

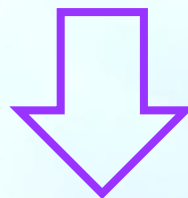
Densità degli stati e D

$$Z(\omega) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} dt e^{-i\omega t} Z(t)$$

$$Z(\omega = 0) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} dt Z(t) = \frac{1}{\pi} \int_0^{+\infty} dt Z(t)$$

Ma vale la relazione di Green-Kubo vista prima:

$$D = \frac{1}{3} \left[\int_0^{+\infty} dt \langle \mathbf{v}_\alpha(0) \cdot \mathbf{v}_\alpha(t) \rangle \right] = \frac{1}{3} \int_0^{+\infty} dt Z(t)$$

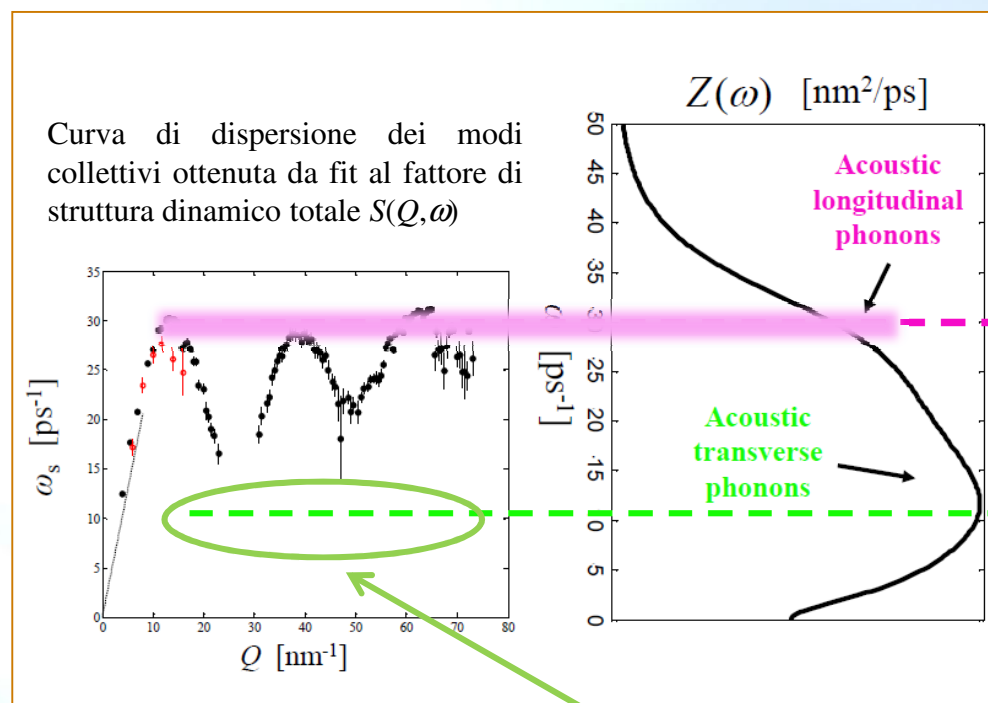


$$Z(\omega = 0) = \frac{3D}{\pi}$$

Grazie a questa relazione, la determinazione della DoS del liquido permette per esempio di ottenere il coefficiente di diffusione. In molti casi il coefficiente di diffusione non è noto (per es. per alcuni metalli che sono liquidi ad altissime temperature) e questo rappresenta un modo molto efficace di ottenerne una stima accurata.

Ancora sul fattore di struttura dinamico *self* e la DoS

Se è possibile accedere alla DoS (attraverso i fit alla S_{self}), è anche possibile avere informazioni sulla dinamica *collettiva* (stati vibrazionali, i.e. stati pseudo-fononici di un liquido)



DoS ottenuta da fit del fattore di struttura dinamico *self*, $S_{self}(Q, \omega)$

Le misure del fattore di struttura dinamico totale NON rivelano la presenza di modi trasversi. Scopriamo tuttavia che essi sono presenti grazie all'esistenza di un primo picco nella DoS.

Quindi attraverso lo studio combinato della dinamica *totale* e di quella *self* si ottiene un quadro molto più completo circa le eccitazioni acustiche presenti in liquidi semplici.

Riassumendo

Lo studio della dinamica *self* è dunque altrettanto importante quanto quello, storicamente molto più approfondito, della dinamica *totale*.

Nel ventesimo secolo sono diventate di grandissimo ausilio le simulazioni di dinamica molecolare al computer (diventate via via più accurate e affidabili, grazie all'enormemente aumentata potenza di calcolo rispetto al passato e la possibilità di simulare sistemi con un numero via via crescente di particelle). Ma le simulazioni si basano sull'assunzione di *modelli per il potenziale intermolecolare...*

Prima di poter essere analizzate per ricavare informazioni sulla fisica del sistema, richiedono di essere preliminarmente **VERIFICATE attraverso il confronto con dati sperimentali.**

Volendo eseguire misure alla nanoscala e al picosecondo (scale ove si osservano eccitazioni in liquidi semplici) della dinamica *totale*, vi sono almeno due tecniche utili: neutroni e raggi X ad alta risoluzione.

Ma esiste una sola tecnica che permette di eseguire misure che riguardino esclusivamente la dinamica *self*: lo **scattering di neutroni.**