



Università degli Studi di Padova – Dipartimento di Ingegneria Industriale

Corso di Laurea in Ingegneria chimica e dei materiali

# **POTENZIALE DI LENNARD-JONES ED EMBEDDED-ATOM MODEL: CONFRONTO APPLICATO AL RAME**

Tutor universitario: Prof. Lucia Nicola

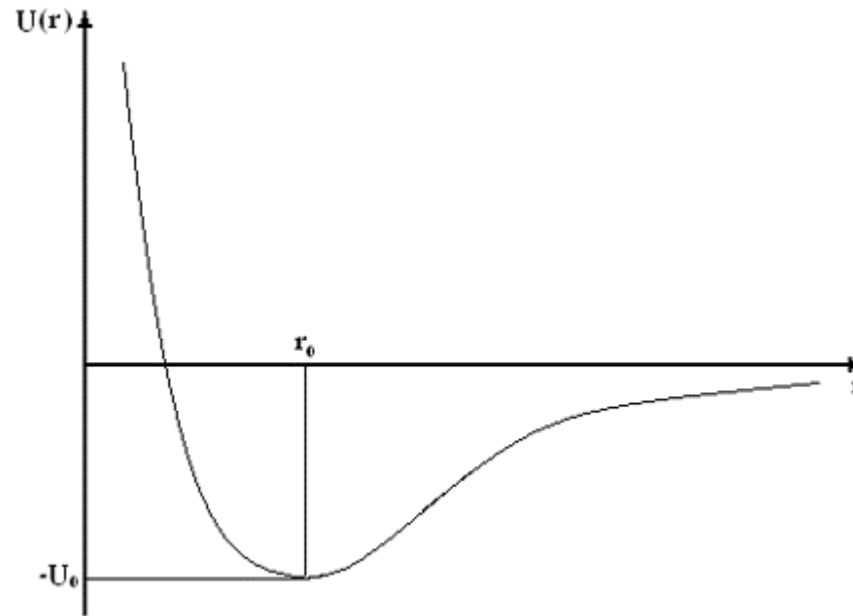
Laureanda: *Claudia Meneguzzo*



- Implementare due modelli computazionali che restituiscano la curva del potenziale interatomico in funzione della distanza tra atomi inserendo in input parametri noti.
- Confrontare i risultati ottenuti dai due modelli inserendo i parametri dell'argon e del rame.

Il potenziale interatomico descrive l'interazione tra atomi.

La curva del potenziale è il risultato di due contributi: quello attrattivo e quello repulsivo.



Le forze in gioco non sono descritte da un'equazione ricavata teoricamente. Ci si deve quindi affidare a delle funzioni empiriche.



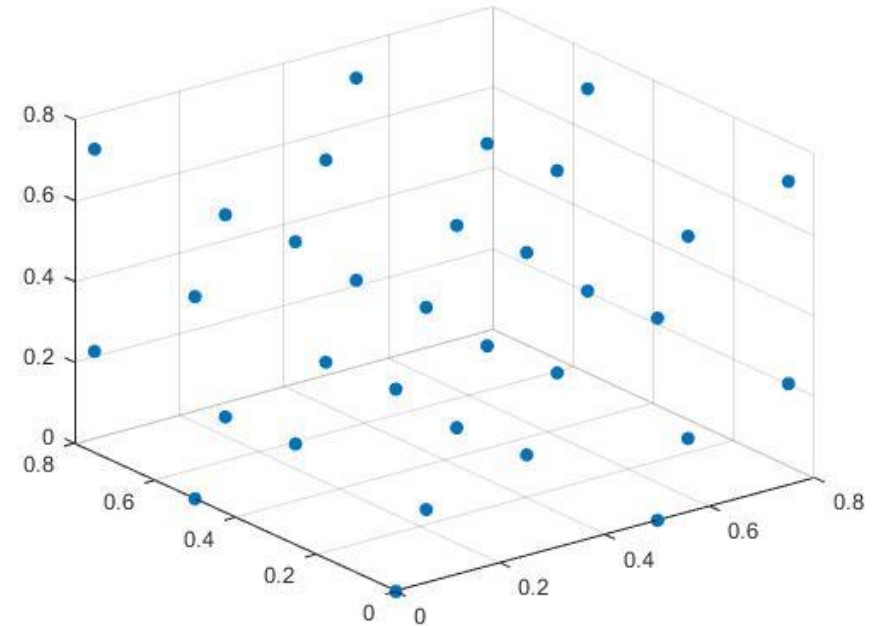
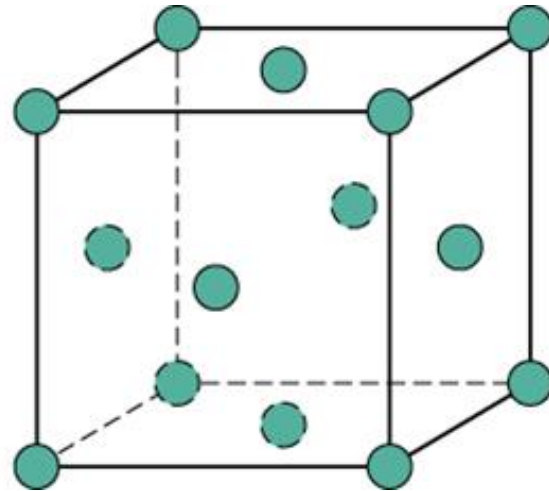
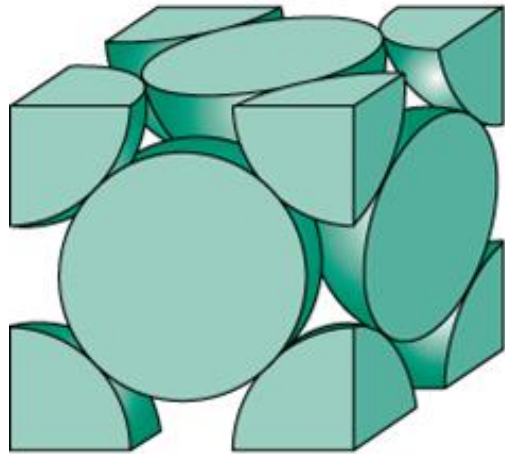
Il più noto per descrivere l'interazione interatomica è il modello di Lennard-Jones, descritto dalla funzione

$$U(r) = 4\varepsilon \cdot \left[ \left( \frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left( \frac{\sigma}{r} \right)^6 \right]$$

dove  $\varepsilon$  è la profondità della buca di potenziale e  $\sigma$  è il raggio dell'atomo.

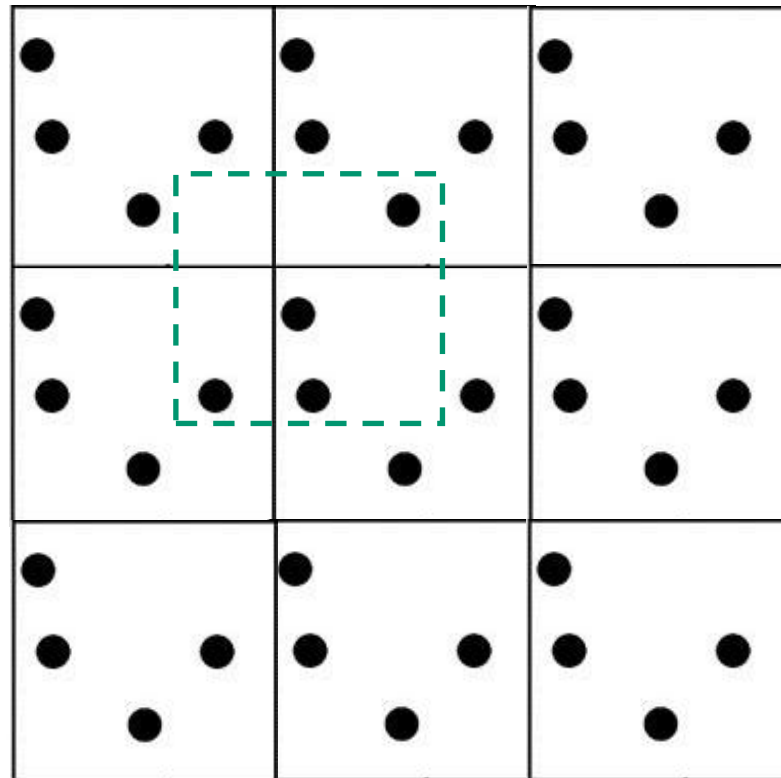
Per applicare la funzione ricavata da Lennard-Jones, è necessario implementare un cristallo formato da atomi.

In questo caso lo studio è eseguito su un cristallo CFC, come argon solido e rame.

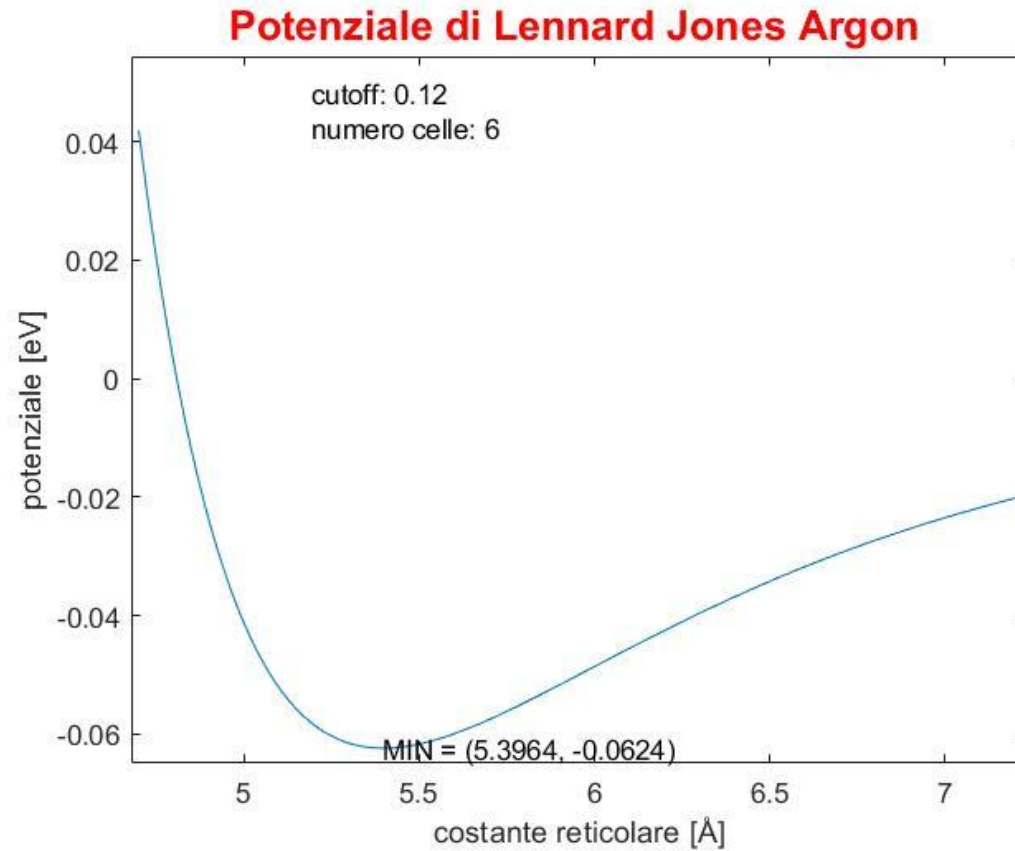


## *Minimum Image Convention:*

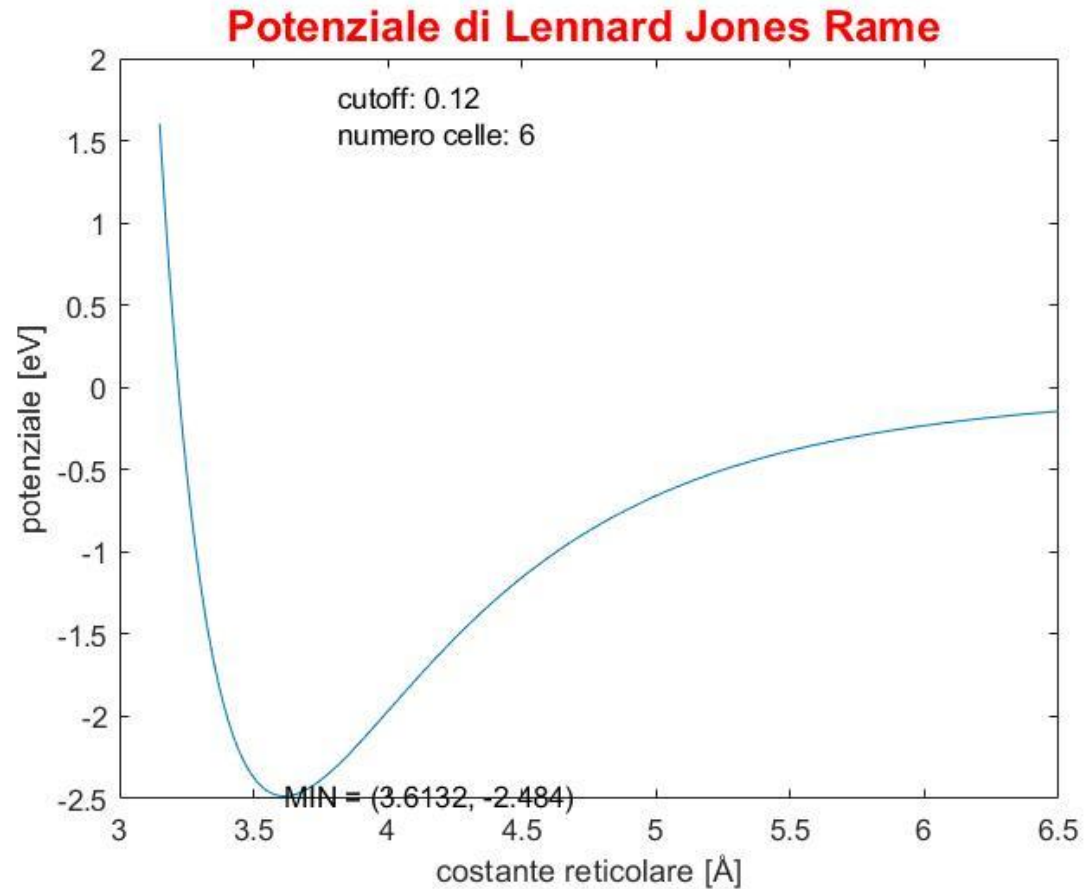
nella simulazione ogni particella interagisce con l'entità più vicina tra un atomo nella cella o la sua immagine nella cella adiacente.



Potenziale Argon con un cutoff che comprenda solo gli atomi più vicini:

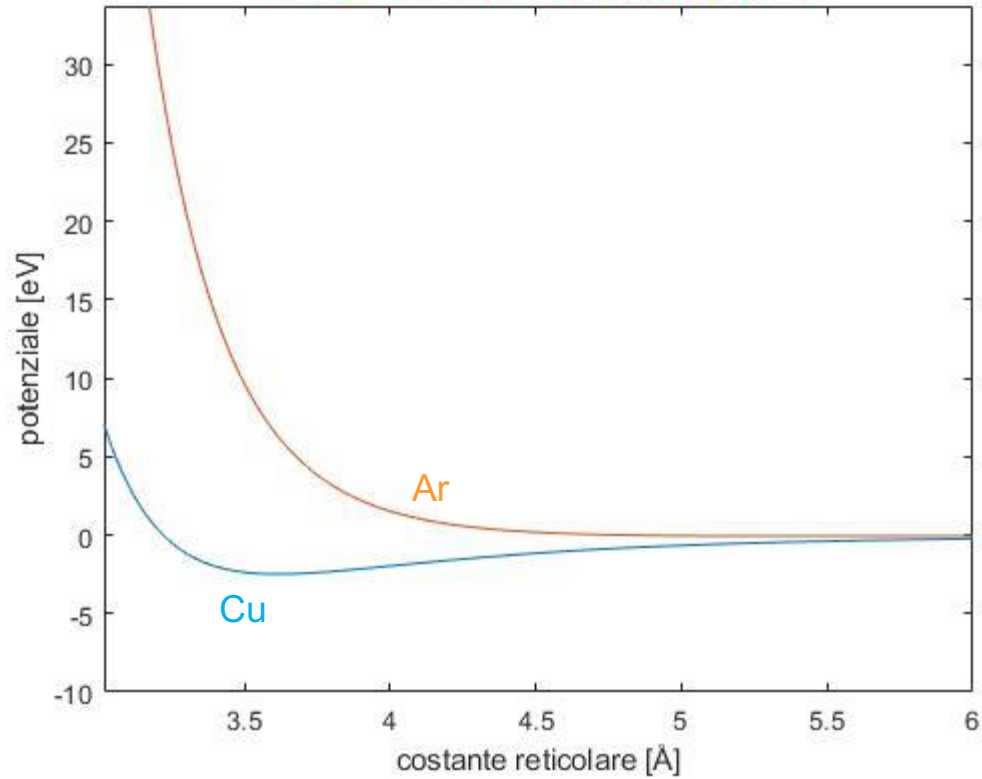


Potenziale Rame con un cutoff che comprenda solo gli atomi più vicini:

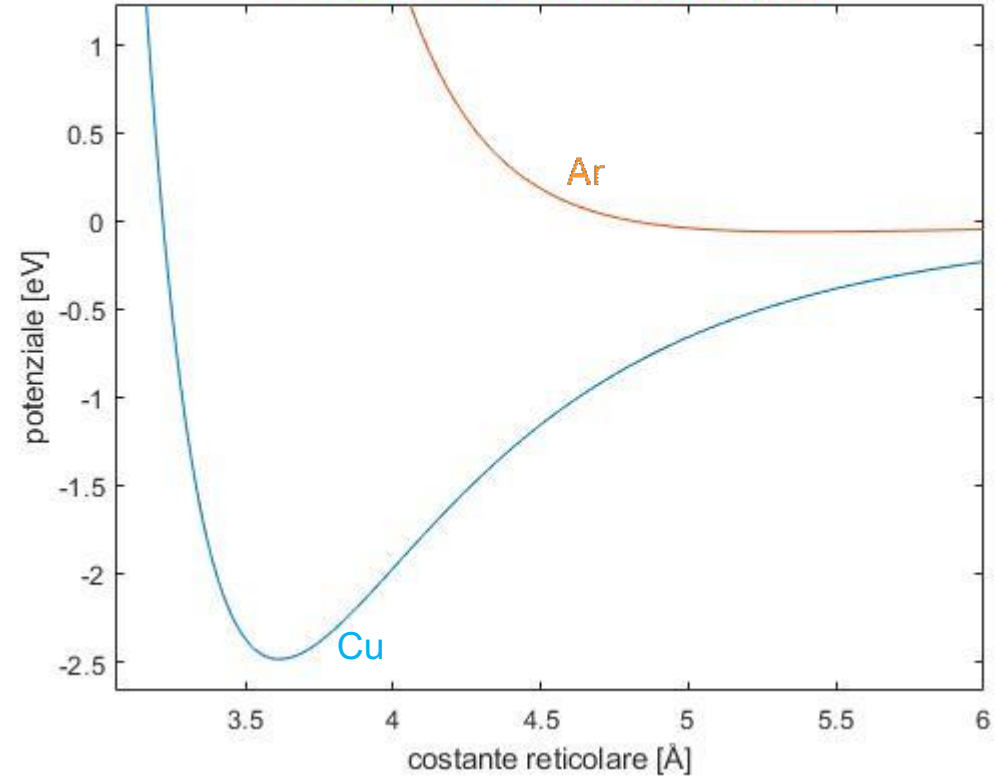




### Potenziale LJ Rame vs Argon



### Potenziale LJ Rame vs Argon





Il modello di Lennard-Jones ha alcuni limiti:

- Non considera la densità di carica elettronica dell'atomo
- Valuta l'interazione esistente solamente tra coppie di atomi.

E' stato in seguito realizzato un modello che tenesse conto dell'effetto dell'interazione tra più di due atomi e della densità elettronica: l'Embedded-Atom Model.

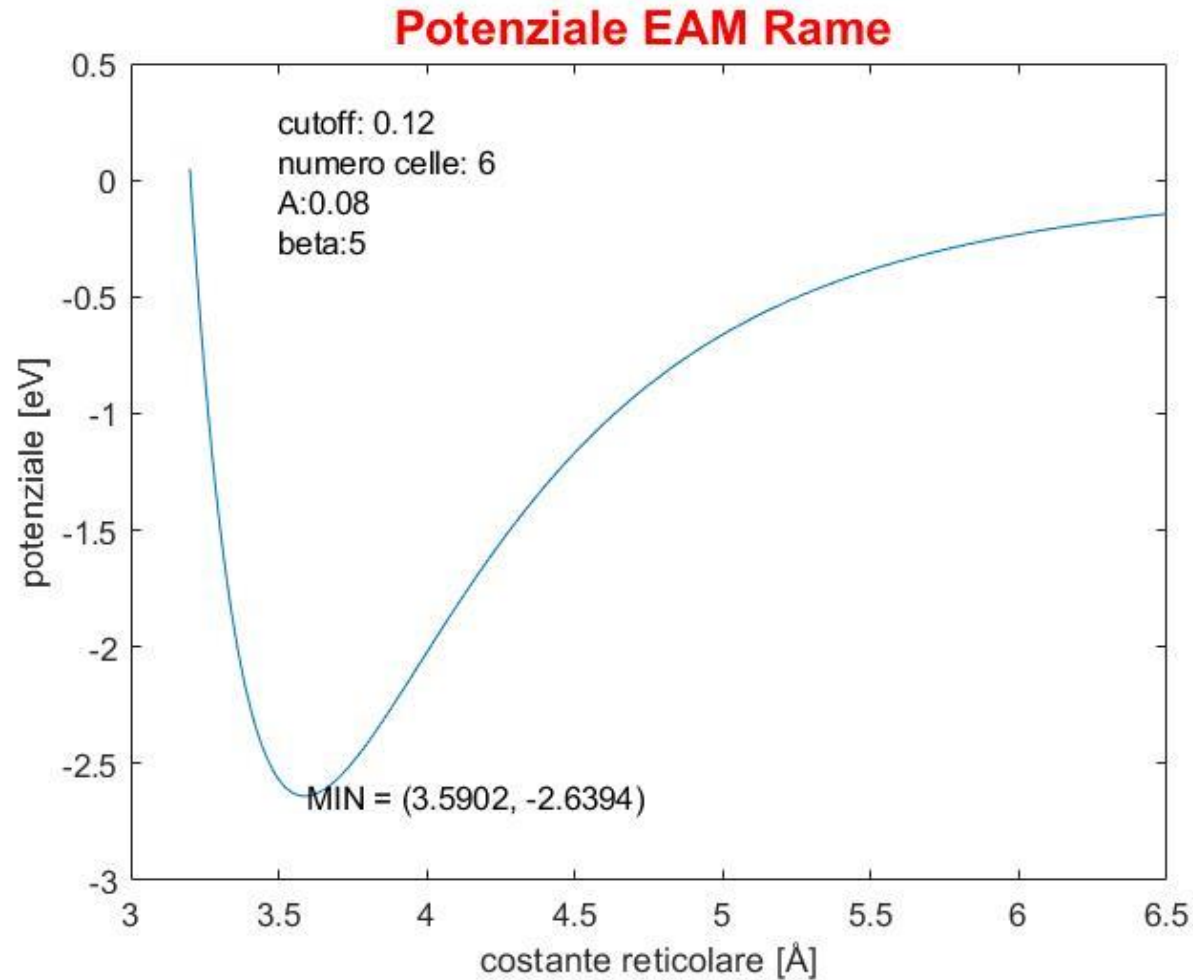
$$E = \sum_i \left[ F(\bar{\rho}_i) + \frac{1}{2} \sum_{j \neq i} \phi(r_{ij}) \right]$$

$$F(\bar{\rho}) = \frac{AZ_0}{2} \bar{\rho} [\ln(\bar{\rho}) - 1]$$

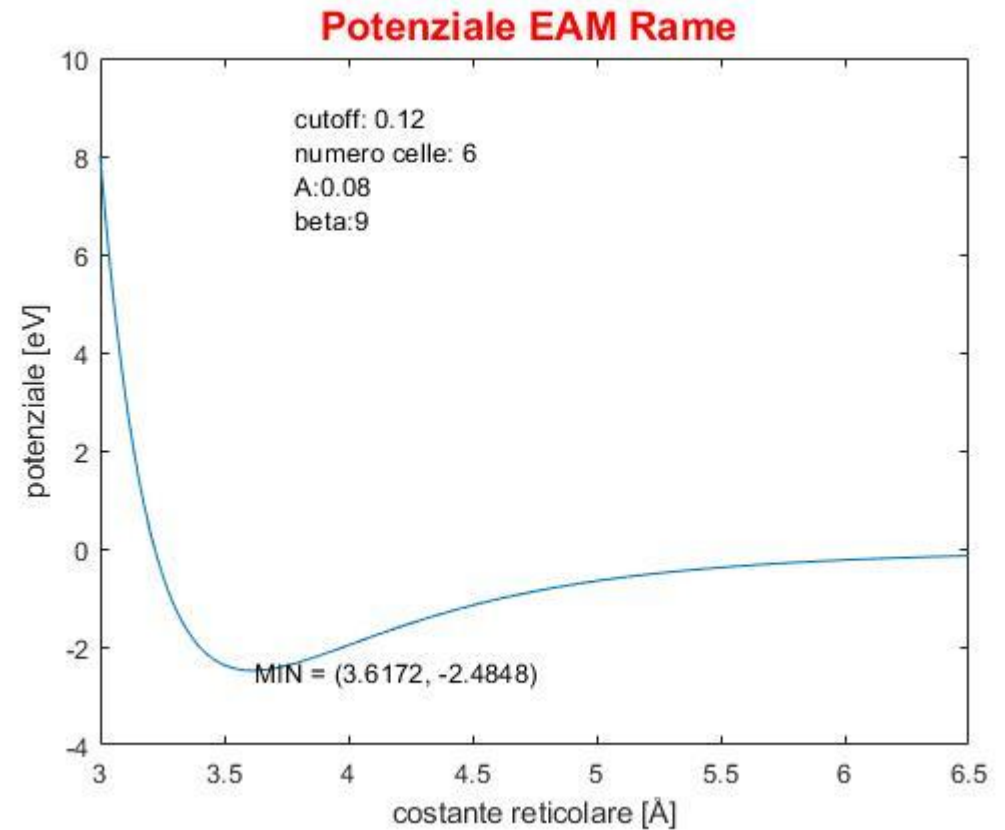
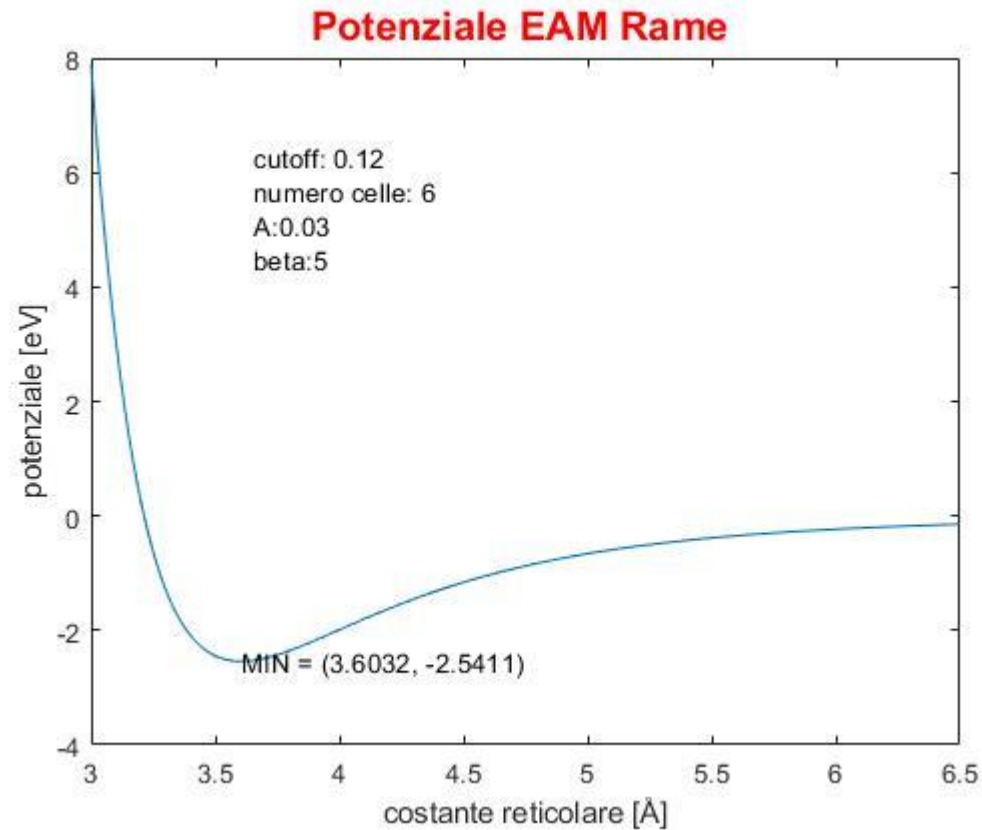
$$\bar{\rho}_i = \frac{1}{Z_0} \sum_{j \neq i} \rho(r_{ij})$$

$$\rho(r) = \exp[-\beta(r - 1)]$$

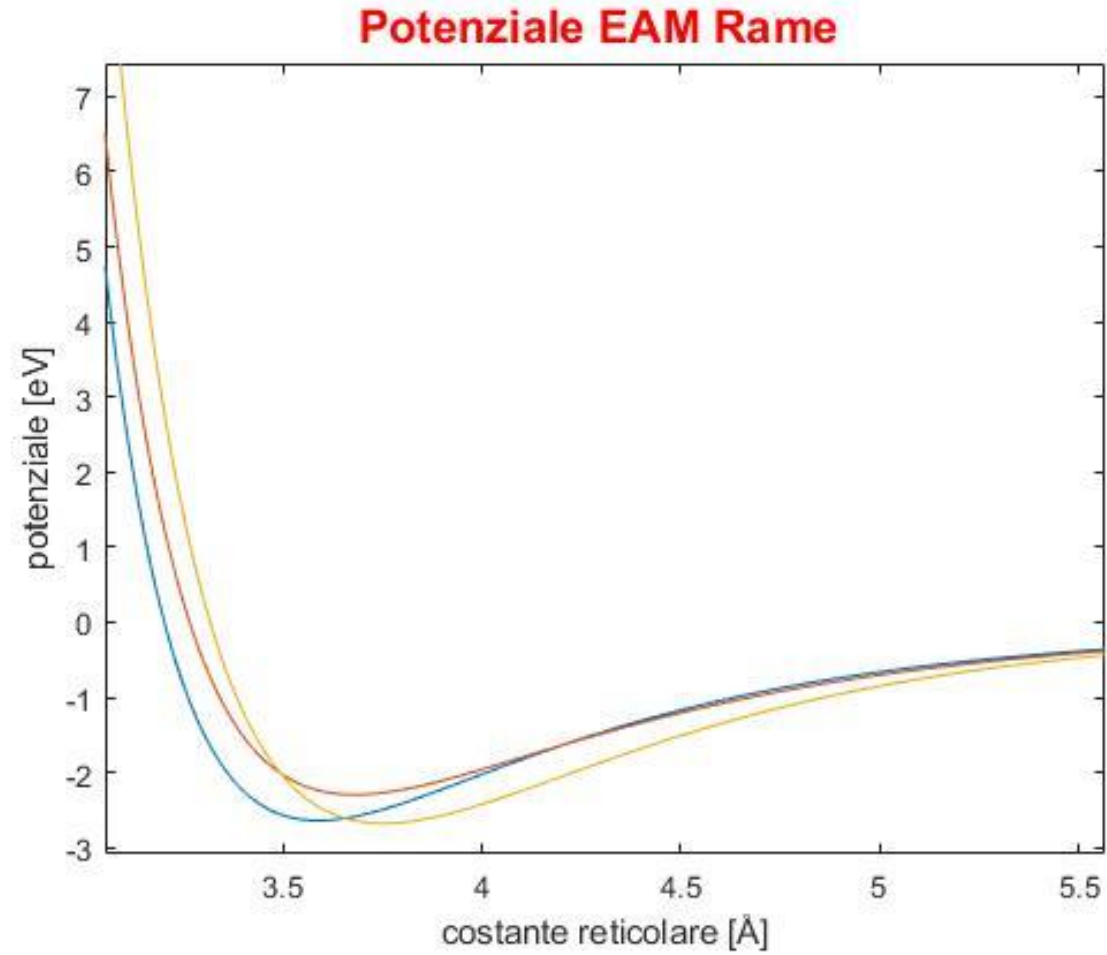
## Potenziale Rame ottenuto da modello Embedded-Atom Potential



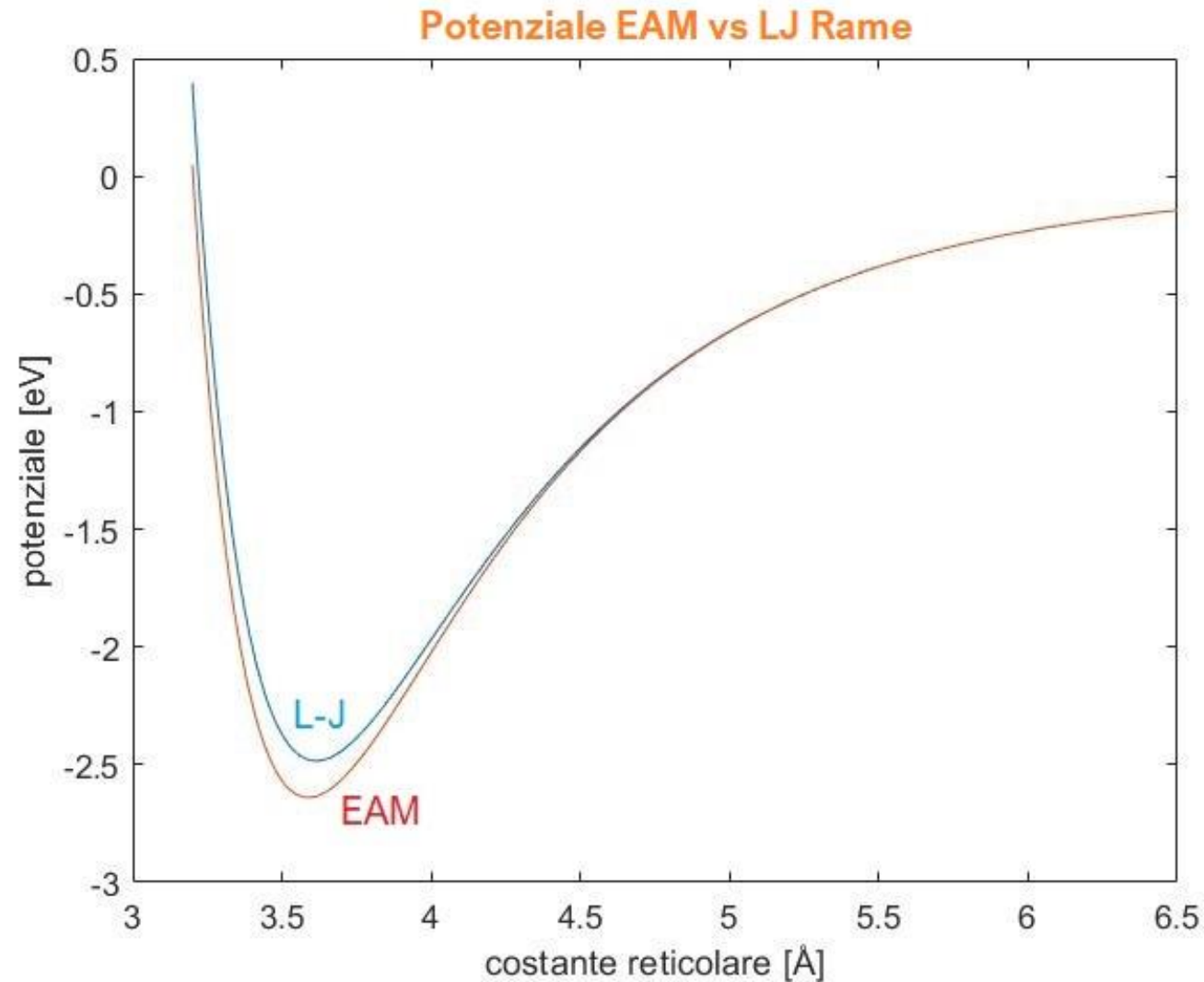
## Potenziale Rame ottenuto da modello Embedded-Atom Potential



Confronto tra curve ottenute inserendo diversi parametri



## Curve ottenute dai due modelli messe a confronto





- Il potenziale di Lennard-Jones può essere utilizzato in applicazione a studi su gas nobili in forma solida come l'argon, essendo solidi legati debolmente.
- L'Embedded-Atom Model controlla non solo il minimo, ma anche la forma della curva. In questo modo è possibile riprodurre un maggior numero di proprietà del materiale.





Grazie per l'attenzione