

**Материалы заданий заключительного этапа Олимпиады школьников
«Надежда энергетики» по комплексу предметов (физика, информатика,
математика) в 2012/2013 учебном году.**

ЗАДАНИЕ

необходимое введение

Под действием давления твердое тело изменяет свой объем – сжимается. Если давление не чрезмерно велико, такая деформация будет упругой (обратимой): после снятия нагрузки тело вернется в первоначальное состояние. Обратимое сжатие тела под действием давления характеризуется объемным модулем упругости – отношением избыточного давления к относительному изменению объема тела:

$$K = -\frac{\Delta p}{\Delta V / V}, \quad (1)$$

знак «минус» показывает, что с увеличением давления объем тела уменьшается, т.е. при $\Delta p > 0$ имеем $\Delta V < 0$ и $K > 0$. Как следует из формулы (1), объемный модуль упругости измеряется в паскалях [Па].

Объемный модуль упругости – важная характеристика материала. Ее можно измерять различными способами: например, с помощью специальных устройств, называемых пьезометрами, в которых непосредственно определяются входящие в формулу (1) величины, или измеряя скорость звука, распространяющегося в этом теле (так как скорость распространения звука в среде связана с упругими свойствами этой среды).

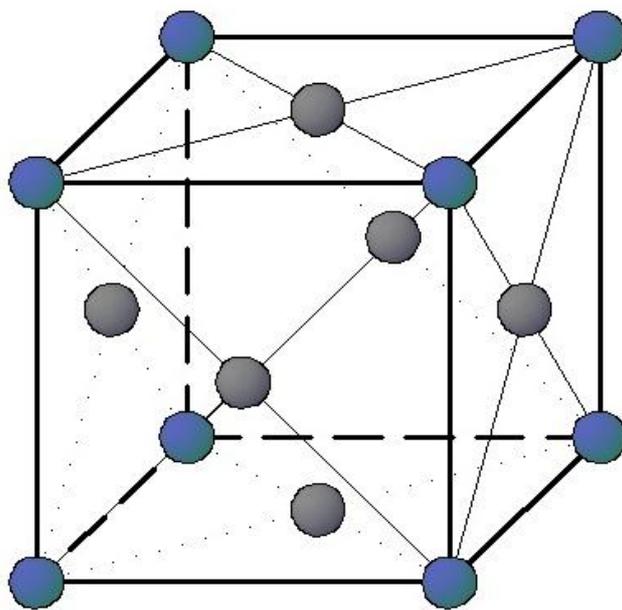
Значение объемного модуля упругости напрямую связано с внутренней структурой и межатомными связями в веществе.

Как мы знаем, все тела состоят из атомов. Между атомами действуют силы притяжения или отталкивания; одно из простейших выражений, описывающих энергию взаимодействия двух атомов, называется потенциалом Леннарда–Джонса:

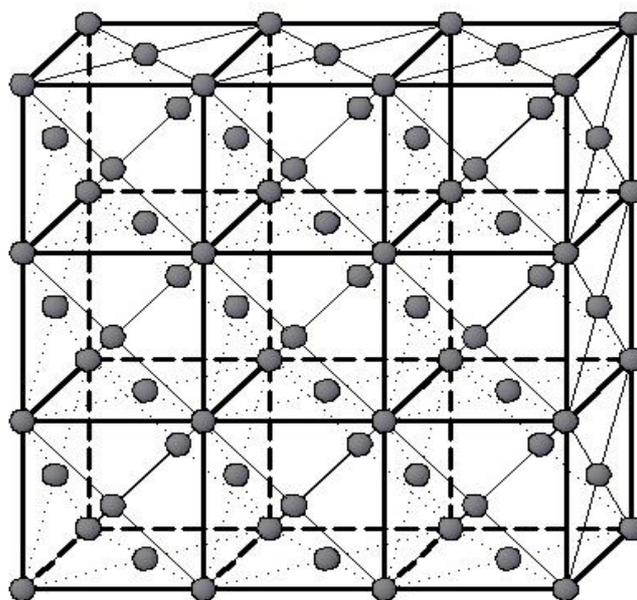
$$U(r) = 4\varepsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r} \right)^6 \right], \quad (2)$$

где r – расстояние между атомами, ε и σ – некоторые константы, подбираемые для каждого вещества из экспериментальных данных (именно это и предстоит сделать Вам); ε имеет размерность энергии [Дж], σ имеет размерность расстояния [м].

Взаимодействие атомов приводит к тому, что при достаточно низких температурах они образуют кристаллическую структуру. Одной из таких структур является гранецентрированная кубическая решетка (ГЦК-решетка): кристалл состоит из ячеек-кубиков, имеющих общие грани, кубик содержит атомы в углах и в центре каждой из сторон.



ГЦК-ячейка. Синие шарики – атомы в углах куба, серые – атомы в центрах граней



ГЦК-решетка. Она состоит из ГЦК-ячеек, имеющих общие грани

От расстояния, на котором располагаются атомы в кристалле, зависит энергия кристалла, складывающаяся из энергии взаимодействия всех атомов между собой. Равновесным состоянием кристалла будет то, в котором его энергия минимальна; этим определяется расстояние между атомами в кристалле (размер стороны одного кубика ГЦК-ячейки), а следовательно и его объем.

При небольшом изменении расстояния между атомами, приводящем к изменению объема ΔV (так что $\Delta V/V \ll 1$), энергия кристалла, отнесенная к его объему, изменяется по закону

$$u = u_0 + \frac{K}{2} \left(\frac{\Delta V}{V} \right)^2, \quad (3)$$

где u_0 – минимальная энергия кристалла на единицу объема, K – объемный модуль упругости.

Таким образом, энергия кристалла, связанная с изменением его объема, определяется с помощью K . В свою очередь, энергия кристалла однозначно определяется параметрами взаимодействия двух атомов (формула (2)) и геометрией кристалла (ГЦК-решетки). Следовательно, если бы мы знали ε , σ и размер элементарной ячейки-кубика ГЦК-решетки в состоянии равновесия (при $u = u_0$), мы могли бы представить u по формуле (3), а, следовательно, и найти K .

Вам предлагается противоположная задача.

начало задания

Для кристалла аргона (имеющего ГЦК-решетку) объемный модуль упругости $K = 1.6 \cdot 10^9$ Па, плотность кристалла $\rho = 1500$ кг/м³, масса атома аргона $M = 6.63 \cdot 10^{-26}$ кг.

Найдите параметры ε и σ в выражении для энергии взаимодействия двух атомов аргона (формула 2), а также размер (длину ребра) одной ячейки-кубика кристаллической ГЦК-решетки.

конец задания

Максимальные оценки за выполнение разделов задания:

Этап решения	Баллы
Моделирование ГЦК-решетки	20
Поиск минимальной энергии кристалла	20
Определение параметра σ	20

Максимальный балл за творческую составляющую: 20.

Примерный ход решения

Представленная на олимпиаде по комплексу предметов (ФМИ) задача допускает различные подходы к решению, различающиеся как глубиной аналитического рассмотрения, так и объемом необходимого компьютерного (вычислительного) эксперимента. При этом все такие подходы позволяют получить адекватное решение. Поэтому не имеет особого смысла выделять какой-либо один из них в качестве эталонного.

Ниже приводится один из возможных путей решения задачи. Решение изложено так, как мог бы рассуждать хорошо понимающий предметы школьник. При этом опущены некоторые технические подробности, восстановить которые участникам, прошедшим отборочный этап, не составит никакого труда. Кроме того, совсем не затронуты вопросы программной реализации алгоритмов суммирования и обхода узлов кристаллической решетки. Сами алгоритмы описаны в тексте решения достаточно подробно. Поэтому представляется, что переписать их на псевдокоде (при необходимости) и на выбранном языке программирования не должно вызывать никаких затруднений.

1. Предварительные замечания.

В задании требуется найти три параметра. Один из них (размер a кубика ГЦК решетки) имеет понятный геометрический смысл. Через него легко выразить объем кристалла и затем найти его, используя заданные массу и плотность. Никакие другие приведенные в условии сведения для поиска размера решетки не требуются.

Теперь обратимся к параметрам потенциала Леннард-Джонса. В условии задачи сказано, что равновесное состояние кристалла соответствует минимуму энергии. Из структуры формулы (2) видно, что параметр ε не влияет на положение точки минимума, поэтому поиск двух оставшихся параметров также можно разделить.

Получается следующий план действий.

- A) Найти размер a одного кубика кристаллической решетки.
- B) Найти параметр σ как точку минимума выражения (2).
- C) Найти параметр ε , используя оставшиеся данные – величину K и формулу (3).

2. Поиск размера кубика ГЦК решетки.

Проведем мысленный эксперимент. Рассмотрим достаточно большой кристалл аргона и вырежем из него кубический фрагмент со стороной 1м. Понятно, что этот фрагмент (большой куб) будет состоять из $\frac{1}{a^3}$ элементарных (маленьких) кубиков ГЦК решетки и иметь объем $V = 1 \text{ м}^3$.

Заметим, что внутри одного маленького кубика находятся части атомов, имеющие суммарный объем, равный объему 4-х целых атомов (это было разъяснено в подсказке 4). Соответственно, внутри малого кубика заключена масса четырех атомов. Тогда весь большой куб будет иметь массу $\frac{4M}{a^3}$, которая, с другой стороны, равна ρV .

Отсюда находим первую искомую величину – длину стороны кубика ГЦК решетки.

$$a = \sqrt[3]{\frac{4M}{\rho V}} = 5.6 \cdot 10^{-10} \text{ м.}$$

3. Поиск параметра σ .

Полная энергия кристалла, минимум которой нас интересует, складывается из энергии взаимодействия всех пар атомов, находящихся в кристалле. Однако ясно (исходя из однородности кристалла), что тот же самый минимум можно получить, рассматривая только взаимодействие одного (любого) атома со всеми остальными. Таким образом, получаем задачу поиска точки минимума выражения

$$\bar{E} = \frac{1}{2} 4\varepsilon \sum_k U(r_k),$$

где r_k – расстояние до очередного (k -го) атома, а $U(r_k)$ – потенциал (2).

Так как величина ε не влияет на положение точки минимума, переходим к рассмотрению величины

$$E = \sum_k U(r_k) = \sum_k \left[\left(\frac{\sigma}{r_k} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r_k} \right)^6 \right].$$

В равновесном состоянии атомы кристалла занимают такие места, чтобы энергия кристалла была минимальна. Однако эти места мы уже знаем. Их взаимное расположение описано в условии (ГЦК решетка), а расстояния легко выражаются через размер элементарного кубика решетки, найденный на предыдущем шаге. Чтобы не "таскать

повсюду" этот размер, сделаем замену переменных $d_k = \frac{r_k}{a}$ (ясно, что новые переменные d_k есть расстояния в кристалле с ребром элементарного кубика, равным единице). Тогда рассматриваемая величина преобразуется в

$$E = E\left(\frac{\sigma}{a}\right) = \left(\frac{\sigma}{a}\right)^{12} \sum_k \left(\frac{1}{d_k}\right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{a}\right)^6 \sum_k \left(\frac{1}{d_k}\right)^6,$$

и теперь видно, что ее единственным аргументом является отношение $\frac{\sigma}{a}$, которое обозначим через s . Как известно, в точке минимума производная равна нулю. Дифференцируя по s , получаем

$$\frac{dE}{ds} = 12s^{11} \sum_k \frac{1}{d_k^{12}} - 6s^5 \sum_k \frac{1}{d_k^6} = 0.$$

Откуда находим выражение для положения точки минимума

$$s_0 = \left(\frac{\sum_k \frac{1}{d_k^6}}{2 \sum_k \frac{1}{d_k^{12}}} \right)^{1/6}.$$

А так как размер ячейки a известен, то будет известен и второй параметр $\sigma = s_0 a$.

Единственный оставшийся момент – вычислить суммы $\sum_k \frac{1}{d_k^{12}}$ и $\sum_k \frac{1}{d_k^6}$. Здесь-то и понадобится мощь вычислительной техники.

Подсчет сумм.

Совершенно естественно считать, что атом, относительно которого мы рассчитываем энергию взаимодействия, расположен в начале координат. При этом межатомные расстояния соответствуют кубикам с единичными ребрами.

Один из возможных способов перебора прочих атомов состоит в применении так называемых векторов трансляции (описанных в подсказке 2)

$$\vec{T} = n_1 \frac{1}{2}(\vec{i} + \vec{j}) + n_2 \frac{1}{2}(\vec{j} + \vec{k}) + n_3 \frac{1}{2}(\vec{i} + \vec{k}).$$

Здесь \vec{i} , \vec{j} и \vec{k} – единичные векторы (орты) по осям OX, OY, OZ (куда направить эти оси – не важно); n_1, n_2, n_3 – целые числа. Перебирая эти числа в порядке возрастания их модулей мы будем получать все более удаленные атомы. Суммирование следует

прекращать, как только очередные слагаемые станут достаточно малыми. Например, когда отношение слагаемого к уже накопленной сумме станет меньше некоторой величины δ . (Для начала можно взять любое значение, например, $\delta = 0.001$, а затем уменьшать его. Если значение суммы практически не изменяется, то можно считать сумму найденной верно.)

Для уменьшения количества вычислений разумно также воспользоваться симметрией. А именно, перебирать только атомы, лежащие в квадранте, ограниченном положительными направлениями осей.

4. Поиск параметра ε .

Будем действовать в соответствии с подсказкой 6. Предположим, что у нас есть кубический объем кристалла (аналогично п. 2), который деформирован равномерно по объему так, что ребро элементарного кубика ГЦК решетки изменило свою длину с a до $a + \Delta a$.

Выше мы уже научились вычислять суммы вида $\sum_k \frac{1}{r_k^c} = \frac{1}{a^c} \sum_k \frac{1}{d_k^c}$. Поэтому мы теперь

можем вычислить значение величины $E_0 = 2 \sum_k \left[\left(\frac{\sigma}{r_k} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r_k} \right)^6 \right]$, соответствующее

равновесному состоянию (это тот самый минимум, который был найден при поиске σ). А

также, можем вычислить величину $E_1 = 2 \sum_k \left[\left(\frac{\sigma}{r_k + \Delta r_k} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r_k + \Delta r_k} \right)^6 \right]$, которая

соответствует деформированному состоянию (т.е. использованию $a + \Delta a$ при переходе к новым расстояниям d_k).

При этом необходимо отметить, что рассматриваемый объем V должен соответствовать количеству слагаемых в суммах E_0 и E_1 (и эти количества должны совпадать). Так как мы обрываем процесс суммирования при достижении очень малых значений энергии взаимодействия, нам необходимо отследить, сколько элементарных кубиков ГЦК решетки было полностью обчислено.

Теперь рассмотрим величину $U = \frac{u}{\varepsilon}$ (см. подсказку 5), для вычисления которой нужна

полная энергия кристалла. Эта энергия равна сумме энергий взаимодействия всех пар атомов, находящихся в кристалле. Предполагая, что мы рассматриваем избранный объем, находящийся во внутренней части кристалла, можно считать, что энергия всех пар одинакова. Тогда полную энергию можно найти, умножив энергию E_k , приходящуюся на один атом, на количество атомов N . Получаем

$$U_0 = \frac{E_0 N}{V} = \frac{2N}{V} \sum_k \left[\left(\frac{\sigma}{r_k} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r_k} \right)^6 \right]$$

Заметим, что величина $\frac{V}{N}$ равна объему, приходящемуся на один атом кристалла.

Поскольку мы уже знаем, что на один атом приходится четверть объема одного кубика ГЦК решетки, то $\frac{V}{N} = \frac{a^3}{4}$. В итоге $U_0 = \frac{E_0 N}{V} = \frac{4E_0}{a^3}$.

Аналогично получаем $U_1 = \frac{E_1 N}{V + \Delta V} = \frac{4E_1}{(a + \Delta a)^3}$.

Осталось подставить все это в формулу (3) (см. условие задачи и подсказки 5, 6):

$$\varepsilon U_1 - \varepsilon U_0 = \frac{K}{2} \left(\frac{\Delta V}{V} \right)^2.$$

Теперь окончательно получаем

$$\varepsilon = \frac{K}{2} \left(\frac{\Delta V}{V} \right)^2 \frac{1}{U_1 - U_0}.$$

Последний параметр найден!

В заключение отметим, что олимпиадная задача интересна прежде всего тем, какие ходы (часто весьма неожиданные) предложит участник для ее решения. Даже описанный выше ход рассуждений может быть реализован с различной долей использования компьютерных вычислений. Более того, задачу можно считать решенной практически верно, если значения искомых параметров не найдены, но в рассуждениях участника присутствуют все этапы ее моделирования и показано верное понимание роли вычислительной техники, необходимой для ее решения. По этим причинам точные значения искомых величин здесь не приводятся. (За исключением размера ячейки решетки, для поиска которого вообще не требуется компьютерное моделирование.)