Análisis de la velocidad angular para una mancuerna de tamaño nanométrico

Carlos López Lima¹ y Verónica Lucero Villegas Rueda² ¹Departamento de Física, ESFM-IPN, México D. F., México ²Departamento de Ciencias Básicas. UPIITA-IPN, México D. F., México E-mail: vvillegasr@ipn.mx

Resumen — La nano robótica tiene retos en la miniaturización de sistemas mecánicos a escala nanométrica. Analizamos un caso sencillo de rotación de una mancuerna bajo condiciones de desplazamiento vertical para transmitir movimiento horizontal por medio de la rotación del brazo y la velocidad angular generada en términos de su tamaño y velocidades que deseemos transmitir para diferentes instantes del movimiento. Los cálculos se muestran para mancuernas de tipo diatómico en moléculas, y otras como la molécula del agua reducida a un modelo simple de mancuerna moviéndose a bajas velocidades.

Palabras Clave – Mecánica, nanomáquinas, velocidad angular, transmisión de velocidad.

Abstract — Nano robotics is a research field that has challenges in the miniaturization of mechanical systems like as the movement transmission mechanism. A simple system to exemplify is the rotation of a dumbbell that transmit vertical displacement to horizontal displacement through the rotation of the axis dumbbell. This axis rotation is solved by relativity velocity and angular velocity analysis in function of dimension or size, angular position, known vertical velocity to transmit at different moments of time. Calculations are shown for diatomictype dumbbells in molecules movement at low velocities in the simple nano dumbbells model.

Keywords — Mechanics, nanomachines, angular velocity, velocity transmission.

I. INTRODUCCIÓN

El desarrollo de máquinas debe contemplar su respuesta mecánica completa en cada instante de movimiento y estas deben cumplir las leyes de la mecánica mediante análisis de mecanismos completos, Fig. 1 [1-4]. Actualmente el interés por tener máquinas cada vez más pequeñas hasta llegar a escalas nanométricas exige medir y cuantificar la dinámica completa sin ignorar los efectos en la respuesta mecánica que tiene el tamaño o dimensiones de la máquina al cambiar de escala de metros a nanómetros. Las soluciones de mecanismos completos y sus respuestas son temas

Este trabajo está patrocinado en parte por la Secretaría de Investigación y Posgrado del IPN, proyecto SIP 20221210.

comunes que se analizan en diferentes cursos de mecánica en las diferentes ingenierías sin ahondar en las implicaciones que tiene un cambio de escala que influye en el tipo y resistencia de materiales, tiempo y costo de desarrollo del mecanismo completo [5]. Llevar al límite nanométrico de tamaño es común cuando se desea analizar máquinas que idealmente puedan trabajar a escala de nanómetros en el ADN, Fig. 2 y Fig. 3 [6, 7], así como desarrollar estructuras que ayuden a soportar, manipular y/o suplir dispositivos nano, Fig. 4 [8].



Fig. 1. Mecanismos típicos de libro de texto de mecánica en ingeniería [1-5].



Fig. 2. Diseños de conectores de cuerpo rígido usados para modelar mecanismos de ADN [5].



Fig. 3. Diseños de conectores de cuerpo rígido usados para modelar mecanismos de ADN [6].



Fig. 4. Estructuras rígidas usadas para modelar la transmisión de movimiento rotacional a movimiento vertical en estructuras del ADN [8].

Un sistema simple para analizar es el mecanismo de una mancuerna simple, en este trabajo se usa el análisis mecánico de velocidades relativas con restricción de transmisión de movimiento vertical a movimiento horizontal mediante el giro del brazo de la mancuerna y posteriormente se calcula la respuesta de velocidad angular llevando al sistema a escala de nanomáquinas y se discute el efecto en la respuesta únicamente mecánica en máquinas de tamaño nanométrico.

II. METODOLOGÍA

Resolvemos la transferencia de velocidades, \vec{v} , analizando la mecánica de la mancuerna que está confinada a moverse en sus extremos de forma lineal y transmitir movimiento lineal vertical a movimiento lineal horizontal. Analizamos la velocidad angular que alcanza a generarse en la rotación del eje de la mancuerna, Fig. 5 y Fig. 6.



Fig.5. Mancuerna restringida a movimiento sobre las trayectorias vertical y horizontal



Fig. 6. Movimiento de desplazamiento de la mancuerna, velocidades lineales y angulares alrededor del punto A.

Se realiza el análisis de movimiento relativo, el diagrama de posiciones y velocidades con las restricciones del movimiento se muestran en Fig. 7 [1-5]. Los vectores de posición del punto A, \vec{v}_A , punto B, \vec{v}_B , y la dirección de giro con velocidad angular del brazo de la mancuerna, $\vec{\omega}_{AB}$, se muestra.



Fig. 7. Diagrama de posiciones desde el, sistema fijo (x, y) y el sistema móvil (x', y') centrado en el punto A. la restricción de movimiento vertical para A y movimiento horizontal para B se muestran, así como la rotación centrada en el punto A.

Analizando el esquema de la Fig. 7, se establecen las ecuaciones vectoriales de movimiento para la mancuerna. La posición de B está dada por la suma de vectores en (1) y al derivar respecto al tiempo se obtiene (2). Los subíndices (x', y') indican que se define desde el centro de giro en A.

$$\vec{r}_{B} = \vec{r}_{A} + \vec{r}_{B|A_{x',y'}} \tag{1}$$

$$\vec{v}_B = \vec{v}_A + \vec{v}_{B|A_{\chi', \chi'}}$$
(2)

Visto desde el punto de rotación A se tiene por definición que la velocidad está dada por $\vec{v}_{B|A_{x',y'}} = \vec{\omega}_{B|A} \times \vec{r}_{B|A_{x',y'}}$. En el esquema se muestra que la dirección de la rotación es positiva por lo que $\vec{\omega}_{B|A} = \omega_{AB}\hat{k}$ y por otro lado tenemos que $\vec{r}_{B|A_{x',y'}} = l \sin \theta \hat{\iota} - l \cos \theta \hat{j}$, entonces sustituyendo en $\vec{v}_{B|A_{x',y'}}$ y reduciendo se obtiene (3).

$$\vec{v}_{B|A_{\chi',\chi'}} = \omega_{AB} l(\cos\theta\,\hat{\imath} + \sin\theta\,\hat{\jmath}) \tag{3}$$

Por otro lado, tenemos que A se mueve de forma vertical hacia abajo con vector velocidad $\vec{v}_A = -v_A \hat{j}$; y B se mueve de forma horizontal a la derecha con velocidad $\vec{v}_B = +v_B \hat{\iota}$. Entonces usando (3) y al sustituir en (2) se obtiene (4)

$$v_B \hat{i} = -v_A \hat{j} + \omega_{AB} l(\cos\theta \,\hat{i} + \sin\theta \,\hat{j}) \tag{4}$$

Igualando por componentes y despejando obtenemos (5) y (6) que son las funciones velocidad angular del brazo y velocidad lineal horizontal transmitidas por la velocidad lineal vertical del punto A.

$$\omega_{AB} = \frac{v_A}{l\sin\theta} \tag{5}$$

$$v_B = \frac{v_A}{\tan\theta} \tag{6}$$

Las ecuaciones (5) y (6) quedan en términos de la rapidez de A, v_A , y la posición angular de B, θ , principalmente, sin embargo, la velocidad angular queda en términos del tamaño de la mancuerna *l*.

Para analizar la respuesta mecánica transmisión de rotación ω_{AB} y translación v_B de la mancuerna a escala nanométrica usamos el tamaño de brazo de la mancuerna l = 10 nm [6-8] y supusimos velocidades bajas de traslación vertical de A con valores $v_A = 1, 2, 3, 4, 5, 6 y 7 m/s$.

III. RESULTADOS

Los cálculos numéricos se realizaron usando el software libre Scilab [9], en los primeros cálculos se consideró el tamaño de brazo de la mancuerna de 10 nm, y se varió el valor de la velocidad manteniendo un valor de rapidez constante y bajo desde 1 m/s hasta 7 m/s. Los resultados se muestran en Fig. 8 y Fig. 9.



Fig. 8. Comportamiento de la velocidad angular ω_{AB} en unidades de gigaradianes por segundo en términos de la posición angular θ . Se muestran diferentes curvas para valores de la velocidad v_A desde 1 *m/s* a 7 *m/s*. El orden de magnitud de ω_{AB} es inversamente dependiente de la longitud de la mancuerna *l*.



Fig. 9. Comportamiento de la velocidad horizontal transmitida v_B , en términos de la posición angular θ .

Las unidades de la velocidad angular ω_{AB} están en unidades de 10⁹ rad/s (Gigaradianes por segundo) el orden de rapidez con la que se dan los giros es "enorme" a escalas nanométricas. Las unidades de la velocidad B están en m/s y son del mismo orden de magnitud de la velocidad proporcionada a A.

En la Fig. 10 se muestra el comportamiento al variar la longitud del brazo de la mancuerna desde 10*nm* hasta 500 *nm* dejando fija la velocidad de A igual a $v_A = 1 m/s$. La respuesta de velocidad angular va alentándose, es decir, va girando más lentamente conforme aumentamos la longitud del eje AB, *l*. La velocidad lineal horizontal transmitida de A a B no varía con la longitud de la mancuerna por lo que su comportamiento sigue siendo el descrito por la Fig. 9.



Fig. 10. Comportamiento de la velocidad angular ω_{AB} en términos de la posición angular θ . Se muestran diferentes curvas para valores de longitud de la mancuerna *l*, desde 10 *nm* hasta 500 *nm*.

IV. DISCUSIÓN

La velocidad lineal v_B y la velocidad angular ω_{AB} son divergentes positivas al iniciar el movimiento en $\theta = 0^\circ$; y va disminuyendo conforme aumenta el ángulo θ hasta llegar a detenerse en $\theta = 90^\circ$ y donde se alcanza $\omega_{AB} = v_A/l$; el límite al que llega ω_{AB} es dependiente del tamaño de la mancuerna l, mientras que v_B siempre es cero en el mismo límite. Cuando $\theta = 45^\circ$ la velocidad transmitida a B es igual a la velocidad de A en ese instante, $v_B = v_A$ y $\omega_{AB} = \sqrt{2} v_A/l$. Se observa que cuando aumenta v_A , también aumentan v_B y ω_{AB} .

Para $l \rightarrow 0$ tenemos que $\omega_{AB} \rightarrow \infty$, entonces para que una máquina de tamaño nanométrica o a escala atómicamolecular responda mecánicamente debe ser capaz de realizar giros con velocidades angulares, ω_{AB} , enormes. Eso tienen implicaciones en la energía que se debe generar durante la rotación donde se considera el valor de la masa para los extremos A y B de la mancuerna, $E_K = \frac{1}{2}I\omega_{AB}^2$, donde , $I = \frac{1}{2}ml^2$, si despreciamos la masa al brazo AB y usamos valores típicos de masas moleculares $m_A = m_B =$ $m \sim 10 \times 10^{-26} kg$, tenemos que el omento de inercia queda como $I = 5 \times 10^{-42} kg \cdot m^2$.

Si $l \to \infty$ tenemos que $\omega_{AB} \to 0$, entonces no habría giro y la velocidad no sería afectada en absoluto y sólo dependería del valor del ángulo de inclinación, que tampoco existiría bajo esos límites de tamaño ya que no es físicamente posible.

Análisis mecánicos se han hecho desde otra perspectiva de movimiento con centro rotación en el centro de masa de moléculas diatómicas [9], sin embargo, el cálculo se limita a encontrar las energías de rotación por medio de momentos de inercia y en nuestro caso llegamos al valor de la velocidad angular de rotación para un sistema nanométrico con restricciones de movimiento que transmite movimiento vertical a movimiento horizontal mediante la rotación del eje que conecta a la mancuerna. Este análisis de tipo mesoscópico ya está dentro del umbral de la mecánica cuántica con momentos rotacionales de las moléculas y estados de vibración donde la temperatura juega un papel importante [10].

V. CONCLUSIONES

Este análisis sirve para visualizar desde el punto de vista mecánico el comportamiento rotacional de una mancuerna y como los efectos de tamaño permiten, o no, escalar la respuesta mecánica de la mancuerna hasta llegar a una molécula. En el análisis sólo se consideran efectos de tamaño y posición angular del eje de la mancuerna desde el punto de vista mecánico clásico de mecanismos y máquinas quedando dentro de un análisis mesoscópico. La intersección con mecánica cuántica debe ser discutido en otro análisis que está fuera de los objetivos del análisis presentado aquí.

REFERENCIAS

- R. C. Hibbeler, Ingeniería Mecánica, Dinámica, 12 Edición, Ed. Pearson Educación, México 2010.
- [2] F. P. Beer, E. R. Johnston, P. J. Cornwell, Mecánica Vectorial para ingenieros, Dinámica, 9na edición, Mc Graw Hill, México 2010.
- [3] H. Goldstain, Mecánica Clasica, Editorial Reverté, 1992.
- [4] R. Resnick, D. Halliday, K. Krane, Física, 4ta edición, Cecsa, México 1999.
- [5] R. C. Hibbeler, Mecánica de Materiales, 8va edición, Pearson Educación, México 2011.
- [6] Marcello DeLuca, et. al., Dynamic DNA nanotechnology: toward functional nanoscale devices, Nanoscale Horizons, 2019. DOI: 10.1039/c9nh00529c
- [7] Hai-Jun Su, et. al., The Kinematic Principle for Designing DNA Origami Mechanism: Challenges and Opportunities, Journal of Mechanical Design, 2017. DOI:10.1115/1.4036216
- [8] Carlos E. Castro, et. al., Mechanical design of DNA nanostructures, Nanoscale 7, 5913-5921, 2015. DOI: 10.1039/C4NR07153K
- [9] Scilab Free Software, Available: https://www.scilab.org/, 2022.
- [10] Espectro rotacional, Available: http://hyperphysics.phy-astr.gsu.edu