

МЕЖДУНАРОДНЫЙ ИНТЕЛЛЕКТ-КЛУБ «ГЛЮОН»

Х-й Юбилейный Международный Турнир «КОМПЬЮТЕРНАЯ ФИЗИКА–2006»

Международный Интеллект-Клуб «Глюон» в рамках Программы «Дети. Интеллект. Творчество» проводит Х-й Юбилейный Международный Турнир «Компьютерная физика» при участии Московского государственного университета им. М.В. Ломоносова, Института общего среднего образования РАО, Московского педагогического государственного университета, фонда «Династия», при поддержке компаний «Интел» (Московское представительство), Соросской Программы в области точных наук», «Кирилл и Мефодий» и «Физикон».

1. Турнир «Компьютерная Физика» – часть Программы Международного Интеллект-Клуба «ГЛЮОН», проводимой с целью поиска, отбора и поддержки интеллектуально одаренных детей, проявляющих интерес к фундаментальным наукам и информатике. Одной из основных задач Программы является поиск наиболее эффективных форм и средств активизации творческой активности высокомотивированных детей в области математики, физики и информатики.

2. Уникальность и новизна. Все задачи Турнира «Компьютерная Физика» предполагается решать с помощью численного моделирования на компьютере. Для участия в Турнире «Компьютерная Физика» приглашаются команды школьников (5 человек), обладающих знанием физики и навыками работы на IBM PC.

3. Форма проведения. Турнир «Компьютерная Физика» проводится в 2 тура:

– заочный тур: задание высылается после 15 сентября 2005 г.

В первый день Турнира (очной встречи) происходит представление командой решения задачи заочного тура с компьютерной демонстрацией.

– очный тур: длится 1 сутки. Задание выдается после заочного тура. Через сутки происходит представление решения задач очного тура. Необходимо иметь с собой компьютер типа Notebook.

4. Порядок проведения. Турнир «Компьютерная Физика» предполагается проводить в виде интеллектуального соревнования между командами. Каждой команде будет предложено выступить с докладом, представить задание и в течение 20 минут рассказать о результатах решения. Остальные команды в этот момент будут исполнять роль оппонентов и рецензентов. Все выступления оцениваются жюри.

5. Информация о Турнирах «Компьютерная физика», проведенных в г. Зеленоград в 1996 г. и г. Протвино в 1998 г., опубликована в журналах «Компьютерные инструменты в образовании» № 6 (1998), «Квант» № 2 (1999), «Квант» № 5 (2004), № 5 (2005) и на сайте МИК «Глюон» www.informika.ru/text/goscom/gluon/

Место проведения: г. Протвино, Государственный Научный Центр Институт Физики Высоких Энергий.

Время проведения: 29 января – 5 февраля 2006 г.

Регистрация: заявки с указанием школы (лица, гимназии) и состава команды принимаются до 15 декабря 2005 г.

Адрес оргкомитета МИК «Глюон»:

115 522 Москва, Пролетарский проспект, 15/6, к.2

тел.: (095) 517-80-14 факс: (095) 396-82-27 e-mail: gluon@yandex.ru

Оргкомитет

МЕЖДУНАРОДНЫЙ ИНТЕЛЛЕКТ-КЛУБ «ГЛЮОН»

X турнир «КОМПЬЮТЕРНАЯ ФИЗИКА»

Заочное задание

КИНЕТИКА ФАЗОВЫХ ПЕРЕХОДОВ

При нагревании выше некоторой температуры любое вещество переходит в газообразное состояние. Это связано с тем, что кинетическая энергия атомов или молекул вещества оказывается больше потенциальной энергии их взаимодействия, что приводит к разрыву межмолекулярных связей. Известно, что между атомами инертных газов (молекулами, не обладающими дипольным моментом), на больших расстояниях действуют силы притяжения (Ван-дер-Ваальса), а на малых расстояниях они сменяются силами отталкивания. Такое взаимодействие между атомами может быть описано потенциалом Леннарда – Джонса

$$U(r) = -U_0 \left(\left(\frac{r_0}{r} \right)^6 - \left(\frac{r_0}{r} \right)^{12} \right), \quad (1)$$

где характерная величина r_0 определяется атомным размером $\approx 1 \div 4 \text{ \AA}$, а U_0 – определяет глубину потенциальной ямы. Для атомов инертных газов $U_0 \approx 0,005 - 0,02 \text{ эВ}$. Соотношение характерной величины кинетической энергии молекул ($\sim kT$) и глубины потенциальной ямы определяет фазовое состояние вещества.

Предлагается промоделировать фазовый переход между газообразным и конденсированным состоянием в ансамбле атомов, взаимодействующих по закону (1). Рассмотрим 2-мерный газ, состоящий из n атомов массы m , находящийся в объеме $L \times L$, где L – размер. Потенциал взаимодействия между каждой парой атомов i и j ($i, j = 1, \dots, n$) в потенциале (1) записывается в виде

$$U_{ij}(\vec{r}_i, \vec{r}_j) = -U_0 \left(\left(\frac{r_0}{r_{i,j}} \right)^6 - \left(\frac{r_0}{r_{i,j}} \right)^{12} \right),$$

где x_i, y_i и x_j, y_j – декартовы координаты i и j атома, а $r_{i,j} = |\vec{r}_i - \vec{r}_j| = \sqrt{(x_i - x_j)^2 + (y_i - y_j)^2}$.

Динамика атомов может быть определена из решения системы уравнения Ньютона, описывающей движение совокупности

атомов. Если считать, что столкновения со стенками являются абсолютно упругими, то система оказывается замкнутой, и через некоторое время, определяемое начальными условиями, в ней установится состояние термодинамического равновесия. Подвод или отвод энергии к системе, приводящей к нагреванию (охлаждению), можно осуществить, предполагая, что в процессе взаимодействия с одной или несколькими стенками происходит увеличение или уменьшение скорости теплового движения атомов. Варьируя величину изменения абсолютного значения скорости при столкновении со стенкой, можно изменять скорость нагрева (охлаждения) газа. Альтернативный способ ввода энергии заключается в принудительном увеличении кинетической энергии одного или нескольких атомов.

ЗАДАНИЕ

1. «Равновесие»

Исследовать равновесные свойства системы (наличие одной или двух фаз) и соотношения количества атомов в этих фазах, температуру



каждой из подсистем в зависимости от полной начальной энергии системы. Определить время выхода на состояние равновесия. Диапазон кинетических энергий частиц варьировать от нуля до $10U_0$. Скорость отвода (подвода) энергии в систему задать исходя из предположения, что при столкновении со стенкой энергия каждого сталкивающегося атома изменяется на величину $\Delta E = \zeta E$, где E – энергия атома до столкновения, а $\zeta = 0 \div 0,3$.

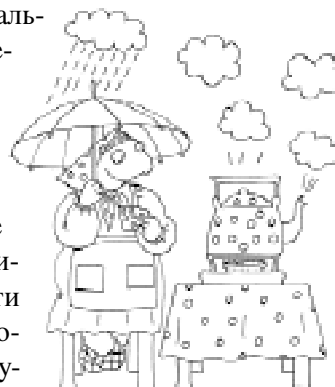
2. «Испарение»



Пусть в начальный момент времени система находится при почти нулевой температуре, то есть в «конденсированном состоянии». Расстояние между соседними атомами равно равновесному, определяемому потенциалом (1), а кинетическая энергия всех атомов много меньше глубины потенциальной ямы. Подводя энергию к системе одним из вышеописанных способов, исследовать процесс фазового перехода: конденсированное состояние – пар. Определить конечное фазовое состояние системы в зависимости от величины подведенной энергии и получить значение температуры каждой из фаз. Полное количество подведенной энергии задавать в диапазоне до $10U_0n$.

3. «Конденсация»

Пусть в начальный момент времени газ имеет температуру $kT \gg U_0$. Рассмотреть динамику перехода в конденсированное состояние в зависимости от скорости отвода тепла. Проанализировать полученные зависимости температуры газообразной и конденсированной фазы от времени.



В качестве параметров использовать $r_0 = 4 \text{ \AA}$, $U_0/k = 200 \text{ K}$ (такие параметры приблизительно соответствуют потенциалу взаимодействия между атомами ксенона), масса атома – 130 атомных единиц.

Считать что $L = 10^{-6} \text{ см}$, число частиц $n = 100$.