Appunti di Fisica 1

Marcello Colozzo http://www.extrabyte.info

1 Il potenziale di Lennard-Jones

Le argomentazioni del numero precedente trovano un'utile applicazione nello studio delle interazioni tra molecole. In particolare, l'energia potenziale di interazione di una coppia di molecole è data dalla formula di Lennard-Jones:

$$V(x) = 4\varepsilon \left[\left(\frac{a}{x} \right)^{12} - \left(\frac{a}{x} \right)^{6} \right] \tag{1}$$

dove: $x > 0$ è la distanza tra le molecole; $\varepsilon > 0$ è una costante con le dimensioni di un'energia; $a > 0$ è una costante con le dimensioni di una lunghezza. Studiamo il comportamento della funzione (1).

Intersezioni con gli assi coordinati

Dal momento che la funzione non è definita in $x = 0$, non si hanno intersezioni con l'asse delle ordinate. L'intersezione con l'asse delle ascisse è data da

$$V(x) = 0 \Longleftrightarrow \left(\frac{a}{x} \right)^{12} - \left(\frac{a}{x} \right)^{6} = 0 \Longleftrightarrow x = a \equiv x_0 \tag{2}$$

Segno della funzione

$V(x) > 0 \Longleftrightarrow \left(\frac{a}{x} \right)^{12} - \left(\frac{a}{x} \right)^{6} > 0 \Longleftrightarrow 0 < x < x_0$

Comportamento agli estremi

$$\lim_{x \to 0^+} V(x) = +\infty, \quad \lim_{x \to +\infty} V(x) = 0^- \tag{3}$$

Ricerca di estremi relativi/assoluti

La derivata prima è

$$V'(x) = -\frac{b_1}{x^{13}} + \frac{b_2}{x^7}, \tag{4}$$

avendo definito:

$$b_1 = 48\varepsilon a^{12}, \; b_2 = 24a^6\varepsilon \tag{5}$$

Segue

$$\begin{aligned} V'(x) = 0 &\Longleftrightarrow x = 2^{1/6}a \equiv x_e \\ V'(x) > 0 &\Longleftrightarrow x \in (0, x_e) \end{aligned}$$

Ne segue che x_e è punto di minimo relativo. Risulta $V(x_e) = -\varepsilon$.

Tracciamento del grafico

Tralasciando il calcolo della derivata seconda (è evidente l'esistenza di un flesso per $x > x_e$), otteniamo il grafico di fig. 1.

Per interpretare fisicamente questi risultati, grafichiamo la forza

$$F(x) = -V'(x) = \frac{b_1}{x^{13}} - \frac{b_2}{x^7} \tag{6}$$

in fig. 2, da cui vediamo che

$$\begin{aligned} x \in (0, x_e) &\Longrightarrow F(x) > 0 \text{ (forza repulsiva)} \\ x \in (x_e, +\infty) &\Longrightarrow F(x) < 0 \text{ (forza attrattiva)} \end{aligned}$$

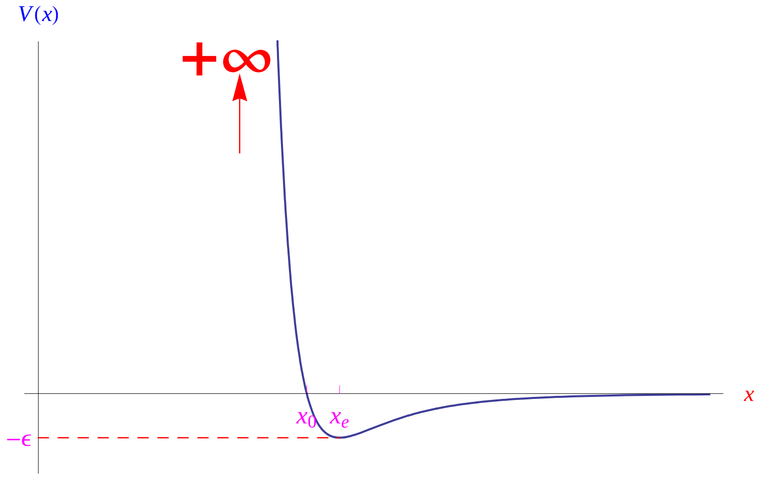

Figura 1: Il potenziale di Lennard-Jones.

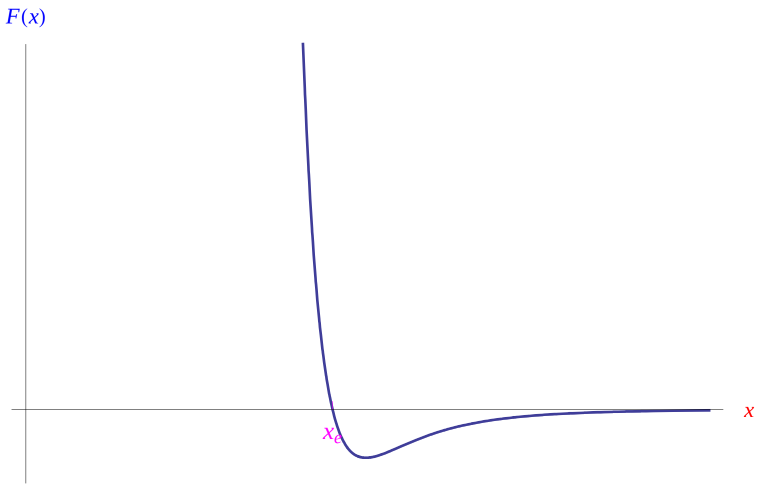

Figura 2: Andamento di $F(x) = -V'(x)$.

Si noti che a tale risultato si giunge riscrivendo la (6) nella forma

$$F(x) = F_{rep}(x) + F_{att}(x),$$

dove $F_{rep}(x) = \frac{b_1}{x^{13}}$, $F_{att}(x) = -\frac{b_2}{x^7}$ sono rispettivamente il termine repulsivo e il termine attrattivo. Ciò è evidente perché il primo è positivo (quindi produce un accelerazione nel verso dell'asse x, allontanando le molecole), mentre il secondo è negativo (determina un'accelerazione nel verso negativo dell'asse x, avvicinando le molecole). Vediamo che il termine repulsivo diminuisce all'aumentare della distanza, più rapidamente del termine attrattivo. A x_e i due termini si annullano restituendo una posizione di equilibrio stabile. In realtà, la distanza tra le due molecole oscilla intorno alla predetto punto di equilibrio. Se vogliamo allontanare una delle due molecole a distanza $x \gg x_e$, dobbiamo fornirle un'energia cinetica dell'ordine di ε.

La stessa formula è valida per due atomi che vengono a costituire una molecola biatomica. A x_e la distanza oscilla intorno a tale punto. Per decomporre la molecola occorre fornire un'energia cinetica pari a ε (energia di dissociazione).

Riferimenti bibliografici

[1] Sette D., 1968. *Lezioni di Fisica. Volume I.* Veschi