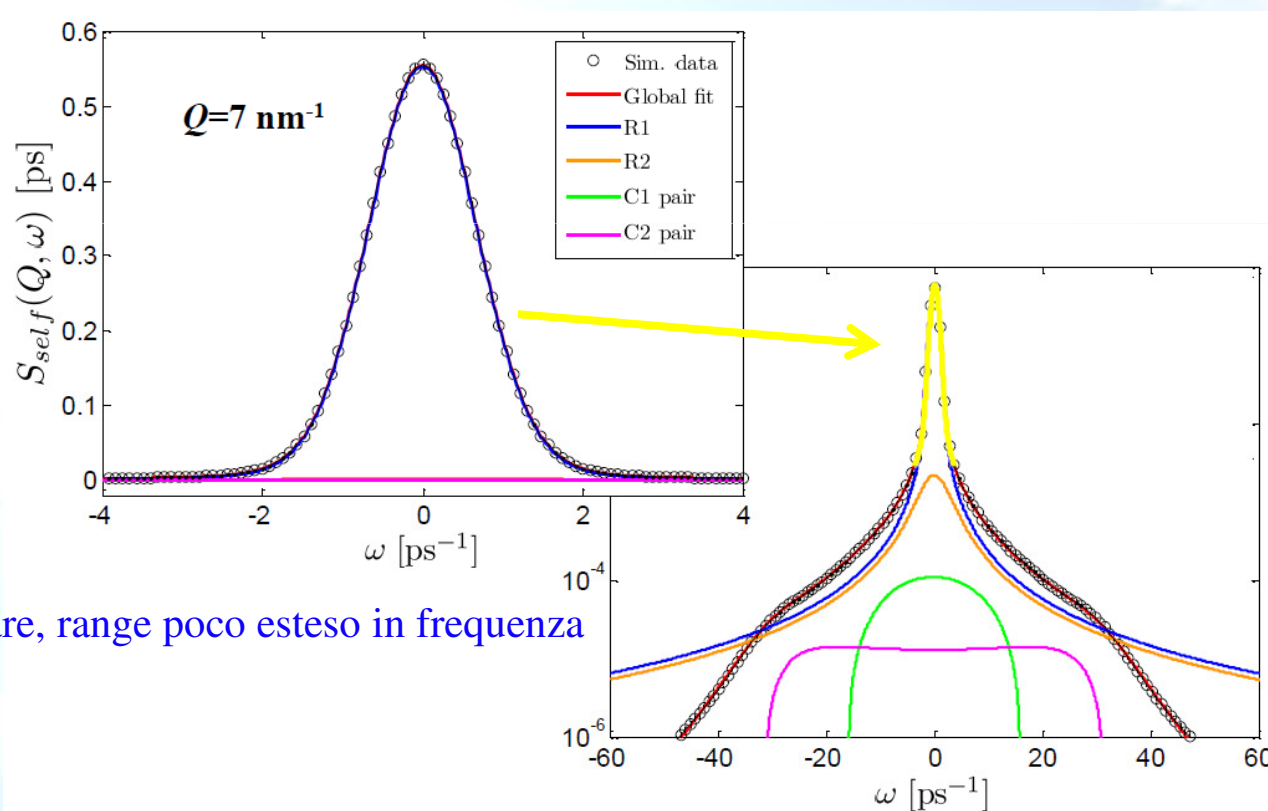


## Ancora sul fattore di struttura dinamico *self*

La  $S_{self}$  è la TF di una funzione di correlazione temporale, dunque è esprimibile come una somma di Lorentziane generalizzate ( $I$  e  $z$  in generale *complessi*)

$$S_{self}(Q, \omega) = \frac{1}{\pi} \operatorname{Re} \left[ \sum_{j=1}^{\infty} \frac{I_j(Q)}{i\omega - z_j(Q)} \right]$$

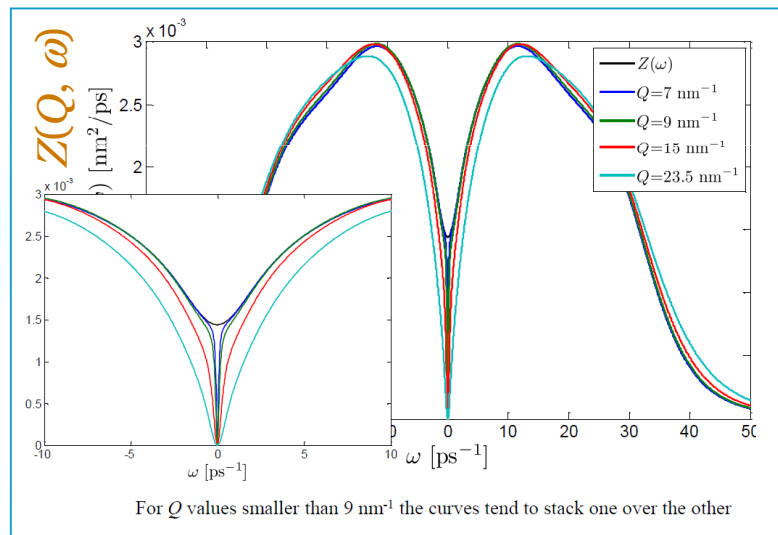


# Densità degli stati vibrazionali di un liquido

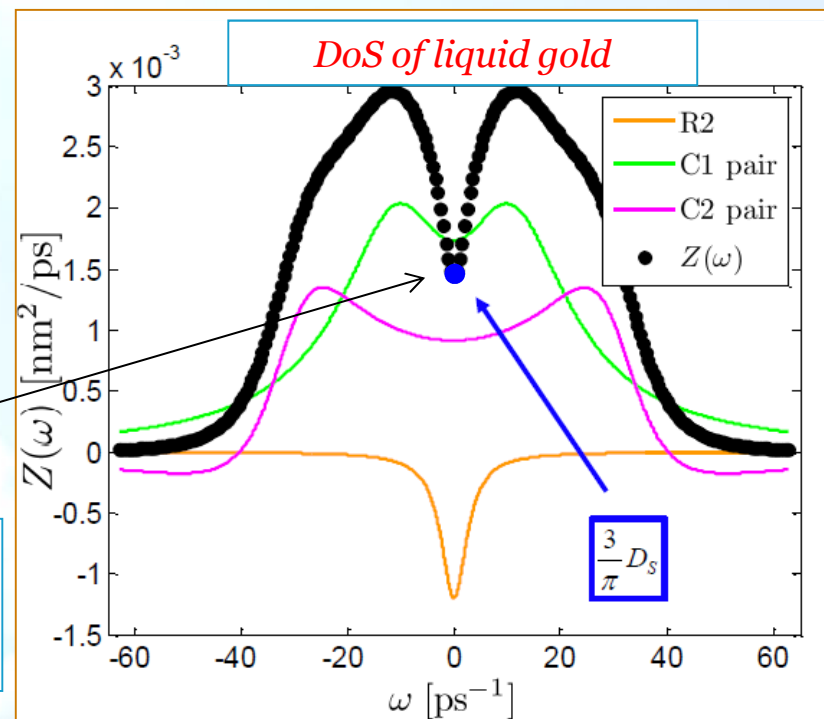
$$Z(\omega) \equiv \frac{1}{2\pi} \int dt e^{-i\omega t} \langle \vec{v}(0) \cdot \vec{v}(t) \rangle = \lim_{Q \rightarrow 0} \left( 3 \frac{\omega^2}{Q^2} S_{self}(Q, \omega) \right) \quad Z(\omega) = \text{Densità degli stati vibrazionali (DoS)}$$

$Z(Q, \omega)$

Grazie allo sviluppo in Lorentziane è molto più semplice determinare il limite per  $Q$  tendente a zero (dai parametri di fit) e quindi diventa possibile la determinazione della DoS di un liquido



$$D_s \cong 1.4 \times 10^{-3} \text{ nm}^2 / \text{ps}$$



$$Z(0) = \lim_{\omega \rightarrow 0} \left[ \lim_{Q \rightarrow 0} \left( 3 \frac{\omega^2}{Q^2} S_{self}(Q, \omega) \right) \right]$$