

# Oro liquido: dinamica ionica collettiva tramite Scattering Brillouin di Neutroni

**Candidato:** Matteo Puglini (puglini@hotmail.it)

**Relatore:** Eleonora Guarini Grisaldi Taja

Lo studio della dinamica ionica collettiva dei metalli liquidi è interessante perché essi possono essere considerati i sistemi che, come i gas nobili, meglio approssimano il modello ideale di un liquido semplice monoatomico ma, più marcatamente dei sistemi nobili, mostrano ben definiti modi collettivi acustici. L'oro liquido, nonostante l'ulteriore interesse per la sua natura monoisotopica, non è stato ancora studiato per quanto riguarda la sua dinamica microscopica. È un (primo) passo molto utile quindi determinare, per l'oro, la curva di dispersione delle eccitazioni collettive e i parametri che caratterizzano i processi di smorzamento dei modi acustici, nonché confrontare queste proprietà con quelle analoghe già ottenute in altri sistemi liquidi, sia metallici sia isolanti.

Questa tesi riporta uno studio sperimentale delle eccitazioni collettive nella dinamica ionica dell'oro liquido, svolto tramite un esperimento di spettroscopia di neutroni avente come obiettivo la determinazione del fattore di struttura dinamico  $S(Q, \omega)$ . Questo è definito come la trasformata di Fourier spazio-temporale della funzione di autocorrelazione delle densità di van Hove  $G(r, t)$ , la quale rende conto delle correlazioni di densità microscopica a posizioni e tempi diversi. La frequenza spettrale  $\omega$  è legata dalla relazione  $E = \hbar\omega$  all'energia  $E$  scambiata in un esperimento di scattering, similmente  $\hbar Q$  rappresenta l'impulso scambiato fra neutrone e campione.

I valori di  $Q$  più rilevanti per la dinamica dei modi acustici ( $Q < \sim 2 \text{ \AA}^{-1}$ ) sono quelli tipici del *Neutron Brillouin Scattering*, caratterizzato da piccoli angoli di scattering. L'esperimento è stato quindi eseguito presso il reattore dell'Institut Laue-Langevin di Grenoble utilizzando lo spettrometro a tempo di volo BRISP, dedicato a questa specifica tecnica. Il campione liquido è stato realizzato fondendo, dentro una fornace, l'oro contenuto in una cella di molibdeno.

Nella tesi si descrivono i dettagli sperimentali, il principio di funzionamento dello spettrometro BRISP, le caratteristiche del campione d'oro e le misure effettuate. I dati grezzi sono stati poi elaborati per tenere conto di vari effetti (attenuazione, risoluzione in energia, scattering multiplo), al fine di ricavare dalle intensità misurate la grandezza di interesse. Infine, i parametri rilevanti per la descrizione della dinamica, e in particolare le energie dei modi di oscillazione, sono stati ottenuti, a ciascun valore di  $Q$ , dai fit di un modello di  $S(Q, \omega)$ .

Partendo dalla teoria idrodinamica, che è valida per valori molto bassi di  $Q$  e prevede che lo spettro  $S(Q, \omega)$  sia dato da un tripletto di lorentziane noto come "tripletto Rayleigh-Brillouin", l'estensione ad altri regimi dinamici è possibile ricorrendo alla teoria della funzione di memoria, che permette di definire modelli di  $S(Q, \omega)$  tra i quali l'idrodinamica generalizzata e il modello viscoelastico, e di esplicitare il legame con il comportamento dinamico dell'oscillatore armonico smorzato. Il modello idrodinamico generalizzato si è dimostrato adeguato a riprodurre lo spettro delle eccitazioni collettive in tutto l'intervallo di  $Q$  investigato sperimentalmente.

A supporto di questo lavoro sperimentale, il gruppo di Calcolo Scientifico dell'ILL ha svolto simulazioni *ab initio* della  $S(Q, \omega)$  dello stesso sistema. Dopo averne verificato l'accordo con le misure neutroniche, lo stesso modello (idrodinamica generalizzata) usato nell'analisi dei risultati sperimentali è stato impiegato come funzione di fit ai dati simulati. Questi, però, hanno anche permesso di mostrare che una descrizione ancora migliore della  $S(Q, \omega)$  è ottenuta con il modello viscoelastico, che ha rivelato la sua capacità di descrivere lo spettro delle eccitazioni collettive con grande accuratezza e in un range di  $Q$  molto più esteso di quello ottenibile sperimentalmente.

La curva di dispersione risultante è stata confrontata sia con quella sperimentale, sia con quelle di un altro metallo liquido (cadmio) e di un isolante ( $\text{CO}_2$  liquida), per evidenziarne la similarità.