

# Gruppo di ricerca in: Fisica Teorica e Sperimentale della Materia Condensata

## Presentazione dell'attività di ricerca

**Dino Costa, Paolo V. Giaquinta, Gianpietro Malessio,  
Santi Prestipino e Alessandro Sergi**

Dip. di Scienze Matematiche ed Informatiche, Scienze Fisiche e Scienze della Terra,  
Università degli Studi di Messina

Giornata degli studenti — Messina, 14/10/2019

# Componenti del gruppo e loro collaborazioni

- **Dino Costa**: J.-M. Bomont e J.-L. Bretonnet (Université de Lorraine)
- **Paolo V. Giaquinta**: M. Saitta (Université Pierre et Marie Curie - Sorbonne); F. Saija (CNR-IPCF Messina); G. Cassone (Czech Academy of Science, Brno)
- **Gianpietro Malescio**: A. Parola (U. di Como) e F. Sciortino (U. La Sapienza, Roma)
- **Santi Prestipino**: E. Tosatti (ICTP e SISSA, Trieste) e A. Laio (SISSA, Trieste); A. Parola (U. di Como)
- **Alessandro Sergi**: A. Messina (U. di Palermo), G. Hanna (U. of Alberta, Canada) e K. Zloschastiev (Sudafrica)

Altri collaboratori del gruppo: G. Munaò, M. C. Abramo, C. Caccamo, E. Bruno, G. Pellicane (UKZN, Sudafrica) e A. Giacometti (U. Ca' Foscari, Venezia)

# Studiamo i sistemi macroscopici

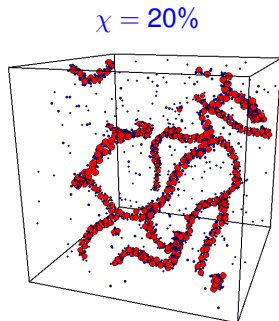
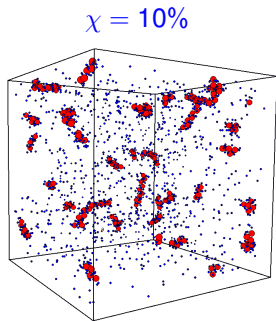
- Dei sistemi macroscopici ha senso soltanto lo studio del *comportamento collettivo*
- All'equilibrio, questo comportamento è retto dalle leggi della termodinamica: se il sistema è *isolato*, l'energia si conserva (I legge) e l'entropia è massima (II legge)
- Se il sistema si trova a contatto con un *reservoir*, all'equilibrio risulterà minimo un opportuno *potenziale termodinamico generalizzato* (PTG), p. es.  $\tilde{G}(E, V; T, P, N) = E - TS(E, V, N) + PV$
- Se  $\tilde{G}$  ha più minimi, sono possibili transizioni di fase
- La meccanica statistica ha ricette per calcolare le proprietà termodinamiche a partire dalla legge di interazione fra le particelle

# 1. Auto-organizzazione di una soluzione colloidale

- Il self-assembly è tra le caratteristiche salienti della *materia vivente*: micelle, catene polimeriche, networks, membrane e vescicole sono strutture frequenti in fase fluida
- Il nostro modello: due specie, una sfera rigida ed un dimero rigido asimmetrico (con monomeri i cui diametri stanno nel rapporto di 3:1); il raggio della buca attrattiva e i diametri delle particelle sono gli *unici parametri*
- Originariamente, l'intenzione era di simulare l'*incapsulamento*; poi si è visto che, al variare della concentrazione  $\chi$  delle sfere, compaiono anche aggregati diversi dalle semplici micelle

# 1. Auto-organizzazione di una soluzione colloidale

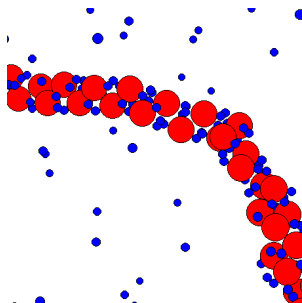
La simulazione: si parte da uno stato omogeneo di bassa densità e si attende che le strutture auto-organizzate si manifestino



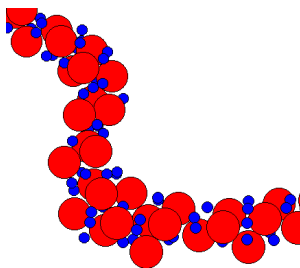
Qui  $d = 1$  e  $T = 0.15$  (sfere in rosso; monomeri piccoli in blu; i monomeri grandi non sono raffigurati)

# 1. Auto-organizzazione di una soluzione colloidale

$\chi = 20\%$



$\chi = 33\%$

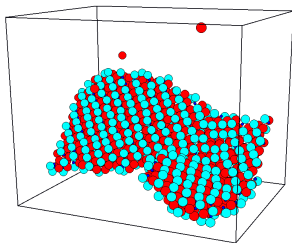


Qui  $d = 1$  e  $T = 0.15$  (sfere in rosso; monomeri piccoli in blu; i monomeri grandi non sono raffigurati)

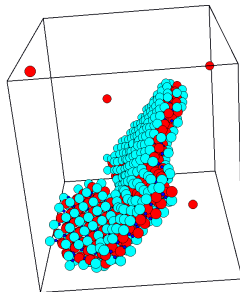
# 1. Auto-organizzazione di una soluzione colloidale

Qui  $d = 1$ ,  $T = 0.15$  e  $\chi = 50\%$  (sfere in rosso; monomeri piccoli in blu; monomeri grandi in celeste)

*front view*

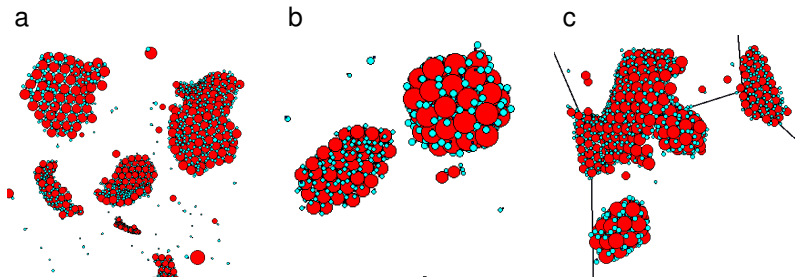


*side view*



# 1. Auto-organizzazione di una soluzione colloidale

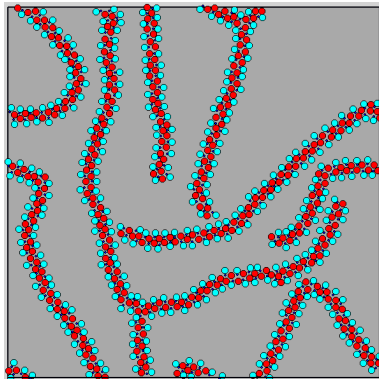
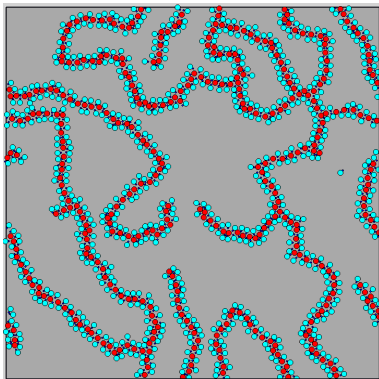
Per sfere tre volte più grandi ( $d = 3$ ), si nota la tendenza a formare lamelle con ordine *in-plane* triangolare (a); di tanto in tanto, appaiono vescicole (b e c)



Qui  $d = 3$ ,  $T = 0.15$  e  $\chi = 20\%$



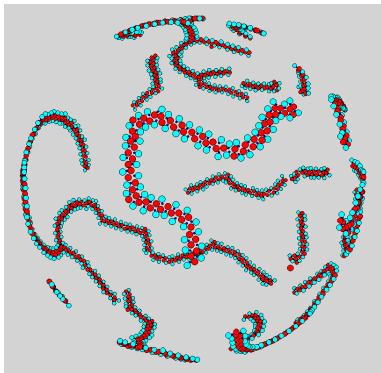
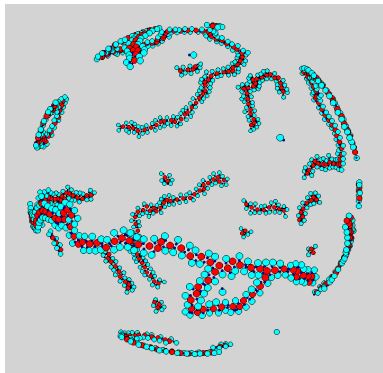
# 1. Auto-organizzazione di una soluzione colloidale



Sul *piano*, ad alta densità e per  $T = 0.10$ .

A sinistra,  $\chi = 33\%$ . A destra:  $\chi = 50\%$

# 1. Auto-organizzazione di una soluzione colloidale

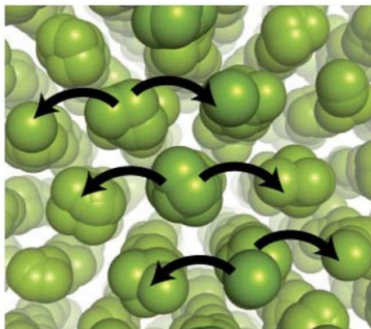


Sulla *sfera*, a bassa densità e per  $T = 0.10$ .

A sinistra,  $\chi = 33\%$ . A destra:  $\chi = 50\%$

## 2. Congelamento di un sistema quantistico

La cristallizzazione di bosoni *soffici* a  $T = 0$  (Pomeau e Rica, Kunimi e Kato, Macrì *et al.*) è un caso, tra i più semplici, di *transizione quantistica*: ad una certa pressione, lo stato fondamentale del sistema cambia all'improvviso da fluido a *cristallo a cluster*



## 2. Congelamento di un sistema quantistico

Se l'interazione tra le particelle è *debole*, basta una teoria di campo medio (lo stato del sistema è un condensato perfetto):  $\Psi(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_N) = \psi(\mathbf{x}_1) \cdots \psi(\mathbf{x}_N)$

La  $\psi$  ottimale minimizza il funzionale *energia-per-particella*:

$$\mathcal{E}[\psi; \rho] = -\frac{\hbar^2}{2m} \int d^d r \psi^* \nabla^2 \psi + \frac{N}{2} \int d^d r d^d r' |\psi(\mathbf{r})|^2 u(\mathbf{r} - \mathbf{r}') |\psi(\mathbf{r}')|^2,$$

ossia risolve l'equazione di Gross-Pitaevskii:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi(\mathbf{x}) + N \int d^d x' |\psi(\mathbf{x}')|^2 u(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \psi(\mathbf{x}) = \lambda \psi(\mathbf{x})$$

## 2. Congelamento di un sistema quantistico

Rappresentiamo il cristallo mediante la funzione d'onda variazionale:

$$\psi(\mathbf{x}) = \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{\mathbf{R}} \exp \left\{ -\alpha \left( \frac{\mathbf{x} - \mathbf{R}}{a} \right)^2 \right\}$$

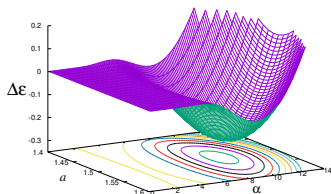
$\alpha$  ed  $a$  (il passo reticolare) sono parametri da ottimizzare per ciascuna  $\rho$ , richiedendo che l'energia  $\mathcal{E}$  sia minima ( $\bar{\alpha} = 0$  nel fluido,  $\bar{\alpha} > 0$  nel cristallo)

Sul reticolo triangolare, ad alta densità:

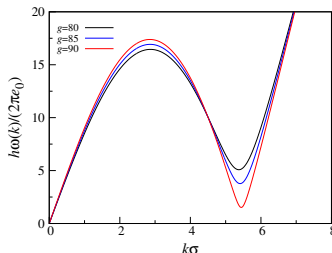
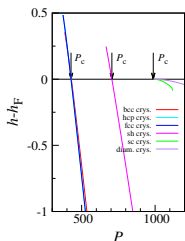
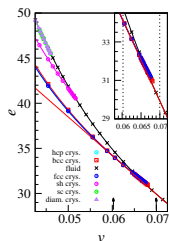
Potenziale a forma di  
barriera rettangolare:

$$u(r) = \begin{cases} \epsilon, & r < \sigma \\ 0, & r > \sigma \end{cases}$$

(anche detto “penetrable  
sphere model”, PSM)



- Per i reticoli di bassa coordinazione, la transizione da fluido a solido è continua
- Nel solido la *frazione superfluida* è 1 alla transizione e poi diminuisce al crescere della pressione ( $\rightarrow$  supersolidità)



A sinistra: energia in funzione del volume ed entalpia di eccesso in funzione della pressione. A destra: relazione di dispersione delle eccitazioni collettive del fluido

## 2. Congelamento di un sistema quantistico

La teoria può essere riformulata per particelle vincolate alla superficie di una sfera

La superficie sferica scoraggia l'ordinamento triangolare, causando la comparsa di disclinazioni

È ragionevole che, ad alta pressione, le strutture più stabili abbiano la simmetria di poliedri regolari e quasi-regolari

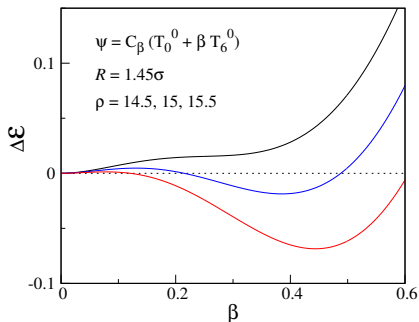
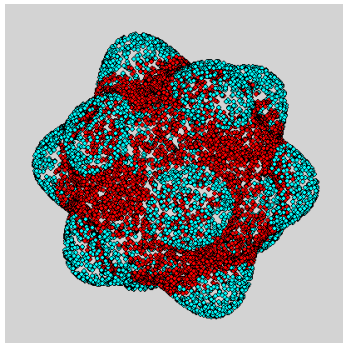
Per un certo  $R$ , i poliedri rilevanti saranno quelli il cui spigolo  $\ell \simeq 1.51\sigma$  (per il PSM)

## 2. Congelamento di un sistema quantistico

Per una combinazione lineare delle prime due armoniche icosaedriche, il calcolo dell'energia  $\mathcal{E}$  è *completamente analitico*

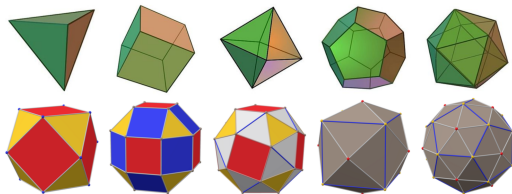
$$T_0^0 + \beta T_6^0(\theta, \phi) \text{ per } \beta = 0.1$$

Energia di eccesso per  $R = 1.45\sigma$   
a tre densità diverse

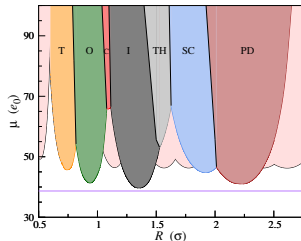




## 2. Congelamento di un sistema quantistico



Tra  $R = 0.5\sigma$  e  $R = 2.5\sigma$  il diagramma delle fasi comprende 7 fasi a cluster



# Alcune proposte di attività per il prossimo futuro

- 1) Studi numerici di particelle classiche con *interazioni antagoniste* (attrattive a corto raggio, repulsive a distanze più grandi), per tesi triennale e magistrale
- 2) Simulazione atomistica dell'interazione tra una *membrana* ed un frammento di *microplastica* (per tesi magistrale)
- 2) *Nucleazione* di fasi solide in modelli elementari di fluidi colloidali (per tesi triennale e magistrale)
- 3) Prestipino e Sergi: sviluppo di algoritmi di *simulazione quantistica*, per applicazioni a sistemi bosonici nel continuo e su reticolo (per tesi magistrale)
- 4) Sergi: disponibile sia per attività di stage che come relatore di tesi triennale (1-2 studenti) su tematiche teorico/computazionali concernenti il problema della *dinamica quantistica*