



UNIVERSITÀ DEGLI STUDI DI MILANO

Facoltà di Scienze e Tecnologie
Laurea Triennale in Fisica

**Meccanismi microscopici di
dissipazione in un modello
bidimensionale**

Relatore: Prof. Nicola Manini

Correlatore: Dr. Andrea Vanossi

Jacopo Ciccoianni

Matricola n° 811388

A.A. 2014/2015

Codice PACS: 68.65.-k

Meccanismi microscopici di dissipazione in un modello bidimensionale

Jacopo Ciccoianni

Dipartimento di Fisica, Università degli Studi di Milano,
Via Celoria 16, 20133 Milano, Italia

Aprile 21, 2016

Sommario

In questo lavoro di tesi caratterizziamo un modello per la simulazione di fenomeni di attrito dinamico su scala microscopica. Il modello è costituito da una particella puntiforme, che rappresenta uno slider come ad esempio la punta di un microscopio a forza atomica, che si muove sopra un lato di un reticolo cristallino bidimensionale interagendovi debolmente e trasferendo così la propria energia al cristallo. Il reticolo è a sua volta rappresentato come composto da atomi puntiformi collegati tra loro da molle armoniche a primi vicini. In presenza di una debole dissipazione riguardante unicamente il cristallo abbiamo studiato il trasferimento d'energia tra lo slider e il cristallo stesso al variare della velocità e della grandezza dello slider. Questo trasferimento d'energia è il risultato di una forza d'attrito che abbiamo valutato mediante una stima dell'accelerazione media dello slider stesso.

Relatore: *Prof. Nicola Manini*

Correlatore: *Dr. Andrea Vanossi*

Indice

1	Introduzione	5
2	Il modello	6
3	Simulazioni	10
4	Discussione e conclusioni	16
	Riferimenti bibliografici	18

1 Introduzione

Generalmente, quando si parla di attrito, ci si riferisce a tutti quei fenomeni in cui si verifica una dissipazione dell'energia meccanica posseduta da un corpo attraverso una sua conversione in energia termica. Lo studio dell'attrito trova applicazioni in innumerevoli situazioni, anche quotidiane, e per questo motivo costituisce oggetto di indagine fin dai tempi di Aristotele. Ciononostante non si è ancora giunti ad una comprensione soddisfacente di molti aspetti di questo fenomeno; in particolare a livello microscopico, ambito nel quale si parla di nanoattrito, mancano ancora dei modelli teorici che forniscano una buona visione d'insieme di tutte le peculiarità di questi fenomeni.

Per quanto riguarda il nanoattrito, l'interazione tra due corpi che scivolano o scorrono l'uno sull'altro è naturalmente ricondotta a delle forze elettromagnetiche che agiscono microscopicamente tra i nuclei e gli elettroni dei due corpi. Il problema concettuale si pone a partire dal fatto che l'interazione Coulombiana è conservativa, mentre i fenomeni di attrito sono dissipativi. Analogamente trattando il solo moto dei nuclei nell'approssimazione adiabatica, almeno per un isolante non ci si aspetta un significativo trasferimento d'energia tra il sistema dei nuclei e quello degli elettroni. La dinamica dei nuclei è quindi in principio conservativa. Il problema fondamentale che rimane da chiarire è una riconciliazione dell'attrito e dei fenomeni dissipativi con una dinamica microscopica fondamentale conservativa. In passato si è tentato di descrivere l'attrito in termini di semplici modelli come quello di Prandtl-Tomlinson [1], utile a descrivere la transizione tra un regime di scivolamento "smooth" e il regime di stick-slip. Analogamente il modello di Frenkel-Kontorova [1] è frequentemente utilizzato per chiarire il ruolo dell'incommensurazione sull'attrito statico tra due superfici cristalline. Entrambi questi modelli introducono la dissipazione mediante un termine viscoso $F = -m\gamma\dot{x}$ "ad hoc", rinunciando così ad una descrizione fisica microscopica. È proprio questa la fondamentale debolezza di questi semplici modelli standard utilizzati per lo studio dei fenomeni dissipativi microscopici.

In dettaglio, il modello di Prandtl-Tomlinson assume che un punto materiale di massa m venga trascinato lungo un potenziale unidimensionale periodico da una molla di costante elastica K agganciata ad un supporto che si muove con velocità relativa v rispetto al potenziale periodico che rappresenta il substrato cristallino. Il potenziale totale percepito dal punto materiale è quindi costituito da due termini: il primo descrive l'interazione tra il punto ed il reticolo cristallino ed ha quindi una semplice forma sinusoidale mentre il secondo esprime l'interazione

elastica dovuta alla molla agganciata al supporto

$$U(x, t) = U_0 \cos\left(\frac{2\pi}{a}x\right) + \frac{K}{2}(x - vt)^2. \quad (1)$$

La dissipazione dell'energia meccanica in calore avviene tramite il termine di attrito viscoso determinato da γ , un coefficiente di dissipazione puramente empirico.

Il modello utilizzato nel presente lavoro intende superare la necessità d'introdurre una forza dissipativa per descrivere l'attrito. Per farlo includiamo nel modello l'elasticità del substrato cristallino sottostante, in modo tale che esso, al passaggio dello slider, si deformi trasmettendo dei fononi che si dissipano nel loro propagarsi attraverso il reticolo: così facendo si realizza un meccanismo per cui l'energia meccanica della particella si converte in calore. Nello specifico, il modello utilizzato come base di partenza è quello caratterizzato da G. Giusti [2] nel caso unidimensionale. Nel presente lavoro esso viene esteso al caso di substrato bidimensionale.

2 Il modello

Il codice utilizzato simula la dinamica bidimensionale di una particella, detta "slider" ed approssimata come un punto materiale, che scorre sul lato di un cristallo elastico nel suo stesso piano. Gli atomi del cristallo sono anch'essi considerati puntiformi, sono identici tra loro e nella loro configurazione d'equilibrio si dispongono su un reticolo esagonale. Il motivo della scelta di questa geometria consiste nel fatto che, volendo costruire un modello definito da un numero minimo di parametri, conviene considerare delle interazioni armoniche tra gli atomi del substrato che agiscono solamente a primi vicini. Se avessimo ad esempio adottato una cella primitiva quadrata un'interazione soltanto a primi vicini sarebbe insufficiente visto che il solido collaserebbe con l'applicazione di una anche minima forza di taglio, e per stabilizzarlo andrebbero inclusi termini a secondi vicini con la conseguente moltiplicazione dei parametri.

L'interazione tra lo slider e ciascun atomo del reticolo è espressa da un potenziale di Lennard-Jones. Dunque l'interazione totale tra cursore e substrato risulta essere la somma di questi potenziali. Dette x_j e y_j le coordinate spaziali del j -esimo atomo del reticolo, x_{SL} e y_{SL} le coordinate dello slider, $r_j = \sqrt{(y_{SL} - y_j)^2 + (x_{SL} - x_j)^2}$ è la distanza tra cursore e j -esimo atomo e l'interazione totale si scrive

$$V_{SL-C} = \sum_{j=1}^N V_{LJ}(r_j) \quad (2)$$

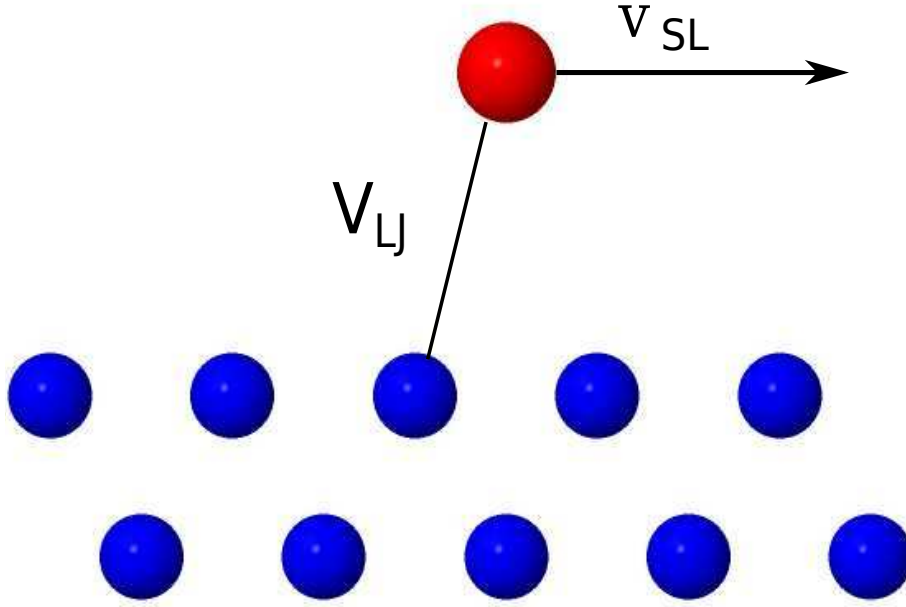


Figura 1: Uno sketch del modello studiato nel presente lavoro. Tutti gli atomi sono mobili, lo slider segue una dinamica conservativa interagendo mediante potenziali di Lennard-Jones con ognuno degli atomi del cristallo. Questi sono legati da molle armoniche e sentono una debole dissipazione viscosa

dove

$$V_{LJ}(r) = \begin{cases} V_{LJ}^{Th}(r) - V_{LJ}^{Th}(r_{cutoff}) & \text{se } r < r_{cutoff} \\ 0 & \text{altrimenti} \end{cases} . \quad (3)$$

Qui V_{LJ}^{Th} è il normale potenziale di Lennard-Jones

$$V_{LJ}^{Th}(r) = \varepsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r} \right)^{12} - 2 \left(\frac{\sigma}{r} \right)^6 \right] \quad (4)$$

con distanza di equilibrio σ ed energia di interazione ε . La costruzione di Eq. (3) serve a evitare che il potenziale abbia un raggio d'azione infinito permettendo di simularlo senza problemi anche in una supercella periodica. Nelle simulazioni abbiamo posto $r_{cutoff} = 15a$, dove a è la distanza d'equilibrio tra gli atomi del reticolo. Il raggio d'azione σ rappresenta in pratica la "taglia" dello slider e va scelto dell'ordine di una o poche unità del passo reticolare a del cristallo. Per quanto riguarda le interazioni interne al reticolo ci si è posti in approssimazione

armonica considerando soltanto le interazioni tra primi vicini.

$$V\{\{\vec{r}_j\}\} = \frac{1}{2}K \sum_{\langle i,j \rangle} (\vec{r}_i - \vec{r}_j - a)^2 \quad (5)$$

dove $\langle i, j \rangle$ indica le coppie di primi vicini e K la costante elastica d'interazione. Scegliamo un sistema di unità di misura tali per cui $K = m = a = 1$ dove m è la massa degli atomi del cristallo. In questo sistema le velocità si esprimono in unità di $v_0 = a\sqrt{K/m}$ e le energie in unità di Ka^2 . Nei calcoli fissiamo la massa dello slider $m_{SL} = 10m$ e l'energia di LJ $\varepsilon = 0.001Ka^2$.

Facciamo inoltre agire sugli atomi del reticolo una forza dissipativa che si scrive

$$F_{diss,j} = -m\gamma\dot{\vec{r}}_j. \quad (6)$$

Il motivo per cui viene introdotta tale dissipazione è il seguente: come detto precedentemente, in questo modello la perdita di energia cinetica dello slider si manifesta sotto forma di fononi che si generano al contatto con il substrato e propagano nel reticolo convertendosi in vibrazioni disordinate ed in ultima analisi in calore. Dato che il modello punta a rappresentare il cristallo macroscopico mediante una piccola cella ripetuta periodicamente, se non ci fosse alcun termine dissipativo relativo alle onde fononiche queste ultime sarebbero libere di propagare liberamente nella supercella, ritornando alla regione dello slider, influenzandone il moto e di conseguenza la forza di attrito. In pratica questo termine dissipativo simula l'effetto della dissipazione dell'energia a grande distanza dal punto di contatto. Evidentemente γ va scelto piccolo in modo da non perturbare significativamente il moto degli atomi al punto di contatto, e nel contempo abbastanza grande da attenuare i fononi emessi prima del loro ritorno al punto di contatto. Sul problema della scelta di γ torneremo sotto nella Sezione 3.

Vista la completa libertà nella scelta della velocità dello slider, per effettuare simulazioni di condizioni fisicamente significative è necessario confrontarla con la velocità del suono v_s dei fononi del reticolo [3, 4]. Quest ultima si ottiene a partire dall' equazione per i modi normali

$$\sum_{\beta} \left(\omega^2 \delta_{\alpha\beta} - \frac{1}{m} \Phi_{\alpha\beta} \right) \bar{u}_{\beta} = 0 \quad (7)$$

nella quale $\Phi_{\alpha\beta}$ è la matrice delle derivate seconde del potenziale interatomico (5) rispetto alle coordinate spaziali di ogni atomo valutate all'equilibrio. In questo caso bidimensionale è una matrice $2N \times 2N$. Essa può essere scritta come $D = \frac{1}{m}\Phi$ ed è detta matrice dinamica. Dato che si ha a che fare con un cristallo si

può sfruttare la sua simmetria per semplificare la diagonalizzazione della matrice dinamica. Infatti la matrice dinamica è invariante per traslazioni

$$D_{j\xi j'\xi'} = D_{j''\xi j'''\xi'} \text{ se } \vec{R}_j - \vec{R}_{j''} = \vec{R}_{j'} - \vec{R}_{j'''}. \quad (8)$$

Questo consente di farne la trasformata di Fourier per ottenere una matrice 2×2

$$\tilde{D}_{\xi\xi'} = \sum_j e^{-i(\vec{R}_j - \vec{R}_{j'})\vec{q}} D_{j\xi j'\xi'} \quad (9)$$

la quale è indipendente dalla scelta di j' . Per il nostro reticolo esagonale con vettori primitivi $\vec{a}_1 = (a, 0)$ e $\vec{a}_2 = (\frac{a}{2}, \frac{\sqrt{3}}{2}a)$, la matrice \tilde{D} ottenuta risulta:

$$\begin{pmatrix} \tilde{D}_{xx} & \tilde{D}_{xy} \\ \tilde{D}_{yx} & \tilde{D}_{yy} \end{pmatrix} \quad (10)$$

i cui coefficienti si scrivono esplicitamente come

$$\tilde{D}_{xx} = \frac{K}{m} \left[3 - \frac{1}{2} \cos\left(\frac{q_x}{2}a + \frac{\sqrt{3}}{2}q_y a\right) - \frac{1}{2} \cos\left(\frac{q_x}{2}a - \frac{\sqrt{3}}{2}q_y a\right) - 2 \cos(q_x a) \right] \quad (11)$$

$$\tilde{D}_{xy} = \tilde{D}_{yx} = \frac{K}{m} \left[\frac{\sqrt{3}}{2} \cos\left(\frac{q_x}{2}a - \frac{\sqrt{3}}{2}q_y a\right) - \frac{\sqrt{3}}{2} \cos\left(\frac{q_x}{2}a + \frac{\sqrt{3}}{2}q_y a\right) \right] \quad (12)$$

$$\tilde{D}_{yy} = \frac{K}{m} \left[3 - \frac{3}{2} \cos\left(\frac{q_x}{2}a + \frac{\sqrt{3}}{2}q_y a\right) - \frac{3}{2} \cos\left(\frac{q_x}{2}a - \frac{\sqrt{3}}{2}q_y a\right) \right]. \quad (13)$$

Si arriva così alla seguente equazione agli autovalori;

$$\sum_{\xi'} [\omega^2 \delta_{\xi\xi'} - \tilde{D}_{\xi\xi'}(\vec{q})] \varepsilon_{\xi'} = 0. \quad (14)$$

Gli autovalori di questa matrice si ottengono come esplicite funzioni di q_x e q_y attraverso la relazione

$$\lambda_{1/2} = \frac{\tilde{D}_{xx} + \tilde{D}_{yy}}{2} \pm \sqrt{\frac{(\tilde{D}_{xx} - \tilde{D}_{yy})^2}{2} + \tilde{D}_{xy}^2}. \quad (15)$$

Le frequenze normali sono date dalla formula $\omega_{1/2} = \sqrt{\lambda_{1/2}}$. Nel limite di piccolo $|\vec{q}|$, ovvero di grande lunghezza d'onda, le frequenze risultano proporzionali a $|\vec{q}|$

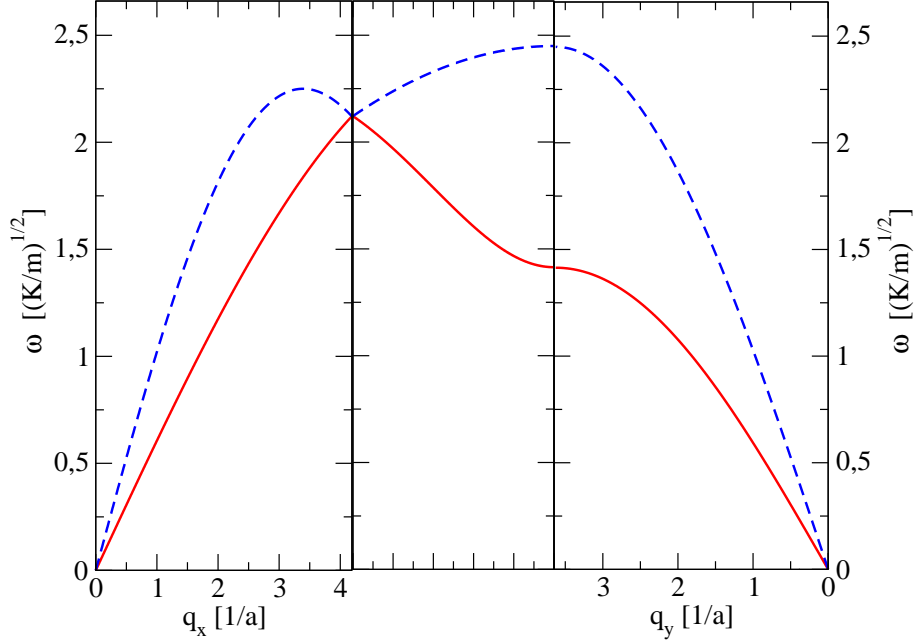


Figura 2: Dispersione delle frequenze angolari fononiche del cristallo esagonale con interazioni elastiche a primi vicini, valutate nelle direzioni ad alta simmetria della prima zona di Brillouin

e indipendenti dalla direzione di \vec{q} . Si hanno quindi onde acustiche con velocità del suono isotrope. Quella longitudinale è $v_s^L = \frac{3}{2\sqrt{2}} v_0$ e quella trasversale è $v_s^T = \frac{\sqrt{3}}{2\sqrt{2}} v_0$. Allontanandosi da $\vec{q} = 0$, le dispersioni deviano dalla linearità, nella maniera illustrata in Fig. 2. La massima frequenza vibrazionale si ha per $\vec{q} = \left(\frac{\pi}{a}, \frac{\pi}{\sqrt{3}a}\right)$, equivalentemente per $\vec{q} = \left(0, \frac{2\pi}{\sqrt{3}a}\right)$ e per altri quattro punti nella prima zona di Brillouin, e vale $\omega^{Max} = \sqrt{6}\sqrt{K/m}$.

3 Simulazioni

Come in Ref.[2] il protocollo di simulazione consiste in due calcoli consecutivi i quali, per integrare l'equazione di Newton e ottenere le evoluzioni temporali delle variabili dinamiche $\{\vec{r}_j\}$ e \vec{r}_{SL} , si basano su un metodo di Runge-Kutta adattivo al quarto ordine implementato in routines standard. Nel primo calcolo la configurazione di partenza del reticolo è quella di equilibrio e la velocità dello slider lungo l'asse x è mantenuta costante al valore programmato come velocità iniziale della simulazione. Lo scopo di questo calcolo è far sì che le deformazioni del reticolo indotte dallo scivolamento dello slider raggiungano una condizione

di stazionarietà, che va appurata verificando l'andamento dell'energia cinetica in funzione del tempo che deve lasciarsi alle spalle i transienti, arrivando a oscillare periodicamente. Durante entrambe le simulazioni lo slider è lasciato libero di muoversi lungo l'asse delle y , pertanto il primo calcolo deve essere sufficientemente lungo da consentire anche lo smorzamento del "rimbalzo" iniziale dello slider sopra il reticolo. Il secondo calcolo prende come configurazione iniziale quella finale del primo calcolo. A differenza del primo calcolo, ora si consente alla componente orizzontale della velocità dello slider di modificarsi in funzione del tempo per effetto delle interazioni con il substrato. Per misurare la forza di attrito ci siamo focalizzati sui dati ricavati dal secondo calcolo.

Con il protocollo sopra descritto abbiamo eseguito dei test preliminari in modo da identificare una regione di parametri in cui l'attrito risulti indipendente da γ . Il motivo di questi calcoli risiede nel fatto che le simulazioni aspirano ad avvicinarsi il più possibile ad una situazione realistica in cui il cristallo è praticamente infinito rispetto alle dimensioni dello slider e non è presente alcuna dissipazione viscosa associata al moto degli atomi. Queste prime simulazioni sono state effettuate nelle seguenti condizioni

- $\sigma = 3a$;
- reticolo di dimensioni $156a \times 179\frac{\sqrt{3}}{2}a \simeq 156a \times 155.02a$;
- componente orizzontale della velocità iniziale dello slider $v_{SL}^i = 0.1v_0$.

Per valutare la forza di attrito F_a utilizzando i dati della velocità in funzione del tempo si è agito in questo modo: abbiamo selezionato un intervallo temporale in cui la velocità diminuisce del 10% e con un fit lineare abbiamo estrapolato la pendenza media di questa curva, corrispondente all'accelerazione media (negativa) dello slider in questo intervallo temporale. La forza d'attrito si ottiene poi banalmente moltiplicando l'accelerazione per la massa dello slider $10m$ e per un segno meno. In questa prima fase ci siamo resi conto della lentezza a smorzarsi del rimbalzo iniziale dello slider e quindi il protocollo di simulazione per i grafici che seguono è stato modificato leggermente: effettuiamo un lungo calcolo iniziale a γ fissato che consenta alla coordinata y dello slider di stabilizzarsi a sufficienza, fino a rendere visibile l'oscillazione alla frequenza di "washboard", cioè l'oscillazione dovuta alle interazioni individuali con i singoli atomi del reticolo. Abbiamo salvato la configurazione finale di questa lunga simulazione e l'abbiamo quindi utilizzata come punto di partenza per i successivi calcoli, con lo scopo di misurare la forza di attrito per il γ desiderato, realizzati secondo il protocollo di simulazione illustrato inizialmente. Il vantaggio nel procedere in questo modo risulta nella brevità della prima parte delle simulazioni. È infatti possibile utilizzare questo approccio simulativo visto che la variazione del parametro dissipativo del substrato modifica in maniera quasi impercettibile la y media. L'andamento

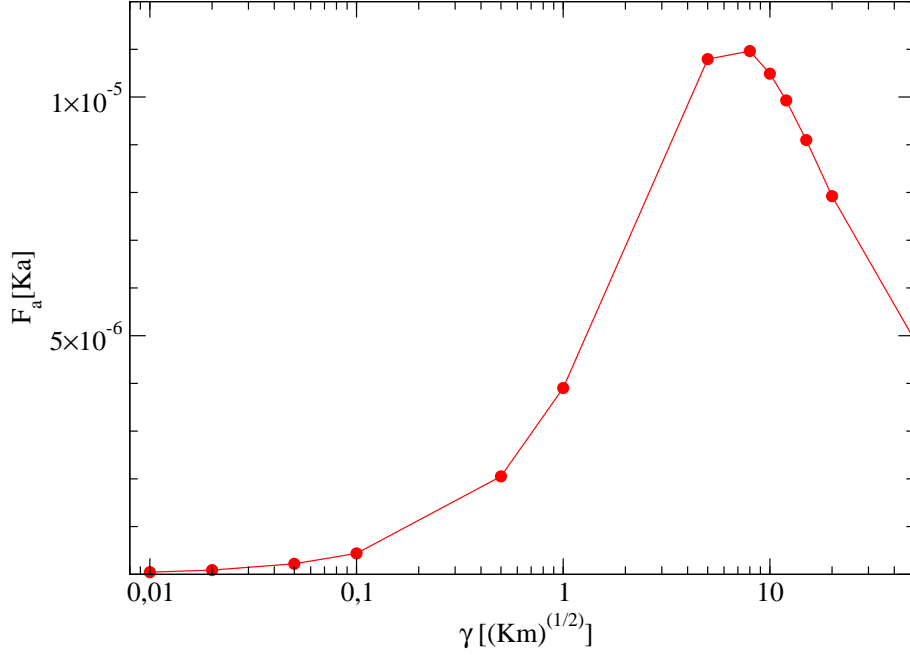


Figura 3: La forza di attrito subita dallo slider per diversi valori del coefficiente di dissipazione γ agente sul substrato cristallino per una lunghezza di Lennard-Jones (dimensioni dello slider) $\sigma = 3a$, simulata con un cristallo di dimensioni $156a \times 179\frac{\sqrt{3}}{2}a$.

di F_a in funzione di γ ricavato con questo metodo è riportato in Fig. 3.

Esiste dunque un'evidente dipendenza di F_a da γ . In sostanza ci siamo resi conto che per $\sigma = 3a$ lo slider è tanto "grande" da "vedere" una superficie essenzialmente piatta, non in grado di produrre un attrito sufficientemente grande da risultare misurabile con il nostro metodo. In pratica ciò che la Fig. 3 mostra è solamente l'attrito non fisico prodotto dal termine viscoso di Eq. (6).

Abbiamo quindi effettuato una nuova serie di simulazioni con uno slider sostanzialmente più piccolo $\sigma = a$. La risultante variazione dell'attrito con la viscosità γ è riportata in Fig. 4. L'andamento mostra una regione in cui F_a è sostanzialmente indipendente da γ , che si manifesta per $\gamma < 0.05(Km)^{\frac{1}{2}}$, mentre per valori di γ superiori si nota una decrescita sempre più rapida dell'attrito. Per $\sigma = a$, il rallentamento dello slider è causato principalmente dalle interazioni individuali con gli atomi alla superficie del cristallo, generando un attrito molto più significativo che rende trascurabile il fattore γ fintanto che γ stesso è sufficientemente piccolo. In altre parole, nei due casi analizzati, la diminuzione di velocità dello slider è causata da fenomeni di attrito distinti tra loro, con l'osservazione che nel caso di $\sigma = 3a$ si ha a che fare con un attrito non fisico, dal momento che dipende fortemente da un parametro non realistico. L'attrito "intrinseco", legato

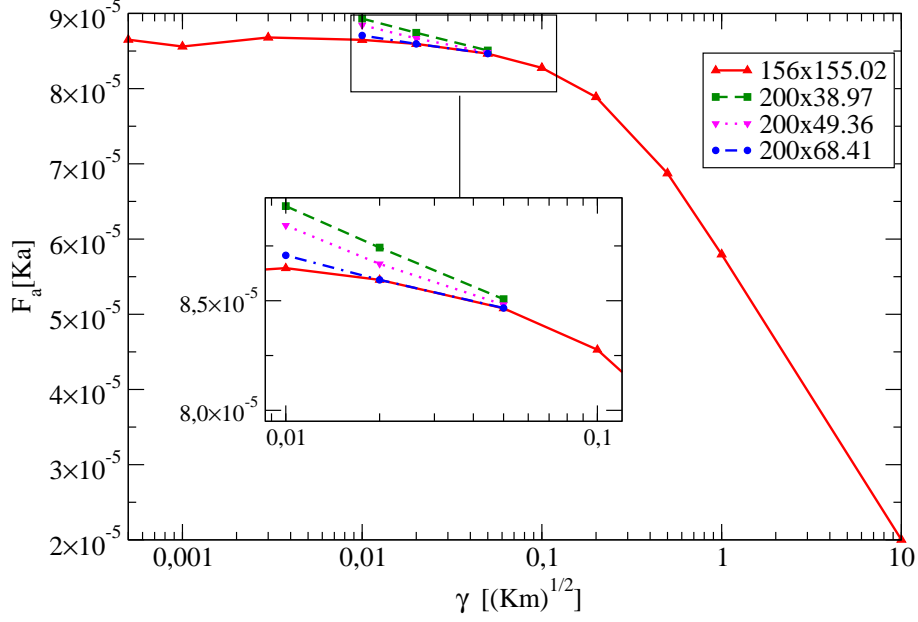


Figura 4: La forza di attrito per velocità iniziale dello slider $v_{SL} = 0,1$ in funzione del coefficiente di dissipazione γ del cristallo. Nella regione d'interesse i valori della forza d'attrito sono valutati per diverse taglie del substrato cristallino. È inserito un ingrandimento della regione d'interesse.

all'eccitazione di fononi che vanno a portar l'energia a grande distanza dal punto di contatto, risulta invece misurabile per lo slider di piccolo raggio $\sigma = a$.

I valori di γ compatibili con un attrito sostanzialmente indipendente da esso sono piuttosto piccoli: è necessario accertarsi che le onde elastiche non tornino al punto di contatto. A questo scopo, focalizzandoci sui valori di γ compresi tra 0,01 e 0,05, abbiamo modificato le dimensioni del substrato cristallino verificando le dimensioni minimali compatibili con una stima dell'attrito essenzialmente identica. Abbiamo simulato cristalli di differente "spessore", con le seguenti dimensioni: $200a \times 45\frac{\sqrt{3}}{2}a$, $200a \times 57\frac{\sqrt{3}}{2}a$, $200a \times 79\frac{\sqrt{3}}{2}a$. I risultati sono mostrati in Fig. 4. Dalla figura si vede che per i cristalli più "sottili", per $\gamma = 0,01$ le onde fononiche generate sono in grado di raggiungere il fondo del substrato, venire riflesse e tornare alla regione dello slider influenzando l'attrito. Alla luce di questi risultati abbiamo scelto il reticolo di dimensioni $200a \times 79\frac{\sqrt{3}}{2}a$ per eseguire i calcoli successivi e abbiamo adottato $\gamma = 0,02$, al bordo del plateau d'attrito.

Avendo fissato i parametri principali della simulazione, ci siamo focalizzati sullo studio dell'andamento della forza d'attrito al variare della velocità dello slider, mantenendo il protocollo di simulazione standard esposto all'inizio di questa sezione. Per mappare la forza d'attrito su un range molto ampio di velocità dello

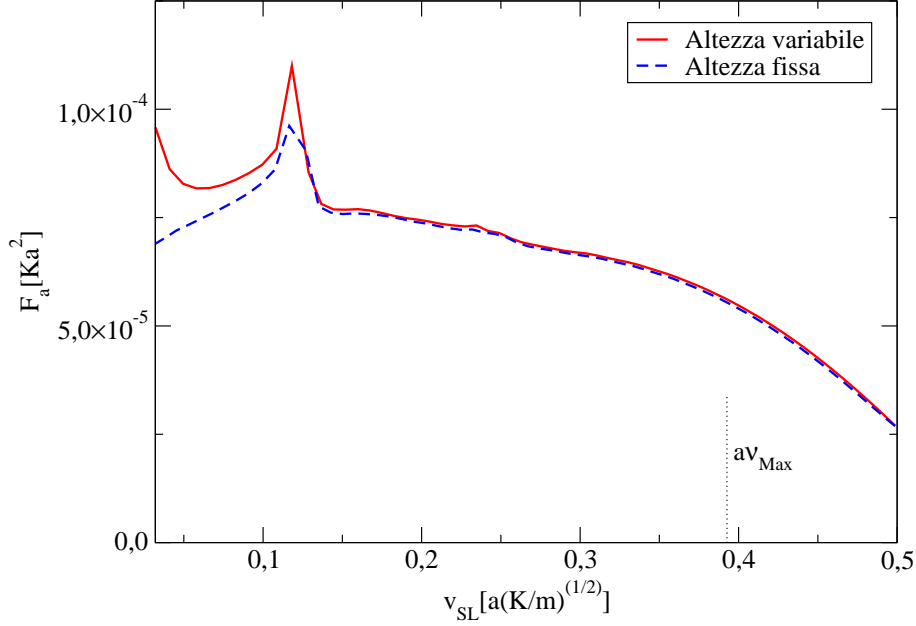


Figura 5: Dipendenza della forza di attrito dalla velocità in una simulazione effettuata con velocità iniziale $0.5v_0$. Sono rappresentati gli andamenti per altezza fissata e altezza lasciata libera di variare.

slider partiamo da una velocità supersonica e lasciamo decadere spontaneamente la velocità per trasferimento di energia al cristallo. Descriviamo innanzitutto il procedimento che ha condotto alla realizzazione dei grafici in Fig. 5 e Fig. 6. Siamo partiti dai dati riguardanti la velocità del cursore in funzione del tempo e abbiamo suddiviso l'asse temporale in sottointervalli molto più lunghi del periodo delle fluttuazioni di v_{SL} generate dalle interazioni individuali dello slider con i singoli atomi del substrato. Su ciascun intervallo abbiamo poi eseguito un fit lineare per estrarne la forza d'attrito con un procedimento analogo a quello già utilizzato per estrapolarla nei calcoli mostrati in Fig. 3. Abbiamo effettuato due simulazioni: una con fissata altezza iniziale dello slider, e una consentendo una dinamica bidimensionale completa. In particolare Fig. 5 è stata ottenuta suddividendo l'asse temporale in sottointervalli lunghi 1000 unità di tempo e impostando come velocità iniziale $0.5v_0$. Per Fig. 6 la velocità iniziale è $1.2v_0$ e abbiamo considerato sottointervalli lunghi 2500 unità di tempo.

Il motivo per cui non è stato rappresentato un unico range di velocità nei grafici è il seguente. Riferendoci sempre a Fig. 6 si nota che per $v \simeq 0.95v_0$ la forza d'attrito mostra un brusco aumento nella simulazione ad altezza variabile (mentre nel calcolo ad altezza fissa l'andamento rimane regolare). Ciò che causa questo fenomeno è l'oscillazione verticale dello slider che entra in risonanza con il substrato cristallino, generando dei rimbalzi dello slider stesso finché esso non

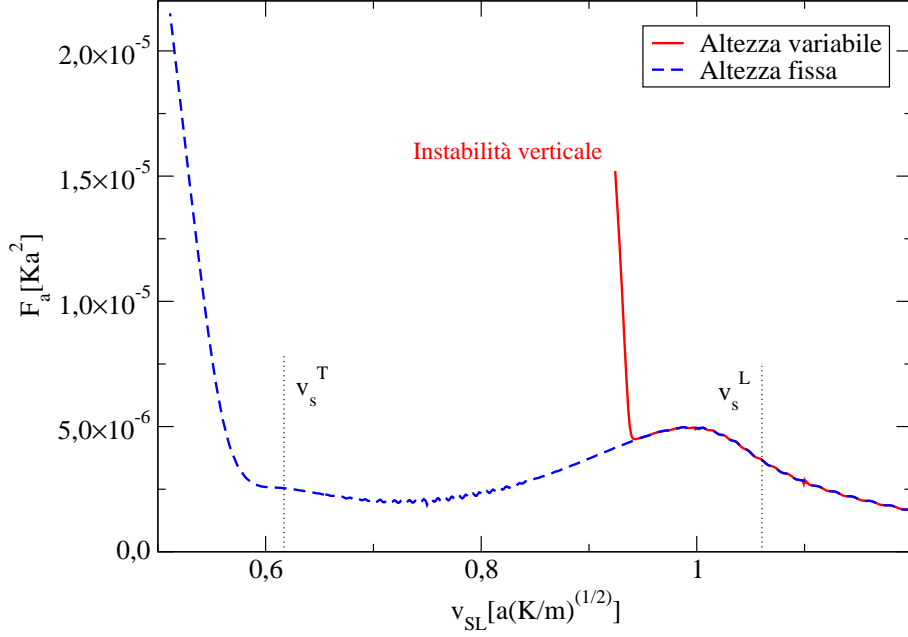


Figura 6: Dipendenza della forza di attrito dalla velocità in una simulazione effettuata con velocità iniziale $1.2 v_0$. Riportiamo gli andamenti ottenuti con lo slider ad altezza fissata (tratteggio) e con altezza lasciata libera di variare (linea continua). Per questo secondo caso il grafico si interrompe a causa di un'intabilità del moto verticale, che porta lo slider ad abbandonare la superficie.

”decolla” allontanandosi indefinitamente dal substrato. Questi rimbalzi non consentono più di misurare l’attrito del sistema. Abbiamo tentato ripartenze a varie velocità inferiori, finché al di sotto di $0.5 v_0$ questa instabilità risulta scomparsa, il che ci ha consentito di effettuare il calcolo di Fig. 5. I tratteggi all’interno di Fig. 6 mettono in evidenza la velocità del suono longitudinale v_s^L e quella trasversale v_s^T calcolate in Sez. 2. In Fig. 5 abbiamo inoltre rappresentato la velocità corrispondente alla massima frequenza di vibrazione del cristallo moltiplicata per il passo reticolare $a\nu_{Max}$. Il termine ν_{Max} rappresenta la frequenza al di sopra della quale la densità degli stati vibrazionali del substrato si annulla e corrisponde alla frequenza dei fononi longitudinali sugli angoli della zona di Brillouin. L’abbiamo dunque valutata con la relazione $\nu_{Max} = \omega_{Max}/2\pi$.

Abbiamo ripetuto queste simulazioni per sliders di taglia diversa: $\sigma = 1.25a$ e $\sigma = 1.5a$. Figura 7 riporta i risultati di queste simulazioni, confrontate con il calcolo descritto precedentemente per $\sigma = a$. È evidente come gli andamenti siano significativamente diversi, in particolare, per $\sigma = 1.25a$ e $\sigma = 1.5a$ si nota una decrescita al diminuire di v_{SL} per velocità inferiori alla velocità dell’ordine della frequenza massima, mentre per il caso $\sigma = 1$ verificiamo soltanto una

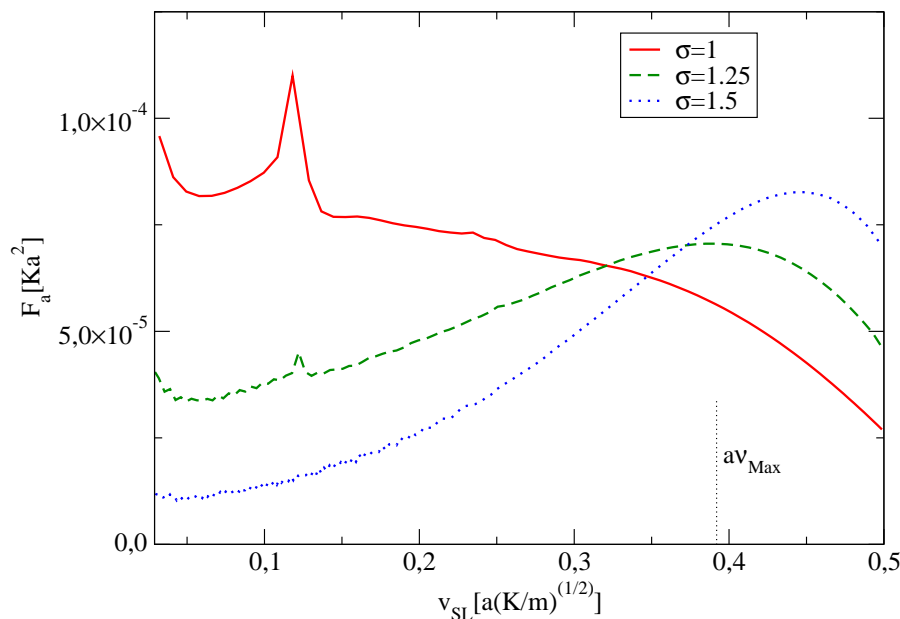


Figura 7: Dipendenza della forza di attrito dalla velocità in simulazioni effettuate con velocità iniziale $0.5 v_0$. Sono rappresentati gli andamenti per taglie dello slider pari a $\sigma = a$, $\sigma = 1.25a$, $\sigma = 1.5a$.

diminuzione della derivata seconda che non è comunque tale da modificare il segno della derivata prima. Inoltre i 2 casi con σ più piccolo mostrano un picco comune nella zona di bassa velocità, che scompare per $\sigma = 1.5a$.

4 Discussione e conclusioni

Mediante simulazione di dinamica molecolare di un semplice modello bidimensionale siamo in grado di valutare la dipendenza dalla velocità dell'attrito per scivolamento su una superficie piatta. Il regime considerato è quello di debole interazione e scivolamento continuo (smooth sliding). Volendo investigare anche il regime di attrito forte e stick-slip sarebbe semplice estendere il modello con l'aggiunta di una molla a trascinare lo slider. La dipendenza dell'attrito dalla velocità risulta comunque tutt'altro che banale. In una regione di velocità intermedie osserviamo una forte instabilità con trasferimento energetico tra il moto orizzontale e quello verticale: le risultanti oscillazioni autoamplificanti rendono impossibile valutare l'attrito in questo intervallo, che peraltro corrisponde a velocità praticamente molto alte, dell'ordine della velocità del suono. Nella regione di velocità fisicamente rilevanti l'attrito mostra interessanti picchi risonanti.

Una chiara limitazione di questo modello è la sua bidimensionalità, con associata struttura della densità degli stati fononici. Un'estensione a tre dimensioni

è certamente auspicabile in futuro.

Riferimenti bibliografici

- [1] A. Vanossi, N. Manini, M. Urbakh, S. Zapperi and E. Tosatti, *Rev. Mod. Phys.* **83**, 85, 529 (2013).
- [2] G. Giusti, *Meccanismi microscopici di dissipazione in un modello unidimensionale*, Tesi di laurea (Università di Milano, 2015), <http://materia.fisica.unimi.it/manini/theses/giusti.pdf>.
- [3] N. Manini, *Introduction to the Physics of Matter* (Springer, 2014).
- [4] G. P. Srivastava, *The Physics of Phonons* (CRC Press, 2014).