

# Simple modellers rolle i fysikken

En dag på RUC, hvor eleverne klassevis har mulighed for at arbejde videre med tilstandsformer og faseovergange. På workshoppen får I lov til at lave simuleringer og arbejde på den supercomputer, forskerne arbejder på med tunge beregninger. Gennem workshoppen opnås en forståelse af faseovergange visualiseret på et atomisk plan, og vi kigger på valget af videnskabelig metode og fysikkens tre-enighed, teori-model-eksperiment, med vægt på "model"-aspektet.

I får lov til at arbejde med en eksemplarisk øvelse i molekyledynamiksimuleringer på Roskilde Universitets supercomputer, dette gøres ved at bruge Roskilde Universitets Simuleringspakker ([www.rumd.org](http://www.rumd.org)).

I denne øvelse skal deltagerne i hold af tre personer undersøge en model for molekyler eller atomer.

## 1. del

Her får hvert hold udleveret en brugervejledning, der guider igennem den første simulering. Denne simulering er en opvarmning af et modelsystem som (måske?) smelter.

## 2. del

Her skal holdet på egen hånd ændre på simuleringsprotokollen for at få en bedre forståelse af modellens opførsel. Fx bør det undersøges, hvad varmhastigheden betyder, og hvad der sker ved en nedkøling.

## 3. del

Her holdes resultaterne op imod stoffernes faktiske opførsel såsom eksperimentelle smelte-temperaturer. Deltagerne finder selv information på internettet. Hver hold undersøger en af de følgende modeller, som er foreslået af forskere:

- Lennard-Jones's model af Argon
- Lennard-Jones's model af Guld
- Lennard-Jones's model af vand
- Den atomistiske SPC vandmodel
- Molinero's et-atom vandmodel
- Kob & Andersen's model for en Nikkel-Phosfor blanding
- Lewis-Wahnström's ortho-terphenyl model

### Udarbejdet af:



**Ulf Rørbæk Pedersen**  
Lektor i fysik  
Roskilde Universitet

Bruger computerbaserede modeller til at udvikle og teste teorier for materials egenskaber.

### Målgruppe

Elever på matematiske-/naturvidenskabelige linjer på HTX, STX, EUX og HF med fysik på B-niveau.

Workshoppen tilbydes primært til vores samarbejdsgymnasier i Region Sjælland.

### Forberedelse inden besøget

Eleverne forventes at have arbejdet med undervisningspakken "Tilstandsformer: Flydende eller fast?". Se [www.ruc.dk/undervisningspakke-tilstandsformer](http://www.ruc.dk/undervisningspakke-tilstandsformer)

### Tilmelding

Klassevis til projektkoordinator Dorthe Vedel på [vedel@ruc.dk](mailto:vedel@ruc.dk) - med ønske om foretrukne datoer og ugedage for besøg på RUC. Vi vil forsøge at imødekomme jeres ønsker, såfremt der er kapacitet til det.

### Varighed

1 dag

### Antal elever

30 elever pr. workshop



## Program for dagen

- 9.00** Velkommen og præsentation af øvelsen og modeller
- 9.20** 1. del: Gennemgang af brugervejledning
- 10.20** Kaffepause
- 10.30** 2. del: Simuleringer på egen hånd
- 12.00** Frokostpause og rundvisning (imens køres lang simulering)
- 13.00** RUC som studiested
- 13.30** 3. del: Opsamling af resultater
- 13.50** Samlet fremlæggelse af udvalgte resultater og diskussion
- 14.30** Slut

### Udbytte af øvelsen

Deltagerne stifter bekendtskab med en videnskabelig software-pakke og det at benytte en supercomputer til tunge beregninger. Der opnåes en forståelse af faseovergange visualiseret på et atomistisk plan.

Gennem eksempler belyses samspillet i fysikkens treenighed; teori-model-eksperiment, med vægt på "model-aspektet".

Til diskussion af modellers betydning i fysikken er der nøje udvalgt en række eksempler. Dels eksempler, hvor en model kan bruges til at beskrive forskellige systemer (Lennard-Jones model kan både være for Argon og for guld), og dels eksempler, hvor det samme system beskrives ved forskellige modeller (eksempler på vandmodeller). Og sidst, hvordan en kendt model kan ændres til at beskrive et nyt system: Lennard-Jones modellen kan modificeres til at beskrive en metallisk blanding eller et molekyle.

