

## Sull'interazione fra le particelle del solido ideale

P. E. VALLE

Ricevuto il 18 Maggio 1963

**RIASSUNTO.** — Viene mostrato che l'interazione tra le particelle del solido ideale può essere valutata senza uscire dal quadro della teoria del calore specifico.

Questa valutazione richiede il calcolo di un'integrale, da cui viene riportata una tabellazione.

**SUMMARY.** — The internal pressure due to the interactions between the particles of the simplest form of solid is evaluated.

### INTRODUZIONE.

La teoria del solido ideale conduce ad un'equazione di stato secondo la quale la pressione interna, che equilibra una pressione esterna di tipo idrostatico, può essere divisa in due parti. Una parte è costituita dalla pressione di radiazione delle onde elastiche di agitazione termica, mentre l'altra è dovuta all'interazione fra le particelle del solido.

La pressione di radiazione delle onde elastiche di agitazione termica è facilmente valutabile, specialmente per temperature superiori alle temperature caratteristiche, ma il problema della valutazione della pressione dovuta all'interazione tra le particelle del solido presenta notevoli difficoltà.

Si può mostrare peraltro<sup>(1)</sup> come sia possibile risolvere questo problema senza uscire dal quadro della teoria del solido ideale, la quale, se non altro, ha il merito di aver condotto ad una valutazione del calore specifico a volume costante conforme ai risultati sperimentali.

## TEORIA.

Ove si indichi con  $p$  la pressione totale, con  $\rho$  la densità di massa, con  $U_l$  e  $U_t$  le energie interne di agitazione termica, associate rispettivamente alle onde longitudinali e trasversali, con  $f(\rho)$  la pressione interna dovuta all'interazione fra le particelle del solido, l'equazione di stato del solido ideale, sottoposto a pressione di tipo idrostatico, si scrive

$$p = f(\rho) + \rho \sum \gamma_m U_m \quad [1]$$

$$(m = l, t, t) .$$

Il secondo termine a secondo membro di questa equazione rappresenta la pressione di radiazione delle onde di agitazione termica e contiene l'energia  $U_t$  due volte, in relazione ai due possibili piani di polarizzazione delle onde trasversali.

Le frequenze massime delle onde di agitazione termica sono date da

$$\nu_m = v_m \left( \frac{3 N \rho}{4 \pi A} \right)^{1/3} \quad [2]$$

$$(m = l, t)$$

nella quale con  $v_l$  e  $v_t$  sono state indicate rispettivamente le velocità delle onde longitudinali e trasversali, con  $N$  il numero di Avogadro e con  $A$  il peso atomico.

Il parametro  $\gamma_m$  è dato poi dalla relazione

$$\gamma_m = \frac{\partial \log (v_m \rho^{1/3})}{\partial \log \rho} . \quad [3]$$

Ora, in questa teoria, le costanti elastiche, che determinano le frequenze delle onde di agitazione termica, dipendono soltanto dalle forze interatomiche. Pertanto queste costanti dovranno essere valutate in modo da non implicare variazioni delle energie di agitazione termica e dovranno inoltre risultare indipendenti dalle energie termiche stesse.

Dato che l'equazione di stato [1] è valida per variazioni isotrope ed omogenee di volume, è conveniente introdurre il modulo di compressibilità  $K$ , il quale è legato alle velocità delle onde elastiche longitudinali e trasversali della nota relazione

$$\frac{K}{\rho} = v_l^2 - \frac{4}{3} v_t^2 . \quad [4]$$

La valutazione di  $K$  dovrà essere effettuata mediante la relazione

$$K = \varrho \left( \frac{\partial p}{\partial \varrho} \right)_{U_l, U_t} \quad [5]$$

e dovranno essere soddisfatte le condizioni

$$\left( \frac{\partial K}{\partial U_l} \right)_{\varrho, U_t} = 0, \quad \left( \frac{\partial K}{\partial U_t} \right)_{\varrho, U_l} = 0. \quad [6]$$

Dall'equazione di stato [1], dalla [5] e dalla [6] si ottiene facilmente

$$K = \varrho \frac{df}{d\varrho} \quad [7]$$

e

$$\varrho \gamma_m = \varrho_0 \gamma_{0m} \quad [8]$$

( $m = l, t$ )

nelle quali  $\varrho_0$  e  $\gamma_{0m}$  sono certi valori iniziali di queste grandezze.

Introducendo le [8] nella [3] risulta

$$v_m = v_{0m} \left( \frac{\varrho_0}{\varrho} \right)^{1/3} e^{\gamma_{0m}} \left( 1 - \frac{\varrho_0}{\varrho} \right) \quad [9]$$

( $m = l, t$ )

Queste espressioni mostrano che le velocità delle onde di agitazione termica longitudinali e trasversali dipendono soltanto dalla distanza media tra le particelle del solido.

È facile verificare poi che le frequenze massime risultano date dalla semplice relazione

$$v_m = v_{0m} e^{\gamma_{0m}} \left( 1 - \frac{\varrho_0}{\varrho} \right). \quad [10]$$

La pressione interna  $f(\varrho)$  dovuta all'interazione tra le particelle del solido ideale si ottiene ora facilmente.

Dalla [7] si ha  $\frac{df}{d\varrho} = \frac{K}{\varrho}$  e quindi tenuto conto delle [4] e [9] risulta

$$\frac{df}{d\varrho} = \left( \frac{\varrho_0}{\varrho} \right)^{2/3} \left[ v_{0l}^2 e^{2\gamma_{0l}} \left( 1 - \frac{\varrho_0}{\varrho} \right) - \frac{4}{3} v_{0t}^2 e^{2\gamma_{0t}} \left( 1 - \frac{\varrho_0}{\varrho} \right) \right]. \quad [11]$$

Se si pone

$$f_m(\varrho) - f_m(\varrho_0) = v_{om}^2 \int_{\varrho_0}^{\varrho} \left( \frac{\varrho_0}{\varrho} \right)^{2/3} e^{2\gamma_{om}} \left( 1 - \frac{\varrho_0}{\varrho} \right) d\varrho \quad [12]$$

( $m = l, t$ )

si avrà

$$f(\varrho) - f(\varrho_0) = f_l(\varrho) - f_l(\varrho_0) - \frac{4}{3} \left[ f_t(\varrho) - f_t(\varrho_0) \right]. \quad [13]$$

Tenuto conto che  $\gamma_{ol}$  e  $\gamma_{ot}$  sono assai prossimi, è stato mostrato <sup>(1)</sup> che la precedente può essere scritta, con buona approssimazione, nella forma

$$f(\varrho) - f(\varrho_0) = \frac{K_o}{\varrho_0} \int_{\varrho_0}^{\varrho} \left( \frac{\varrho_0}{\varrho} \right)^{2/3} e^{2\Gamma} \left( 1 - \frac{\varrho_0}{\varrho} \right) d\varrho \quad [14]$$

nella quale

$$\Gamma = \gamma_{ol} + \frac{a^2}{1-a^2} (\gamma_{ol} - \gamma_{ot}) \quad [15]$$

con

$$a^2 = \frac{4 v_{ot}^2}{3 v_{ol}^2}. \quad [16]$$

#### CALCOLI NUMERICI.

L'utilizzazione della [13] o della [14] per la valutazione della pressione dovuta all'interazione tra le particelle del solido ideale, richiede il calcolo di un'integrale del tipo

$$F(x) = \int_0^x \xi^{-2} e^{-\frac{2}{3}\xi} d\xi \quad [17]$$

come risulta da una facile trasformazione della [12] o della [14].

Tabella I

| $x$   | $F(x)$                       | $x$   | $F(x)$                      | $x$   | $F(x)$                      | $x$   | $F(x)$                      |
|-------|------------------------------|-------|-----------------------------|-------|-----------------------------|-------|-----------------------------|
| 0     | 0                            | 0,150 | 0,860193 · 10 <sup>-4</sup> | 0,400 | 0,169266 · 10 <sup>-1</sup> | 0,700 | 0,880229 · 10 <sup>-1</sup> |
| 0,005 | 0,117541 · 10 <sup>-89</sup> | 0,155 | 0,110911 · 10 <sup>-3</sup> | 0,410 | 0,184731 · 10 <sup>-1</sup> | 0,710 | 0,910791 · 10 <sup>-1</sup> |
| 0,010 | 0,791021 · 10 <sup>-46</sup> | 0,160 | 0,140907 · 10 <sup>-3</sup> | 0,420 | 0,200879 · 10 <sup>-1</sup> | 0,720 | 0,941674 · 10 <sup>-1</sup> |
| 0,015 | 0,404276 · 10 <sup>-31</sup> | 0,165 | 0,176618 · 10 <sup>-3</sup> | 0,430 | 0,217701 · 10 <sup>-1</sup> | 0,730 | 0,972868 · 10 <sup>-1</sup> |
| 0,020 | 0,102038 · 10 <sup>-23</sup> | 0,170 | 0,218668 · 10 <sup>-3</sup> | 0,440 | 0,235184 · 10 <sup>-1</sup> | 0,740 | 0,100436                    |
| 0,025 | 0,300763 · 10 <sup>-19</sup> | 0,175 | 0,267686 · 10 <sup>-3</sup> | 0,450 | 0,253317 · 10 <sup>-1</sup> | 0,750 | 0,103615                    |
| 0,030 | 0,299527 · 10 <sup>-16</sup> | 0,180 | 0,324307 · 10 <sup>-3</sup> | 0,460 | 0,272088 · 10 <sup>-1</sup> | 0,760 | 0,106822                    |
| 0,035 | 0,427706 · 10 <sup>-14</sup> | 0,185 | 0,389162 · 10 <sup>-3</sup> | 0,470 | 0,291484 · 10 <sup>-1</sup> | 0,770 | 0,110057                    |
| 0,040 | 0,180690 · 10 <sup>-12</sup> | 0,190 | 0,462876 · 10 <sup>-3</sup> | 0,480 | 0,311493 · 10 <sup>-1</sup> | 0,780 | 0,113319                    |
| 0,045 | 0,338033 · 10 <sup>-11</sup> | 0,195 | 0,546066 · 10 <sup>-3</sup> | 0,490 | 0,332101 · 10 <sup>-1</sup> | 0,790 | 0,116606                    |
| 0,050 | 0,356902 · 10 <sup>-10</sup> | 0,200 | 0,639337 · 10 <sup>-3</sup> | 0,500 | 0,353230 · 10 <sup>-1</sup> | 0,800 | 0,119918                    |
| 0,055 | 0,248245 · 10 <sup>-9</sup>  | 0,210 | 0,858463 · 10 <sup>-3</sup> | 0,510 | 0,375063 · 10 <sup>-1</sup> | 0,810 | 0,123255                    |
| 0,060 | 0,126134 · 10 <sup>-8</sup>  | 0,220 | 0,112475 · 10 <sup>-2</sup> | 0,520 | 0,397390 · 10 <sup>-1</sup> | 0,820 | 0,126615                    |
| 0,065 | 0,502974 · 10 <sup>-8</sup>  | 0,230 | 0,144236 · 10 <sup>-2</sup> | 0,530 | 0,420263 · 10 <sup>-1</sup> | 0,830 | 0,129998                    |
| 0,070 | 0,165695 · 10 <sup>-7</sup>  | 0,240 | 0,181509 · 10 <sup>-2</sup> | 0,540 | 0,443668 · 10 <sup>-1</sup> | 0,840 | 0,133403                    |
| 0,075 | 0,468283 · 10 <sup>-7</sup>  | 0,250 | 0,224633 · 10 <sup>-2</sup> | 0,550 | 0,467594 · 10 <sup>-1</sup> | 0,850 | 0,136829                    |
| 0,080 | 0,110802 · 10 <sup>-6</sup>  | 0,260 | 0,273907 · 10 <sup>-2</sup> | 0,560 | 0,492025 · 10 <sup>-1</sup> | 0,860 | 0,140276                    |
| 0,085 | 0,262773 · 10 <sup>-6</sup>  | 0,270 | 0,329591 · 10 <sup>-2</sup> | 0,570 | 0,516950 · 10 <sup>-1</sup> | 0,870 | 0,143742                    |
| 0,090 | 0,542307 · 10 <sup>-6</sup>  | 0,280 | 0,391904 · 10 <sup>-2</sup> | 0,580 | 0,542355 · 10 <sup>-1</sup> | 0,880 | 0,147228                    |
| 0,095 | 0,104055 · 10 <sup>-5</sup>  | 0,290 | 0,461028 · 10 <sup>-2</sup> | 0,590 | 0,568227 · 10 <sup>-1</sup> | 0,890 | 0,150733                    |
| 0,100 | 0,187632 · 10 <sup>-5</sup>  | 0,300 | 0,537113 · 10 <sup>-2</sup> | 0,600 | 0,594554 · 10 <sup>-1</sup> | 0,900 | 0,154256                    |
| 0,105 | 0,320741 · 10 <sup>-5</sup>  | 0,310 | 0,620270 · 10 <sup>-2</sup> | 0,610 | 0,621324 · 10 <sup>-1</sup> | 0,910 | 0,157796                    |
| 0,110 | 0,523491 · 10 <sup>-5</sup>  | 0,320 | 0,710385 · 10 <sup>-2</sup> | 0,620 | 0,648524 · 10 <sup>-1</sup> | 0,920 | 0,161353                    |
| 0,115 | 0,820617 · 10 <sup>-5</sup>  | 0,330 | 0,808112 · 10 <sup>-2</sup> | 0,630 | 0,676143 · 10 <sup>-1</sup> | 0,930 | 0,164926                    |
| 0,120 | 0,124163 · 10 <sup>-4</sup>  | 0,340 | 0,912882 · 10 <sup>-2</sup> | 0,640 | 0,704168 · 10 <sup>-1</sup> | 0,940 | 0,168515                    |
| 0,125 | 0,182085 · 10 <sup>-4</sup>  | 0,350 | 0,102490 · 10 <sup>-1</sup> | 0,650 | 0,732588 · 10 <sup>-1</sup> | 0,950 | 0,172119                    |
| 0,130 | 0,259724 · 10 <sup>-4</sup>  | 0,360 | 0,114415 · 10 <sup>-1</sup> | 0,660 | 0,761393 · 10 <sup>-1</sup> | 0,960 | 0,175738                    |
| 0,135 | 0,361422 · 10 <sup>-4</sup>  | 0,370 | 0,127062 · 10 <sup>-1</sup> | 0,670 | 0,790569 · 10 <sup>-1</sup> | 0,970 | 0,179371                    |
| 0,140 | 0,491931 · 10 <sup>-4</sup>  | 0,380 | 0,140423 · 10 <sup>-1</sup> | 0,680 | 0,820108 · 10 <sup>-1</sup> | 0,980 | 0,183018                    |
| 0,145 | 0,656373 · 10 <sup>-4</sup>  | 0,390 | 0,154494 · 10 <sup>-1</sup> | 0,690 | 0,849998 · 10 <sup>-1</sup> | 0,990 | 0,186677                    |
|       |                              |       |                             |       |                             | 1,000 | 0,190350                    |

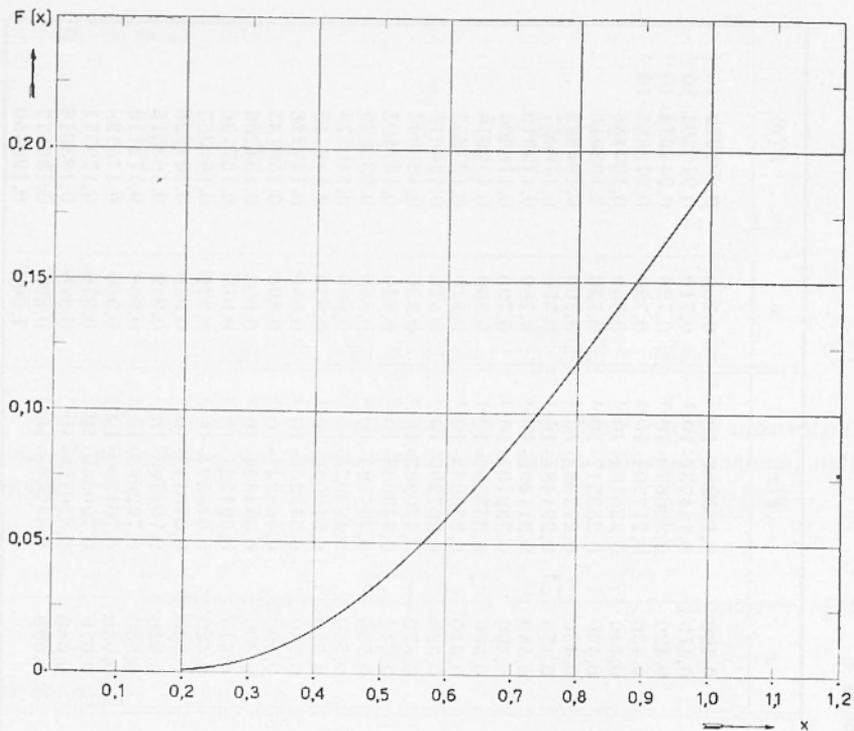


Fig. 1

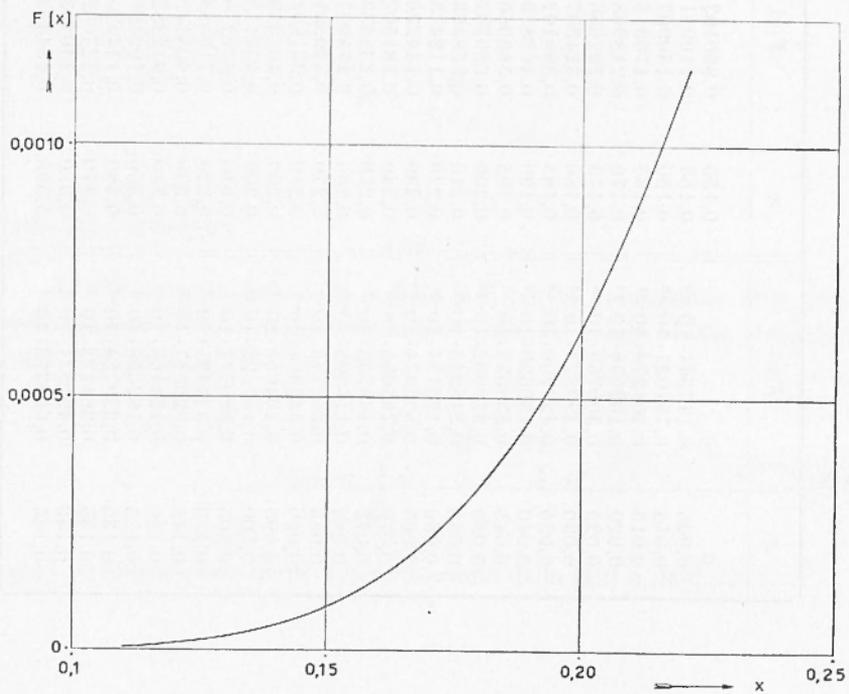


Fig. 2

Il calcolo numerico della funzione  $F(x)$  è stato effettuato dall'autore in occasione di precedenti lavori <sup>(1)</sup>, <sup>(2)</sup>, i quali però contengono soltanto diagrammi particolari, mentre è conveniente avere a disposizione un'adeguata serie di valori di questa funzione, per l'utilizzazione dell'equazione di stato [1].

Si riporta pertanto in questa nota, una tabellazione della  $F(x)$  eseguita dall'Istituto per le Applicazioni del Calcolo, con la calcolatrice elettronica F.I.N.A.C., la quale è da ritenere sufficiente per molte applicazioni.

Le Figg. 1 e 2 illustrano l'andamento della funzione  $F(x)$ .

#### BIBLIOGRAFIA

- (1) P. E. VALLE, *Un'equazione di stato per i solidi*. « Annali di Geofisica », 6, 183-197 (1953).
- (2) P. E. VALLE, *Una stima del punto di fusione del ferro sotto alle pressioni*. « Annali di Geofisica ». 8, 189-200, (1955).
-