

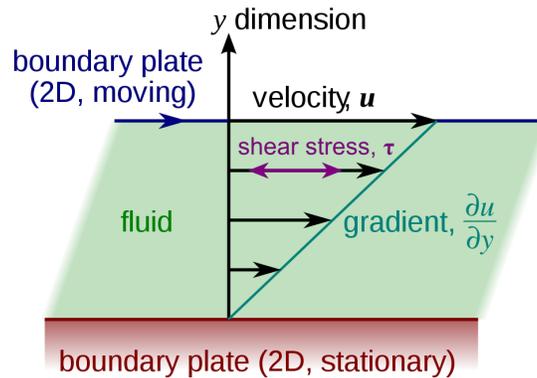
Navier-Stokes

Liquidi 2006

May 16, 2013

1 Una breve introduzione sulla viscosita'.

Supponiamo di applicare ad uno strato di fluido di superficie S una forza F in direzione x . Questa forza generera' un campo di velocita' nel liquido come mostrato in figura



Per collegare la forza applicata al gradiente di velocita' generato si definisce un coefficiente di viscosita' η secondo la relazione

$$\frac{F_x}{S} = \eta \frac{\partial v_x}{\partial y}$$

Il rapporto $\frac{F_x}{S}$ prende il nome di sforzo e formalmente e' un tensore (direzione della forza, direzione della normale S e si associa il simbolo σ_{xy}). Se la viscosita' fosse nulla, la lastra superiore scivolerebbe sul fluido e non ci sarebbe alcun gradiente di velocita'.

Se prendiamo un volumetto infinitesimo, la quantita' di moto del volumetto variara' se le forze applicate ai suoi estremi non sono uguali, cioe' se esiste un gradiente della forze o, in questo caso, un gradiente dello sforzo.

Generalizziamo la definizione per direzioni arbitrarie. Un tensore di rango 2 puo' essere sempre scritto come somma di un tensore simmetrico a traccia nulla, un tensore antisim-

metrico ed un tensore proporzionale a \mathbf{I} .

$$T^{\alpha,\beta} = \frac{1}{2}(T^{\alpha,\beta} + T^{\beta,\alpha} - \frac{2}{3} \sum_{\gamma} T^{\gamma,\gamma} \delta_{\alpha,\beta}) + \frac{1}{2}(T^{\alpha,\beta} - T^{\beta,\alpha}) + \frac{1}{3} \sum_{\gamma} T^{\gamma,\gamma} \delta_{\alpha,\beta}$$

Nel caso che ci interessa, possiamo definire un tensore \mathbf{D} delle derivate spaziali della velocita' opportunamente simmetrizzato per godere delle proprieta' di simmetria $D_{\alpha,\beta} = D_{\beta,\alpha}$ come

$$\mathbf{D} = \begin{pmatrix} \frac{\partial v_x}{\partial x} + \frac{\partial v_x}{\partial x} & \frac{\partial v_x}{\partial y} + \frac{\partial v_y}{\partial x} & \frac{\partial v_x}{\partial z} + \frac{\partial v_z}{\partial x} \\ \frac{\partial v_y}{\partial x} + \frac{\partial v_x}{\partial y} & \frac{\partial v_y}{\partial y} + \frac{\partial v_y}{\partial y} & \frac{\partial v_y}{\partial z} + \frac{\partial v_z}{\partial y} \\ \frac{\partial v_z}{\partial x} + \frac{\partial v_x}{\partial z} & \frac{\partial v_z}{\partial y} + \frac{\partial v_y}{\partial z} & \frac{\partial v_z}{\partial z} + \frac{\partial v_z}{\partial z} \end{pmatrix}$$

e separarlo nelle sue componenti simmetrico e a traccia nulla e componente proporzionale a \mathbf{I} come

$$\mathbf{D}_{sym} = \mathbf{D} - \frac{2}{3}(\vec{\nabla} \cdot \mathbf{v})\mathbf{I}$$

e

$$\mathbf{D}_I = \frac{2}{3}(\vec{\nabla} \cdot \mathbf{v})\mathbf{I}$$

Un fluido si definisce newtoniano quando la sua viscosita' non varia con la velocita'. La relazione matematica che lega il tensore degli sforzi alle componenti del tensore della velocita' di deformazione e' lineare. Poiche' il tensore degli sforzi puo' dipendere solo linearmente dal gradiente della velocita' e poiche' la parte antisimmetrica deve essere nulla per garantire la conservazione del momento angolare, \mathbf{D}_{sym} e \mathbf{D}_I sono le uniche due componenti rilevanti. Si definiscono due coefficienti η e ζ che quantificano la linearita' del tensore simmetrico a traccia nulla e del tensore proporzionale ad \mathbf{I} . Si definisce cosi' a scrivere una equazione costitutiva nella quale il tensore degli sforzi appare come

$$\sigma(\mathbf{r}, t) = P(\mathbf{r}, t)\mathbf{I} - \zeta(\vec{\nabla} \cdot \mathbf{v})\mathbf{I} - \eta\mathbf{D}_{sym} = \left[P(\mathbf{r}, t) + \left(\frac{2}{3}\eta - \zeta \right) \right] (\vec{\nabla} \cdot \mathbf{v}) \mathbf{I} - \eta\mathbf{D}$$

1.1 Divergenza di \mathbf{D}

Calcoliamo la divergenza di \mathbf{D} , cioe' $\nabla \cdot \mathbf{D}$. Occorre quindi fare il prodotto matriciale tra

$$\nabla = \begin{pmatrix} \frac{\partial}{\partial x} & \frac{\partial}{\partial y} & \frac{\partial}{\partial z} \end{pmatrix}$$

e \mathbf{D} . Il prodotto da'

$$\mathbf{D} = \begin{pmatrix} \frac{\partial^2 v_x}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 v_x}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 v_y}{\partial x \partial y} + \frac{\partial^2 v_x}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 v_z}{\partial x \partial z} + \frac{\partial^2 v_z}{\partial z^2} \\ \frac{\partial^2 v_y}{\partial x \partial y} + \frac{\partial^2 v_y}{\partial x \partial y} + \frac{\partial^2 v_y}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 v_y}{\partial y^2} \frac{\partial^2 v_z}{\partial y \partial z} + \frac{\partial^2 v_y}{\partial y \partial z} \\ \frac{\partial^2 v_x}{\partial z^2} + \frac{\partial^2 v_x}{\partial x \partial z} + \frac{\partial^2 v_y}{\partial y \partial z} + \frac{\partial^2 v_z}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 v_z}{\partial z^2} + \frac{\partial^2 v_z}{\partial z^2} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) v_x + \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial v_x}{\partial x} + \frac{\partial v_y}{\partial y} + \frac{\partial v_z}{\partial z} \right) \\ \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) v_x + \frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{\partial v_x}{\partial x} + \frac{\partial v_y}{\partial y} + \frac{\partial v_z}{\partial z} \right) \\ \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) v_x + \frac{\partial}{\partial z} \left(\frac{\partial v_x}{\partial x} + \frac{\partial v_y}{\partial y} + \frac{\partial v_z}{\partial z} \right) \end{pmatrix} =$$

$$\nabla \cdot \mathbf{D} = \nabla^2 \mathbf{v} + \nabla(\nabla \cdot \mathbf{v})$$

L'altro tensore che entra in gioco e' un tensore proporzionale al tensore identita' \mathbf{I} ($I_{\alpha,\beta} = \delta_{\alpha,\beta}$) che ha come elementi diagonali $\nabla \cdot \mathbf{v}$. Per questo tensore

$$\nabla \cdot (\nabla \cdot \mathbf{v})\mathbf{I} = \nabla(\nabla \cdot \mathbf{v})$$

Quindi, come discusso sopra

$$\nabla \cdot \sigma = \nabla P - \eta \nabla^2 \mathbf{v} - \left(\frac{1}{3}\eta + \zeta\right) \nabla(\nabla \cdot \mathbf{v})$$

2 Equazioni di conservazione

Lavoriamo adesso nel limite idrodinamico e cerchiamo di scrivere le equazioni di conservazione per un sistema in cui la variazione dall' equilibrio e' piccola. Dunque sono piccole le velocita' locali (in media nulle), le fluttuazioni di densita' e le fluttuazioni di energia.

2.1 Densita'

La conservazione della densita' si scrive

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho(\mathbf{r}, t) = -\vec{\nabla} \cdot \mathbf{J}(\mathbf{r}, t)$$

dove $\mathbf{J} = \rho_0 \mathbf{v}$. Nota che il momento per unita' di volume \mathbf{p} e' legato a \mathbf{J} . Infatti, espandendo intorno ai valori medi (ma trascurando i termini quadratici nelle variazioni), possiamo scrivere

$$\mathbf{p}(\mathbf{r}, t) = m[\rho_0 + \delta\rho(\mathbf{r}, t)]\mathbf{u}(\mathbf{r}, t) = m\rho_0 \mathbf{v}(\mathbf{r}, t)$$

$$\mathbf{p}(\mathbf{r}, t) = m\mathbf{J}$$

2.2 Momento

La legge di conservazione della densita' di momento lineare

$$\frac{\partial}{\partial t} \mathbf{p}(\mathbf{r}, t) = -\vec{\nabla} \cdot \sigma(\mathbf{r}, t)$$

dove $\sigma(\mathbf{r}, t)$ e' il tensore degli sforzi

$$\sigma(\mathbf{r}, t) = \left[P(\mathbf{r}, t) + \left(\frac{2}{3}\eta - \zeta\right) \right] \nabla \cdot \mathbf{v} \mathbf{I} - \eta \mathbf{D}$$

Come discusso sopra

$$\nabla \cdot \sigma = \nabla P - \eta \nabla^2 \mathbf{v} - \left(\frac{1}{3}\eta + \zeta\right) \nabla(\nabla \cdot \mathbf{v})$$

Sostituendo anche qui $\mathbf{p}(\mathbf{r}, t) = m\mathbf{J}(\mathbf{r}, t)$

$$m \frac{\partial \mathbf{J}}{\partial t} + \nabla P - \eta \nabla^2 \mathbf{v} - \left(\frac{1}{3}\eta + \zeta\right) \nabla(\nabla \cdot \mathbf{v}) = 0$$

Sostituendo le deviazioni in ρ and T nelle equazioni di conservazione possiamo espandere la pressione in funzione di ρ e T trovando

$$\delta P(\mathbf{r}, t) = \left(\frac{\partial P}{\partial \rho}\right)_T \delta \rho(\mathbf{r}, t) + \left(\frac{\partial P}{\partial T}\right)_\rho \delta T(\mathbf{r}, t)$$

$$m \frac{\partial \mathbf{J}}{\partial t} + \left(\frac{\partial P}{\partial \rho}\right)_T \nabla \delta \rho(\mathbf{r}, t) + \left(\frac{\partial P}{\partial T}\right)_\rho \nabla \delta T(\mathbf{r}, t) - \frac{\eta}{\rho_o} \nabla^2 \mathbf{J} - \frac{1}{\rho_o} \left(\frac{1}{3}\eta + \zeta\right) \nabla(\nabla \cdot \mathbf{J}) = 0$$

2.3 Energia

La conservazione della densita' di energia si scrive

$$\frac{\partial e(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = -\vec{\nabla} \cdot \mathbf{J}^e(\mathbf{r}, t)$$

dove il flusso \mathbf{J}^e e' definito come

$$\mathbf{J}^e(\mathbf{r}, t) = h\mathbf{v}(\mathbf{r}, t) - \lambda \nabla T(\mathbf{r}, t)$$

e dove h e' il valore medio di equilibrio dell' entalpia.

Sostituendo

$$\frac{\partial e(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = -\nabla \cdot (h\mathbf{v}(\mathbf{r}, t) - \lambda \nabla T(\mathbf{r}, t)) \approx -h_o \nabla \cdot \mathbf{v}(\mathbf{r}, t) + \lambda \nabla^2 T(\mathbf{r}, t)$$

e dalla conservazione della densita' precedentemente discussa

$$\frac{\partial \rho(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = -\nabla \cdot \rho \mathbf{v}(\mathbf{r}, t) \approx -\rho_o \nabla \cdot \mathbf{v}(\mathbf{r}, t)$$

$$\frac{\partial e(\mathbf{r}, t)}{\partial t} \approx \frac{h_o}{\rho_o} \frac{\partial \rho(\mathbf{r}, t)}{\partial t} + \lambda \nabla^2 T(\mathbf{r}, t)$$

o

$$\frac{\partial [e(\mathbf{r}, t) - \frac{h_o}{\rho_o} \rho(\mathbf{r}, t)]}{\partial t} \approx \lambda \nabla^2 T(\mathbf{r}, t)$$

Per capire il significato della quantità $e(\mathbf{r}, t) - \frac{h_0}{\rho_0} \rho(\mathbf{r}, t)$ notiamo che la conservazione dell' energia richiede

$$dQ = dU + PdV$$

che in termini di densità di energia si può scrivere

$$dQ = d(eV) + PdV = Vde + edV + PdV = V[de + (e + P)\frac{dV}{V}] = V[de - (e + P)\frac{d\rho}{\rho}]$$

da cui possiamo definire una densità di calore $dq = dQ/V$ come

$$dq \equiv T \frac{dS}{V} = de - (e + P) \frac{d\rho}{\rho} \approx d(e - \frac{h_0}{\rho_0} \rho)$$

Quindi la variazione

$$\frac{\partial [e(\mathbf{r}, t) - \frac{h_0}{\rho_0} \rho(\mathbf{r}, t)]}{\partial t} = \frac{\partial q}{\partial t} = \lambda \nabla^2 T(\mathbf{r}, t)$$

indica proprio la variazione del calore. Se ancora una volta scegliamo di lavorare come variabili indipendenti con ρ e T

$$\begin{aligned} \delta q(\mathbf{r}, t) &= \left(\frac{\partial q}{\partial \rho} \right)_T \delta \rho(\mathbf{r}, t) + \left(\frac{\partial q}{\partial T} \right)_\rho \delta T(\mathbf{r}, t) \\ &= \frac{T}{V} \left(\frac{\partial S}{\partial \rho} \right)_T \delta \rho(\mathbf{r}, t) + \frac{T}{V} \left(\frac{\partial S}{\partial T} \right)_\rho \delta T(\mathbf{r}, t) \end{aligned}$$

Possiamo ora far uso delle seguenti identità termodinamiche

$$\rho c_V = \rho \frac{1}{N} \frac{dQ}{dT} \Big|_\rho = \frac{T}{V} \frac{dS}{dT} \Big|_\rho$$

dove c_V è il calore specifico a volume costante per particella. Facendo uso della relazione di Maxwell

$$\frac{\partial S}{\partial V} \Big|_T = \frac{\partial P}{\partial T} \Big|_V$$

e cambiando da $d\rho = -\frac{N}{V^2} dV$

$$\frac{T}{V} \left(\frac{\partial S}{\partial \rho} \right)_T = -\frac{V^2 T}{N V} \left(\frac{\partial S}{\partial V} \right)_T = -\frac{T}{\rho} \left(\frac{\partial P}{\partial T} \right)_V$$

La conservazione dell' energia viene quindi riscritta come

$$\frac{\partial q}{\partial t} - \lambda \nabla^2 T(\mathbf{r}, t) = 0$$

$$\frac{\partial \left[\left(\frac{\partial q}{\partial \rho} \right)_T \delta \rho(\mathbf{r}, t) + \left(\frac{\partial q}{\partial T} \right)_\rho \delta T(\mathbf{r}, t) \right]}{\partial t} - \lambda \nabla^2 \delta T(\mathbf{r}, t) = 0$$

$$\left(\frac{\partial q}{\partial \rho} \right)_T \frac{\partial \delta \rho(\mathbf{r}, t)}{\partial t} + \left(\frac{\partial q}{\partial T} \right)_\rho \frac{\partial \delta T(\mathbf{r}, t)}{\partial t} - \lambda \nabla^2 \delta T(\mathbf{r}, t) = 0$$

$$-\frac{T}{\rho} \left(\frac{\partial P}{\partial T} \right)_\rho \frac{\partial \delta \rho(\mathbf{r}, t)}{\partial t} + \rho c_V \frac{\partial \delta T(\mathbf{r}, t)}{\partial t} - \lambda \nabla^2 \delta T(\mathbf{r}, t) = 0$$

e dividendo per ρc_V

$$-\frac{T}{c_V \rho^2} \left(\frac{\partial P}{\partial T} \right)_\rho \frac{\partial \delta \rho(\mathbf{r}, t)}{\partial t} + \left(\frac{\partial}{\partial t} - \frac{\lambda}{\rho c_V} \nabla^2 \right) \delta T(\mathbf{r}, t) = 0$$

2.4 Riassumendo...

Le leggi di conservazione, per liquidi Newtoniani e per piccole variazioni dall' equilibrio si scrivono come

- Conservazione della massa

$$\frac{\partial \delta \rho(\mathbf{r}, t)}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{J}(\mathbf{r}, t) = 0$$

- Conservazione del momento

$$m \frac{\partial \mathbf{J}}{\partial t} - \frac{\eta}{\rho_o} \nabla^2 \mathbf{J} - \frac{1}{\rho_o} \left(\frac{1}{3} \eta + \zeta \right) \nabla (\nabla \cdot \mathbf{J}) + \left(\frac{\partial P}{\partial \rho} \right)_T \nabla \delta \rho(\mathbf{r}, t) + \left(\frac{\partial P}{\partial T} \right)_\rho \nabla \delta T(\mathbf{r}, t) = 0$$

- Conservazione dell' energia

$$-\frac{T}{c_V \rho^2} \left(\frac{\partial P}{\partial T} \right)_\rho \frac{\partial \delta \rho(\mathbf{r}, t)}{\partial t} + \left(\frac{\partial}{\partial t} - \frac{\lambda}{\rho c_V} \nabla^2 \right) \delta T(\mathbf{r}, t) = 0$$

Ora possiamo risolvere le cinque leggi di conservazione trasformando secondo Fourier nello spazio e secondo Laplace nel tempo. Iniziamo con Laplace. La regola per la trasformazione della derivata temporale e' $LT[df/dt] = -f(0) - izLT[f]$, che si dimostra integrando per parti ($\tilde{f} = \int_0^\infty e^{izt} f(t) dt$)

- Conservazione della massa

$$-iz \tilde{\delta \rho}(\mathbf{r}, z) + \nabla \cdot \tilde{\mathbf{J}}(\mathbf{r}, z) = \rho(\mathbf{r}, t = 0)$$

- Conservazione del momento

$$m - iz\tilde{\mathbf{J}} - \frac{\eta}{\rho_o} \nabla^2 \tilde{\mathbf{J}} - \frac{1}{\rho_o} \left(\frac{1}{3} \eta + \zeta \right) \nabla (\nabla \cdot \tilde{\mathbf{J}}) + \left(\frac{\partial P}{\partial \rho} \right)_T \nabla \delta \tilde{\rho}(\mathbf{r}, z) + \left(\frac{\partial P}{\partial T} \right)_\rho \nabla \delta \tilde{T}(\mathbf{r}, z) = m \mathbf{J}(\mathbf{r}, t = 0)$$

- Conservazione dell' energia (sostituendo anche l'equazione per la conservazione della massa in $\partial \delta \rho / \partial t$)

$$-\frac{T}{c_V \rho^2} \left(\frac{\partial P}{\partial T} \right)_\rho [-\nabla \cdot \tilde{\mathbf{J}}(\mathbf{r}, z)] + \left(-iz - \frac{\lambda}{\rho c_V} \nabla^2 \right) \delta \tilde{T}(\mathbf{r}, z) = \delta T(\mathbf{r}, t = 0)$$

Ora trasformiamo secondo Fourier $f_k = \int e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} f(\mathbf{r}) d\mathbf{r}$. Le regole da seguire sono: $\nabla \cdot \mathbf{F} \rightarrow i\mathbf{k} \cdot \mathbf{F}_k$. Per il gradiente invece $\nabla f = i\mathbf{k} \tilde{f}$. Per il gradiente della divergenza $\nabla \nabla \cdot \mathbf{F}$ si trova $i\mathbf{k}(\mathbf{k} \cdot \mathbf{F}_k)$. Il laplaciano invece ∇^2 genera un $-k^2$ ($|\mathbf{k}|^2$).

- Conservazione della massa

$$-iz\delta\tilde{\rho}_k(z) + i\mathbf{k} \cdot \tilde{\mathbf{J}}_k(z) = \rho_k(t = 0)$$

- Conservazione del momento (dividendo tutto per m)

$$\begin{aligned} -iz\tilde{\mathbf{J}}_k - \frac{\eta}{m\rho_o} (-k^2)\tilde{\mathbf{J}}_k - \frac{1}{m\rho_o} \left(\frac{1}{3} \eta + \zeta \right) i\mathbf{k} i\mathbf{k} \cdot \tilde{\mathbf{J}}_k(z) + \frac{1}{m} \left(\frac{\partial P}{\partial \rho} \right)_T i\mathbf{k} \delta\tilde{\rho}_k(z) + \frac{1}{m} \left(\frac{\partial P}{\partial T} \right)_\rho i\mathbf{k} \delta\tilde{T}_k(z) \\ = \mathbf{J}_k(t = 0) \end{aligned}$$

- Conservazione dell' energia

$$-\frac{T}{c_V \rho^2} \left(\frac{\partial P}{\partial T} \right)_\rho [-i\mathbf{k} \cdot \tilde{\mathbf{J}}_k(z)] + \left(-iz + \frac{\lambda}{\rho c_V} k^2 \right) \delta\tilde{T}_k(z) = \delta T_k(t = 0)$$

La equazione dei momenti puo' essere separato in 3 equazioni, una per ogni direzione. Scegliendo come asse z la direzione di \mathbf{k} , (cioe' $\mathbf{k} = (0, 0, k)$) l' equazione diviene per la componente z

$$-iz\tilde{J}_k^z + \frac{\eta k^2}{m\rho_o} \tilde{J}_k^z + \frac{1}{m\rho_o} \left(\frac{1}{3} \eta + \zeta \right) k^2 \tilde{J}_k^z(z) + \frac{ik}{m} \left(\frac{\partial P}{\partial \rho} \right)_T \delta\tilde{\rho}_k(z) + \frac{ik}{m} \left(\frac{\partial P}{\partial T} \right)_\rho \delta\tilde{T}_k(z) = J_k^z(t = 0)$$

mentre per le componenti x e y di \mathbf{J} ($\alpha = x, y$)

$$-iz\tilde{J}_k^\alpha + \frac{\eta k^2}{m\rho_o} \tilde{J}_k^\alpha = J_k^\alpha(t = 0)$$

Le cinque leggi di conservazione possono essere scritte in forma matriciale come

$$\begin{pmatrix} -iz & 0 & ik & 0 & 0 \\ 0 & -iz + \frac{\lambda}{\rho c_V} k^2 & ik \frac{T}{c_V \rho^2} \left(\frac{\partial P}{\partial T} \right)_\rho & 0 & 0 \\ \frac{ik}{m} \left(\frac{\partial P}{\partial \rho} \right)_T & \frac{ik}{m} \left(\frac{\partial P}{\partial T} \right)_\rho & -iz + \frac{(\frac{4}{3}\eta + \zeta) k^2}{m \rho_o} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -iz + \frac{\eta k^2}{m \rho_o} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -iz + \frac{\eta k^2}{m \rho_o} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \tilde{\rho}_{\mathbf{k}}(z) \\ \tilde{T}_{\mathbf{k}}(z) \\ \tilde{J}_{\mathbf{k}}^z(z) \\ \tilde{J}_{\mathbf{k}}^x(z) \\ \tilde{J}_{\mathbf{k}}^y(z) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \rho_{\mathbf{k}}(t=0) \\ T_{\mathbf{k}}(t=0) \\ J_{\mathbf{k}}^z(t=0) \\ J_{\mathbf{k}}^x(t=0) \\ J_{\mathbf{k}}^y(t=0) \end{pmatrix}$$

Definendo la viscosita' longitudinale cinematica $b \equiv \frac{(\frac{4}{3}\eta + \zeta)}{m \rho_o}$ e la viscosita' di taglio cinematica $\nu = \frac{\eta}{m \rho_o}$, $a \equiv \frac{\lambda}{\rho c_V}$, e considerando che la compressibilita' isoterma $k_T = -\frac{1}{V} \frac{\partial V}{\partial P}_T$

$$\frac{ik}{m} \left(\frac{\partial P}{\partial \rho} \right)_T = -\frac{ik}{m \rho} V \left(\frac{\partial P}{\partial V} \right)_T = \frac{ik}{m} \frac{1}{\rho k_T}$$

Per trovare il significato termodinamico degli altri termini dobbiamo utilizzare la *chain rule*, una proprieta' delle funzioni differenziabili. Se $f(x, y, z) = 0$, allora

$$\left(\frac{\partial x}{\partial y} \right)_z \left(\frac{\partial y}{\partial z} \right)_x \left(\frac{\partial z}{\partial x} \right)_y = -1$$

e

$$\left(\frac{\partial x}{\partial y} \right)_z = \frac{1}{\left(\frac{\partial y}{\partial x} \right)_z}$$

che ci consente di scrivere

$$\left(\frac{\partial x}{\partial y} \right)_z = - \left(\frac{\partial z}{\partial y} \right)_x \left(\frac{\partial x}{\partial z} \right)_y$$

e nel nostro caso

$$\left(\frac{\partial P}{\partial T} \right)_\rho = - \left(\frac{\partial \rho}{\partial T} \right)_P \left(\frac{\partial P}{\partial \rho} \right)_T$$

Ricordandosi che il coefficiente di espansione termica $\alpha_P = \frac{1}{V} \left(\frac{\partial V}{\partial T} \right)_P$ e che

$$\left(\frac{\partial \rho}{\partial T} \right)_P = \frac{\rho}{V} \left(\frac{\partial V}{\partial T} \right)_P = \rho \alpha_P$$

abbiamo

$$\left(\frac{\partial P}{\partial T} \right)_\rho = \rho \alpha_P \left(\frac{\partial P}{\partial \rho} \right)_T = \frac{\alpha_P}{k_T}$$

Infine, ricordando che $\frac{C_P}{C_V} = \frac{k_T}{k_S} \equiv \gamma$ e che

$$c_s^2 = \frac{\gamma}{m \rho k_T}$$

possiamo riscrivere il nostro determinante come

$$\begin{pmatrix} -iz & 0 & ik & 0 & 0 \\ 0 & -iz + ak^2 & ik \frac{T}{c_V \rho^2} \frac{\alpha_P}{k_T} & 0 & 0 \\ \frac{ik}{m} \frac{1}{\rho k_T} & \frac{ik}{m} \frac{\alpha_P}{k_T} & -iz + bk^2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -iz + \nu k^2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -iz + \nu k^2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \tilde{\rho}_{\mathbf{k}}(z) \\ \tilde{T}_{\mathbf{k}}(z) \\ \tilde{J}_{\mathbf{k}}^z(z) \\ \tilde{J}_{\mathbf{k}}^x(z) \\ \tilde{J}_{\mathbf{k}}^y(z) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \rho_{\mathbf{k}}(t=0) \\ T_{\mathbf{k}}(t=0) \\ J_{\mathbf{k}}^z(t=0) \\ J_{\mathbf{k}}^x(t=0) \\ J_{\mathbf{k}}^y(t=0) \end{pmatrix}$$

Le soluzioni per z sono date dagli zeri del determinante. Visto che il determinante è costituito da due blocchi indipendenti abbiamo due coppie di soluzioni, una per densità, temperatura e corrente longitudinale ed una per le correnti trasverse.

2.5 Fluttuazioni di densità, temperatura e corrente longitudinale

Cerchiamo le soluzioni per il primo gruppo. Il determinante si può scrivere come

$$-iz \left[(-iz + ak^2)(-iz + bk^2) + k^2 \frac{T}{c_V \rho^2} \frac{\alpha_P}{k_T} \frac{1}{m} \frac{\alpha_P}{k_T} \right] - ik \left[\frac{ik}{m} \frac{1}{\rho k_T} (-iz + ak^2) \right] = 0$$

Il termine $\frac{T}{c_V \rho^2} \frac{1}{m} \frac{\alpha_P^2}{k_T^2}$ facendo uso della relazione termodinamica (dimostrata per es. a pag 26 del libro Stanley, Introduction to critical phenomena)

$$\alpha_P^2 = \frac{k_T}{TV} (c_P - c_V) N$$

(dove c_P e c_V sono per particella) può essere riscritto come

$$\frac{T}{c_V \rho^2} \frac{1}{m} \frac{\alpha_P^2}{k_T^2} = \frac{T}{c_V \rho^2} \frac{1}{m} \frac{(c_P - c_V) N}{VT k_T} = \frac{1}{\rho} \frac{1}{m} \frac{\gamma - 1}{k_T} = \frac{\gamma - 1}{\gamma} c_s^2$$

Il termine $ik \frac{ik}{m} \frac{1}{\rho k_T}$ può essere riscritto come

$$ik \frac{ik}{m} \frac{1}{\rho k_T} = -\frac{k^2}{m} \frac{1}{\rho k_T} = -k^2 \frac{c_s^2}{\gamma}$$

per cui le soluzioni di z sono date dall'equazione

$$-iz \left[(-iz + ak^2)(-iz + bk^2) + k^2 c_s^2 \right] + ak^4 \frac{c_s^2}{\gamma} = 0$$

Svolgendo i prodotti

$$iz \left[-z^2 - iz(a+b)k^2 + abk^4 + k^2 c_s^2 \right] - ak^4 \frac{c_s^2}{\gamma} = 0$$

$$iz^3 - z^2(a+b)k^2 - iz(abk^4 + k^2c_s^2) + ak^4\frac{c_s^2}{\gamma} = 0$$

Nel limite di $k \rightarrow 0$, possiamo trascurare abk^4 rispetto a $k^2c_s^2$. Le soluzioni possibili per z sono date da un moto puramente diffusivo $z_0 = -iD_Tk^2$ e da due soluzioni propaganti smorzate $z_{\pm} = \pm c_s k - i\Gamma k^2$. Mostriamo che effettivamente queste sono le soluzioni. Sostituendo $z_0^3 = iD_T^3k^6$, $z_0^2 = -D_Tk^4$

$$-D_T^3k^6 - \cancel{D_T^2k^6(a+b)} - D_Tk^4c_s^2 + ak^4\frac{c_s^2}{\gamma}$$

e trascurando i termini in k^6 , z_0 e' soluzione con

$$D_T = \frac{a}{\gamma} = \frac{\lambda}{\gamma\rho c_V}$$

Verifichiamo ora le soluzioni propaganti $z_{\pm} = \pm c_s k - i\Gamma k^2$, $z_{\pm}^2 = c_s^2 k^2 - \Gamma^2 k^4 \mp 2i\Gamma c_s k^3$. Se trascuriamo i termini superiori od uguali a k^5 ,

$$z_{\pm}^3 = \pm c_s^3 k^3 - 3ic_s^2 k^4 \Gamma$$

e

$$\begin{aligned} \pm ic_s^3 k^3 + 3c_s^2 k^4 \Gamma - c_s^2 k^4 (a+b) \mp ic_s k^3 c_s^2 - \Gamma k^4 c_s^2 + ak^4 \frac{c_s^2}{\gamma} &= 3c_s^2 k^4 \Gamma - c_s^2 k^4 (a+b) - \Gamma k^4 c_s^2 + ak^4 \frac{c_s^2}{\gamma} = \\ &= c_s^2 k^4 \left[3\Gamma - (a+b) - \Gamma + \frac{a}{\gamma} \right] \end{aligned}$$

che si annulla se

$$\Gamma = \frac{1}{2} \left[a + b - \frac{a}{\gamma} \right]$$

2.6 Evolution of the density

Per trovare l'evoluzione di $\tilde{\rho}_{\mathbf{k}}(z)$ occorre risolvere il sistema.

$$\begin{pmatrix} -iz & 0 & ik \\ 0 & -iz + ak^2 & ik \frac{T}{c_V \rho^2} \frac{\alpha_P}{k_T} \\ \frac{ik}{m} \frac{1}{\rho k_T} & \frac{ik}{m} \frac{\alpha_P}{k_T} & -iz + bk^2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \tilde{\rho}_{\mathbf{k}}(z) \\ \tilde{T}_{\mathbf{k}}(z) \\ \tilde{J}_{\mathbf{k}}^z(z) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \rho_{\mathbf{k}}(t=0) \\ T_{\mathbf{k}}(t=0) \\ J_{\mathbf{k}}^z(t=0) \end{pmatrix}$$

La soluzione formale e' (indicando M^{min} il determinante della matrice minore)

$$\begin{pmatrix} \tilde{\rho}_{\mathbf{k}}(z) \\ \tilde{T}_{\mathbf{k}}(z) \\ \tilde{J}_{\mathbf{k}}^z(z) \end{pmatrix} = \frac{1}{\text{Det}[M]} \begin{pmatrix} M_{11}^{min} & M_{12}^{min} & M_{13}^{min} \\ M_{21}^{min} & M_{22}^{min} & M_{23}^{min} \\ M_{31}^{min} & M_{32}^{min} & M_{33}^{min} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \rho_{\mathbf{k}}(t=0) \\ T_{\mathbf{k}}(t=0) \\ J_{\mathbf{k}}^z(t=0) \end{pmatrix}$$

dove $\text{Det}[M]$ e' il determinante della matrice.

$$\tilde{\rho}_{\mathbf{k}}(z) = \frac{1}{\text{Det}[M]} [M_{11}^{min} \rho_{\mathbf{k}}(t=0) + M_{12}^{min} T_{\mathbf{k}}(t=0) + M_{13}^{min} J_{\mathbf{k}}^z(t=0)]$$

Possiamo sempre scegliere la direzione di z (e dunque di $J_{\mathbf{k}}^z$) perpendicolare a $\mathbf{v}(0)$, annullando cosi $J_{\mathbf{k}}^z(t=0)$. Inoltre, se il nostro scopo e' calcolare l' autocorrelazione della densita', possiamo anche trascurare $T_{\mathbf{k}}(t=0)$ poiche' $\langle T_{\mathbf{k}}(t=0) \rho_{-\mathbf{k}}(t=0) \rangle = 0$. Quindi il problema si semplifica in

$$\tilde{\rho}_{\mathbf{k}}(z) = \frac{M_{11}^{min} \rho_{\mathbf{k}}(t=0)}{\text{Det}[M]}$$

$$M_{11}^{min} = \left[(-iz + ak^2)(-iz + bk^2) + k^2 \frac{T}{c_V \rho^2} \frac{\alpha_P}{k_T} \frac{1}{m} \frac{\alpha_P}{k_T} \right] =$$

e ancora una volta usando le relazioni

$$\begin{aligned} T \frac{\alpha_P^2}{k_T \rho} &= c_P - c_V & m \rho k_T &= \frac{\gamma}{c_s^2} \\ &= \left[(-iz + ak^2)(-iz + bk^2) + k^2 \frac{\gamma - 1}{\gamma} c_s^2 \right] \end{aligned}$$

e

$$\text{Det}[M] = i(z - z_0)(z - z_+)(z - z_-)$$

(la i e' necessaria per garantire che la potenza piu' alta sia iz^3). Siccome M_{11}^{min} e' un polinomio di grado 2 in z possiamo scrivere

$$\frac{\left[(-iz + ak^2)(-iz + bk^2) + k^2 \frac{\gamma - 1}{\gamma} c_s^2 \right]}{i(z - z_0)(z - z_+)(z - z_-)} = \frac{A}{z - z_0} + \frac{B}{z - z_+} + \frac{C}{z - z_-}$$

Per simmetria, essendo le due soluzioni simmetriche nella direzione di propagazione, $B = C$. L'uguaglianza dunque si semplifica in

$$A(z - z_+)(z - z_-) + B(z - z_0)(z - z_+ + z - z_+) = -i \left[-z^2 - iz(a + b)k^2 + abk^4 + k^2 \frac{\gamma - 1}{\gamma} c_s^2 \right]$$

Confrontando i termini in z^2 ed in z^0 (i piu' semplici) (e trascurando abk^4) troviamo

$$A + 2B = i$$

$$Az_+z_- + Bz_0(z_+ + z_-) = -ik^2 \frac{\gamma - 1}{\gamma} c_s^2$$

Dalle soluzioni esplicite di z_0, z_{\pm} abbiamo

$$z_+z_- = -\Gamma^2 k^4 - c_s^2 k^2 \approx -c_s^2 k^2$$

$$z_+ + z_- = -2i\Gamma k^2$$

$$z_0(z_+ + z_-) = -2\Gamma D k^4$$

Poiche' quest'ultimo contributo e' $O(h^4)$, possiamo semplificare la condizione per il termine noto come

$$-c_s^2 k^2 A = -ik^2 \frac{\gamma - 1}{\gamma} c_s^2 \rightarrow A = i \frac{\gamma - 1}{\gamma}$$

e dalla altra condizione

$$B = \frac{1}{2}(i - A) = \frac{i}{2} \left(1 - \frac{\gamma - 1}{\gamma}\right) = \frac{i}{2\gamma}$$

Dunque troviamo infine

$$\tilde{\rho}_{\mathbf{k}}(z) = \rho_{\mathbf{k}}(t=0) \left(\frac{\gamma - 1}{\gamma} \frac{1}{-iz + iz_0} + \frac{1}{2\gamma} \frac{1}{-iz + iz_+} + \frac{1}{2\gamma} \frac{1}{-iz + iz_-} \right)$$

I tre termini possono essere trasformati indietro nel tempo ottenendo

$$\rho_{\mathbf{k}}(t) = \rho_{\mathbf{k}}(t=0) \left(\frac{\gamma - 1}{\gamma} e^{-D_T k^2 t} + \frac{1}{\gamma} e^{-\Gamma k^2 t} \cos(c_s k t) \right)$$

da cui si puo' immediatamente calcolare la funzione di correlazione della densita'

$$F(k, t) = S(k) \left(\frac{\gamma - 1}{\gamma} e^{-D_T k^2 t} + \frac{1}{\gamma} e^{-\Gamma k^2 t} \cos(c_s k t) \right)$$

la cui trasformata di Fourier in frequenza ci da'

$$S(k, \omega) = \frac{S(k)}{2\pi} \left[\frac{\gamma - 1}{\gamma} \frac{2D_T k^2}{\omega^2 + (D_T k^2)^2} + \frac{1}{2\gamma} \left(\frac{2\Gamma k^2}{(\omega + c_s k)^2 + (\Gamma k^2)^2} + \frac{2\Gamma k^2}{(\omega - c_s k)^2 + (\Gamma k^2)^2} \right) \right]$$

Integrando in ω , ogni Lorenziana $[2A/(\omega^2 + A^2)]$ in frequenza si ha

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{2A}{\omega^2 + A^2} d\omega = 2 \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dx}{x^2 + 1} = 2\pi$$

il che mostra che l'intensita' integrata sotto il picco Rayleigh e' pari a $\frac{\gamma-1}{\gamma} S(k)$, mentre quella sotto ogni picco di Brillouin e' $\frac{1}{2\gamma} S(k)$. Il rapporto tra le aree integrate (Landau Placzek ratio) consente dunque di stimare γ .

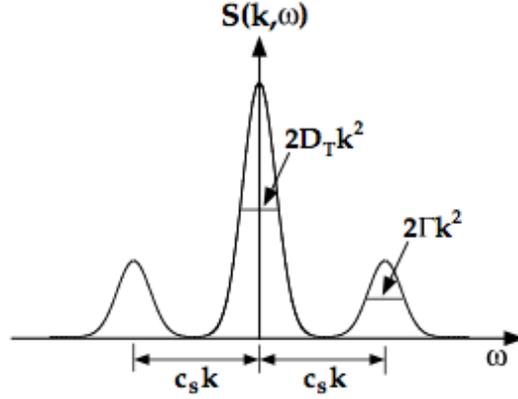


FIG. 8.2. Dynamic structure factor in the hydrodynamic limit. D_T is the thermal diffusivity, Γ is the sound-attenuation coefficient and c_s is the adiabatic speed of sound.

inserire discussione figura

E' anche possibile calcolare ora la funzione di correlazione della corrente longitudinale, utilizzando per esempio le relazioni

$$C_l(k, t) = -\frac{d^2}{dt^2} F(k, t)$$

o in trasformata di Laplace

$$\tilde{C}_l(k, z) = z^2 \tilde{F}(k, z) - izS(k)$$

2.7 Evoluzione delle correnti trasverse

Per il blocco bidimensionale che descrive le correnti trasverse,

$$\begin{pmatrix} -iz + \nu k^2 & 0 \\ 0 & -iz + \nu k^2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \tilde{J}_k^x(z) \\ \tilde{J}_k^y(z) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} J_k^x(t=0) \\ J_k^y(t=0) \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} \tilde{J}_k^x(z) \\ \tilde{J}_k^y(z) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -iz + \nu k^2 & 0 \\ 0 & -iz + \nu k^2 \end{pmatrix}^{-1} \begin{pmatrix} J_k^x(t=0) \\ J_k^y(t=0) \end{pmatrix}$$

che mostra che le due correnti sono indipendenti, ma uguali, e che soddisfano l'equazione

$$\tilde{J}_k^x(z) = \frac{1}{-iz + \nu k^2} J_k^x(t=0)$$

La soluzione nel tempo e'

$$J_k^x(t) = J_k^x(t=0) e^{-\nu k^2 t}$$

La funzione di correlazione della corrente trasversa e'

$$C_t(k, t) = C_t(k, 0)e^{-\nu k^2 t} = k^2 \frac{k_B T}{m} e^{-\nu k^2 t} = \omega_0^2 e^{-\nu k^2 t}$$

dove abbiamo fatto uso del valore noto di $C_t(k, 0)$ In trasformata di Laplace

$$\tilde{C}_t(k, z) = \frac{\omega_0^2}{-iz + \nu k^2}$$

e in Fourier

$$C_t(k, \omega) = \frac{\omega_0^2}{2\pi} \frac{2\nu k^2}{\omega^2 + (\nu k^2)^2}$$

2.8 Significato microscopico coefficienti di trasporto

Per piccoli k possiamo approssimare $C_t(k, \omega)$ come

$$C_t(k, \omega) = \frac{\omega_0^2}{2\pi} \frac{2\nu k^2}{\omega^2} = \frac{k^2 k_B T}{2m\pi} \frac{2\eta k^2}{m\rho\omega^2}$$

ed η

$$\eta = \lim_{k \rightarrow 0} \pi m^2 \beta \rho \frac{\omega^2}{k^4} C_t(k, \omega) \quad (1)$$

Ora troviamo una espressione microscopica per $\omega^2 C_t(k, \omega)$.

Consideriamo l'integrale (nota le derivate temporali di $\mathbf{J}_{\mathbf{k}}$)

$$\int_0^\infty \frac{k^2}{N} \langle \mathbf{J}_{\mathbf{k}}^x(t) \mathbf{J}_{-\mathbf{k}}^x(0) \rangle e^{i\omega t} dt = - \int_0^\infty \frac{d^2}{dt^2} \frac{k^2}{N} \langle \mathbf{J}_{\mathbf{k}}^x(t) \mathbf{J}_{-\mathbf{k}}^x(0) \rangle e^{i\omega t} dt =$$

poiche' $C_t(k, t) = \frac{k^2}{N} \langle \mathbf{J}_{\mathbf{k}}(t) \mathbf{J}_{-\mathbf{k}}(0) \rangle$,

$$\begin{aligned} - \int_0^\infty \frac{d^2}{dt^2} C_t(\mathbf{k}, t) e^{i\omega t} dt &= - \int_0^\infty d\dot{C}_t(\mathbf{k}, t) e^{i\omega t} = -\dot{C}_t(\mathbf{k}, t) e^{i\omega t} \Big|_0^\infty + \int_0^\infty (i\omega) \dot{C}_t(\mathbf{k}, t) e^{i\omega t} dt = \\ &= -\dot{C}_t(\mathbf{k}, t) e^{i\omega t} \Big|_0^\infty + i\omega C_t(\mathbf{k}, t) e^{i\omega t} \Big|_0^\infty - \int_0^\infty (i\omega)^2 C_t(\mathbf{k}, t) e^{i\omega t} dt \end{aligned}$$

Considerando che $C_t(\mathbf{k}, \infty) = \dot{C}_t(\mathbf{k}, \infty) = 0$ e che $\dot{C}_t(\mathbf{k}, 0) = 0$ perche' funzione pari del tempo, troviamo

$$= -i\omega C_t(\mathbf{k}, 0) + \omega^2 \int_0^\infty C_t(\mathbf{k}, t) e^{i\omega t} dt = -i\omega C_t(\mathbf{k}, 0) + \omega^2 \tilde{C}_t(\mathbf{k}, \omega)$$

Ricordandoci che sull' asse reale $C_{AA}(\omega) = \frac{1}{\pi} \text{Re} \tilde{C}_{AA}(\omega)$ possiamo scrivere

$$\lim_{\omega \rightarrow 0} \omega^2 C_t(\mathbf{k}, \omega) = \lim_{\omega \rightarrow 0} \frac{\omega^2}{\pi} \tilde{C}_t(\mathbf{k}, \omega) = \frac{1}{\pi} \lim_{\omega \rightarrow 0} \int_0^\infty \frac{k^2}{N} \langle \mathbf{J}_{\mathbf{k}}(t) \mathbf{J}_{-\mathbf{k}}(0) \rangle e^{i\omega t} dt$$

Da cui, tornando all' Eq. 1

$$\eta = \lim_{k \rightarrow 0} \lim_{\omega \rightarrow 0} m^2 \beta \rho \int_0^\infty \frac{1}{N k^2} \langle \dot{\mathbf{J}}_{\mathbf{k}}^x(t) \dot{\mathbf{J}}_{-\mathbf{k}}^x(0) \rangle e^{i\omega t} dt$$

Poiche' $i\mathbf{k} \cdot \sigma_x = ik\sigma^{xz}$ e $\dot{\mathbf{J}}_{\mathbf{k}}^x = -i \frac{\mathbf{k} \cdot \sigma_{\mathbf{k}}^x}{m}$, sostituendo troviamo (il $-\mathbf{k}$ contribuisce con un segno -)

$$\eta = \lim_{k \rightarrow 0} \lim_{\omega \rightarrow 0} \beta \rho \int_0^\infty \frac{1}{N} \langle \sigma_k^{xz}(t) \sigma_k^{xz}(0) \rangle e^{i\omega t} dt = \lim_{k \rightarrow 0} \frac{\beta}{V} \int_0^\infty \langle \sigma_k^{xz}(t) \sigma_k^{xz}(0) \rangle dt$$

2.9 Significato microscopico del tensore di stress

Abbiamo visto che

$$\dot{\mathbf{J}}_{\mathbf{k}} = -i\mathbf{k} \cdot \sigma_{\mathbf{k}}$$

dove $\mathbf{J}_{\mathbf{k}} = m \sum_i \mathbf{v}_i e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_i}$. Nella direzione α , chiamando β la direzione di \mathbf{k} (così che $\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} = \sum_\beta k^\beta r^\beta$) abbiamo

$$J_{\mathbf{k}}^\alpha = -ik \cdot \sigma_{\mathbf{k}}^{\alpha,\beta}$$

Questa relazione ci consente di trovare una espressione microscopica per $\sigma_{\mathbf{k}}^{\alpha,\beta}$. Derivando $J_{\mathbf{k}}^\alpha$ abbiamo

$$\dot{J}_{\mathbf{k}}^\alpha = m \sum_i \dot{v}_i^\alpha e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_i} - im \sum_i v_i^\alpha k^\beta v_i^\beta e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_i}$$

ma

$$mv_i^\alpha = -\frac{d \sum_{j \neq i} v_{ij} (|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|)}{dr_i^\alpha} = -\sum_{j \neq i} v'(r_{ij}) \frac{r_i^\alpha - r_j^\alpha}{r_{ij}}$$

per cui

$$m \sum_i \dot{v}_i^\alpha e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_i} = -\sum_i \sum_{j \neq i} v'(r_{ij}) \frac{r_i^\alpha - r_j^\alpha}{r_{ij}} e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_i}$$

sommando due volte, ciascuna pesata 1/2 possiamo scrivere

$$= -\frac{1}{2} \sum_i \sum_{j \neq i} v'(r_{ij}) \frac{r_i^\alpha - r_j^\alpha}{r_{ij}} e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_i} - \frac{1}{2} \sum_i \sum_{j \neq i} v'(r_{ij}) \frac{r_i^\alpha - r_j^\alpha}{r_{ij}} e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_i}$$

e scambiando nella seconda somma gli indici i e j

$$\begin{aligned} &= -\frac{1}{2} \sum_i \sum_{j \neq i} v'(r_{ij}) \frac{r_i^\alpha - r_j^\alpha}{r_{ij}} e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_i} - \frac{1}{2} \sum_i \sum_{j \neq i} v'(r_{ij}) \frac{r_j^\alpha - r_i^\alpha}{r_{ij}} e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_j} \\ &= -\frac{1}{2} \sum_i \sum_{j \neq i} v'(r_{ij}) \frac{r_i^\alpha - r_j^\alpha}{r_{ij}} \left[e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_i} - e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_j} \right] \end{aligned}$$

Mettendo ora in evidenza $e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_i}$ e moltiplicando e dividendo per $ik^\beta(r_i^\beta - r_j^\beta) = i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j)$ abbiamo

$$m \sum_i \dot{v}_i^\alpha e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_i} = -\frac{ik^\beta(r_i^\beta - r_j^\beta)}{2} \sum_i \sum_{j \neq i} v'(r_{ij}) \frac{r_i^\alpha - r_j^\alpha}{r_{ij}} \frac{[1 - e^{-i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_i)}]}{i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j)} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_i} =$$

$$\frac{ik^\beta}{2} \sum_i \sum_{j \neq i} v'(r_{ij}) \frac{(r_i^\beta - r_j^\beta)(r_i^\alpha - r_j^\alpha)}{r_{ij}} \frac{[e^{i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j)} - 1]}{i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j)} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_i}$$

Abbiamo in conclusione (con un segno meno di troppo forse)

$$\sigma_{\mathbf{k}}^{\alpha,\beta} = m \sum_i \left(v_i^\alpha v_i^\beta - \frac{1}{2} \sum_{j \neq i} v'(r_{ij}) \frac{(r_i^\beta - r_j^\beta)(r_i^\alpha - r_j^\alpha)}{r_{ij}} \frac{[e^{i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j)} - 1]}{i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j)} \right) (e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_i})$$

2.10 Significato microscopico viscosita' di bulk

Ripartiamo dalla funzione di correlazione della corrente longitudinale, che per simmetria a tempo zero non correla con la densita' e con la temperatura. Dunque,

$$\tilde{\mathbf{J}}_{\mathbf{k}}(z) = \frac{M_{33}^{min} \mathbf{J}_{\mathbf{k}}(t=0)}{Det[M]}$$

dove ricordiamo che

$$M_{33}^{min} = -iz(-iz + ak^2)$$

e

$$Det[M] = -iz [(-iz + ak^2)(-iz + bk^2) + k^2 c_s^2] + ak^4 \frac{c_s^2}{\gamma}$$

$$\tilde{\mathbf{J}}_{\mathbf{k}}(z) = \frac{-iz(-iz + ak^2) \mathbf{J}_{\mathbf{k}}(t=0)}{-iz [(-iz + ak^2)(-iz + bk^2) + k^2 c_s^2] + ak^4 \frac{c_s^2}{\gamma}} =$$

$$\frac{\mathbf{J}_{\mathbf{k}}(t=0)}{(-iz + bk^2) + \frac{k^2 c_s^2 + ak^4 \frac{c_s^2}{\gamma}}{-iz(-iz + ak^2)}} =$$

$$\frac{\mathbf{J}_{\mathbf{k}}(t=0)}{(-iz + bk^2) + \frac{k^2 c_s^2}{\gamma} \frac{\gamma + ak^2}{-iz(-iz + ak^2)}} =$$

Il termine $\frac{\gamma+ak^2}{-iz(-iz+ak^2)}$ puo' essere scritto come $\frac{A}{-iz} + \frac{B}{-iz+ak^2}$ con $A+B = \gamma$ e $A = 1$. Per cui

$$\tilde{\mathbf{J}}_{\mathbf{k}}(z) = \frac{\mathbf{J}_{\mathbf{k}}(t=0)}{(-iz + bk^2) + \frac{k^2 c_s^2}{\gamma} \left[\frac{1}{-iz} + \frac{\gamma-1}{-iz+ak^2} \right]}$$

Se ora moltiplichiamo per $\tilde{\mathbf{J}}_{\mathbf{k}}(t=0)$, mediamo termodinamicamente, ed espandiamo per piccoli k e valutiamo in $z = \omega$ possiamo scrivere

$$\begin{aligned} \tilde{C}_l(\mathbf{k}, \omega) &= \frac{\omega_0^2}{(-i\omega + bk^2) + \frac{k^2 c_s^2}{\gamma} \left[\frac{1}{-i\omega} + \frac{\gamma-1}{-i\omega+ak^2} \right]} = \\ &= \frac{\omega_0^2}{-i\omega \left\{ 1 + \frac{bk^2}{-i\omega} + \frac{k^2 c_s^2}{-i\omega\gamma} \left[\frac{1}{-i\omega} + \frac{\gamma-1}{-i\omega+ak^2} \right] \right\}} \approx \\ &= \frac{\omega_0^2}{-i\omega} \left\{ 1 - \frac{bk^2}{-i\omega} - \frac{k^2 c_s^2}{-i\omega\gamma} \left[\frac{1}{-i\omega} + \frac{\gamma-1}{-i\omega+ak^2} \right] \right\} = \\ &= \frac{\omega_0^2}{\omega} \left\{ i + \frac{bk^2}{\omega} + \frac{k^2 c_s^2}{\omega\gamma} \left[\frac{1}{-i\omega} + \frac{\gamma-1}{-i\omega+ak^2} \right] \right\} = \end{aligned}$$

Il termine $\left[\frac{1}{-i\omega} + \frac{\gamma-1}{-i\omega+ak^2} \right]$ puo' essere scritto, separando la parte reale da quella immaginaria, come

$$\begin{aligned} \left[\frac{1}{-i\omega} + \frac{\gamma-1}{-i\omega+ak^2} \right] &= \frac{-i\omega + ak^2 + i\omega - i\omega\gamma}{-\omega^2 - i\omega ak^2} = \\ &= \left(-\frac{ak^2 - i\omega\gamma}{\omega^2 + i\omega ak^2} \right) \left(\frac{\omega^2 - i\omega ak^2}{\omega^2 - i\omega ak^2} \right) = -\frac{ak^2 - i\omega\gamma}{\omega^4 + \omega^2 a^2 k^4} (\omega^2 - i\omega ak^2) \end{aligned}$$

La parte reale e' dunque

$$-\frac{ak^2\omega^2 - \omega^2 ak^2\gamma}{\omega^4 + \omega^2 a^2 k^4} = \frac{ak^2(\gamma-1)}{\omega^2 + a^2 k^4}$$

Quindi

$$C_l(k, \omega) = \frac{1}{\pi} \text{Re} \tilde{C}_l(k, \omega) = \frac{\omega_0^2}{\pi\omega^2} \left(+bk^2 + \frac{k^2 c_s^2}{\gamma} \frac{ak^2(\gamma-1)}{\omega^2 + a^2 k^4} \right) =$$

Ricordando che $\omega_0^2 = k^2 \frac{k_B T}{m}$, e $b = \frac{1}{\rho m} (\frac{4}{3}\eta + \zeta)$ possiamo scrivere

$$\lim_{k \rightarrow 0} \frac{\omega^2 C_l(k, \omega)}{k^4} = \frac{k_B T b}{m\pi} = \frac{k_B T (\frac{4}{3}\eta + \zeta)}{\rho m^2 \pi}$$

da cui

$$\frac{4}{3}\eta + \zeta = \frac{\rho m^2 \pi}{k_B T} \lim_{k \rightarrow 0} \lim_{\omega \rightarrow 0} \frac{\omega^2 C_l(k, \omega)}{k^4}$$

Come fatto per le correnti trasverse, si trova

$$\frac{4}{3}\eta + \zeta = \frac{1}{Vk_B T} \lim_{k \rightarrow 0} \lim_{\omega \rightarrow 0} \int_0^\infty \langle \sigma_k^{zz}(t) \sigma_k^{zz}(0) \rangle e^{i\omega t} dt$$