5 ELECTRONES

Ujué Etayo (ujue.etayo@gmail.com), Departamento de Matemáticas, Estadística y Computación, Universidad de Cantabria

Parcialmente financiado por el proyecto MTM2014-57590-P, Ministerio de Economía y Competitividad, Gobierno de España (I.P.: Carlos Beltrán)

Origen del problema

En 1904 y tras proponer el modelo atómico del *plum pudding*, el científico británico J.J. Thomson expone el siguiente problema:

Determinar la mínima energía potencial electrostática en una configuración de n electrones situados en la superficie de una esfera que se repelen los unos a los otros en virtud de la ley de Coulomb.

Dicho problema admite la siguiente formulación:

$$\min \mathcal{E}_1(\omega_n) = \min \sum_{i,j=1, i<j}^{n} \frac{1}{||x_i - x_j||}.$$

donde $\omega_n = \{x_1, \ldots, x_n\}$ son puntos de $\mathbb{S}^2$.

De hecho, el problema de Thomson no es más que un caso particular de un problema más general conocido como el problema de minimizar la energía de Riesz o s-energía, que viene dado por la siguiente formula:

$$\boxed{\min \mathcal{E}_s(\omega_n) = \min \sum_{i=1, i<j}^{n} \frac{1}{||x_i - x_j||^s}}$$

donde s toma valores en el intervalo $(0, \infty)$.

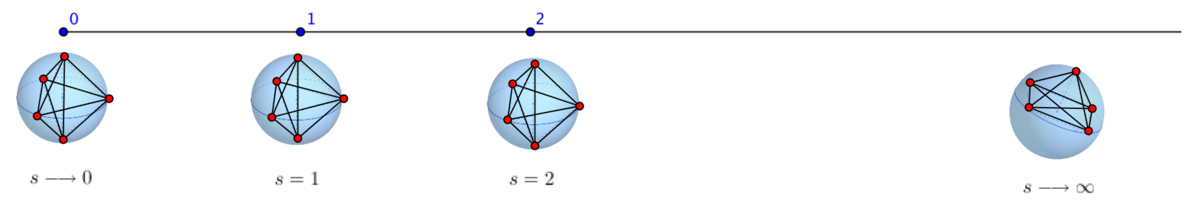
Caso particular: 5 puntos

Estudiaremos la solución del problema de la **s-energía para 5 puntos** situados en la superficie de una esfera, es decir, intentaremos resolver:

$$\boxed{\min \mathcal{E}_s(\omega_5) = \min \sum_{i=1, i<j}^{5} \frac{1}{||x_i - x_j||^s}}$$

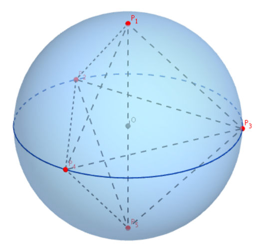
Estado del arte

El problema de minimizar la s-energía para 5 puntos es un problema que sólo está resuelto parcialmente.

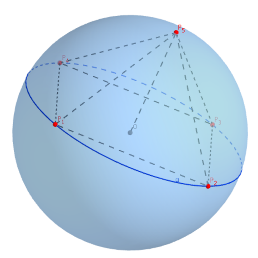


Se conoce la solución exacta solamente en 4 casos:

- Cuando $s \longrightarrow 0$, estructura óptima consiste en colocar los 5 puntos formando una **estructura bipiramidal** : dos puntos están situados en los polos y los otros tres forman un triángulo equilátero en el ecuador. La estructura bipiramidal es también la solución cuando $s = 1$ y $s = 2$ (ésto se conoce por una complicada prueba computacional [1] [2]).



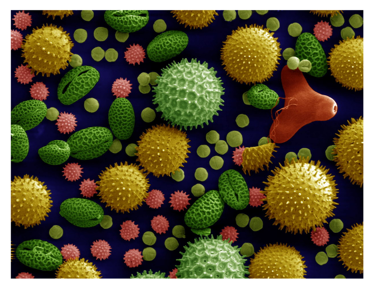
- Cuando $s \longrightarrow \infty$ la estructura que minimiza la s-energía es una pirámide cuadrangular de altura el radio de la esfera, una **estructura piramidal.**



Aplicaciones prácticas

El problema de minimizar la s-energía se encuadra dentro de un conjunto de problemas aún más general, que consiste en realizar una buena distribución de puntos en la superficie de una esfera. Dichos problemas cuentan con numerosas aplicaciones prácticas, entre las que destacan:

- La modelización de una estructura óptima de las gotas de metal confinadas en las *Paul traps*.
- El análisis de las grandes estructuras de fullerenos, moléculas de carbono de gran importancia para la nanotecnología.
- La descripción de colecciones de puntos apropiadas para interpolación y cuadratura.
- El conocimiento de la distribución de los agujeros en las partículas de polen de tal forma que optimicen la germinación.

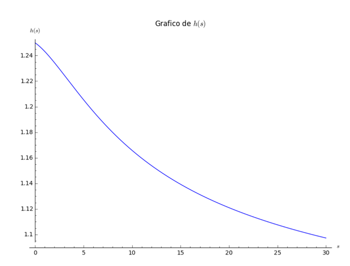


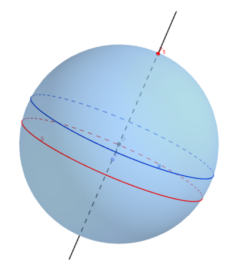
Nuestro aporte: estudio de dos estructuras

Trabajando con puntos en la esfera $\mathbb{S}^2$, resulta sencillo identificar dos estructuras básicas, las dos únicas estructuras de 5 puntos que se sabe que son solución para algún s: la *estructura bipiramidal* , tal como la describimos anteriormente, y la *estructura piramidal* (con altura h) en la que cuatro puntos forman un cuadrado y el otro punto pertenece a la recta perpendicular al plano por el centro del cuadrado definido por dicho cuadrado y tiene altura h sobre el mismo.

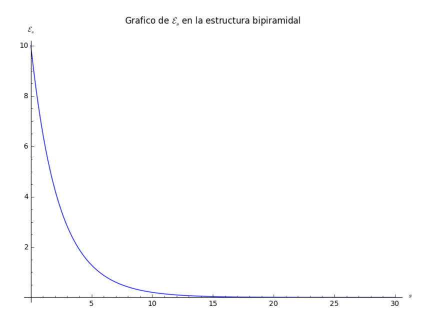
Nuestro trabajo ha consistido en:

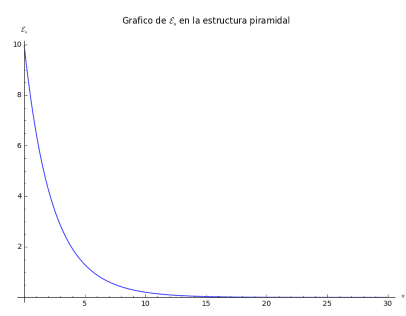
1. Demostrar que para una estructura piramidal, existe una única altura $h_s \in (1, \frac{5}{4})$ que minimiza la s-energía para cada $s \in (0, \infty)$.



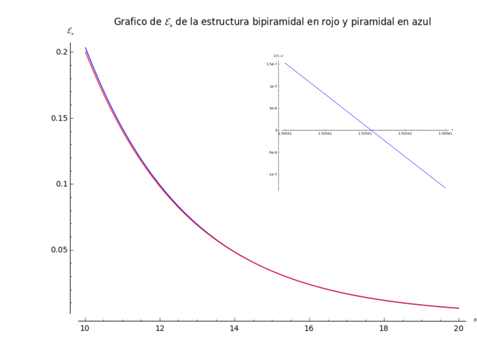


2. Hacer un estudio comparativo de las dos estructuras.





3. Calcular el primer (y presumiblemente único) punto de corte de ambas gráficas, $s \approx 15{,}048077392$.



Relación de la energía logarítmica con la fórmula ABS

Los puntos situados en una esfera que maximizan el producto de sus distancias mutuas se denominan *puntos elípticos de Fekete* , dichos puntos minimizan la energía de Riesz cuando $s \longrightarrow 0$. Aunque el problema de minimizar la s-energía cuando $s \longrightarrow 0$ ya está resuelto para $n = 5$, vamos a proponer una hipótesis sobre esta energía a través de la fórmula de Armentrano-Beltrán-Shub

$$\boxed{\mathcal{E}_0(\omega_n) = \underbrace{\frac{1}{2}\sum_{i=1}^{n} \ln(\mu(f, z_i))}_{\mathcal{M}} + \underbrace{\frac{n}{2} \ln\left(\frac{\prod_{i=1}^{n}\sqrt{1+|z_i|^2}}{||f||}\right)}_{\mathcal{N}} - \frac{n}{4}\ln(n)}$$

Esquemáticamente:

- z_i y x_i se relacionan por la proyección estereográfica.
- f es el polinomio con raíces z_i.
- μ mide la estabilidad de las raíces de f.
- $||f||$ es la norma de Bombieri.

que pone en relación expresiones que pertenecen a ámbitos de las matemáticas muy distintos.

Hipótesis : La disposición de puntos que minimiza $\mathcal{E}_0(\omega_n)$ es la misma que minimiza $\mathcal{M}$ y que maximiza $\mathcal{N}$.

Estructura bipiramidal	$\mathcal{E}_0^{\lozenge}(\omega_5) = 2{,}511$	$\mathcal{M}^{\lozenge} = 4.\widehat{740}$	$\mathcal{N}^{\lozenge} \approx 4{,}472$
Estructura piramidal	$\mathcal{E}_0^{\triangle}(\omega_5) = 2{,}520$	$\mathcal{M}^{\triangle} \approx 4{,}897$	$\mathcal{N}^{\triangle} \approx 4{,}459$

Dicha hipótesis se verifica en el caso de 5 puntos si sólo consideramos las estructuras piramidal y bipiramidal.

Bibliografía

[1] Richard Evan Schwartz. The five-electron case of Thomson's problem. *Experimental Mathematics*, 22(2):157–186, 2013.

[2] L. L. Whyte. Unique arrangements of points on a sphere. *The American Mathematical Monthly*, 59(9):pp. 606–611, 1952.

[3] Peter D Dragnev, DA Legg, and DW Townsend. Discrete logarithmic energy on the sphere. *Pacific journal of mathematics*, 207(2):345–358, 2002.

[4] Diego Armentano, Carlos Beltrán, and Michael Shub. Minimizing the discrete logarithmic energy on the sphere: the role of random polynomials. *Trans. Am. Math. Soc.*, 363(6):2955–2965, 2011.

[5] A.V. Bondarenko, D.P. Hardin, and E.B. Saff. Mesh ratios for best-packing and limits of minimal energy configurations. *Acta Mathematica Hungarica*, 142(1):118–131, 2014.

[6] J.J. Thomson F.R.S. Xxiv. on the structure of the atom: an investigation of the stability and periods of oscillation of a number of corpuscles arranged at equal intervals around the circumference of a circle; with application of the results to the theory of atomic structure. *Philosophical Magazine Series 6*, 7(39):237–265, 1904.