

Integrazione dal gas ideale - LJ

Calcoliamo l' energia libera in eccesso per il modello LJ con $r_{cut} = 2.5\sigma$ a $T = 2$, utilizzando l' equazione di stato precedentemente trovata.

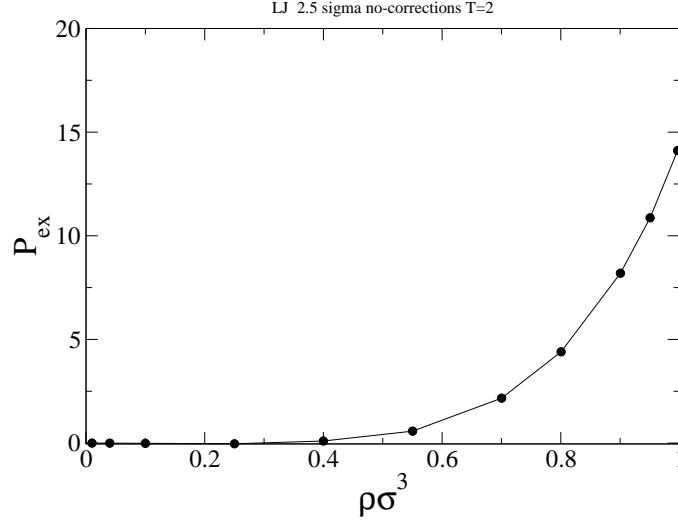


Figure 1: Pressione in eccesso (senza correzioni SW) in funzione di ρ .

I dati mostrati qui in figura riflettono solo il contributo del viriale. A causa del taglio del potenziale a 2.5σ e' presente anche un contributo aggiuntivo alla pressione che come discusso nelle note delle lezioni e'

$$P^{SW} = \frac{8}{3}\pi\epsilon\rho^2\sigma^3 \left[\left(\frac{\sigma}{r_c}\right)^9 - \left(\frac{\sigma}{r_c}\right)^3 \right]$$

Nel caso di $r_c = 2.5\sigma$

$$P^{SW} = -0.53588\rho^2$$

Per calcolare l' energia libera occorre integrare P^{ex}/ρ^2 da 0 a ρ . Quindi il contributo all' energia libera che viene dallo SW e'

$$f^{SW}(\rho) = -0.53588\rho$$

La figura successiva mostra P^{ex}/ρ^2 , il suo integrale numerico (βf^{ex} , dove $\beta = 0.5$) e la aggiunta della correzione *SW*.

Si trova cosi, per esempio, che a $\rho = 0.55$, $\beta f \approx -0.20$.

Considerando che $P^{ex}(\rho = 0.55) = P^{vir} + P^{sw} = 0.57 - 0.53588\rho^2 = 0.41$, e che dunque

$$\frac{\beta P^{ex}(\rho = 0.55)}{\rho} = \frac{0.41}{0.55 * 2} = 0.37$$

troviamo

$$\beta\mu^{ex} = \beta f + \beta P/\rho = -0.2 + 0.37 = 0.17$$

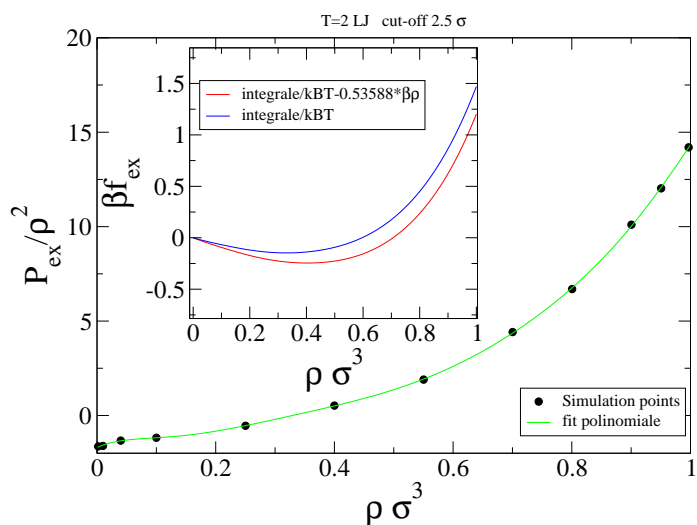


Figure 2: Pressione in eccesso (senza correzioni SW) divisa ρ^2 .