

ABSTRACT – Caratterizzazione di un modello Mercedes-Benz dell'acqua su reticolo esagonale

Abbiamo caratterizzato un modello Mercedes-Benz dell'acqua su reticolo esagonale, mediante metodo Monte Carlo, al fine di osservare i suoi comportamenti macroscopici in funzione di vari parametri. Il modello mostra un interesse qualitativo e didattico visti i suoi comportamenti peculiari a partire da dimensioni limitate del reticolo e simulazioni di ridotto peso computazionale.

Abbiamo effettuato simulazioni con due differenti piattaforme (NetLogo e C) osservando il comportamento al variare di parametri come i termini energetici (potenziale chimico, interazione Lennard-Jones, legame a idrogeno, termine "di tripletta"), la dimensione del reticolo, la degenerazione degli stati dei nodi, la presenza di nuclei già congelati o di stati che simulano sostanze estranee (sale). Il sistema mostra, coerentemente con l'acqua, temperature di congelamento o evaporazione che variano coi parametri e mostra diverse strutture congelate coerentemente con l'acqua. Mostra inoltre come alcuni stati apparentemente liquidi congelino in presenza di un nucleo di condensazione sufficientemente grande, coerentemente con il fenomeno del sovraraffreddamento. Mostra infine come la presenza di sostanze estranee riduca drasticamente la temperatura di congelamento.