

Resumen

En este trabajo se presenta un estudio teórico del rebote de una esfera nanoscópica de argón que cae desde distintas alturas sobre una superficie del mismo material en un campo de fuerzas constantes. Simulaciones hechas con dinámica molecular muestran que, después del rebote, la esfera se comprime y actúa como oscilador armónico para velocidades bajas, y se funde para velocidades grandes; pero existe un rango de velocidades de impacto para las cuales la esfera sólida cambia su estructura configuracional. Por otro lado, se cuantifica la energía térmica y configuracional entregada a la superficie, lo cual explicaría origen del coeficiente de restitución.

1. Introducción

Un problema clásico dentro de la mecánica es el del rebote de un cuerpo sobre una superficie, bajo la acción de la fuerza de gravedad en caída libre. Después de cada rebote, el cuerpo alcanza distintas alturas, cada una de ellas menor o igual a la anterior, en dependencia de la energía mecánica transferida a la superficie en forma de calor después de cada rebote. El propósito de esta investigación es describir precisamente esta transferencia de energía en completo detalle, para cuantificar su transformación, desde la energía potencial inicial, a cinética y térmica luego, en sistemas de pocas partículas, en función de su temperatura y velocidad inicial, entre otras variables.

El sistema en cuestión consta de una nanoesfera que interactúa de manera repulsiva con una superficie, ambas de argón en estado sólido (ver figura). El estudio a nivel atómico se realiza mediante simulaciones de dinámica molecular clásica [1], modelando la interacción interatómica con un potencial de Lennard-Jones modificado:

$$V(r) = \begin{cases} 4\varepsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r}\right)^{12} - c \left(\frac{\sigma}{r}\right)^6 \right] & r < r_c = 6\sigma \\ 0 & r \geq r_c, \end{cases} \quad (1)$$

donde r denota la separación entre dos átomos, r_c la distancia de corte, mientras que σ y ε son los parámetros de distancia y energía correspondientes al argón [2], respectivamente. La interacción entre los átomos de la nanoesfera y los átomos de la superficie está dada por la ec. (1) con $c = 0$ (es decir, puramente repulsivo), mientras que las interacciones dentro de la nanoesfera y dentro de la superficie están dadas por potencial de Lennard-Jones habitual (ec. (1) con $c = 1$). La nanoesfera, compuesta por menos de 100 átomos, se encuentra inmersa en un campo de fuerza constante en dirección y magnitud, del orden de 10^{-5} eV/Å, y es lanzada desde diferentes alturas para que impacte a la superficie, formada por alrededor de 1500 átomos.

El problema es analizado también en forma analítica, en una aproximación macroscópica, usando un modelo armónico, en el cual dos masas atadas por un resorte (que modelan una nanoesfera compresible) caen bajo la fuerza de gravedad encima de una plataforma unida a un resorte que se encuentra atado a la tierra. La caída de las dos masas comprime al resorte de tal manera que, al reaccionar, éste impulsa a las dos masas incidentes hacia arriba.

2. Modelo Teórico.

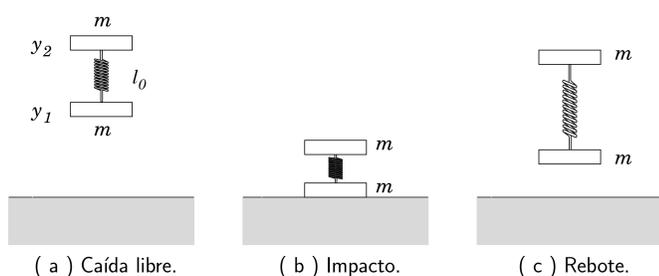


Figura 1: Momentos de la colisión.

Ecuaciones de movimiento para la Fig. 0(a)

$$m\ddot{y}_2 = -mg - k(y_2 - y_1 - \ell_0), \quad (2)$$

$$m\ddot{y}_1 = -mg + k(y_2 - y_1 - \ell_0), \quad (3)$$

Ecuaciones de movimiento para la Fig. 0(b)

$$m\ddot{y}_2 = -mg + k(\ell_0 - y_2), \quad (4)$$

$$y_1 = 0, \quad (5)$$

3. Simulaciones en Dinámica Molecular

La figura 2 muestra la simulación de la esfera cayendo sobre el plano. Al colisionar, la bola se comprime, para luego despegarse de la superficie, oscilando de manera armónica.

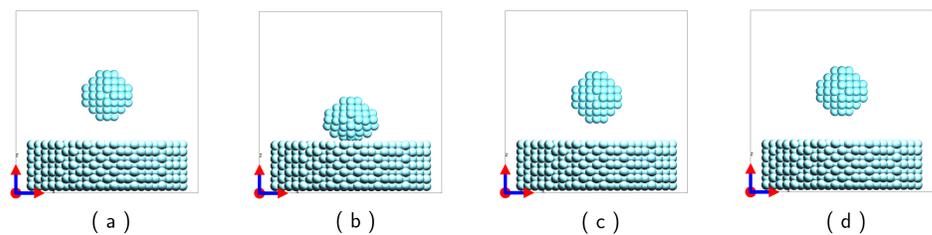


Figura 2: Impacto a 100 m/s.

La figura 2 muestra la simulación de la esfera cayendo sobre el plano. Al colisionar, la bola se comprime, para luego despegarse de la superficie, oscilando de manera armónica.

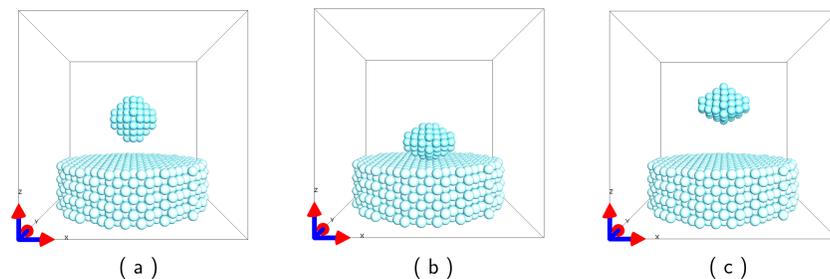


Figura 3: Impacto a 150 m/s.

4. Resultados

| | Porcentaje Error a | Porcentaje Error b |
|-------------|----------------------|----------------------|
| $T = 100 K$ | 0.6157 | 0.4168 |
| $T = 120 K$ | 0.6119 | 0.4142 |
| $T = 150 K$ | 0.6603 | 0.4470 |
| $T = 190 K$ | 0.5549 | 0.3756 |
| $T = 240 K$ | 0.6102 | 0.4130 |

Tabla 2: Coeficiente de restitución en función de la altura

5. Final Remarks and Future Work

† Remarks

- LPMD works on most computer hardware, adding new features does not imply a reinstallation of the full code.
- LPMD has a simple input format (minimal learning curve) based on loading and applying modules.
- LPMD is far from being just a simple MD code: it includes utilities such as *analyzer*, *converter*, *visualizer*, all connected within the common MD framework. Using the LPMD API it is easy to make your own custom C++ and Python MD codes.
- It supports many formats for input and output files, unlike most molecular dynamics codes. Some plugins were developed as interfaces between MD codes, for easy comparison and migration.
- As free software, we aim for frequent releases and bug fixes. During last year, a lot of new features has been implemented, such as structural analysis, potentials and file formats.

† Future Work

- MPI support. We hope to achieve combined support for MPI and OpenMP.
- Ewald summation method, or some other faster ones for electrostatics interaction forces.
- Mixer. A new program for building complex material structures.
- Full integration between LPMD and the Python programming language.
- Attend requests from other users or colleagues.

Referencias

- [1] S. Davis, C. Loyola, F. González, and J. Peralta. Las Palmeras Molecular Dynamics: A flexible and modular molecular dynamics code. *Computer Physics Communications*, 181(12):2126 – 2139, 2010. <http://www.lpmd.cl/>.
- [2] C. Kittel, Introduction to Solid State Physics, 53 (University of California, Berkeley, 2005).

6. Agradecimientos

Este trabajo es apoyado por los Proyectos Anillo ACT-24 *Computer simulation lab for nano-bio systems* y ENL 10/06 VRID-U. de Chile. Agradecemos a S. Davis útiles comentarios en torno al trabajo. F.G-C agradece a la beca doctoral de CONICYT.