



UNIVERSITÀ DEGLI STUDI DI MILANO

Facoltà di Scienze e Tecnologie  
Laurea Triennale in Fisica

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

Relatore: Prof. Nicola Manini

Correlatore: Prof. Rosario Capozza

Giovanni Giusti

Matricola n° 805251

A.A. 2014/2015

Codice PACS: 68.35.af



# Meccanismi microscopici di dissipazione in un modello unidimensionale

Giovanni Giusti

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

11 Dicembre 2015

## Sommario

In questo lavoro di tesi abbiamo caratterizzato un modello per la simulazione atomistica dell'attrito dinamico. Il modello consiste in una particella (slider) che si muove interagendo con una catena lineare di masse e molle. Integrando le equazioni di Newton, in presenza di una debole dissipazione riguardante esclusivamente la catena, abbiamo studiato il trasferimento energetico dallo slider alla catena stessa, al variare della velocità dello slider e dei vari parametri caratterizzanti il modello.

Relatore: *Prof. Nicola Manini*

Correlatore: *Prof. Rosario Capozza*

# Indice

<b>1</b>	<b>Introduzione</b>	<b>5</b>
<b>2</b>	<b>Il modello</b>	<b>6</b>
<b>3</b>	<b>Simulazioni</b>	<b>9</b>
3.1	Dipendenza dall'energia d'interazione $\epsilon$ . . . . .	12
3.2	Dipendenza dalla distanza slider-catena . . . . .	14
3.3	Dipendenza dalla velocità $v_{SL}$ . . . . .	16
<b>4</b>	<b>Discussione e conclusioni</b>	<b>19</b>
	<b>Bibliografia</b>	<b>21</b>

# 1 Introduzione

Con il termine attrito individuamo tutte le condizioni in cui si assiste alla trasformazione di energia meccanica in energia termica. Lo studio dei fenomeni d'attrito costituisce uno dei più antichi problemi della fisica e riveste un ruolo fondamentale nella comprensione di numerosissimi sistemi. Inoltre, la sua importanza da un punto di vista pratico è strabiliante ed abbraccia indistintamente fenomeni di natura macro e microscopica. Importanti sviluppi si concretizzarono nel corso dello scorso secolo, grazie anche all'apporto garantito da una grande quantità di dati sperimentali, particolarmente legati alle nuove tecniche di microscopia a risoluzione atomica (AFM) [1, 2]. Nonostante ciò, molti aspetti riguardanti la dinamica dell'attrito rimangono ancora incompresi o compresi soltanto parzialmente. In effetti, in passato l'argomento attrito non ha suscitato un adeguato interesse teorico da parte della comunità scientifica.

Di grande importanza, per quanto riguarda la descrizione di fenomeni d'attrito su scala nanometrica, è il modello di Prandtl-Tomlinson [1, 2, 3]. Tale modello assume che un punto materiale di massa  $m$  venga trascinato lungo un potenziale unidimensionale di carattere sinusoidale, che rappresenta l'interazione tra il cursore che scivola lungo la superficie e la corrugazione della superficie stessa. Il cursore è schematizzato attraverso il punto materiale sopra citato. Esso viene trascinato tramite una molla di costante elastica  $K$ , fissata al punto materiale e ad un sostegno, che si muove con velocità costante rispetto al substrato. Il potenziale di cui risente il cursore può dunque essere scritto come:

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

$U_0$  è l'ampiezza ed  $a$  la periodicità del potenziale sinusoidale. La dissipazione è descritta interamente da una forza di natura viscosa che agisce sul cursore stesso:  $-\gamma m\dot{x}$ . Definendo il parametro:

$$\eta = \frac{4\pi^2 U_0}{Ka^2} \quad (2)$$

che descrive il rapporto tra l'interazione cursore-substrato e la rigidità della molla, è possibile verificare come tale quantità influenzi la forma del potenziale  $U(x, t)$ . Quest'ultimo esibisce un unico minimo per valori di  $\eta$  inferiori all'unità e diversi minimi per  $\eta > 1$ , modificando radicalmente la fisica del sistema. Con un solo minimo, lo scorrimento è continuo e regolare, mentre in presenza di molti minimi si ottiene il cosiddetto regime a "stick-slip". La dinamica osservata dipende inoltre dal valore del parametro di dissipazione  $\gamma$ .

Nel nostro lavoro di tesi abbiamo caratterizzato un diverso modello unidimensionale per la descrizione microscopica di fenomeni d'attrito di contatto, che

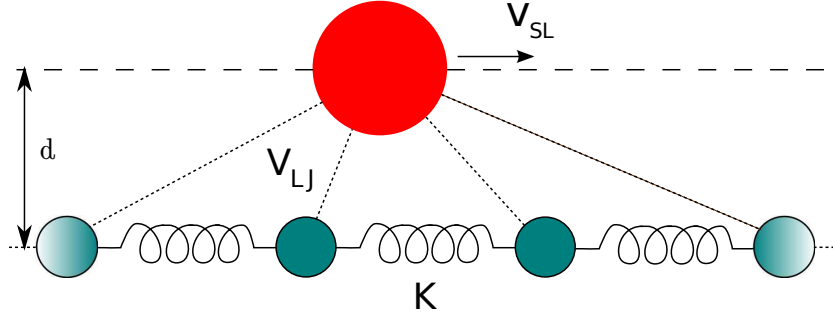


Figura 1: Rappresentazione grafica del modello analizzato.

tenga conto dell'elasticità del substrato e quindi dei reali meccanismi di conversione tra energia meccanica e calore. Al pari del modello di Prandtl-Tomlinson, il modello da noi analizzato prevede l'esistenza di parametri da impostare arbitrariamente. Obiettivo del nostro lavoro è quindi quello di caratterizzare gli effetti di tali parametri, impostandone il valore ed analizzando di volta in volta la differente risposta del sistema. Presentiamo ora in dettaglio le caratteristiche del nostro modello e la natura delle analisi realizzate.

## 2 Il modello

Il codice utilizzato simula la dinamica classica di un sistema composto da una catena lineare di atomi puntiformi di massa  $m = 1$ , in posizioni  $x_j$  e connessi tra loro da molle, e da un cursore, in grado di scorrere lungo una guida a distanza  $d$  fissata dalla catena stessa. Il modello viene simulato all'interno di una supercella, alla quale sono applicate condizioni al contorno periodiche. Il cursore, o slider, viene schematizzato mediante un'ulteriore particella puntiforme, più massiva delle particelle che costituiscono la catena, e posizionata a coordinata orizzontale  $x_{SL}$ . L'interazione slider-catena è regolata da un potenziale che è somma di potenziali di Lennard-Jones. Se  $R_j = \sqrt{d^2 + (x_{SL} - x_j)^2}$  è la distanza tra lo slider e la particella  $j$ -esima, scriviamo:

$$V_{SL-C} = \sum_{j=1}^N V_{LJ}(R_j), \quad (3)$$

dove

$$V_{LJ}(R_j) = \begin{cases} V_{LJ}^{Th}(R_j) - V_{LJ}^{Th}(R_{cutoff}) & \text{se } R_j \leq R_{cutoff} \\ 0 & \text{altrimenti} \end{cases} \quad (4)$$

è una versione troncata del normale potenziale di Lennard-Jones

$$V_{LJ}^{Th}(R_j) = \epsilon \left[ \left( \frac{\sigma}{R_j} \right)^{12} - 2 \left( \frac{\sigma}{R_j} \right)^6 \right]. \quad (5)$$

La costruzione (4) serve ad implementare un raggio finito d'azione del potenziale, com'è necessario quando si adottano condizioni al contorno periodiche. Utilizziamo  $R_{cutoff} = 15 a$ . I costituenti della catena interagiscono tra loro mediante un potenziale armonico a primi vicini:

$$V(x_j) = \frac{1}{2} K \sum_{j=1}^{N-1} (x_{j+1} - x_j - a)^2, \quad (6)$$

con  $K$  costante d'interazione ed  $a$  passo reticolare d'equilibrio, che settiamo entrambi ad 1. Gli atomi della catena, inoltre, risultano sottoposti ad una lieve dissipazione, in modo da far sì che le onde fononiche propaganti nel cristallo risultino smorzate e svaniscano allontanandosi dal punto dove vengono generate, vicino allo slider. In particolare, scriviamo la forza cui risultano soggette le particelle per effetto del termine dissipativo come:

$$F_{diss,j} = -\gamma \dot{x}_j. \quad (7)$$

Questo termine permette di confinare le vibrazioni generate dallo slider ad una regione di dimensioni minori della supercella, evitando dunque il ritorno di eccitazioni ondulatorie alla regione di contatto, e simula l'effetto di dissipazione dell'energia a grande distanza. Oltre alla debole dissipazione appena discussa, il regime investigato è quello di debole accoppiamento slider-catena. Figura 1 propone una rappresentazione grafica del modello analizzato.

Le simulazioni effettuate hanno coinvolto un ampio intervallo di velocità, da confrontare con la velocità del suono della catena [4, 5]. Quest'ultima si ottiene a partire dall'equazione del moto per la sola catena (no slider, no dissipazione):

$$m\ddot{u}_j = Ku_{j+1} + Ku_{j-1} - 2Ku_j, \quad (8)$$

dove  $u_j = x_j - x_j^{eq}$  indica lo spostamento dell'atomo  $j$ -esimo dalla posizione d'equilibrio  $x_j^{eq} = j \cdot a$  ed  $m$  la massa dell'atomo stesso. Con l'ansatz

$$u_j = Ae^{i(kja-\omega t)}, \quad (9)$$

l'Eq. (8) può essere riscritta come:

$$-m\omega^2 Ae^{i(kja-\omega t)} = KA \left[ e^{i(kja-\omega t)} e^{ika} + e^{i(kja-\omega t)} e^{-ika} - 2e^{i(kja-\omega t)} \right], \quad (10)$$

che, mediante opportune semplificazioni, diviene:

$$-\omega^2 = \frac{K}{m} [e^{ika} + e^{-ika} - 2]. \quad (11)$$

Riscrivendo gli esponenziali complessi in termini di seno e coseno, otteniamo:

$$\omega^2 = 2\frac{K}{m} [1 - \cos(ka)] \quad (12)$$

che fornisce la legge di dispersione

$$\omega = 2\sqrt{\frac{K}{m}} \sin\left|\frac{ka}{2}\right| \quad (13)$$

In Eq. (13) abbiamo sfruttato l'identità

$$\sin^2\left(\frac{x}{2}\right) = \frac{1 - \cos(x)}{2}. \quad (14)$$

In termini di frequenze, la dispersione (13) si può scrivere

$$\nu = \frac{1}{\pi} \sqrt{\frac{K}{m}} \sin\left|\frac{ka}{2}\right|. \quad (15)$$

Ponendoci ora nel limite di grande lunghezza d'onda, equivalente alla condizione  $|k| \ll 1$ , ed espandendo il termine  $\sin\left|\frac{ka}{2}\right|$ , riscriviamo l'equazione (13) come:

$$\omega \simeq \sqrt{\frac{K}{m}} a |k|. \quad (16)$$

Da qui, otteniamo l'espressione per la velocità del suono:

$$v_s = \frac{\omega}{k} = a\sqrt{\frac{K}{m}}. \quad (17)$$

Nel sistema di unità di misura naturali del modello ( $K = 1, a = 1, m = 1$ ), il valore numerico di  $v_s$  risulta pari ad 1. Pertanto quando lo slider si muove a  $v_{SL} > 1$ , significa che viaggia a velocità supersonica, quando  $v_{SL} < 1$ , la sua velocità è subsonica.

Il presente lavoro di tesi si propone di valutare il fenomeno di dissipazione associato all'interazione tra slider e catena e, come anticipato, gli effetti dei vari parametri fisici del modello. Tra questi  $\epsilon$  e  $\sigma$  definenti il potenziale di LJ, la velocità del cursore e la distanza  $d$  di quest'ultimo dalla catena.



### 3 Simulazioni

Il protocollo di simulazione consiste in due calcoli consecutivi. Nel primo la catena viene presa inizialmente in quiete con gli atomi posti a distanza regolare  $a$ , e la velocità dello slider viene mantenuta costante, finché i moti e le deformazioni indotti nella catena dalla sua presenza raggiungono una condizione di stazionarietà. Nel secondo calcolo, eseguito a partire dalle condizioni stazionarie raggiunte dall'intero sistema al termine del procedimento iniziale, lo slider è lasciato libero di modificare la propria velocità, come conseguenza dell'interazione con il substrato. Si noti che il termine viscoso di Eq. (7) *non* coinvolge lo slider. Al fine di studiare ed approfondire i meccanismi di dissipazione ci siamo quindi concentrati su quello che si verifica in questo secondo processo. In generale, a meno che non si stia esplicitamente caratterizzando l'effetto di un particolare parametro, le simulazioni cui faremo riferimento nel seguito presentano le seguenti caratteristiche:

- $\epsilon = 5 \cdot 10^{-4} K a^2$ ;
- $\sigma = 0,5 a$ ;
- distanza della guida dalla catena,  $d = 0,475 a$ ;
- velocità iniziale dello slider,  $v_{SL}^i = 0,1 v_s$ .

Per valutare la forza d'attrito  $F_a$  utilizzando i dati riguardanti la velocità  $v_{SL}$  del cursore in funzione del tempo, abbiamo adottato il seguente protocollo: concentrandoci su un intervallo temporale sufficientemente lungo affinché la velocità del cursore  $v_{SL}$  si riducesse del 10%, abbiamo eseguito un fit lineare che consentisse di estrapolare il valor medio della sua accelerazione (negativa). Moltiplicando il valore ottenuto per la massa del cursore stesso  $m_{SL} = 10 m$  e per un segno meno, abbiamo ricavato la forza d'attrito agente tra slider e substrato. Le barre d'errore associate al valore dell'accelerazione stimato risultano pressoché invisibili. Per questo motivo non sono state riportate nei grafici. Per impostare il valore di  $m_{SL}$  abbiamo effettuato alcune verifiche, dalle quali è emerso che il trasferimento d'energia tra slider e catena varia molto debolmente per valori della massa compresi tra  $5 m$  e  $20 m$ .

Preliminarmente abbiamo eseguito dei test, attraverso i quali abbiamo valutato l'andamento della forza d'attrito  $F_a$  al variare del coefficiente di smorzamento  $\gamma$ . I quadrati in Fig. 2 costituiscono i risultati dei test effettuati utilizzando una supercella contenente  $N = 500$  atomi. Questi test hanno consentito di individuare un'ampia regione  $\gamma < 0,1 (Km)^{\frac{1}{2}}$  all'interno della quale la dipendenza della

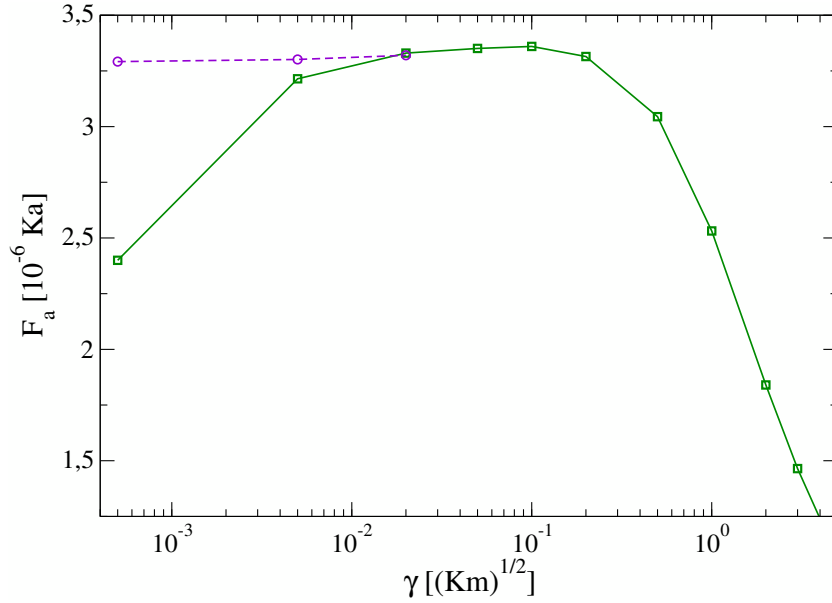


Figura 2: Forza d'attrito al variare del coefficiente di smorzamento  $\gamma$ , misurata per  $v_{SL}^i = 0,1 a (K/m)^{\frac{1}{2}}$ . Quadrati: i dati riguardanti le simulazioni eseguite all'interno di una supercella costituita da  $N = 500$  atomi. Cerchi: il risultato di simulazioni con supercella da  $N = 5000$  atomi, dove le onde emesse dallo slider si smorzano ben prima di ritornarvi, anche per piccolo  $\gamma$ .

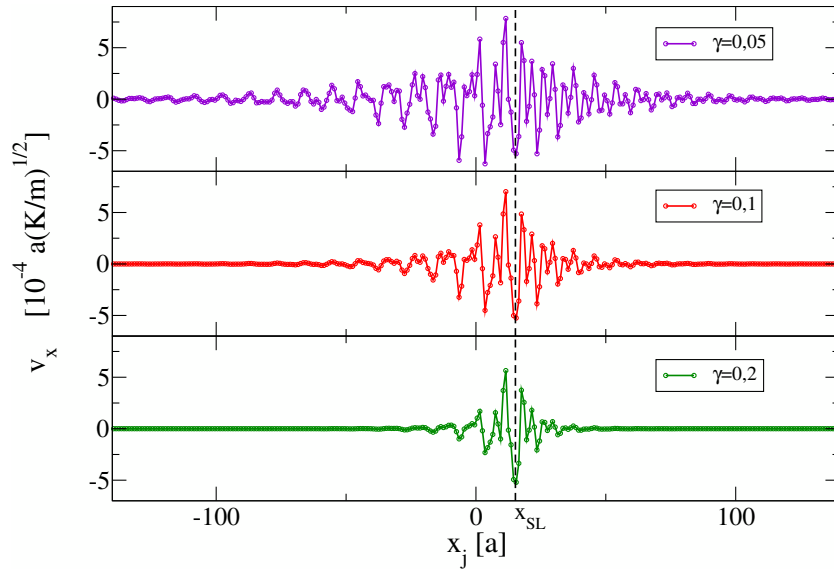


Figura 3: Effetto del coefficiente di dissipazione  $\gamma$  sulle eccitazioni ondulatorie della catena, generate dallo slider in movimento a  $v_{SL} \simeq 0,1 a (K/m)^{\frac{1}{2}}$ , che in questo istante transita alla posizione  $x_{SL}$  identificata dalla linea tratteggiata.

forza d'attrito dal termine di smorzamento risulta molto debole. All'aumentare di  $\gamma$  oltre questa regione si osserva una progressiva decrescita della forza, che si annulla quando il coefficiente di smorzamento tende ad infinito. Un  $\gamma$  infinitamente elevato, in effetti, impedirebbe alle particelle della catena di vibrare per effetto dell'interazione con il cursore. L'energia ed il momento che quest'ultimo trasferisce al substrato, quindi, decrescono all'aumentare del coefficiente  $\gamma$ , provocando la diminuzione della  $F_a$ . Invece, in corrispondenza di valori del coefficiente di smorzamento eccessivamente ridotti  $\gamma < 0,01 (Km)^{\frac{1}{2}}$ , le eccitazioni ondulatorie propagano quasi indisturbate attraverso l'intera catena, e ritornano al punto di contatto con lo slider. Qui esse interferiscono con la generazione di ulteriori vibrazioni al contatto, generando una sorta di "termolubricità". I cerchi nel grafico risultano da simulazioni eseguite per una catena costituita da  $N = 5000$  atomi. In questo modo le dimensioni della supercella garantiscono che le onde propaganti al suo interno si smorzino prima di tornare al punto di contatto, e di nuovo forniscono un valore della forza d'attrito prossimo a quelli riscontrati per la cella da 500 atomi, nel regime di  $\gamma \simeq 0,1 (Km)^{\frac{1}{2}}$ . La Fig. 3 mostra esplicitamente l'effetto del coefficiente di smorzamento sulle eccitazioni ondulatorie generate all'interno del substrato. Il tratteggio mette in evidenza la posizione istantanea dello slider  $x_{SL}$ . Questa è appunto la regione dove è maggiormente stimolata l'eccitazione della catena, visualizzata mediante la velocità delle particelle. Allontanandosi dal punto di contatto si osserva come queste oscillazioni siano smorzate tanto più rapidamente quanto più grande è  $\gamma$ . Si nota che  $\gamma = 0,2 (Km)^{\frac{1}{2}}$  è tanto grande da ridurre l'ampiezza dell'oscillazione perfino nel punto in cui è generata. Per questo motivo si osserva in Fig. 2 l'inizio della diminuzione dell'attrito proprio in corrispondenza di  $\gamma = 0,2 (Km)^{\frac{1}{2}}$ . Sulla base di questi risultati abbiamo definitivamente adottato il coefficiente di smorzamento  $\gamma = 0,1 (Km)^{\frac{1}{2}}$  e  $N = 500$ .

Abbiamo finora considerato simulazioni relativamente brevi, in cui  $v_{SL}$  diminuisce del 10% circa. Veniamo ora ad esaminare globalmente il rallentamento dello slider per effetto della dissipazione nella catena. La Fig. 4 mostra le velocità dello slider e del centro di massa della catena  $v_{CM}$  in funzione del tempo. L'aumento progressivo della pendenza media di  $v_{SL}$ , e dell'ampiezza delle oscillazioni di  $v_{CM}$  della catena suggeriscono che l'energia ed il momento trasferiti alla catena tendono ad aumentare al diminuire della velocità dello slider, fenomeno che approfondiremo nel seguito. La progressiva diminuzione della velocità del cursore si ripercuote in un aumento dell'ampiezza di oscillazione della velocità del centro di massa del substrato, il cui valor medio cresce lentamente. Lo slider dissipa la sua energia cinetica fino a rimanere intrappolato tra due atomi, dopodiché si libera del residuo d'energia mediante delle oscillazioni smorzate, che

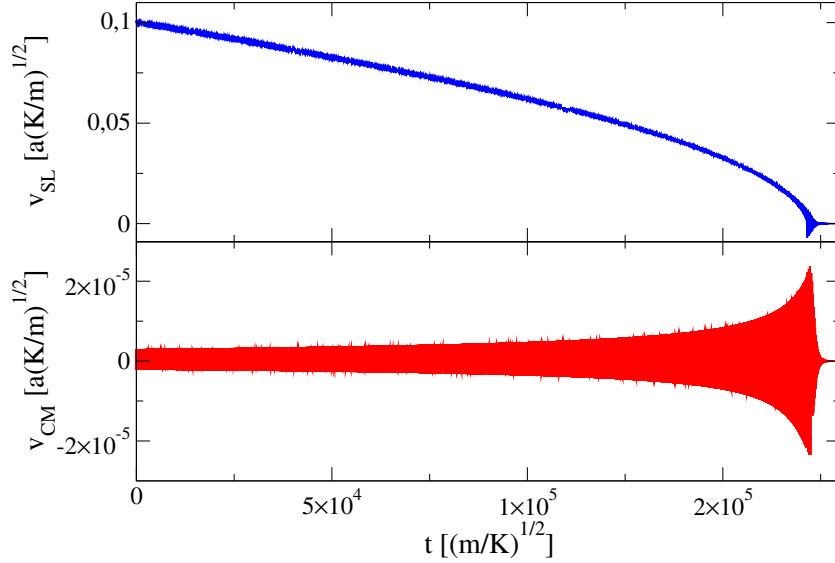


Figura 4: Velocità dello slider  $v_{SL}$  e del centro di massa della catena  $v_{CM}$  in funzione del tempo, fino all'arresto completo.

lo portano a fermarsi definitivamente al termine della simulazione, come chiarito dal dettaglio di Fig. 5. In corrispondenza di ciascuna particella del substrato il potenziale avvertito dal cursore presenta due minimi, simmetrici rispetto alla posizione  $x_j$  della particella stessa. I due minimi risultano separati da una piccola barriera, il cui massimo giace proprio in corrispondenza di  $x_j$ . Il cursore oltrepassa la particella ( $n - 1$ ), dirigendosi verso l' $n$ -esima e superandola. Dopo averla superata risente dell'attrazione che quest'ultima esercita su di lui e, non riuscendo ad allontanarsi a sufficienza affinché prevalga l'attrazione dell' $(n + 1)$ -esima particella, si ferma. A questo punto la sua velocità cambia segno, lo slider viaggia di nuovo verso la particella  $n$  ed attorno ad essa comincia ad oscillare. Le triplette di inversioni della velocità dello slider testimoniano il superamento, nell'uno o nell'altro verso, della posizione di una particella della catena. Dopo aver compiuto alcune oscillazioni attorno alla posizione  $x_n$  dell' $n$ -esima particella, il cursore rimane intrappolato in uno dei due minimi descritti precedentemente, non avendo più l'energia sufficiente per superare la barriera che li separa. Da quell'istante le triplette scompaiono. Attraverso queste oscillazioni smorzate lo slider trasferisce l'energia residua alla catena (che la dissipa in attrito viscoso), poi si arresta definitivamente.

### 3.1 Dipendenza dall'energia d'interazione $\epsilon$

Il primo parametro di cui analizziamo sistematicamente l'effetto è la profondità  $\epsilon$  della buca di potenziale di Lennard-Jones, Eqs. (3) e (4). Il grafico in Fig. 6

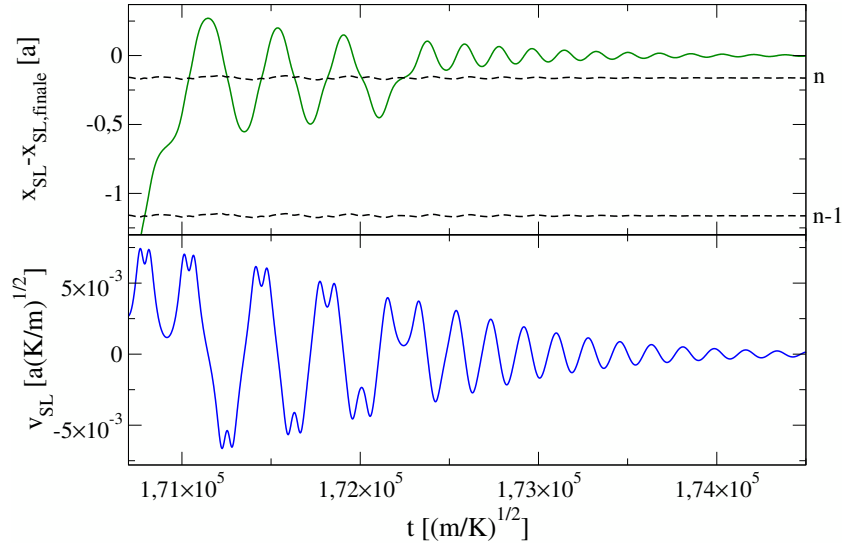


Figura 5: Moto dello slider in prossimità dell'istante di tempo in corrispondenza del quale si assiste al suo intrappolamento da parte della catena, e successivo completo arresto. I tratteggi indicano le posizioni delle particelle  $n$ -esima ed  $(n - 1)$ -esima.

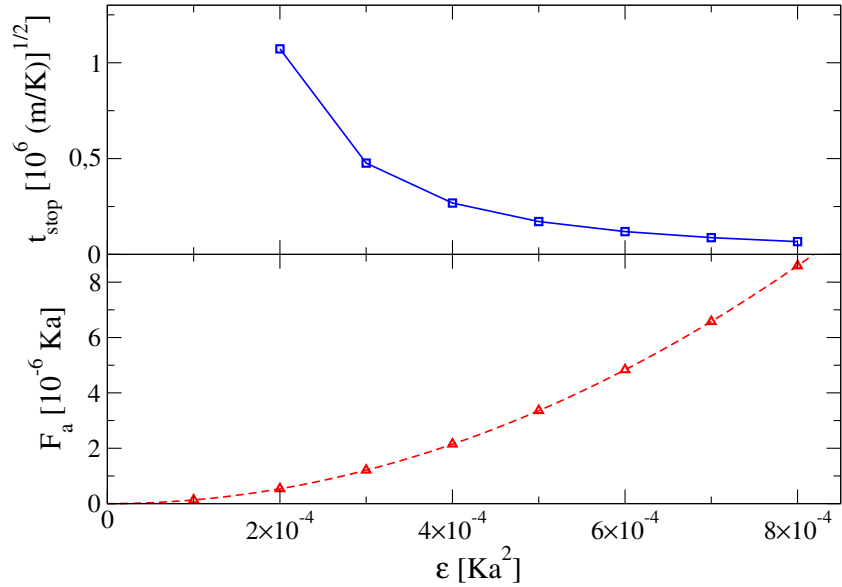


Figura 6: Tempo d'arresto  $t_{stop}$  e forza iniziale d'attrito  $F_a$  [a  $v_{SL}^i = 0,1 a(K/m)^{\frac{1}{2}}$ ] con cui lo slider interagisce con il cristallo, al variare della profondità  $\epsilon$  del potenziale di LJ. Curva tratteggiata: un fit  $F_a = 13,42 \cdot \epsilon^2$ .

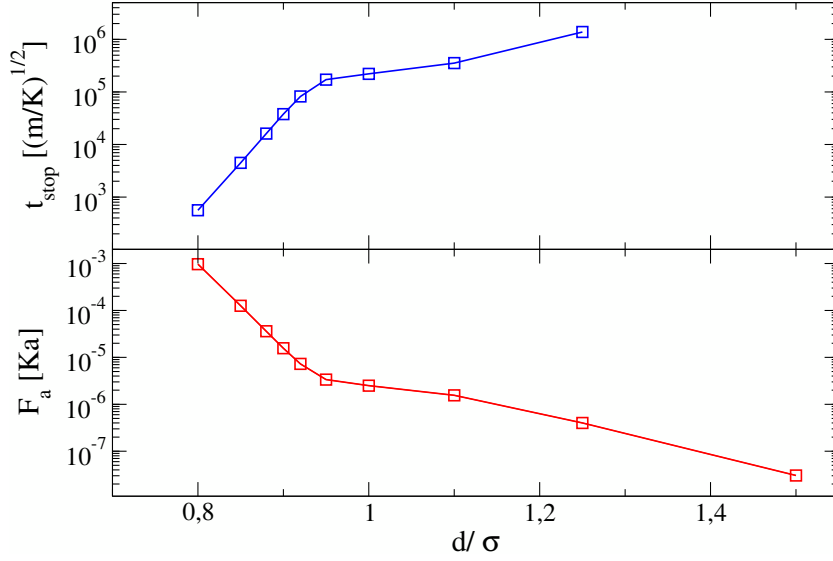


Figura 7: Tempo d'arresto  $t_{stop}$  e forza iniziale d'attrito  $F_a$  [a  $v_{SL}^i = 0,1 a (K/m)^{1/2}$ ] per lo slider interagente con la catena, al variare della distanza tra lo slider e la catena stessa, a fissata distanza d'equilibrio  $\sigma$  del potenziale di LJ,  $\sigma = 0,5 a$ .

riporta, al variare di  $\epsilon$  appunto, il tempo necessario all'arresto del cursore e la forza d'attrito iniziale, ottenuta mediante il procedimento descritto precedentemente. Il tempo d'arresto  $t_{stop}$  è definito come il tempo necessario affinché la velocità dello slider cambi segno per la prima volta, prima di cominciare ad oscillare attorno allo zero per poi stabilizzarsi definitivamente sul valore nullo. All'aumentare dell'interazione  $\epsilon$  si osserva il progressivo aumento della  $F_a$ , cui corrisponde una graduale decrescita del  $t_{stop}$ . Questo andamento appare ragionevole, poiché la costante  $\epsilon$  descrive, in un certo senso, l'intensità con cui il cursore sfrega sul substrato. In particolare i valori di  $F_a(\epsilon)$  fittano la dipendenza quadratica  $F_a = \alpha \cdot \epsilon^2$ , con  $\alpha = 13,42 (Ka^3)^{-1}$ . Questa dipendenza pare del tutto plausibile, visto che le forze che lo slider esercita sulla catena, e quindi gli spostamenti  $u_j$  e le velocità  $\dot{x}_j$  della catena stessa, sono proporzionali a  $\epsilon$ . Ma il lavoro per unità di tempo, dunque la potenza trasferita dallo slider al substrato, risulta appunto proporzionale al prodotto di tali forze per tali velocità, dunque a  $\epsilon^2$ .

### 3.2 Dipendenza dalla distanza slider-catena

La Fig. 7 riporta il tempo d'arresto e la forza d'attrito al variare del rapporto tra la distanza  $d$  dello slider dalla catena ed il parametro  $\sigma$  del potenziale di Lennard-Jones, con  $\sigma$  fissato al valore  $0,5 a$ . La dipendenza da  $d$  osservata risulta qualitativamente opposta alla dipendenza da  $\epsilon$  di Fig. 6: il tempo cresce

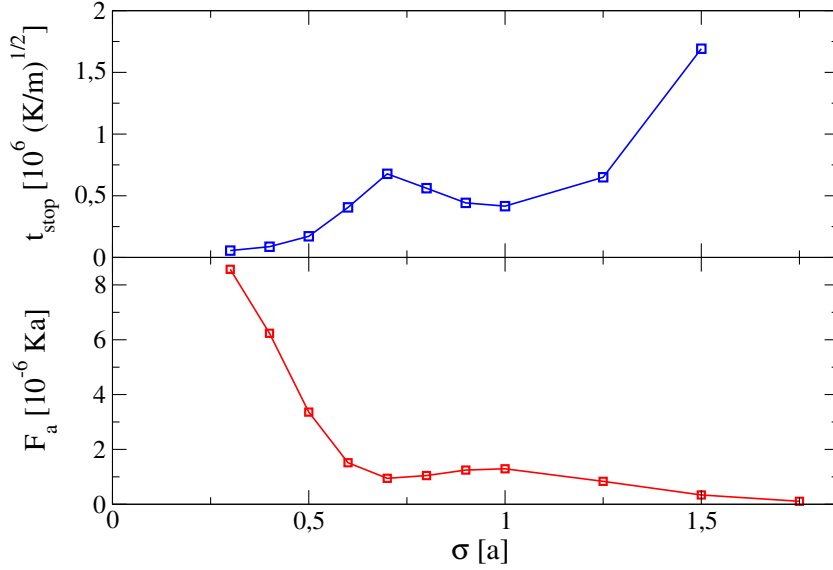


Figura 8: Tempo d'arresto  $t_{stop}$  e forza iniziale d'attrito  $F_a$  [a  $v_{SL}^i = 0,1 a (K/m)^{\frac{1}{2}}$ ] per lo slider interagente con il cristallo, al variare del parametro  $\sigma$  di LJ, con valore del rapporto  $d/\sigma$  fissato a 0,95.

e la forza decresce con  $d$ . Anche in questo caso, l'esito delle simulazioni effettuate risulta quello atteso. In effetti, incrementando la distanza tra cursore e catena, la dissipazione si riduce, come effetto della diminuzione dell'intensità con cui i due sistemi interagiscono. In particolare, osserviamo che in corrispondenza di  $d/\sigma$  prossimo all'unità si assiste alla transizione tra due diversi andamenti approssimativamente esponenziali. Tali punti descrivono il passaggio da un'interazione di natura attrattiva e repulsiva insieme ( $d/\sigma < 1$ ), ad una esclusivamente attrattiva ( $d/\sigma \geq 1$ ). Il  $t_{stop}$  corrispondente a  $d/\sigma = 1,5$  non è stato riportato, in quanto il tempo di calcolo risultava eccessivamente elevato. I risultati di Fig. 7 rappresentano in un certo senso come questo modello prevede la variazione della dissipazione al variare del carico applicato perpendicolarmente allo slider, che porta dal regime di non-contatto ( $d/\sigma \geq 1$ ) a quello di contatto per alto carico ( $d/\sigma < 1$ ).

La Fig. 8 rappresenta le modalità entro cui  $t_{stop}$  e  $F_a$  dipendono da  $\sigma$ , questa volta con fissato rapporto  $d/\sigma = 0,95$ , dunque una condizione di contatto senza carico applicato, ma al variare della dimensione dello slider. La forza d'attrito ed il tempo d'arresto presentano un andamento non monotono nell'intorno di  $\sigma = a$ . Qui la  $F_a$  esibisce un massimo locale ed il  $t_{stop}$  un minimo. Le ragioni dell'andamento appena descritto non risultano chiare.

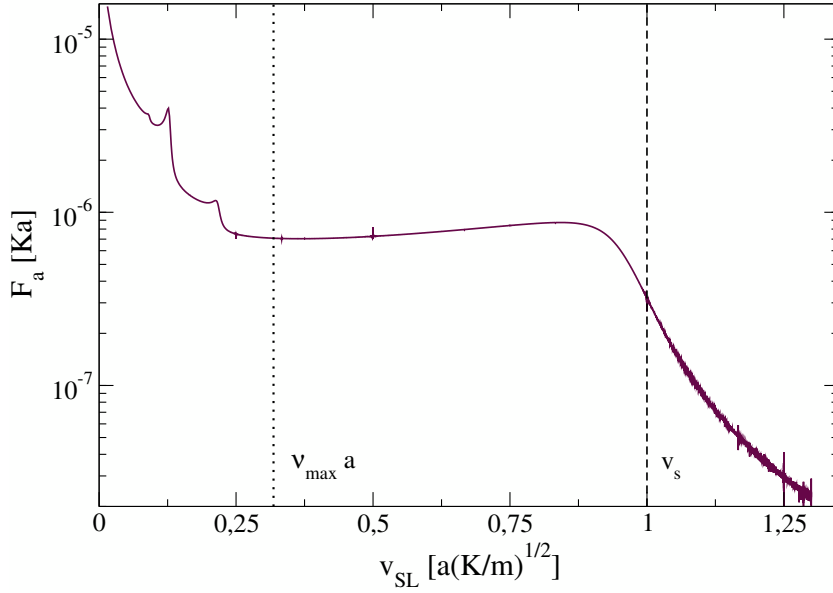


Figura 9: La forza d'attrito in funzione della velocità dello slider. La linea tratteggiata indica la velocità del suono; la linea puntinata è la velocità corrispondente alla frequenza massima dei fononi della catena.

### 3.3 Dipendenza dalla velocità $v_{SL}$

Veniamo ora allo studio dell'andamento della forza d'attrito al variare della velocità dello slider. Descriviamo innanzitutto il procedimento che ha condotto alla realizzazione del grafico in Fig. 9. Siamo partiti dai dati riguardanti la velocità del cursore in funzione del tempo, ad esempio quelli di Fig. 4, abbiamo suddiviso l'asse temporale in sottointervalli regolari lunghi 5000 unità di tempo, quindi molto più lunghi del periodo delle fluttuazioni di  $v_{SL}$  generate dagli incontri successivi dello slider con le particelle individuali nella catena. Su ciascun intervallo abbiamo eseguito un fit lineare. La pendenza della retta interpolante la velocità  $v_{SL}$  in funzione del tempo  $t$  rappresenta l'accelerazione media dello slider stesso. Associando l'accelerazione media ottenuta al valor medio della velocità nel medesimo intervallo, abbiamo ricavato l'andamento di  $F_a(v_{SL})$ . Chiaramente per ottenere  $F_a$  l'accelerazione è stata moltiplicata per  $(-m_{SL})$ . I tratteggi centrali all'interno di Fig. 9 mettono in evidenza la velocità del suono  $v_s = a(K/m)^{\frac{1}{2}}$ , calcolata in Sez. 2, e la velocità corrispondente alla massima frequenza di vibrazione del cristallo moltiplicata per il passo reticolare ( $\nu_{max} \cdot a$ ). Il termine  $\nu_{max}$  rappresenta la frequenza al di sopra della quale la densità degli stati vibrazionali del substrato si annulla. Per determinarla abbiamo utilizzato l'Eq. (15), valutandola



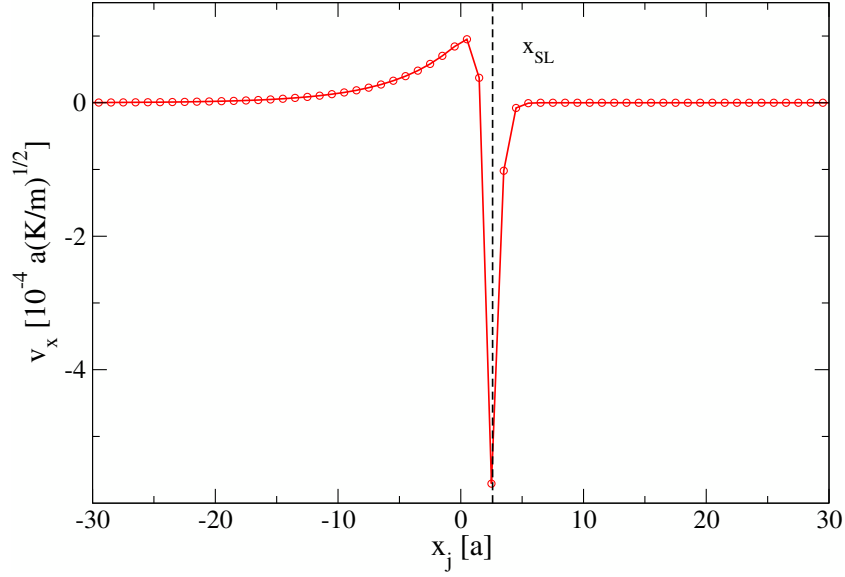


Figura 10: Istantanea delle velocità delle particelle del substrato in corrispondenza della velocità supersonica  $v_{SL} \simeq 1,29 a (K/m)^{\frac{1}{2}}$ . La linea tratteggiata identifica la posizione dello slider allo stesso istante di tempo.

a bordo zona, in corrispondenza di  $k = \pi/a$ :

$$\nu_{max} = \frac{1}{\pi} \sqrt{\frac{K}{m}} \sin \left| \frac{\pi a}{2a} \right| = \frac{1}{\pi} \sqrt{\frac{K}{m}}. \quad (18)$$

Osserviamo innanzitutto la presenza di diversi picchi per valori della velocità dello slider inferiori a  $\pi^{-1} a (K/m)^{\frac{1}{2}}$ . Superata tale velocità la  $F_a$  varia debolmente al crescere di  $v_{SL}$ . In prossimità di  $v_s$  si assiste ad un'imponente decrescita della forza, che assume valori molto ridotti quando il cursore si muove con velocità supersonica.

Nel tentativo di comprendere le ragioni dell'andamento appena descritto ci siamo concentrati sull'aspetto fenomenologico. In particolare abbiamo analizzato le caratteristiche delle eccitazioni generate in corrispondenza di differenti valori di  $v_{SL}$ . La Fig. 10 rappresenta un'istantanea realizzata in corrispondenza di  $v_{SL} \simeq 1,29 a (K/m)^{\frac{1}{2}}$ . Il profilo dell'onda originata è fortemente asimmetrico rispetto alla posizione dello slider e l'onda risulta smorzata rapidamente con la distanza dal punto di contatto. Un'analogia asimmetria emerge per velocità del cursore subsoniche. L'istantanea in Fig. 11 e quella in Fig. 12 mostrano la velocità degli atomi del substrato per, rispettivamente,  $v_{SL} \simeq 0,69 a (K/m)^{\frac{1}{2}}$  e  $v_{SL} \simeq 0,25 a (K/m)^{\frac{1}{2}}$ . In entrambi i casi, la velocità delle particelle che il cursore ha oltrepassato oscilla nello spazio, con un'oscillazione che decade lentamente con la distanza da  $x_{SL}$ . Gli atomi che lo slider non ha ancora raggiunto, invece,

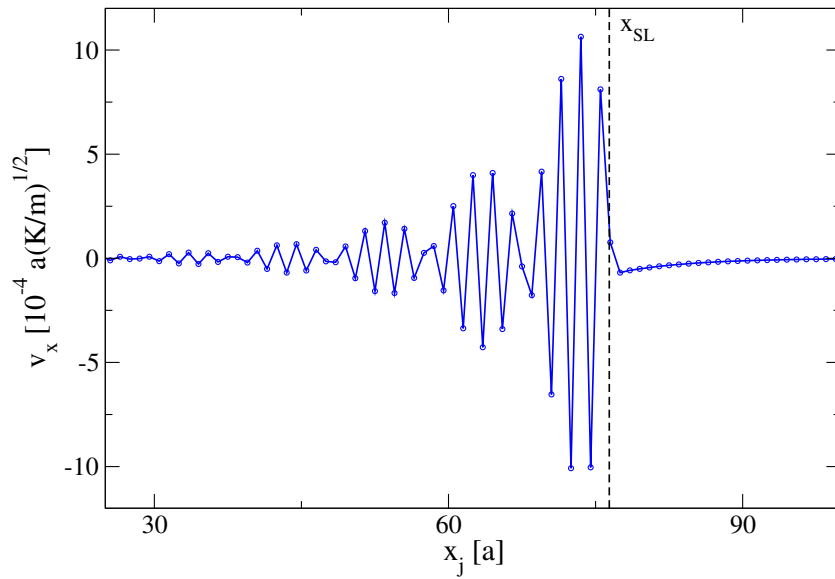


Figura 11: Istantanea delle velocità delle particelle del substrato in corrispondenza della velocità subsonica  $v_{SL} \simeq 0,69 a (K/m)^{\frac{1}{2}}$ . La linea tratteggiata identifica la posizione dello slider allo stesso istante di tempo.

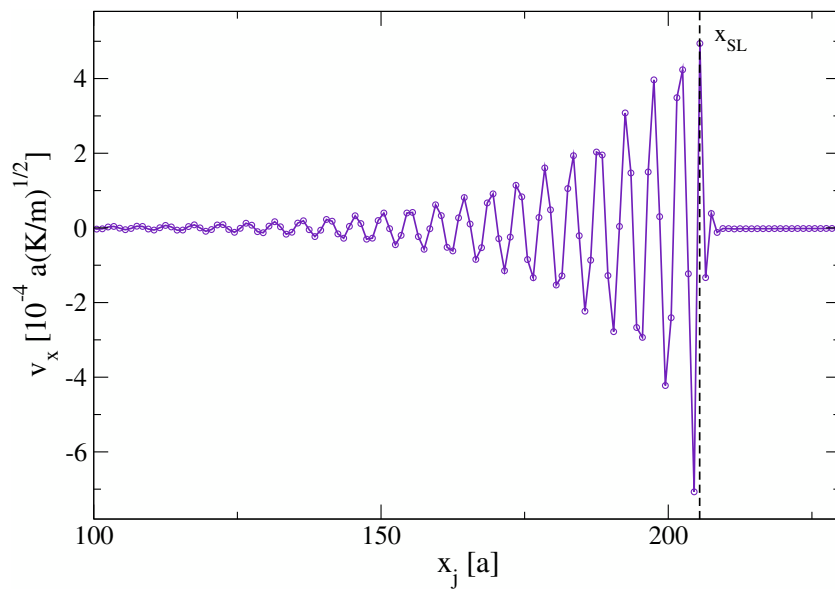


Figura 12: Istantanea delle velocità delle particelle del substrato in corrispondenza della velocità  $v_{SL} \simeq 0,25 a (K/m)^{\frac{1}{2}}$ . La linea tratteggiata identifica la posizione dello slider allo stesso istante di tempo.

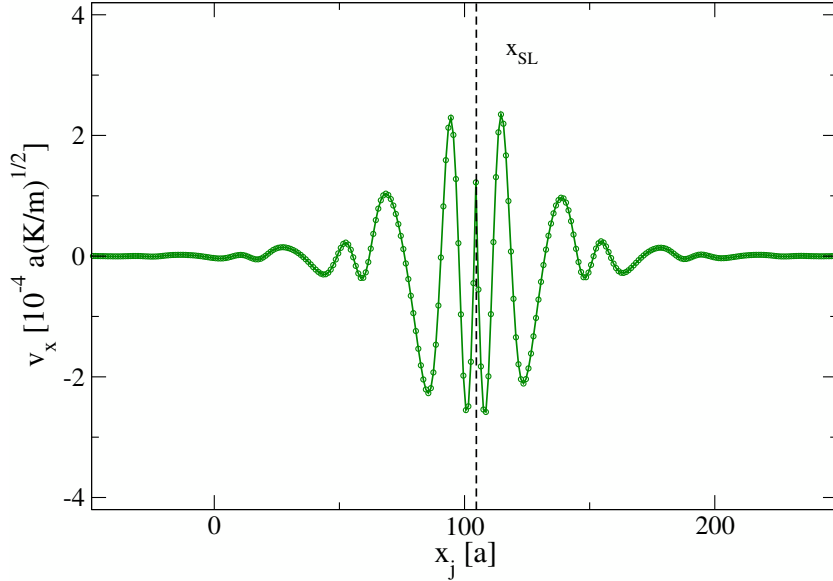


Figura 13: Istantanea delle velocità delle particelle del substrato in corrispondenza della velocità  $v_{SL} \simeq 0,024 a(K/m)^{\frac{1}{2}}$ . La linea tratteggiata identifica la posizione dello slider allo stesso istante di tempo.

risultano praticamente in quiete. Il fonone eccitato per  $v_{SL} \simeq 0,69 a(K/m)^{\frac{1}{2}}$  è principalmente quello a bordo zona  $k \simeq \pi/a$ . Il vettore d'onda dominante per  $v_{SL} = 0,25 a(K/m)^{\frac{1}{2}}$  risulta  $k \simeq 0,4 \cdot \pi/a$ , in una regione intermedia della zona di Brillouin. La Fig. 13, infine, riporta le velocità della catena in corrispondenza di una velocità molto minore,  $v_{SL} \simeq 0,024 a(K/m)^{\frac{1}{2}}$ . La velocità delle particelle oscilla coinvolgendo fononi di lunghezza d'onda molto maggiore rispetto ai casi di  $v_{SL}$  superiori, decade su una regione più estesa, e l'onda emessa risulta visibilmente ben più simmetrica attorno alla posizione dello slider. Inoltre la velocità degli atomi prossimi a  $x_{SL}$  risulta in assoluto inferiore se paragonata alle simulazioni effettuate a  $v_{SL}$  maggiore. Le istantanee presentate mostrano le caratteristiche delle eccitazioni generate all'interno della catena tipiche della velocità dello slider a cui si riferiscono. Abbiamo infatti verificato che il profilo delle differenti eccitazioni mostrate non subisce brusche variazioni all'interno di intervalli temporali ristretti (alcune unità).

## 4 Discussione e conclusioni

In questa tesi abbiamo caratterizzato almeno in parte un semplice modello unidimensionale in grado di catturare l'essenziale della dissipazione in onde elastiche:

quando uno slider, ad esempio la punta di un microscopio a forza atomica (AFM), striscia contro una superficie cristallina priva di scalini. Abbiamo mostrato l'esistenza di una "finestra" di valori del parametro fenomenologico di dissipazione in grado di garantire l'attenuazione delle onde emesse nello strisciamento del contatto, senza di fatto influenzare significativamente la dinamica del contatto stesso, e quindi il trasferimento d'energia tra slider e catena. Il risultato principale del presente lavoro è la dipendenza dell'attrito dalla velocità: a velocità supersoniche l'attrito risulta minimo (ed in rapida diminuzione all'aumentare di  $v_{SL}$ ); a velocità intermedie tra quella che genera la frequenza di "washboard" uguale alla massima frequenza fononica e la velocità del suono otteniamo un attrito moderato e debolmente dipendente dalla velocità; a bassa velocità la forza d'attrito cresce rapidamente, con fenomeni di risonanza. Probabilmente, se il cursore venisse trascinato mediante una molla, in questo regime di bassa velocità si assisterebbe alla transizione ad un regime altamente dissipativo di stick-slip.

Per una caratterizzazione più completa del modello, sarebbe utile verificare se i tre regimi d'attrito al variare della velocità, Fig. 9, rimangono simili per diversa interazione slider-catena (diverso  $\epsilon$ ,  $d$  o  $\sigma$ ). Resta inoltre da simulare l'effetto di una temperatura finita della catena, come si potrebbe ottenere mediante l'introduzione di un termostato di Langevin. Il modello andrebbe poi studiato in un numero differente di dimensioni, facendo scivolare lo slider vicino ad un blocco di materia dell'opportuna dimensionalità. In codeste generalizzazioni sarebbe anche possibile prescindere dalla guida a distanza fissata  $d$  del presente modello, testando dunque l'effetto relativo dell'eccitazione di modi trasversali. È possibile che, in condizioni più realistiche di cristallo tridimensionale, la dipendenza da  $v_{SL}$  dell'attrito risulti significativamente diversa da quella di Fig. 9.

## Riferimenti bibliografici

- [1] A. Vanossi, N. Manini, M. Urbakh, S. Zapperi, and E. Tosatti, *Rev. Mod. Phys.* **85**, 529 (2013).
- [2] C. Fusco and A. Fasolino, *Phys. Rev. B* **71**, 045413 (2005).
- [3] S. N. Medyanik, W. K. Liu, I. H. Sung, and R. W. Carpick, *Phys. Rev. Lett.* **97**, 136106 (2006).
- [4] C. Kittel, *Introduction to Solid State Physics* (John Wiley and Sons, U.S.A., 2005).
- [5] N. W. Ashcroft and N. D. Mermin, *Solid State Physics* (Harcourt, U.S.A., 1976).