

Appunti fluidi

Tommaso Miliani

18-09-25

1 Prototipo di funzioni che descrivono il potenziale di interazione

1.1 Funzioni di Leonard - Jones

Il potenziale di interazione è dato dalla seguente relazione

$$V(r) = \epsilon \left(\left(\frac{r_0}{r} \right)^{12} - 2 \left(\frac{r_0}{r} \right)^6 \right) \quad (1)$$

Il modello funziona molto bene per i gas nobili in quanto sono atomi neutri che non interagiscono con nessun'altro atomo. Anche per lo studio di casi più complessi il modello da seguire è essenzialmente questo entro certe approssimazioni; spesso si riscrive in modo leggermente diversa questa formulazione, ossia nella seguente forma

$$V(r) = 4\epsilon \left(\left(\frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r} \right)^6 \right) \quad (2)$$

Dove si ha che $r_0 = 2^{1/6} \cdot \sigma \approx 1.12\sigma$. Sigma è il valore oltre al quale il potenziale diventa negativo, ossia il punto in cui si azzerà l'energia potenziale; il valore di ϵ per i gas nobili è dato da

$$\epsilon = 10^{-3} \sim 10^{-2} eV$$

mentre il range di σ (sempre per i gas nobili) è

$$\sigma = 0.2 \sim 0.4 nm$$

L'interazione alla sesta è data dai termini di Van Der Walls che dipendono dalle interazioni tra le nubi elettroniche; è possibile ricavare che il contributo attrattivo sia di potenza 6 mentre il contributo repulsivo è di potenza 12 in quanto è computazionalmente comoda. Questo modello puramente meccanico ci permette di descrivere le interazioni atomiche a livello approssimativo poiché non si può usare le leggi della meccanica classica.

2 Studio del minimo dell'energia totale

2.1 Configurazione a minore energia

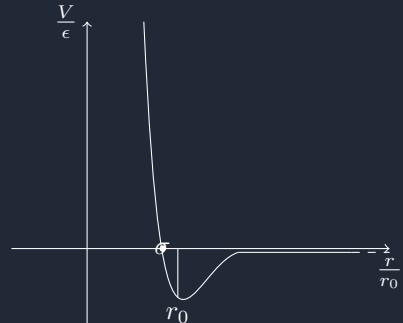
Nello studio di sistemi conservativi si possono imparare un sacco di cose dallo studio della funzione dell'energia potenziale senza andare a derivare; per esempio in uno oscillatore armonico nel punto più basso dell'energia potenziale il sistema sta fermo, se però si dà un po' di energia al sistema, allora il sistema avrà una regione all'interno della quale si può muovere. Dall'espressione dell'energia totale

$$E = \frac{1}{2} m \sum_{i=1}^n |\vec{v}_i|^2 + U(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_n)$$

si può trovare il minimo dell'energia. Il livello minimo più intuitivo si ha quando tutte le particelle sono ferme, tuttavia esisterà anche un altro punto di minimo che è più complicato da ricavare. Riesprimendo il potenziale come

$$U = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n V(|\vec{r}_i - \vec{r}_j|)_{i \neq j}$$

Figura 1: La funzione di potenziale



Trascurando l'effetto della differenza tra due e tre dimensioni e, al posto di utilizzare metodi analitici, cerchiamo di trovare il minimo attraverso metodi fisici e matematici. Lo scopo è allora capire come si dispongono gli atomi nello spazio per poter determinare il minimo dell'interazione tra di essi. Possiamo innanzitutto ricondurci ad un caso molto semplice con soli due atomi $N = 2$. L'energia potenziale è allora minima quando $r = r_0$, che si ottiene centrando il sistema di riferimento nella particella 1 e ponendo la seconda a distanza r_0 .

Se avessi ora tre particelle, avrei tre contributi energetici per il potenziale dato da

$$U = V(r_{1,2}) + V(r_{1,3}) + V(r_{2,3})$$

Se la distanza tra tutte le particelle è esattamente r_0 , allora il mio sistema avrà energia potenziale minima. Da $N > 4$ le cose cambiano radicalmente in quanto, essendo vincolati ad un piano, non c'è nessun modo per far sì che le distanze tra tutte le particelle sia uguale. Devo disporre quindi tutte le particelle in modo tale che stiano secondo uno schema simmetrico e regolare in quanto le particelle da una parte della configurazione esercitano una certa forza mentre quelle che stanno dall'altra esercitano una forza uguale e contraria per cui il contributo netto sulle singole particelle è zero. Con questa disposizione regolare allora avremmo che la funzione presenta sicuramente un punto stazionario anche se, secondo l'analisi, si avranno altri punti stazionari. Dobbiamo fare in modo che questa configurazione regolare si contribuisca con la minore energia possibile e quindi posso ripetere il pattern del triangolo equilatero per poter ottenere la minore energia potenziale.

Si può dimostrare che il reticolo regolare è la configurazione con minore energia potenziale purché il numero di particelle considerate sia molto grande rispetto ad 1 anche se il minimo vero è diverso poiché stiamo ignorando il contributo potenziale con la parete. Possiamo ottenere tutte le posizioni delle particelle in un reticolo come se fosse un sottospazio vettoriale con generatori

$$\begin{aligned} \vec{a} &= r_0 \hat{i} \\ \vec{b} &= \frac{r_0}{2} \left(-\hat{i} + \sqrt{3} \hat{j} \right) \\ \implies \vec{r}_{n,m} &= n\vec{a} + m\vec{b} \quad n, m \in \mathbb{Z} \end{aligned}$$

Si può allora ottenere che per determinare il minimo per ogni particella si considerano le particelle all'interno dell'esagono più vicino poiché abbiamo dimostrato che, in valore assoluto, hanno contributo maggiore e dunque si ottiene che il minimo è proprio:

$$E_{mn} \approx \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \sum_{j \neq i}^6 V(r_0) = -3N\epsilon \quad (3)$$

Il **cristallo** è la disposizione di minima energia possibile in quanto la fisica quantistica fa prediligere le formazioni cristalline come configurazione di energia minore possibile.

2.2 Validità del modello entro un certo ΔE rispetto al minimo

Dobbiamo ora cercare di convincerci che questo modello non funzioni solo per un modello con poche particelle ma anche per configurazioni abbastanza simili:

$$E = E_{min} + \Delta E$$

Penso applicare allora un po' di energia cinetica al nostro modello attraverso il calore per poter ottenere un innalzamento dell'energia totale (utilizzando l'approssimazione per la quale l'energia che applichiamo al sistema è uniformemente condivisa tra tutti gli atomi). Possiamo prendere l' i -esimo atomo con energia pari a

$$\frac{1}{2}m|\vec{v}_i|^2 \approx \frac{\Delta E}{N} \quad \Delta E \ll E_{min} \quad \frac{1}{2}m|\vec{v}_i|^2 \ll \epsilon$$

Se sviluppassi con Taylor al secondo ordine la funzione di potenziale rispetto a r si ottiene che

$$V(r_{i,j}) \approx -\epsilon + \frac{1}{2}V''(r_0)(r_j - r_0)^2 \quad V''(r_0) = 72\frac{\epsilon}{r_0^2}$$

Figura 2: La configurazione a minore energia: il reticolo regolare



Tutte le coppie di atomi si comportano allora come oscillatori armonici e quindi si può approssimare il modello come un network di oscillatori armonici trascurando le molle più lontane e considerando solo quelle dei 6 atomi più vicini. Macroscopicamente si comporta come un solido in quanto per poterlo deformare bisogna applicare forze molto grandi. Se si continua a far crescere l'energia, ad un certo punto dobbiamo aggiungere termini successivi allo sviluppo di Taylor, il quale diventa più grande, e il modello necessita dell'introduzione dei termini successivi. Da questo si ha che più un sistema è caldo (e quindi più calore forniamo ad un sistema) e più questo si dilata.

2.3 Gli effetti di ΔE molto grandi

Aumentando sempre di più ΔE il modello avrà un asintoto verticale e quindi se applico una energia maggiore della differenza tra il minimo e zero allora gli atomi non saranno più legati tra di loro e quindi il sistema inizierà a comportarsi come un gas e ogni particella inizierà a muoversi indipendentemente dalle altre. Come si vede dal grafico, se aumenta l'energia, i valori possibili di energia per r_0 tende ad essere uno solo, ossia nella parte del grafico dove l'energia potenziale è repulsiva.

Il sistema si comporterà come un solido cristallino se e solo se l'energia delle particelle è minore di ϵ e non supera la buca di potenziale; se superassi allora questa buca di potenziale si comporterà come un gas. Ovviamente esiste anche la situazione di mezzo per cui il corpo si comporta come un liquido. A livello macroscopico la differenza tra un liquido ed un solido non è la comprimibilità ma lo scorrimento delle molecole l'una sulle altre.

Figura 3: La buca di potenziale

