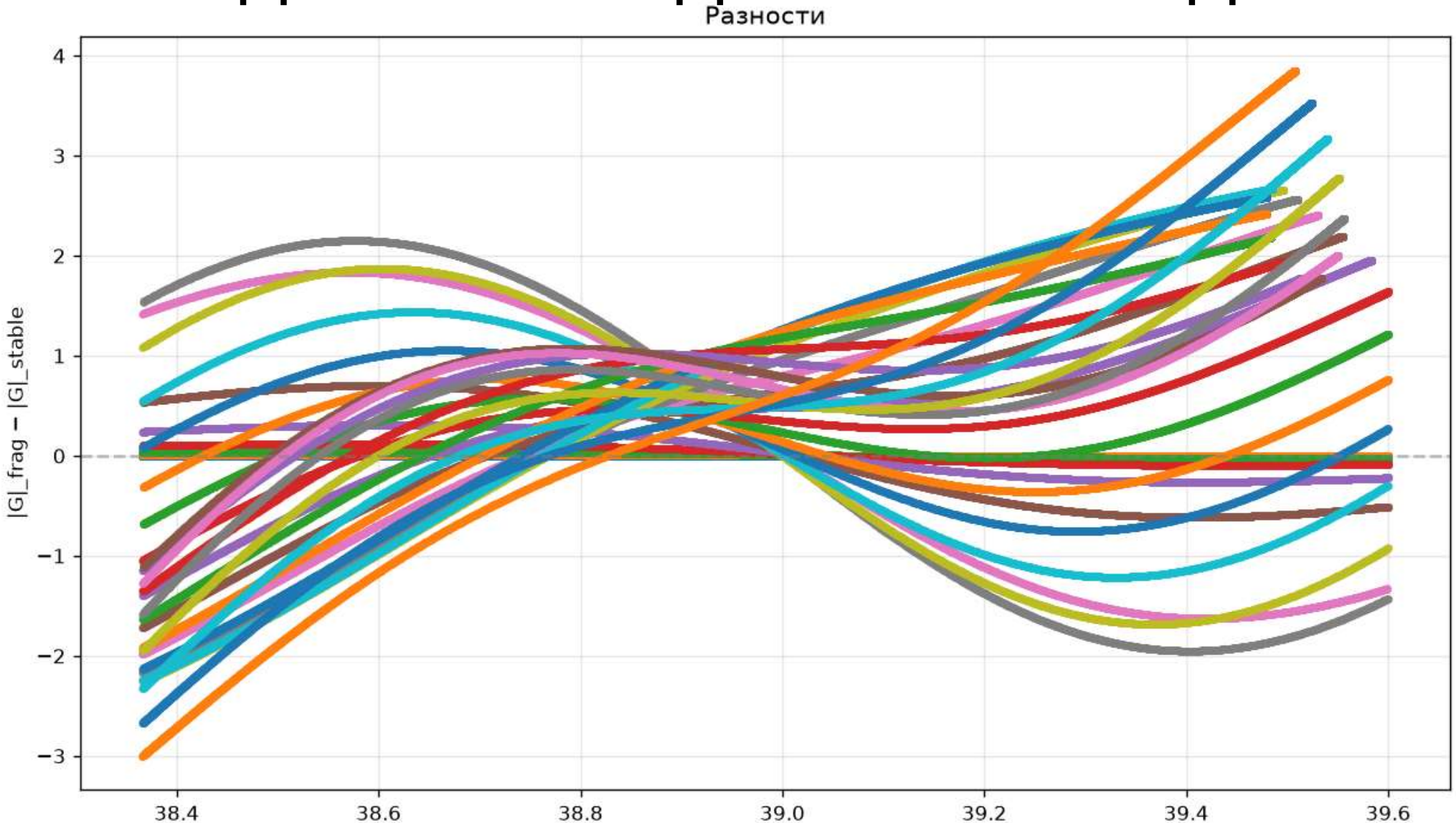


Графики разностей сил в случаях когда ионы подвижны и когда статичны



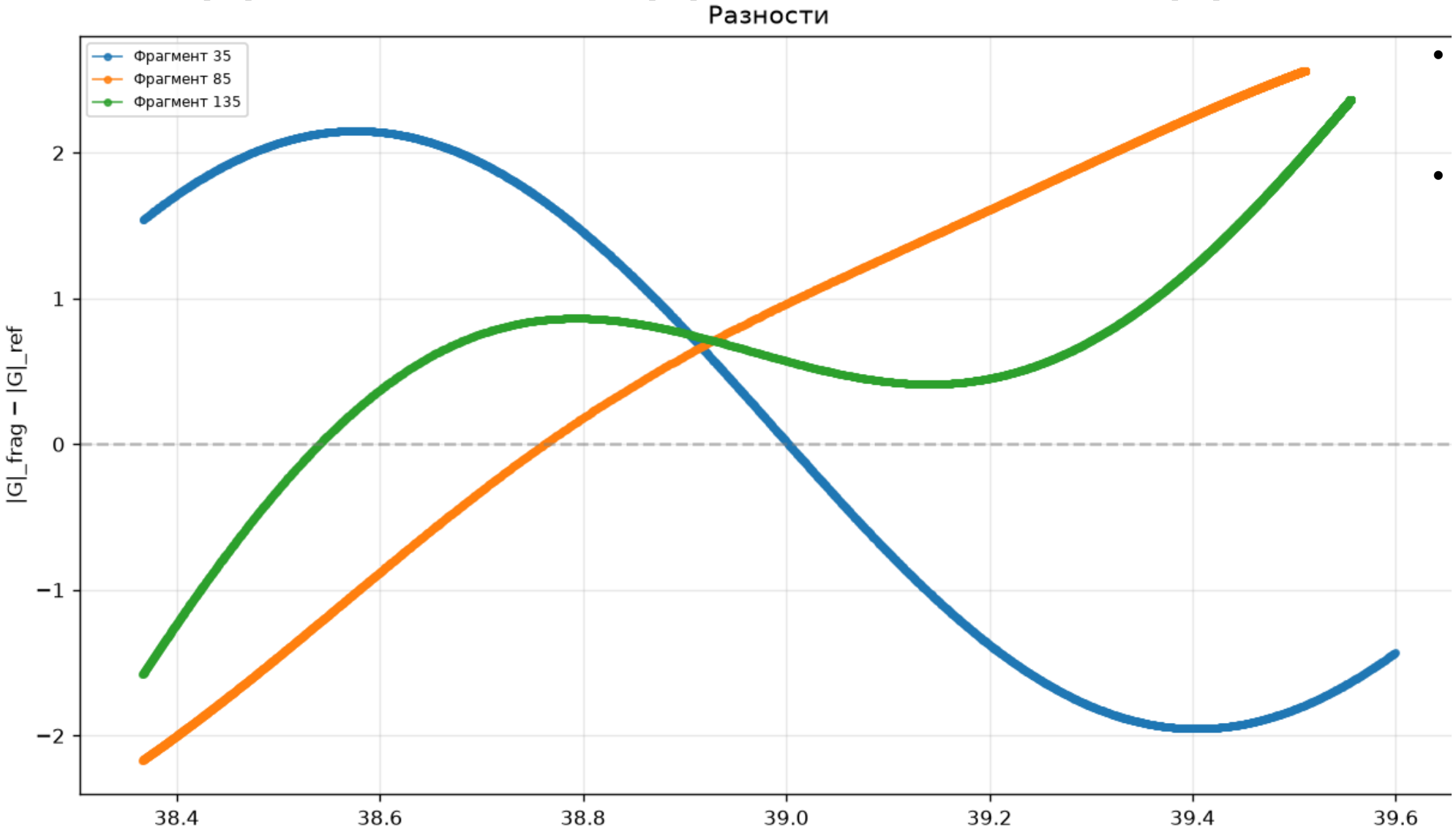
- Вычитаем из каждой линии чёрную линию
- Мы получаем именно влияние “подвижности” ионов

Графики разностей сил в случаях когда ионы подвижны и когда статичны



Выводим каждую пятую

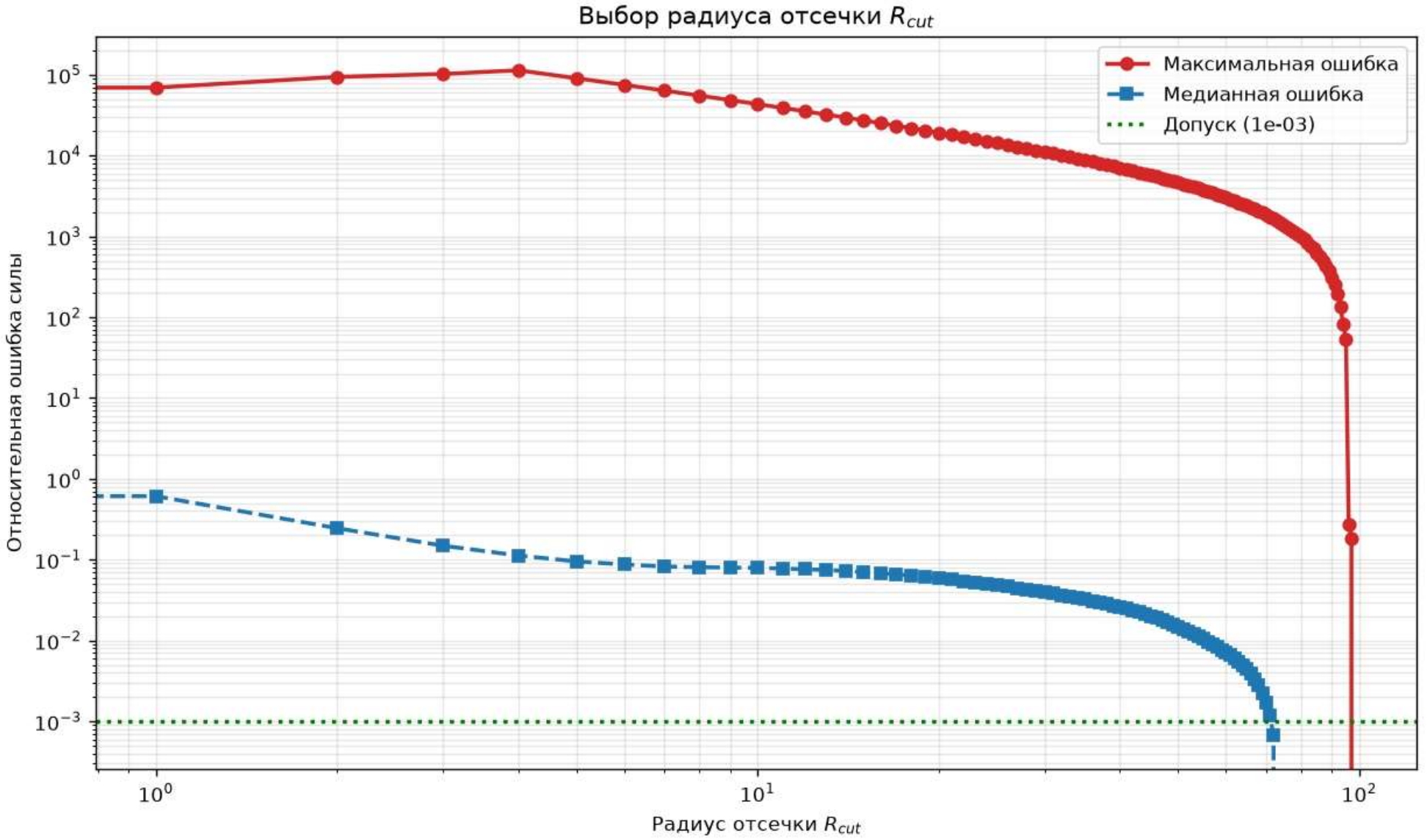
Графики разностей сил в случаях когда ионы подвижны и когда статичны



- Синий — начало: сила знакопеременная.
- Жёлтый и зелёный (с середины) — сила преимущественно притягивающая.

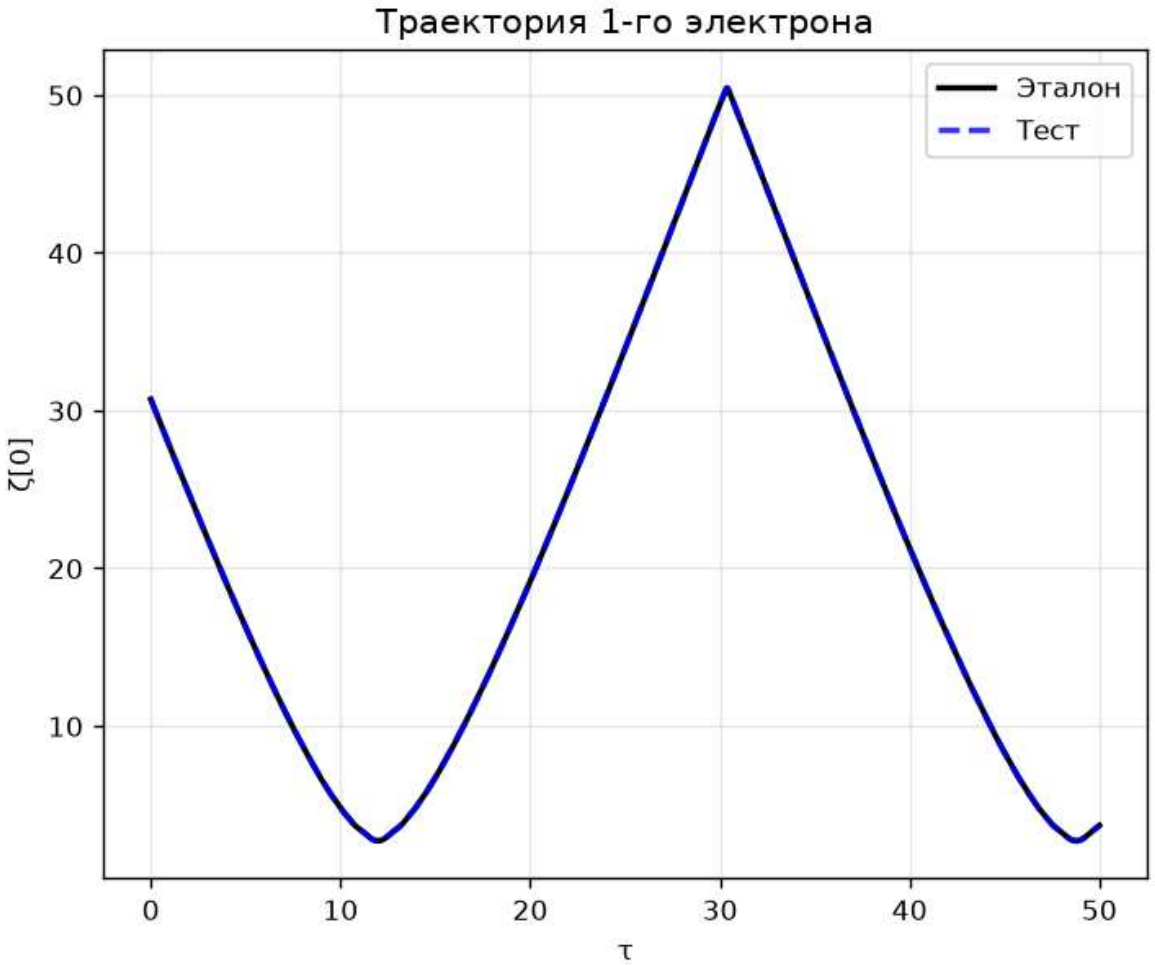
Оптимизация. Радиус отсечения

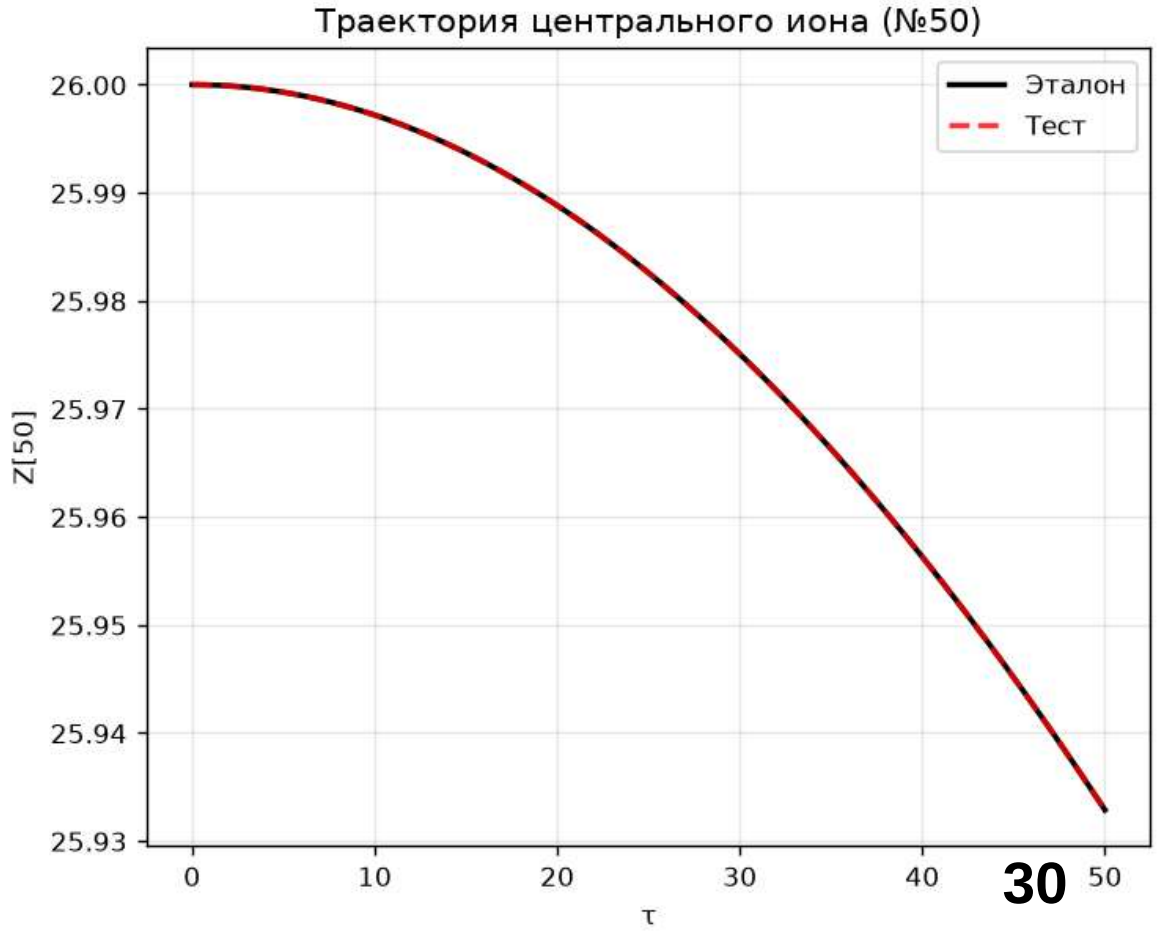
- Чтобы введение радиуса отсечки не нарушило результат вычислений. Нужно учитывать 90% всех ионов;
- При уменьшении радиуса отсечки, возникают высокие ошибки;
- Оптимизация данным методом для 1D задачи не рациональна;
- Вычисления практически не ускоряются



Сравнение методов. leapfrog

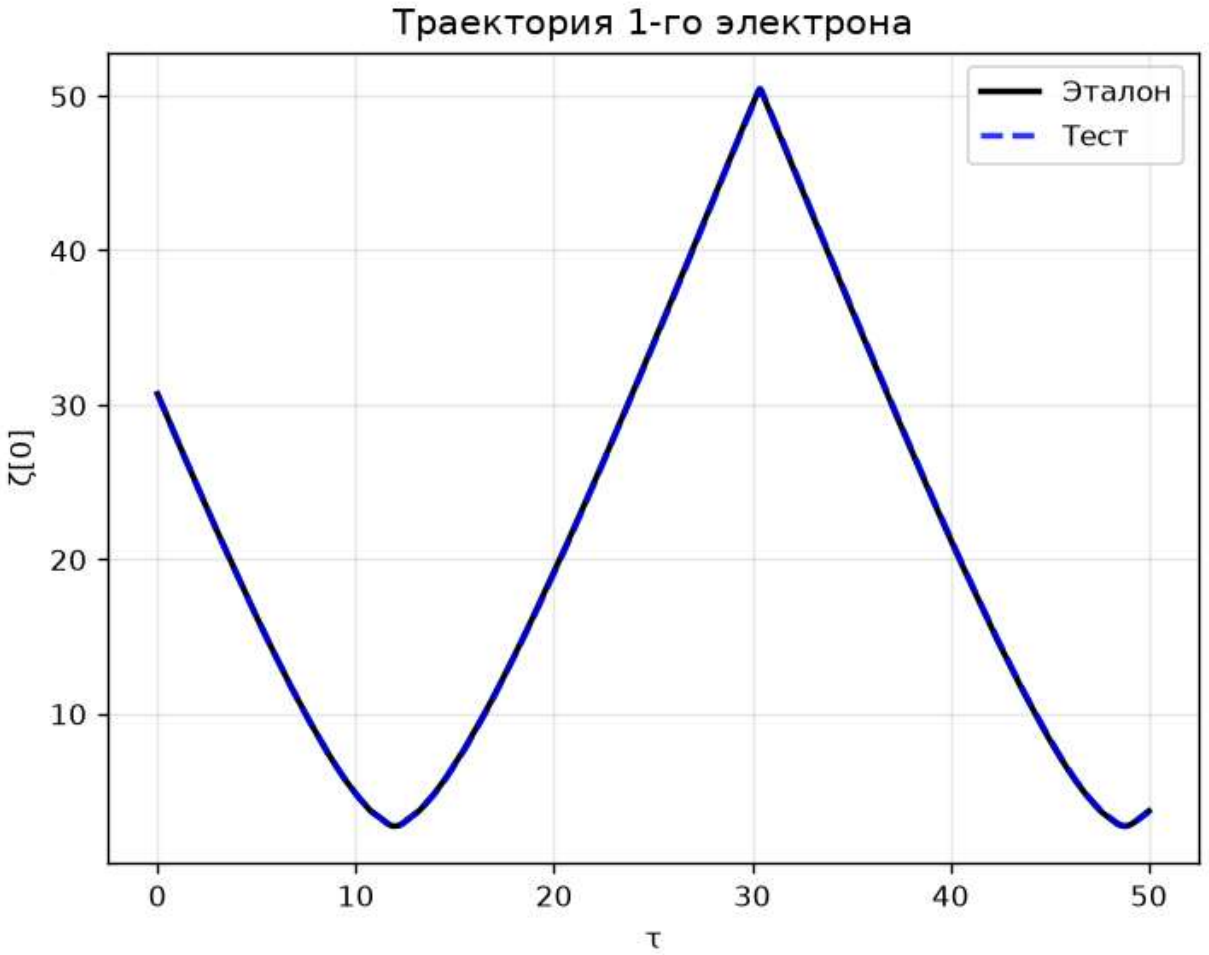
- Максимальная относительная ошибка для электронов 2.216e-04;
- Максимальная относительная ошибка для ионов 7.794e-09;
- Вычисления быстрее эталонных в 15 раз!

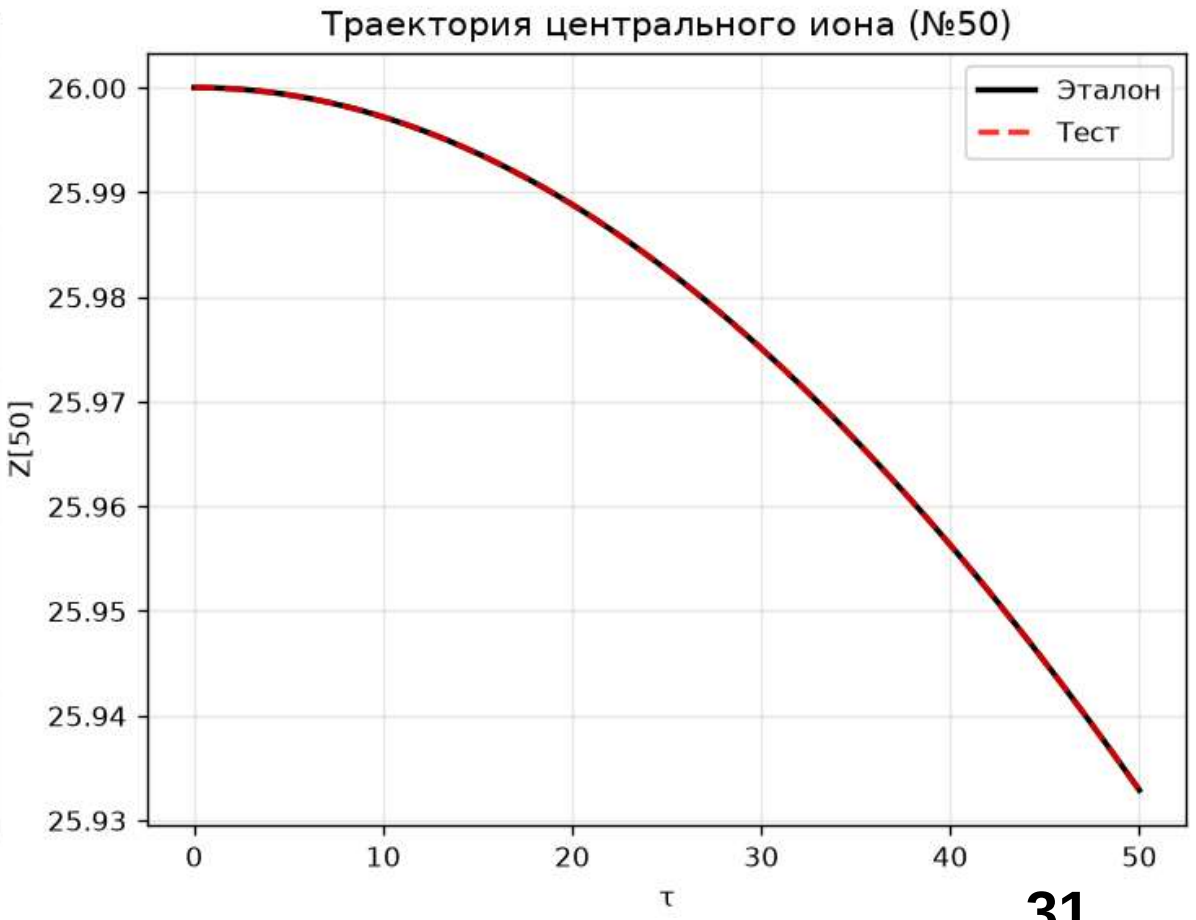




Сравнение методов. Velocity-verlet

- Максимальная относительная ошибка для электронов 2.086e-03;
- Максимальная относительная ошибка для ионов 1.244e-07;
- Вычисления быстрее эталонных в 15 раз!





Результаты

- Программа для моделирования отклонений фрагментов эластичного шнура ионов под действием притягательной силы двух электронов. Виноградов В.А., Шикота И.А. 2026689161;
- Программа для моделирования расчёта действующего на электрон потенциала как функции расстояния между электронами вблизи двух ионных эластичных шнуров. Виноградов В.А., Шикота И.А. 2026689073;
- Attraction Between a Pair of Electrons in the Vicinity of Two Parallel Ion Chains DOI: 10.1134/S1995080226620564 ISSN 1995-0802, Lobachevskii Journal of Mathematics, 2026, Vol. 47, No. 9, pp. 4368–4378. c Pleiades Publishing, Ltd., 2026 (V.A. Vinogradov, G.G. Lazareva, A.V. Turlapov, I.A. Shikota).