

Appunti fluidi

Tommaso Miliani

19-09-25

1 Le proprietà microscopiche dello stato liquido

Considerando un esagono di atomi dal reticolo cristallino e riprendendo allora la definizione che si è data al reticolo, ci poniamo dunque nelle ipotesi di avere ancora un solido. Concentrandosi sull'atomo centrale, possiamo allora chiedersi come si può muovere questo assumendo che gli altri atomi siano in una posizione fissata. Questo diventa il problema del moto di un punto materiale in due dimensioni: posso esprimere l'energia potenziale del sistema intorno all'atomo considerato come

$$U(x, y) = \sum_{i=1}^n V(|\vec{r} - \vec{r}_i|)$$

In questo problema si ha una funzione di due variabili che dipende parametricamente anche dalle altre dodici variabili (che posso allora fissare come voglio dato che sono parametri e non variabili). L'energia meccanica sarà allora data dal contributo anche cinetico

$$E = \frac{1}{2}m(v_x^2 + v_y^2) + U(x, y)$$

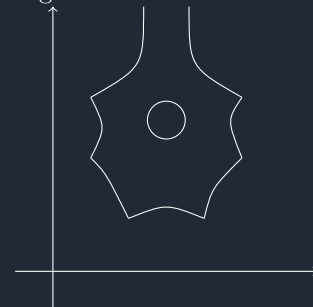
Quale è la regione di piano accessibile al moto del nostro punto centrale? La regione accessibile dall'atomo centrale è quella in cui l'energia potenziale sia minore o uguale all'energia meccanica totale. L'energia cinetica in questo modello semplificato può essere applicata solamente all'atomo centrale: questo moto è descritto allora da questa regione di movimento specifica. Che succede allora se gli altri sei atomi sono fermi ed in un reticolo a bassa energia? La particella non si muove molto poiché è ingabbiata dagli altri atomi anche nel caso in cui si fornisca una energia molto grande di 10ϵ .

Se si considera la situazione più realistica secondo la quale tutti gli atomi ricevono energia cinetica: in questo caso gli atomi tenderanno tutti ad agitarsi e dunque il raggio r_0 di interazione tenderà a crescere e il moto della particella risulterà maggiore rispetto alla situazione ideale anche con solo $\frac{1}{2}\epsilon$. La particella ha quindi molto più margine di movimento in quanto gli atomi in media sono più distanti tra di loro e ciascuno si muove di più rispetto agli altri. Tra tutte le fluttuazioni possibili se due degli atomi del reticolo intorno si muovono in direzioni opposte, allora il margine di movimento della particella ha di punto in bianco una regione di movimento maggiore e si crea un canale di uscita; anche se la situazione più probabile è quella che la particella centrale si scambia di posizione con una del reticolo intorno. Se si aspetta abbastanza ogni particella potrebbe percorrere tutto il reticolo (e questa è proprio la situazione che accade nel liquido!) senza dispendio di energia anche se, in un dato istante, si volesse osservare cosa accade, ogni particella apparirà circondata da altre 6 particelle.

Figura 1:



Figura 2: Situazione fisica



1.1 Riassunto delle proprietà delle fasi e ipotesi di validità

Per ogni fase noi consideriamo una energia minima in cui si ha il reticolo perfetto di un materiale e aggiungiamo un certo ΔE :

Solido	$\frac{\Delta E}{N} \ll \epsilon$
Liquido	$\frac{\Delta E}{N} \approx \epsilon$
Gas	$\frac{\Delta E}{N} \gtrsim 3\epsilon$

Tutte queste ipotesi valgono solo quando la distribuzione degli atomi è omogenea e la distribuzione di energia applicata al sistema sia uniforme a tutti gli atomi. Gli stati della materia dunque sono omogenei in quanto sono interazioni a corto raggio mentre interazioni a lungo raggio come la forza di gravità non è omogenea. Questo modello vale solo ed esclusivamente nel caso in cui gli atomi sono approssimabili a piccole sferette anche se a livello macroscopico potremmo anche assumere gli atomi come puntiformi in quanto in fisica, gli eventi che avvengono ad una data scala sono influenzati solo dalle scale immediatamente vicine ed ignorano (salvo varie eccezioni) ciò che accade alle scale più lontane. Le dimensioni contano in quanto è possibile ricavare le leggi per livelli superiori partendo dalle leggi del piccolo però dalle leggi macroscopiche non si può ricavare le leggi microscopiche.

1.2 Determinare gli effetti probabilistici nel sistema

Considerando la forza applicata ad ogni oggetto

$$\vec{F}_i = m\vec{a}_i \quad i = 1, \dots, N \quad N \gg 1$$

Per esempio in un bicchiere d'acqua ci sono $8.4 \cdot 10^{24}$ atomi all'interno del bicchiere e quindi questo problema è perfettamente determinato attraverso le leggi che abbiamo definito. L'unico problema è che abbiamo 10^{25} punti materiali nel nostro sistema e computazionalmente è molto scomodo. Supponiamo che per ogni punto materiale utilizziamo 1Byte di informazioni, ossia $10^{13}TB$ solo per tenere in memoria le posizioni dei punti materiali. Le prime persone che hanno provato a calcolare le posizioni attraverso un calcolatore è stato negli anni 50 con un set di dati di $N = 32$ e $N = 64$ solo nel moto unidimensionale per cercare di studiare la dinamica molecolare.

Con un supercomputer si potrebbe ora simulare sistemi dell'ordine di 10^6 , se il nostro sistema stesse in un cubo, allora segue

$$N \propto V = L^3 \implies L \propto N^{1/3}$$

Allora il numero di atomi che sta sul bordo è proporzionale a L^2 e quindi $N_{bordo} \propto L^2 \propto N^{2/3}$ e quindi

$$\frac{N_{bordo}}{N} \propto \frac{N^{2/3}}{N} = N^{-1/3}$$

Più il sistema è piccolo e più gli effetti del brodo contano, anche con soli 10^6 atomi, avrò un errore di circa 10^{-2} nello studio della dinamica molecolare. Se noi facciamo la dinamica molecolare in un piano con punti materiali allora dovremmo rivedere le nostre relazioni utilizzando un software per poter simulare sistemi molecolari.