

UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO GRANDE DO SUL
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM FÍSICA

**Estudo do Atrito de um Dímero Deslizando sobre
um Potencial Periódico Bidimensional[†]**

Aluno: Ítalo Gabriel Neide
Orientador: Dr. Sebastián Gonçalves
Co-orientador: Dr. Sílvio R. Dahmen

Porto Alegre, RS
Maio 2007

[†]Trabalho financiado pelo CNPq

Ítalo Gabriel Neide

**Estudo do Atrito de um Dímero Deslizando sobre
um Potencial Periódico Bidimensional**

Dissertação de Mestrado para ser apresentada ao Instituto de Física da UFRGS como parte dos requisitos à obtenção do título de Mestre em Física.

Orientador: Sebastián Gonçalves

Co-orientador: Sílvio R. Dahmen

Porto Alegre, RS

Maio 2007

Agradecimentos

- Ao meu orientador e co-orientador, Drs. Sebastián Gonçalves e Sílvio R. Dahmen, sou grato pela orientação.
- Aos colegas de pós-graduação, em especial o amigo Evy Salcedo Torres, pela ajuda incondicional e pelas críticas e sugestões.
- A minha mãe e ao meu pasastro pelo apoio durante esta jornada.
- Ao CNPq, pelo apoio financeiro.

Resumo

O trabalho pioneiro de Krim e Widom [Phys. Rev B **38**, 12184 (1988)] revelou a origem da natureza viscosa do atrito em escala atômica gerando uma extensiva atividade teórica e experimental na área da tribologia. Em trabalho posterior, Struntz e Elmer [Phys. Rev. E **58**, 1601(1998)] estudaram em detalhes o atrito não linear no modelo Frenkel-Kontorova e identificaram como origem do atrito a ressonância da velocidade de deslizamento com os modos internos de vibração da cadeia e a formação de kinks. Mais recentemente Fusco e Fasolino [Eur. Phys. J. B **31**, 95(2003); Thin Solid Films **428**, 34(2003)] observaram, através de simulação numérica, o mesmo fenômeno ressonante no atrito de um dímero deslizando sobre uma superfície com potencial periódico unidimensional. Gonçalves et al. [Phys. Rev B **72**, 195418(2005)] estudaram mais profundamente esse modelo e descobriram o efeito de histerese no sistema. Nossa pesquisa busca ampliar o modelo unidimensional estudado nos trabalhos anteriores para um modelo bidimensional, aproximando-se assim de um modelo mais real. Para tanto, provamos primeiro a validade do modelo bidimensional, reproduzindo os resultados obtidos pelo modelo unidimensional e observando em seguida de que forma a inclusão de uma nova dimensão resulta numa dinâmica diferente frente ao modelo unidimensional. Avaliamos como a comensurabilidade afeta a dinâmica do dímero para diferentes configurações iniciais, e como resultado sempre constatamos que, para estados comensurados, o atrito é mais forte. A descoberta mais interessante foi que, ao reproduzir as curvas características obtidas pelo trabalho de Gonçalves et al., dando um giro inicial para o dímero, obtivemos mais um fenômeno ressonante, agora em relação a velocidade de rotação do dímero. Nossos resultados descrevem toda a dinâmica de um dímero deslizando sobre uma superfície bidimensional periódica e podem servir de base para elucidar os principais fatores envolvidos na origem do atrito em objetos pequenos.

Abstract

The pioneering work of Krim and Widom [Phys. Rev B **38**, 12184 (1988)] unveiled the origin of the viscous nature of friction at the atomic scale generating extensive experimental and theoretical activity in the area of tribology. A posterior work by Struntz and Elmer [Phys. Rev. E **58**, 1601 (1998)] aimed at the nonlinear friction of the Frenkel-Kontorova model and identified its origins in the resonance of the sliding velocity with the internal vibration modes of the chain and the formation of kinks. More recently, Fusco and Fasolino [Eur. Phys. J. B **31**, 95 (2003); Thin Solid Films **428**, 34(2003)] have identified by numerical solutions the same resonance phenomenon in the friction of a dimer sliding over a unidimensional periodic substrate. Gonçalves et al. [Phys. Rev B **72**, 195418(2005)] extended this model further and discovered the effects of hysteresis in the system. Our research aims at extending the unidimensional model studied in the works to a bidimensional model, approximating it thus to reality. We first proved the validity of the bidimensional model by reproducing the results of the unidimensional model, then observing how that the inclusion of a new dimension results in a new dynamic. We studied how commensurability affects the dynamics for different configurations, and as a result we verified that friction is always stronger at commensurated states. The most striking result was that, by reproducing the characteristic curves made by Gonçalves et al. with an initial rotation, we found one more resonance phenomenon, now connected to the rotation velocity of the dimer. Our results describe the whole dynamics of a dimer sliding on a periodic bidimensional substrate and may serve as a starting point to explain the main factors related to the origin of friction for small objects.

Conteúdo

Lista de Figuras

Lista de Tabelas

1	História da Tribologia	p. 17
1.1	A Macrotribologia	p. 17
1.2	A Micro e Nanotribologia	p. 22
1.2.1	Aparelho de Força de Superfície	p. 23
1.2.2	Microscópio de Força Atômica e de Força de Atrito	p. 26
1.2.3	Microbalança de Cristal de Quartzo	p. 28
2	Pesquisas Teóricas	p. 35
2.1	Pesquisas	p. 35
2.1.1	Origem Eletrônica do Atrito	p. 35
2.1.2	Origem Fonônica do Atrito	p. 37
2.2	Cálculos por Dinâmica Molecular	p. 39
2.2.1	Modelo de Tomlinson	p. 39
2.2.2	Modelo de Frenkel-Kontorova	p. 40
2.2.3	Modelo de Lennard-Jones	p. 41

2.3	Comensurabilidade	p. 47
2.3.1	Superlubrificação	p. 47
2.3.2	Atrito de um Dímero Unidimensional	p. 49
2.3.3	Dinâmica não Linear de um Dímero; Estudo da Comensurabilidade	p. 51
3	Modelo e Metodologia Utilizada	p. 54
3.1	Descrição do Modelo	p. 54
3.2	Algoritmo de Integração	p. 55
3.3	Metodologia	p. 56
3.3.1	Variáveis Relevantes	p. 56
3.3.2	Exposição dos Métodos	p. 59
4	Resultados e Discussão	p. 60
4.1	Verificação do Modelo	p. 60
4.2	Regime Transiente	p. 61
4.2.1	Estudo de Casos	p. 61
4.2.2	Verificação da Influência do Giro	p. 69
4.3	Regime no Limiar de Deslizamento	p. 71
4.3.1	Condições Iniciais	p. 71
4.3.2	$b/a = 1$	p. 74
4.3.3	$b/a = 0.5$	p. 80
4.4	Regime Estacionário	p. 81
4.4.1	Força na Direção 0	p. 82

4.4.1.1	$b/a = 0.5$	p. 82
4.4.1.2	$b/a = 1$	p. 87
4.4.1.3	$b/a = 1.25$	p. 88
4.4.1.4	$b/a = 1.5$	p. 90
4.4.2	Força na Direção de $\pi/2$	p. 90
4.4.2.1	$b/a = 0.5$	p. 91
4.4.2.2	$b/a = 1$	p. 92
4.4.2.3	$b/a = 1.25$	p. 94
4.4.2.4	$b/a = 1.5$	p. 95
4.4.3	Força na Direção de $\pi/4$	p. 96
4.4.3.1	$b/a = 0.5$	p. 96
4.4.3.2	$b/a = 1$	p. 100
4.4.3.3	$b/a = 1.25$	p. 103
4.4.3.4	$b/a = 1.5$	p. 105
4.5	Energia	p. 107
5	Conclusão	p. 110
	Bibliografia	p. 113

Lista de Figuras

- 1.1 Transporte de uma estátua de Ti, encontrado em uma tumba em Saqqar [1]. . . p. 18
- 1.2 Traços feitos por Leonardo da Vinci em *Codex Atlanticus e Codex Arundel*, demonstrando suas montagens experimentais para determinar: (a) a força de atrito entre um plano horizontal e outro vertical, (b) o efeito da área de contato, (c) a força de atrito mediante o uso da polia e (d) o torque de atrito [2, 3]. p. 19
- 1.3 Modelo de C. A. Coulomb mostrando o encaixe perfeito [2, 3]. p. 20
- 1.4 Modelo atualmente aceito para representar o contato entre dois corpos, proposto por Bowden e Tabor [4]. p. 21
- 1.5 Abrangência da três técnicas experimentais mais usadas na tribologia, Aparelho de Força de Superfície (SFA), Microscópio de Força de Atrito (AFM) e Microbalança de Cristal de Quartzo (QCM) [5]. p. 23
- 1.6 Descrição do Aparelho de Força de Superfície (AFS) medindo a força normal \mathbf{F} , e de atrito, \mathbf{f} , entre duas superfícies polidas de área \mathbf{A} , separadas por uma fina camada de líquido de espessura \mathbf{D} . Mediante técnicas espectroscópicas é possível medir com precisão a variação da espessura em tempo real. Em geral a área de contato é de $300\ \mu\text{m}^2$ a 5mm^2 e \mathbf{D} pode variar entre uma molécula ($\mathbf{D} = \sigma - 4\text{\AA}$) até $100\ \text{\AA}$ [6, 7]. p. 24
- 1.7 No movimento desliza-pára o lubrificante sofre uma transição de fase, alterna seu estado de sólido para o líquido [2]. p. 25

1.8	Diferentes tipos de estruturas que pode assumir o filme que lubrifica um corpo: (a) sólido, (b) amorfo, (c) líquido e (d) super-cinético [2].	p. 26
1.9	Funcionamento do Microscópio de Força Atômica. Conforme a ponte de prova desliza, ela sofre flexões devido às irregularidades da superfície. Atráves dos ângulos que um feixe de laser incidindo sobre o topo da ponta de prova assume após sua reflexão é possível analisar estas flexões [8].	p. 27
1.10	Nesta figura podem ser observados o caráter do movimento desliza-pára, a histerese e a não linearidade entre o atrito e a carga. O gráfico representa a força lateral na direção do mapeamento em função da posição do mapeamento. A agulha de prova vai e volta na mesma direção com a mesma carga aplicada [9].	p. 28
1.11	Esquema da MCQ (a) visão frontal e (b) visão lateral. As regiões sombreadas representam eletrodos metálicos evaporados sobre a superfície do cristal. (c) oscilação do cristal que pode ocasionar deslizamentos mensuráveis de filmes finos (adsorvatos) [10, 11].	p. 29
1.12	Alguns resultados obtidos por Krim et al. [12] com a micro-balança de quartzo.	p. 31
1.13	Efeito da ação de impurezas sobre o tempo de deslizamento nas medidas realizadas com a MBQ. Os quadrados representam as amostras contaminadas e os asteriscos as amostras limpas. Na Figura (a) o adsorvato é N e na Figura (b) é Kr [11].	p. 32
1.14	Tempo de deslizamento e atrito por unidade de área $s = \eta v$ (para $v = 1 \text{ cm/s}$) vs a cobertura para três diferentes superfícies de $Ag(111)$ (1 monocamada = 5.970 tomos/nm^2). O atrito por unidade de área para a bicamada de adátomos é de $15.1 \pm 0.5 \text{ N/m}^2$, que é aproximadamente 25 % maior que o atrito para uma monocamada $11.9 \pm 0.4 \text{ N/m}^2$ [13].	p. 33

1.15	Tempo de deslizamento τ e o atrito por unidade de área $s = \eta v$ (para $v = 1 \text{ cm/s}$) vs T/T_c [14].	p. 34
2.1	Modelo de Tomlinson, onde m é a massa das partículas adsorvidas e k é uma medida da interação destas partículas com o resto do corpo.	p. 40
2.2	(a) Resultados da simulação (triângulos) realizada por Cieplak et al. [15]. A curva contínua representa o resultado experimental obtido por Krim et al [10]. Os dados foram todos divididos pelo tempo característico, t_0 e logo divididos por 1000 a fim de ajustar a curva experimental. (b) Relação entre v e F para diferentes comensurações do sistema ($\sigma = 1.12r_0$, $t_0 = \sqrt{m\sigma^2/\epsilon}$). Na figura, os círculos cheios representam o sistema no estado fluido e os círculos abertos o estado sólido; quadrados cheios para estado de corrugação grande, e quadrados vazios para estados de corrugação pequena.	p. 44
2.3	Tempo de deslizamento (em segundos) vs a cobertura do substrato (em unidade do número de partículas por área), como obtido por Tommasone et al. [16] utilizando o (a) método de relaxação da velocidade e (b) o método de autocorrelação de velocidades. As linhas em ambos gráficos são resultados experimentais obtido por Krim et al.	p. 46
2.4	Média da força do atrito pelo ângulo feito pelo “flocó” de grafite em relação com o substrato de grafite. Dois picos são observados.	p. 48
2.5	Comportamento do coeficiente c , relação quadrática entre o atrito total e a corrugação do substrato, como função da comensurabilidade do sistema e da temperatura.	p. 49
2.6	Simulações numéricas das equações de movimento do dímero para potencial harmônico (a), (b) e LJ (c), (d). O movimento do centro de massa CM e movimento relativo são mostrados [17].	p. 50

2.7	Comparação entre as curvas características entre um monômero e um dímero. (a) $T = 0$, (b) $T \neq 0$ [18].	p. 51
2.8	Relação de velocidade e força, obtida por simulações numéricas para diferentes valores de a/b ($a =$ comprimento de equilíbrio do dímero, $b =$ parâmetro de rede do substrato) [19].	p. 52
2.9	Histerese obtida na relação de velocidade e força [19].	p. 53
3.1	Modelo do sistema (vista de corte).	p. 54
3.2	Velocidade da partícula 1 do dímero escrita em coordenadas do eixo do dímero, $V_{1T} =$ velocidade tangencial, ou de rotação da partícula 1, $V_{1R} =$ velocidade radial, ou de vibração da partícula 1. $\alpha =$ ângulo que o eixo faz com o sistema de coordenadas, chamado de ângulo de orientação.	p. 58
4.1	Gráfico das curvas características do dímero. A ressonância ocorre para os mesmos valores de forças e a característica linear da dependência do atrito para forças no regime alto também é obtida.	p. 61
4.2	Esquemas representando as posições iniciais do dímero. O ângulo de orientação do dímero é o ângulo que o eixo do dímero faz com a orientação do substrato na direção x . Os nós da matriz representam os máximos do potencial do substrato.	p. 62
4.3	Velocidade inicial das partículas = 3; $b/a = 1$	p. 63
4.4	Velocidade inicial das partículas = 300; $b/a = 1$	p. 64
4.5	Velocidade inicial das partículas = 3; $b/a = 0.5$	p. 64
4.6	Velocidade inicial das partículas = 300; $b/a = 0.5$	p. 65
4.7	Esquema do dímero lançado com a direção da velocidade igual à orientação inicial.	p. 66

4.8	Velocidade inicial das partículas = 3; $b/a = 1$. Neste gráfico, o ângulo de orientação do dímero foi variado até $\pi/4$ pelo fato da dinâmica assumir simetria perfeita no intervalo de $\pi/4$ até $\pi/2$	p. 66
4.9	Esquema utilizado para conhecimento do sistema com uma velocidade de giro.	p. 67
4.10	Velocidade tangencial variando de 0 a 30; $b/a = 1$	p. 68
4.11	Velocidade tangencial variando de 0 a 30; $b/a = 0.5$	p. 68
4.12	Velocidade tangencial inicial com valores = 0, 100, 200 e 300; $b/a = 1$	p. 70
4.13	Esquemas representando as posições iniciais do dímero em mínimos e máximos.	p. 72
4.14	Dinâmica das duas condições iniciais diferentes. Mesma força aplicada para as duas configurações, enquanto que para máximos o dímero inicia um movimento de translação, para os mínimos ele não consegue sair da posição inicial.	p. 73
4.15	Dinâmica das duas posições iniciais iguais. Mesma força aplicada, porém diferentes VT.	p. 74
4.16	Esquemas representando as posições iniciais do dímero para cada dinâmica analisada.	p. 75
4.17	Dinâmica frente à comensurabilidade com sentido da força variando. $F_{ext} = 0.5, b/a = 1$	p. 77
4.18	Dinâmica frente à comensurabilidade com amplitude da força variando, sentido da força = 0, $b/a = 1$	p. 78
4.19	Dinâmica frente à comensurabilidade com sentido da força variando. $F_{ext} = 0.5, b/a = 1$	p. 79
4.20	Dinâmica frente à comensurabilidade com sentido da força variando. $F_{ext} = 0.5, b/a = 0.5$	p. 80

4.21 Dinâmica frente à comensurabilidade com sentido da força variando. $F_{ext} = 0.5, b/a = 0.5$	p. 81
4.22 Média das sementes, direção da força = 0, $b/a = 0.5$	p. 83
4.23 Ampliação no região descontínua com forças altas, três sementes estão representadas.	p. 83
4.24 Ampliação da área com a descontinuidade na região de forças baixas, média das sementes, direção da força = 0, $b/a = 0.5$	p. 85
4.25 Estudo do caso com $a/b = 0.5$, na figura (a) a força aplicada ainda está no regime linear, nas figuras (b) e (c) está na primeira área, na figura (d) na segunda área e nas figuras (e) e (f) está na terceira área.	p. 86
4.26 Média das sementes, direção da força = 0, $b/a = 1$	p. 87
4.27 Ampliação da área na região de forças baixas, média das sementes, direção da força = 0, $b/a = 1$	p. 88
4.28 Média das sementes, direção da força = 0, $b/a = 1.25$	p. 89
4.29 Média das sementes, direção da força = 0, $b/a = 1.5$	p. 90
4.30 Média das sementes, direção da força = $\pi/2, b/a = 0.5$	p. 91
4.31 Média das sementes, direção da força = $\pi/2, b/a = 1$	p. 92
4.32 Ampliação da área na região de forças baixas, 3 sementes, direção da força = $\pi/2, b/a = 1$	p. 93
4.33 Dinâmica para força na direção de $\pi/2, b/a = 1$ e $VGI = 2$	p. 94
4.34 Média das sementes, direção da força = $\pi/2, b/a = 1.25$	p. 95
4.35 Média das sementes, direção da força = $\pi/2, b/a = 1.5$	p. 96
4.36 Média das sementes, direção da força = $\pi/4, b/a = 0.5$	p. 97

4.37	Ampliação da área na região de forças baixas, 3 sementes, direção da força = $\pi/4$, $b/a = 0.5$	p. 98
4.38	Estudo do caso com $b/a = 0.5$ e com força na direção de $\pi/4$	p. 99
4.39	Média das sementes, direção da força = $\pi/4$, $b/a = 1$	p. 100
4.40	Ampliação da área na região de forças baixas, 3 sementes, direção da força = $\pi/4$, $b/a = 1$	p. 101
4.41	Estudo do caso com $b/a = 1$, VGI = 2 e com força na direção de $\pi/4$	p. 102
4.42	Média das sementes, direção da força = $\pi/4$, $b/a = 1.25$	p. 103
4.43	Ampliação da área na região de forças baixas, 3 sementes, direção da força = $\pi/4$, $b/a = 1.25$	p. 104
4.44	Estudo do caso com $b/a = 1.25$, VGI = 1 e com força na direção de $\pi/4$	p. 105
4.45	Média das sementes, direção da força = $\pi/4$, $b/a = 1.5$	p. 106
4.46	Ampliação da área na região de forças baixas, 3 sementes, direção da força = $\pi/4$, $b/a = 1.5$	p. 107
4.47	Comportamento das energias do dímero (referente ao gráfico (d) da Figura 4.25).	p. 108
4.48	Comportamento das energias do dímero (referente ao gráfico (c) da Figura 4.38).	p. 108

Lista de Tabelas

- 2.1 Tempo de vida média τ (com origem na excitação de pares elétron-lacuna) da vibração na direção paralela ao substrato para vários sistemas ([20]). p. 36
- 3.1 Valores das constantes usadas no modelo. p. 59

1 História da Tribologia

1.1 A Macrotribologia

A palavra tribologia vem do grego tribos (esfregar) e significa o estudo do atrito. O termo foi amplamente difundido após a publicação do relatório “The Jost Report” [1], no qual Peter Jost descreve as perdas na economia devido a fricção, o desgaste e a corrosão, principalmente nos maquinários industriais.

O avanço da tribologia tem se mostrado importante para a solução de vários problemas. Um dos mais relevantes consiste na proteção ambiental. A temperatura média do planeta subirá de $1,8^{\circ}\text{C}$ a 4°C até 2100, provocando um aumento estimado do nível dos oceanos de 18 a 59 *cm*. Estas conclusões anunciadas em fevereiro de 2007 pelo Painel Intergovernamental sobre Mudanças Climáticas (IPCC, em inglês), da ONU. A tribologia tem oferecido meios para diminuir a produção de gases poluentes, contribuindo com a sustentabilidade de produtos industriais, provocando uma redução do aquecimento global, reduzindo o impacto do uso de fontes de energia não renováveis e de matérias primas [21, 22].

A história do atrito é tão antiga quanto a do homem. Em Saqqar, no Egito, foi descoberta uma ilustração (ver Figura 1.1) que mostra um egípcio curvado para despejar um lubrificante de maneira a deslizar uma estátua da deusa Ti. Nos séculos posteriores, alguns poucos passos foram dados por esta ciência, principalmente na arte da guerra. Um bom exemplo foram as

famosas plataformas giratórias usadas pelos romanos na construção de seus navios de guerra, que serviam para ajustar a trajetória de projéteis arremessados [5].



Figura 1.1: Transporte de uma estátua de Ti, encontrado em uma tumba em Saqqar [1].

A primeira pesquisa com impacto direto nos estudos atuais foi o trabalho sistemático feito por Leonardo da Vinci. Ele descobriu que a força tangencial de fricção (força de atrito) entre dois corpos sólidos em movimento é proporcional à força normal. A constante desta proporcionalidade é o famoso coeficiente de atrito. Com um bloco retangular deslizando sobre um plano (Figura 1.2), da Vinci conseguiu formular, 200 anos antes de Newton conceituar força, as leis do atrito macroscópico, dando indícios que ele já então tinha compreendido o conceito de força: “O atrito realizado pelo mesmo peso deve ser igual à resistência no início do seu movimento, mesmo que o contato possua diferentes larguras e comprimentos”; “O atrito produz o dobro da quantidade de esforço se o peso é duplicado”.

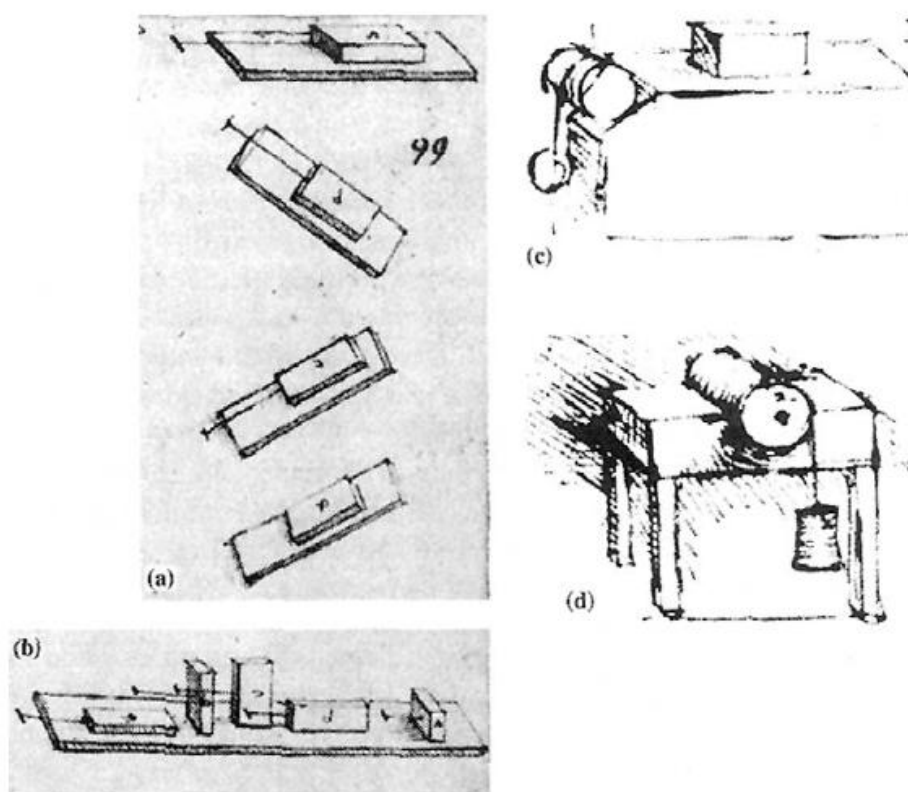


Figura 1.2: Traços feitos por Leonardo da Vinci em *Codex Atlanticus e Codex Arundel*, demonstrando suas montagens experimentais para determinar: (a) a força de atrito entre um plano horizontal e outro vertical, (b) o efeito da área de contato, (c) a força de atrito mediante o uso da polia e (d) o torque de atrito [2, 3].

Seus estudos porém não tiveram influência nos desenvolvimentos posteriores, uma vez que seus escritos não se tornaram públicos por centenas de anos. Em 1699, época em que já fora introduzido o conceito de força por Newton, o físico francês Guillaume Amontons foi o primeiro cientista a publicar as leis do atrito macrosocópico, no trabalho *De la resistance causée dans les machines*. As duas leis reformuladas são: “A força de atrito é independente da área de contato”; “A força de fricção que resiste ao deslizamento (força de atrito) numa interface é proporcional à carga normal” [23].

Charles Augustin Coulomb, em *Théorie des machines simples, en ayant regard au Frottement de leurs parties, et a la roideur des cordages*, de 1785, faz um estudo sistemático e

compreensivo do atrito macroscópico que permite a postulação da terceira lei da macrotribologia: “A força de atrito independe da velocidade com que se inicia o movimento”. Coulomb é considerado o pai da macrotribologia por idealizar um modelo que explicava as leis até então formuladas sobre o atrito, propondo que a origem do atrito estático fosse o encaixe perfeito entre as duas superfícies em contato (Figura 1.3) [24].

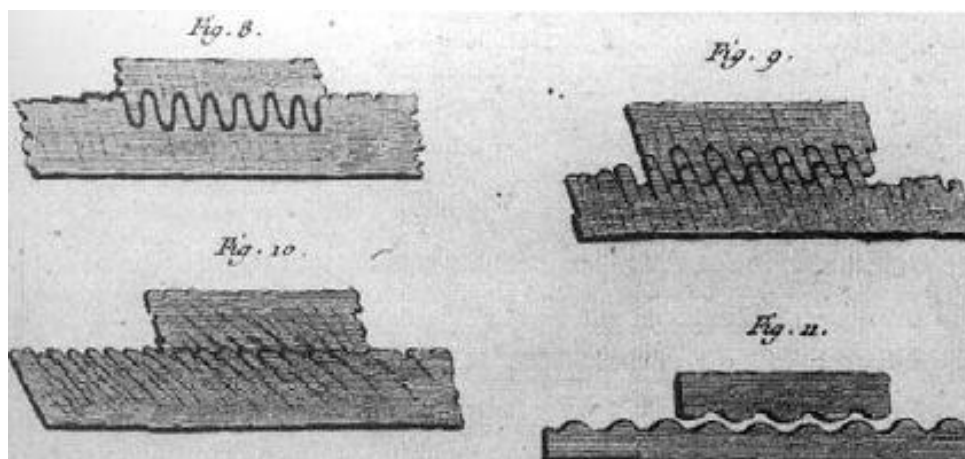


Figura 1.3: Modelo de C. A. Coulomb mostrando o encaixe perfeito [2, 3].

Os diversos avanços na área culminaram com a formação da teoria da lubrificação hidrodinâmica em 1973. Como protagonistas responsáveis pelos fundamentos da teoria podemos citar Euler, Bernoulli, Poiseuille, Navier e Stokes. Osborne Reynolds (1886) desenvolve os trabalhos da lubrificação hidrodinâmica clássica, introduzindo a teoria de lubrificação com filme-fluido e a famosa equação de lubrificação com filme-fluido. A teoria demonstra que quando dois corpos deslizam em alta velocidade o lubrificante é expelido da interface e o coeficiente de atrito passa a ser proporcional à velocidade.

No século XX, o conhecimento sobre “atrito seco” e “atrito com lubrificação” foram extremamente desenvolvidos. Como em todas áreas da física, chegava-se então cada vez mais próximo à região microscópica. O rumo natural foi a análise de lubrificantes no regime ultrafino, culminando com a teoria da Lubrificação-Limite, proposta por W. B. Hardy (1919). Ele descobriu que o importante para se ter um bom lubrificante é a constituição química do fluido e não sua viscosidade. Sua pesquisa impulsionou significativamente os trabalhos na área, aumen-

tando a aplicação de técnicas experimentais modernas nas pesquisas relacionadas com o atrito [25].

Graças a evolução de técnicas experimentais a tribologia amadurece. F.P. Bowden e D. Tabor publicam um livro [26] constituído por uma série de trabalhos próprios e trabalhos-chave de outros pesquisadores relacionados a tribologia macroscópica. A partir destes trabalhos foi possível expor uma teoria satisfatória para explicar a segunda lei do atrito. Quando dois corpos estão em contato somente alguns dos pontos da superfície destes corpos participam efetivamente do contato, a chamada área de contato real. Eles observaram que o atrito, apesar de independente da área de contato aparente, é em fato proporcional à área de contato real. Também observou-se que a área de contato real independe do tamanho da superfície mas é diretamente proporcional à força normal. Logo ao se modificar a carga (força normal) os pontos de contato cedem e alteram a área de contato de forma a suportar a nova carga (Figura 1.4).

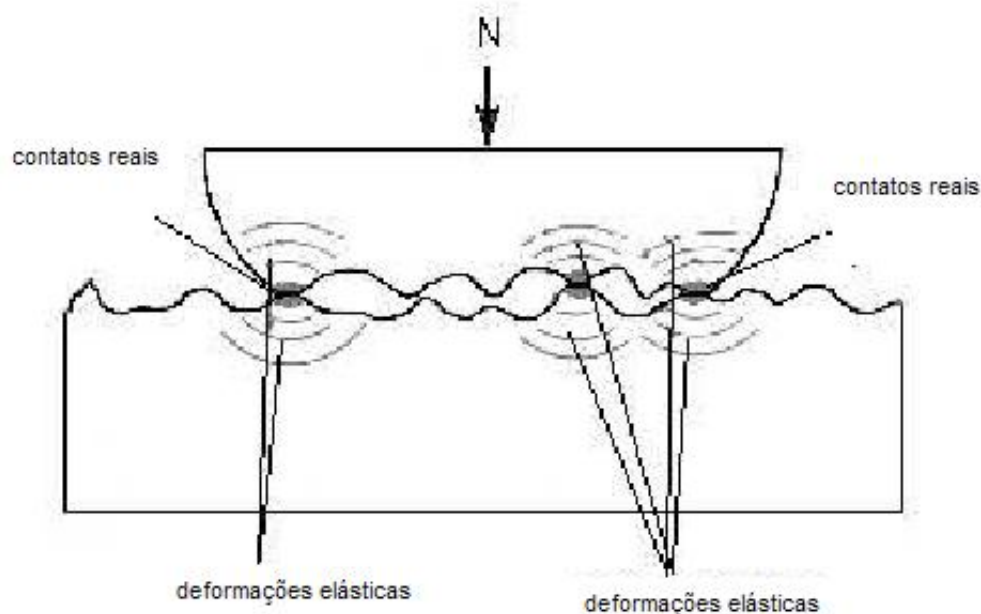


Figura 1.4: Modelo atualmente aceito para representar o contato entre dois corpos, proposto por Bowden e Tabor [4].

Resultados recentes têm demonstrado que o atrito seco não é independente da velocidade, o coeficiente de atrito pode apresentar uma dependência fraca com a mesma. Mas, os resultados de Coulomb e Amontons ainda são aceitos tendo em vista estes fatos. Também foi observado que nos casos de forças normais muito altas o coeficiente de atrito diminui.

A teoria de Bowden e Tabor foi elaborada utilizando-se caráter elástico e plástico nos pontos de contato. Eles cogitaram que o atrito tinha sua origem em ligações fortes entre os pontos de contato, arrancando de forma contínua fragmentos minúsculos dos materiais. Contudo, foi provado que o atrito pode existir com a total ausência da “quebra” de fragmentos. Através dos fônons foi possível encontrar uma explicação aceitável ante esta situação [9]. Mesmo assim, o estudo de Bowden e Tabor continua válido, pois sua discussão reside em propriedades que estão relacionadas à independência do coeficiente de atrito com a carga [4].

1.2 A Micro e Nanotribologia

Já no fim da década de 60, com a evolução de equipamentos da física de superfície, foi possível a observação de novos e interessantes fenômenos em nível micro e nanoscópico. Em 1975, C. J. Myers publicou um artigo sobre a consolidação da tribologia [27] enquanto área de estudo, descrevendo seu impacto em pesquisas nos setores da indústria, plásticos, tecnologia espacial, computadores, ácidos, corrosão e resistência de membranas, deixando clara a importância desta área. Grande parte do resto da história da tribologia fica por conta de três técnicas experimentais: Aparelho de Força de Superfície, com escalas longas de tempo, de comprimento e escalas com abrangência média de força; Microscópio de Força de Atrito, com escalas atômicas para medidas de comprimento, grandes escalas de tempo e altas escalas de força; Microbalança de Cristal de Quartzo com escalas atômicas de comprimento (entre superfícies), pequenas escalas de tempo e pequenas escalas de força (Figura 1.5). Estas ainda são as principais técnicas usadas.

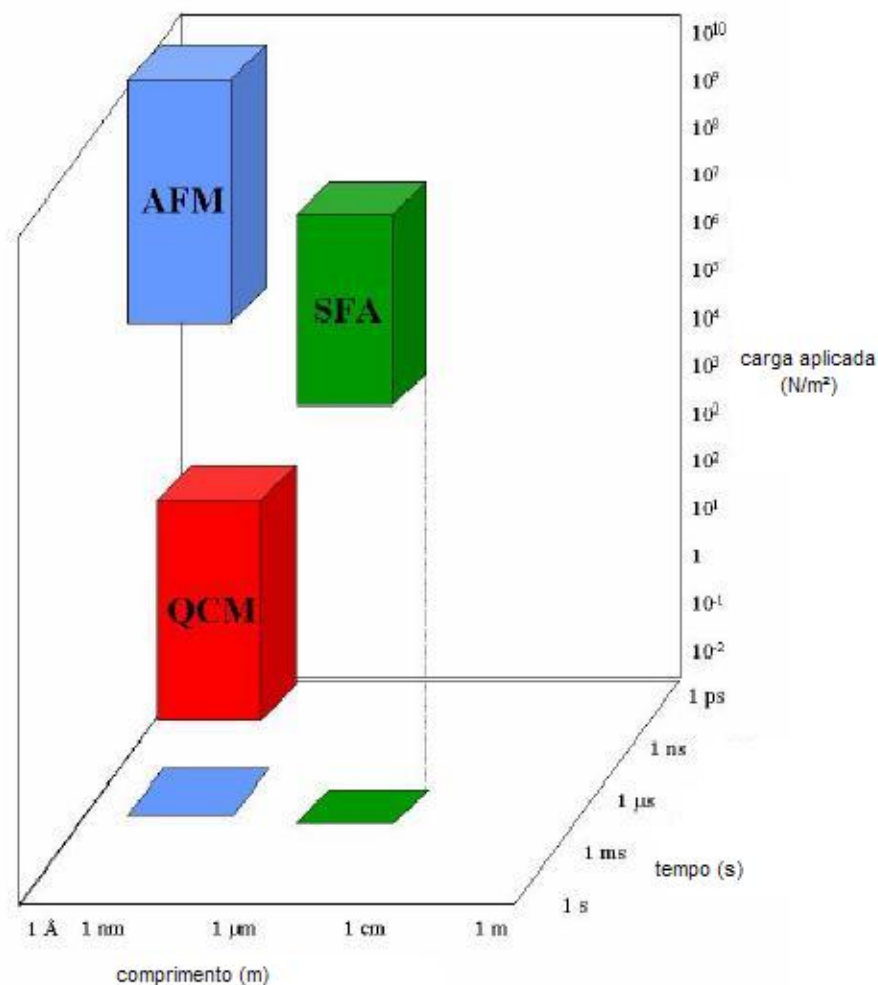


Figura 1.5: Abrangência da três técnicas experimentais mais usadas na tribologia, Aparelho de Força de Superfície (SFA), Microscópio de Força de Atrito (AFM) e Microbalança de Cristal de Quartzo (QCM) [5].

1.2.1 Aparelho de Força de Superfície

O Aparelho de Força de Superfície (AFS) foi modificado em 1973 por J. N. Israelachvili para medir o atrito [6, 7]. Ele é constituído por uma base e por um bloco altamente polidos, ambos de mica. O bloco é pressionado contra a base, e entre os dois existe um filme lubrificante (Figura 1.6). A regulação da força F controla a espessura do lubrificante D , ficando possível a

obtenção de apenas uma camada de moléculas do lubrificante.

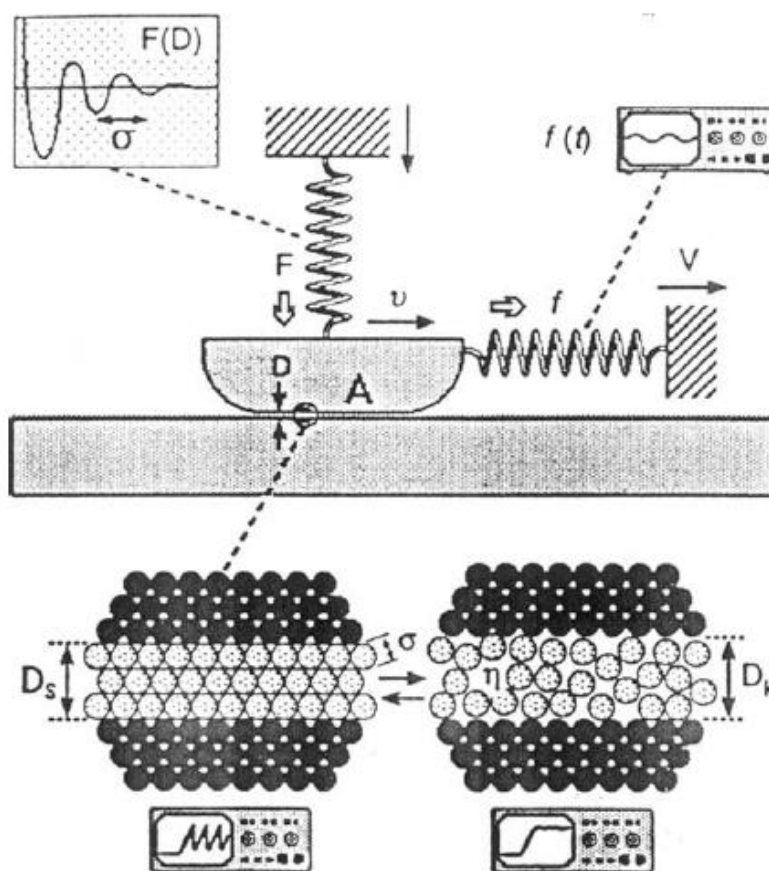


Figura 1.6: Descrição do Aparelho de Força de Superfície (AFS) medindo a força normal F , e de atrito, f , entre duas superfícies polidas de área A , separadas por uma fina camada de líquido de espessura D . Mediante técnicas espectroscópicas é possível medir com precisão a variação da espessura em tempo real. Em geral a área de contato é de $300\mu m^2$ a $5mm^2$ e D pode variar entre uma molécula ($D = \sigma - 4\text{\AA}$) até 100\AA [6, 7].

Pesquisas com o AFS mostram que o comportamento do atrito é determinado pela estrutura que adquire o lubrificante (Figura 1.7). Esta estrutura depende da temperatura, da carga e da velocidade com que o bloco anda. Segue uma breve descrição de cada tipo de estrutura:

- Sólido - Quando as camadas que separam as superfícies são poucas, a cristalinidade da superfície pode induzir uma solidificação do lubrificante. Logo o movimento apenas

inciará quando a força de atrito estático for vencida. A solidificação faz com que o corpo continuamente se alterne em momentos nos quais fica parado e em outros nos quais fica deslizando. Comportamento conhecido como desliza-pára (stick-slip motion) (Figura 1.8).

- Líquido - neste tipo de estrutura temos o atrito de Stokes, em que o atrito é proporcional a velocidade.
- Amorfo - aqui temos um emaranhado das cadeias moleculares (a maioria dos lubrificantes são polímeros) e portanto o atrito é alto.
- Super-cinético - o lubrificante vai de uma fase amorfa para uma configuração tal que o atrito é muito baixo. É uma situação rara e ocorre após o corpo ultrapassar uma velocidade crítica.

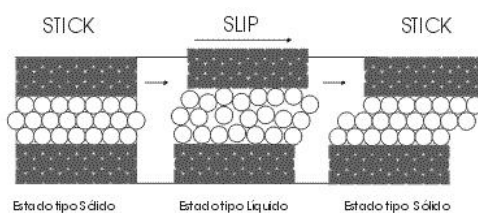


Figura 1.7: No movimento desliza-pára o lubrificante sofre uma transição de fase, alterna seu estado de sólido para o líquido [2].

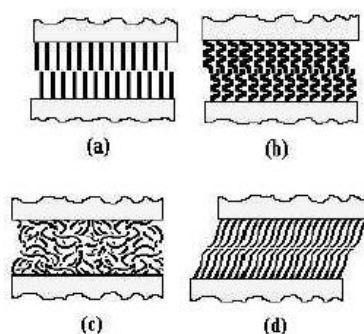


Figura 1.8: Diferentes tipos de estruturas que pode assumir o filme que lubrifica um corpo: (a) sólido, (b) amorfo, (c) líquido e (d) super-cinético [2].

Após a descoberta do movimento desliza-pára, as idéias de Bowden e Tabor não eram mais sustentáveis. Em 1929, Tomlinson criou um modelo de como o atrito pode de fato ter origem microscópica via fônons. Este modelo começou a ser revisitado e foi ganhando força até que, em 1986, a partir de resultados obtidos pelo Microscópio de Força de Atrito, evidências sobre o atrito fonônico foram obtidas.

1.2.2 Microscópio de Força Atômica e de Força de Atrito

O Microscópio de Força Atômica (MFA) permite fazer medições de forças extremamente pequenas entre uma ponta de prova (feita de tungstênio ou diamante com raio entre 10 e 100 nm) e uma superfície condutora ou isolante. É possível realizar medidas de força menores que 1 nN , monitorando a flexão da ponta de prova ao desliza-la sobre uma superfície mediante a utilização de diversos métodos modernos, como reflexão ótica, capacitância, e tunelamento de corrente (Figura1.9).

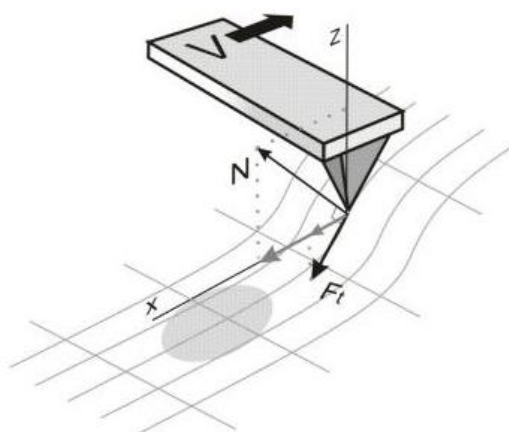


Figura 1.9: Funcionamento do Microscópio de Força Atômica. Conforme a ponte de prova desliza, ela sofre flexões devido às irregularidades da superfície. Atráves dos ângulos que um feixe de laser incidindo sobre o topo da ponta de prova assume após sua reflexão é possível analisar estas flexões [8].

Modificações realizadas por Mate et al. [9] ao Microscópio de Força Atômica resultaram no Microscópio de Força de Atrito ou de Força Lateral. Como o próprio nome sugere, sua principal diferença é trabalhar com a força aplicada na direção do movimento, e não mais na direção normal à superfície. Resultados obtidos demonstram o movimento desliza-pára e uma curva de histerese (Figura 1.10). O atrito aumenta com o aumento força lateral; logo observa-se uma não linearidade no comportamento do atrito ao nível microscópico, violação direta da lei de Coulomb-Amontons, $F = \mu N$.

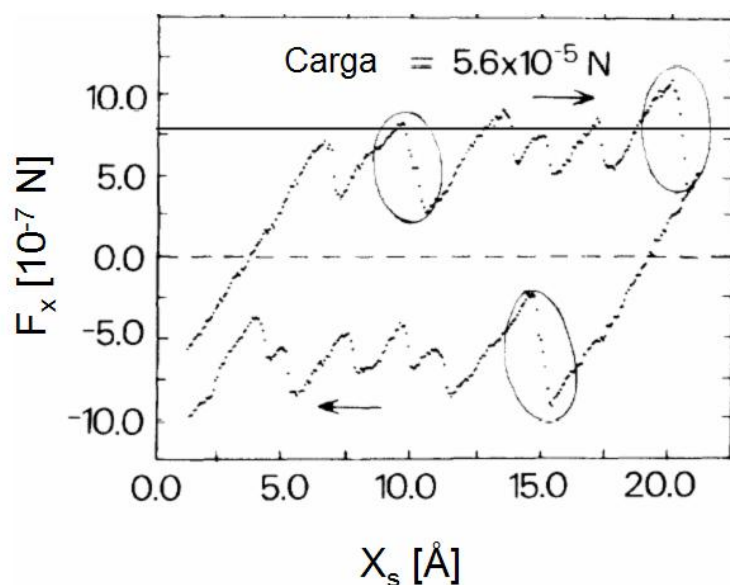


Figura 1.10: Nesta figura podem ser observados o caráter do movimento desliza-pára, a histerese e a não linearidade entre o atrito e a carga. O gráfico representa a força lateral na direção do mapeamento em função da posição do mapeamento. A agulha de prova vai e volta na mesma direção com a mesma carga aplicada [9].

1.2.3 Microbalança de Cristal de Quartzo

A Microbalança de Cristal de Quartzo (MCQ) (Figura 1.11) inicialmente era usada em determinações de massas de partículas e foi adaptada para medidas de atrito em 1986 por Krim e Widom [10, 11]. A MCQ consiste num cristal de quartzo que oscila numa frequência bem definida (5-10 Mhz). É depositado neste cristal um material condutor sobre as duas faces, geralmente ouro ou prata, com a função de atuar como substrato de um segundo material, chamado de absorvato. Este material condutor também assume o papel de eletrodos, permitindo controlar as oscilações que ocorrem no cristal.

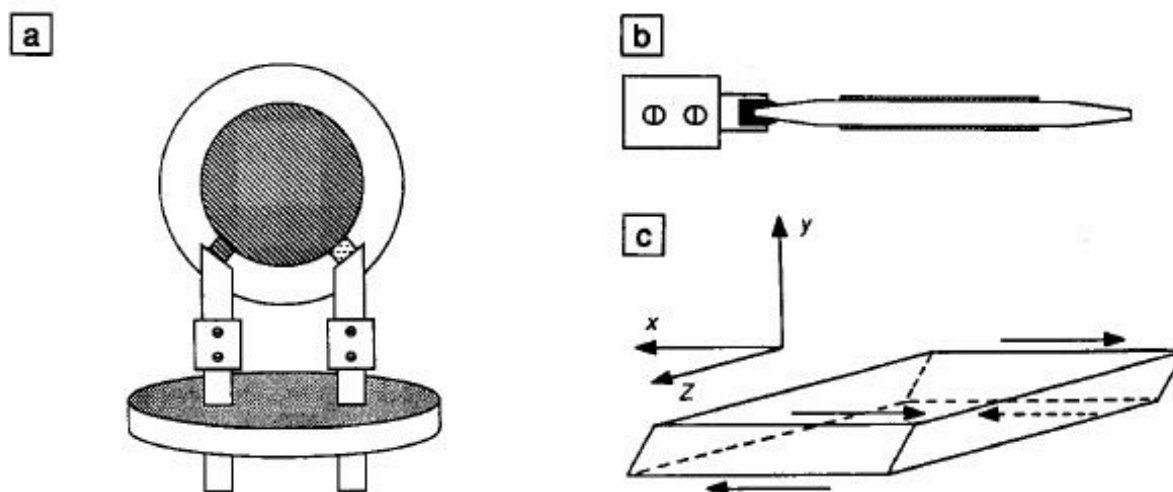


Figura 1.11: Esquema da MCQ (a) visão frontal e (b) visão lateral. As regiões sombreadas representam eletrodos metálicos evaporados sobre a superfície do cristal. (c) oscilação do cristal que pode ocasionar deslizamentos mensuráveis de filmes finos (adsorvatos) [10, 11].

A determinação de massa de partículas absorvidas na sua superfície é possível a partir da perturbação na frequência de vibração do quartzo. A partir da frequência do quartzo (ω'), da variação da frequência observada ($\delta\omega$) e da massa do quartzo (M_q), a massa das partículas absorvidas (m_a) é dada por:

$$m_a = -2M_q \frac{\delta\omega}{\omega'}. \quad (1.1)$$

Mas esta relação é deduzida para sistemas em que as partículas sobre o quartzo estão fixas ou quase fixas. Portanto, se as partículas não estão fixas ao substrato, isso se manifesta como uma variação na frequência de vibração do cristal que não corresponde à Equação 1.1. A partir desta hipótese, Krim desenvolve seu trabalho para o cálculo do atrito viscoso. A força atuante no adsorvato é do tipo $F = F_0 \exp(i\omega t)$. No seu trabalho, Krim et al. [10] descreveram como as vibrações do cristal podem ser aproximados às de um oscilador harmônico forçado com dissipação proporcional à velocidade. Conseqüentemente, foi possível calcular diversas grandezas,

das quais se obteve que a relação entre a resistência mecânica R e a reatância mecânica X para o caso de uma monocamada é:

$$R/X = \omega\tau,$$

em que ω é a frequência da diferença de potencial aplicada ao cristal e τ é o tempo necessário para que o momentum das partículas absorvidas decaia até $1/e$ do seu valor no equilíbrio. Contudo, X e R não podem ser determinadas diretamente a partir de medidas experimentais. Stockbridge demonstrou que o deslocamento do valor mais provável do fator de qualidade da micro-balança de quartzo, $\delta(1/Q)$, está diretamente relacionado com a resistência mecânica, R , através da equação:

$$\delta\left(\frac{1}{Q}\right) = 2\left(\frac{2R}{\omega\rho t}\right),$$

na qual o fator 2 é consequência da absorção existir em ambos os lados do cristal em que foi depositado o metal. Nesta relação ρ e t são respectivamente a densidade e a espessura do cristal. Já a reatância, X , está relacionada com a variação da frequência de oscilação do cristal, i.e.:

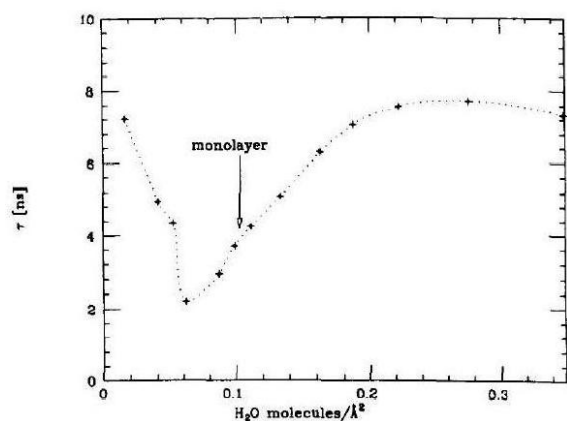
$$\delta\omega = \frac{2X}{\rho t}.$$

A partir destas equações, fica fácil demonstrar que o tempo característico da oscilação do material fisio-absorvido sobre o substrato metálico é dado pela relação

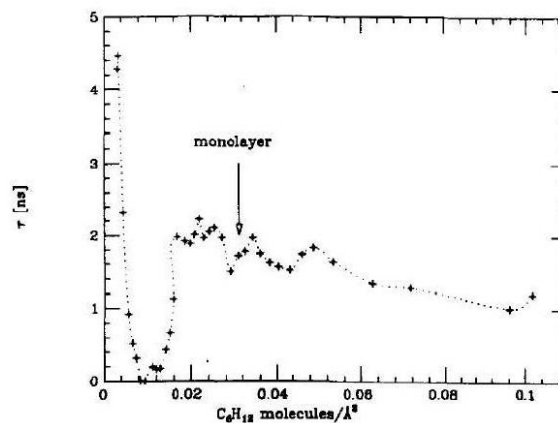
$$\tau = \frac{\delta(1/Q)}{2\delta\omega} \quad (1.2)$$

Curvas características de τ por densidade de átomos por área (cobertura) podem ser observados nas Figuras 1.12 e 1.13. Tem-se um comportamento diferenciado do tempo característico para cada amostra, portanto para cada sistema há uma curva característica associada. Em 1991, Krim et al. publicaram medidas do atrito de camadas de Criptônio deslizando em Ouro na MBQ. Eles descobriram que o tempo necessário para monocamadas sólidas de Criptônio deslizando

em Ouro (111) é cinco vezes maior que o tempo de deslizamento de monocamadas líquidas de Criptônio, ou seja, camadas sólidas apresentam menor atrito que camadas líquidas.



(a) Tempo de deslizamento vs cobertura para água absorvida em prata a temperatura ambiente. O tempo de deslizamento, τ , para o caso de uma monocamada, é de $4ns$.



(b) Tempo de deslizamento vs cobertura para ciclohexano absorvido em prata a temperatura ambiente. O tempo de deslizamento, τ , para o caso de uma monocamada, é de $1.9ns$.

Figura 1.12: Alguns resultados obtidos por Krim et al. [12] com a micro-balança de quartzo.

Utilizando a MBQ, Watts et al. [11] publicaram medidas em que comparam o efeito da exposição de amostras no ar com amostras que foram mantidas no vácuo, simulando assim um processo de contaminação. Resultados obtidos mostram, na Figura 1.13, que o tempo característico das amostras contaminadas é menor em relação ao das amostras limpas. A interpretação dos autores é que a contaminação, principalmente por hidrocarbonetos, cria pontos onde os átomos fisio-adsorvidos são apanhados (pinning centers) aumentando o atrito.

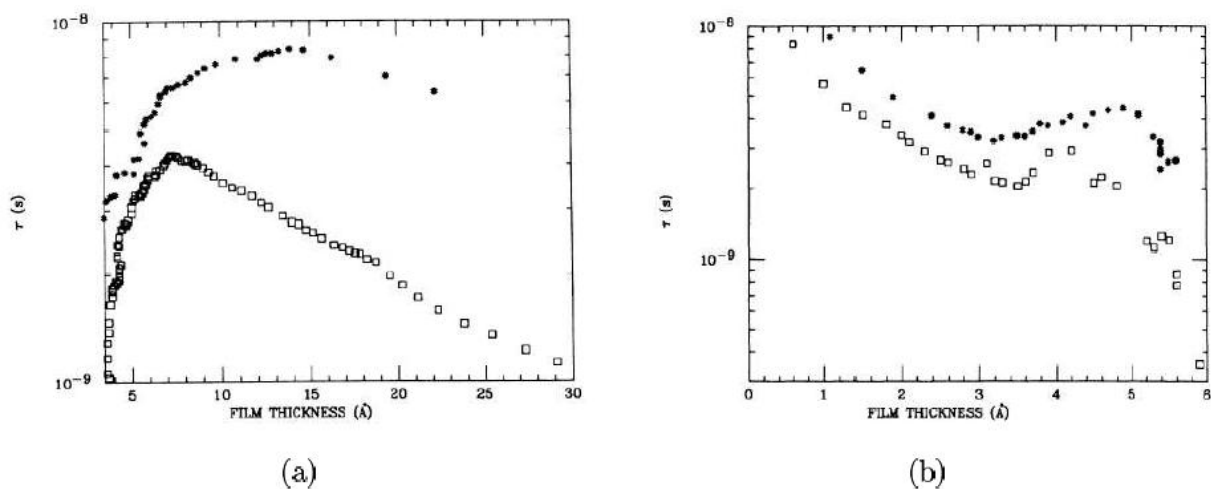


Figura 1.13: Efeito da ação de impurezas sobre o tempo de deslizamento nas medidas realizadas com a MBQ. Os quadrados representam as amostras contaminadas e os asteriscos as amostras limpas. Na Figura (a) o adsorvato é N e na Figura (b) é Kr [11].

As pesquisas desenvolvidas com a MBQ motivaram cálculos por dinâmica molecular para interpretar os resultados experimentais obtidos. Entretanto, diferentes grupos encontraram resultados controversos. Despontaram duas teorias distintas: as que atribuíram a origem do atrito nanoscópico aos movimentos eletrônicos originados pelo deslizamento dos átomos adsorvidos e as que atribuíram às excitações das vibrações atômicas (fônons). Para tentar resolver o impasse surgido, dois trabalhos experimentais foram feitos. Daly e Krim estudaram o sistema Xe sobre $Ag(111)$ [13]. O resultado foi surpreendente. A teoria que afirma que a origem do atrito nanoscópico é eletrônica indica que para o caso de duas camadas de material adsorvido o atrito teria que aumentar apenas 5 % em relação à monocamada, enquanto a teoria fonônica aponta que este aumento pode ser de até 100%. Mas o aumento calculado foi de 27% (Figura 1.14), levando à conclusão de que deve haver uma coexistência entre estes dois mecanismos.

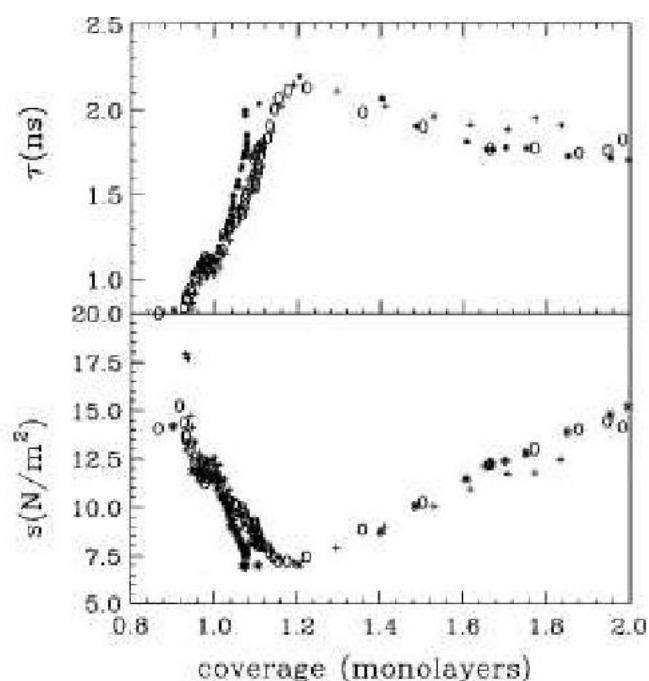


Figura 1.14: Tempo de deslizamento e atrito por unidade de área $s = \eta v$ (para $v = 1 \text{ cm/s}$) vs a cobertura para três diferentes superfícies de $\text{Ag}(111)$ (1 monocamada = 5.970 tomos/nm^2). O atrito por unidade de área para a bicamada de adátomos é de $15.1 \pm 0.5 \text{ N/m}^2$, que é aproximadamente 25% maior que o atrito para uma monocamada $11.9 \pm 0.4 \text{ N/m}^2$ [13].

O outro trabalho que tenta solucionar esta questão é um estudo mais detalhado da contribuição eletrônica ao atrito nanoscópico, estudo realizado por Dayo et al. [14]. O material adsorvido e o substrato utilizados respectivamente foram N_2 e Pb com 99.9999% de pureza. A idéia abordada foi a de diminuir a temperatura para um valor menor que a temperatura de transição da supercondutividade do Chumbo (7.2 K), obtendo assim uma mudança de fase. Neste estado os elétrons formam pares de Cooper e portanto fluem sem resistência. Logo era de se esperar que este comportamento tivesse um maior impacto no atrito com origem eletrônica do que no de origem fonônica, sendo possível demonstrar o papel fundamental do atrito de origem eletrônica. Os resultados (Figura 1.15) demonstram que no ponto de transição ocorre um aumento abrupto no valor do tempo característico (ou diminuição do atrito e do valor de “shear stress”). A princípio, o resultado é satisfatório pois aponta para uma contribuição equitativa

entre as duas origens do atrito. Porém Dayo et al. observaram que não acontece um aumento abrupto na quantidade de elétrons supercondutores. O resultado aumentou a atenção na comunidade científica, desencadeando diversos comentários e trabalhos posteriores. Um trabalho muito similar mostrou que a baixa temperatura com Nitrogênio não gera a descontinuidade relatada por Dayo et al. na transição de supercondutividade. Como a maior diferença dizia respeito à pureza do substrato, ficou claro que o efeito é observado apenas com substratos extremamente puros. Vários trabalhos teóricos [28–31] foram realizados a fim de explicar a causa da mudança abrupta no valor do coeficiente de atrito. Contudo, este problema ainda continua em aberto, o entendimento das contribuições eletrônicas e fonônicas para o atrito nanoscópico ainda são questões a serem resolvidas.

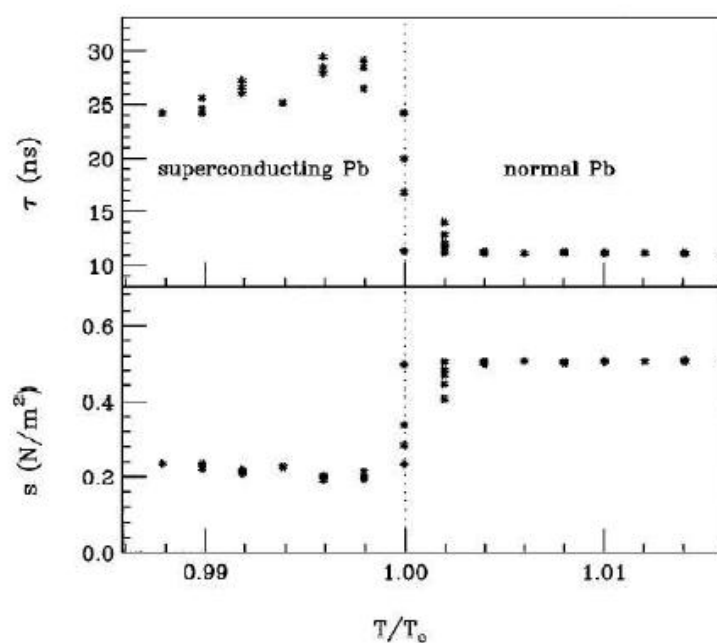


Figura 1.15: Tempo de deslizamento τ e o atrito por unidade de área $s = \eta v$ (para $v = 1 \text{ cm/s}$) vs T/T_c [14].

2 *Pesquisas Teóricas*

No capítulo anterior foi exposta uma breve revisão da história da tribologia, das descobertas de Leonardo da Vinci até os resultados de pesquisas atuais com enfoque na nanotribologia, assunto abordado no presente trabalho. Neste capítulo, serão apresentados: as teorias eletrônica e fonônica sobre o atrito, os três modelos de atrito microscópico mais usados para simulações de dinâmica molecular, e estudos de como a comensurabilidade atinge o atrito em escala nanométrica.

2.1 **Pesquisas**

Os avanços tecnológicos comentados no capítulo anterior geraram um aumento considerável no número de grupos teóricos que tentam explicar as novas descobertas. Os principais avanços teóricos ocorridos neste ínterim estão explicados resumidamente neste capítulo.

2.1.1 **Origem Eletrônica do Atrito**

Quando um átomo desliza sobre um substrato de metal, acontece a excitação de elétrons condutores próximos da superfície. Esta excitação gera pares elétron-lacunas. Pares elétron-lacunas em metais (em oposição com semicondutores) tem tempos de vida muito curtos. Quando estes

pares relaxam, o excesso de energia é dissipado na forma de calor, e a temperatura conseqüentemente aumenta. Após alguns anos transcorridos das publicações sobre as pesquisas relativas a MBQ, Persson publicou um trabalho teórico no qual estudou a variação da resistividade de um filme metálico (sobre o qual são absorvidas moléculas de um material) e a excitação de pares elétrons-lacuna (vida média de vibração na direção paralela ao substrato) [20]. Persson obteve que a relação entre a vida média de vibração na direção paralela ao substrato, τ , e a variação da resistividade com a densidade de partículas absorvidas, ρ , são dadas pela relação

$$\frac{1}{\tau} = \frac{n^2 e^2}{M} d \left. \frac{\partial \rho}{\partial n_a} \right|_{n_a=0}, \quad (2.1)$$

onde a n é densidade de elétrons de condução, e é a carga do elétron, M é a massa do adsorvato, d é espessura do filme, e n_a é a concentração de adsorvatos. Utilizando a equação 2.1 e resultados experimentais obtidos mediante espectroscopia de absorção infra-vermelha por reflexão (IRAS), Persson calculou o τ para vários sistemas (Tabela 2.1).

Tabela 2.1: Tempo de vida média τ (com origem na excitação de pares elétron-lacuna) da vibração na direção paralela ao substrato para vários sistemas ([20]).

Sistema	τ (s)
Químico-absorvido	
<i>H/Ni</i>	9.9×10^{-13}
<i>CO/Ni</i>	1.4×10^{-11}
<i>N₂/Ni</i>	4.6×10^{-11}
<i>CO/Cu</i>	3.9×10^{-11}
<i>O/Cu</i>	6.9×10^{-12}
<i>Ag/Ag</i>	1.0×10^{-10}
Físio-absorvido	
<i>CO/Ag</i>	3.6×10^{-10}
<i>C₂H₄/Ag</i>	7.2×10^{-10}
<i>Xe/Ag</i>	$\sim 3.0 \times 10^{-9}$
<i>C₆H₆/Ag</i>	1.4×10^{-9}
<i>C₆H₁₂/Ag</i>	1.7×10^{-9}
<i>C₂H₆/Ag</i>	3.6×10^{-9}

Mais tarde, Persson aplicou seus resultados às pesquisas realizadas por Krim et al. [10] e concluiu que o coeficiente de atrito experimentado pelas moléculas que compõem o material

absorvido, η_t , pode ser expresso pela relação

$$\eta_t = \frac{1}{\tau_{ph}} + \frac{1}{\tau_e}, \quad (2.2)$$

onde o termo $1/\tau_e$ está relacionado com o amortecimento resultante das excitações dos pares elétron-lacunas e $1/\tau_{ph}$ com as perdas originadas pela excitação de fônons. Persson concluiu que a contribuição eletrônica (a contribuição $1/\tau_e$) é de maior importância que a fonônica, porém admitiu que esta última não pode ser desprezada. Esta interpretação dos resultados obtidos com a MQB deu origem a um debate entre Persson e outros grupos de pesquisas que defendiam uma maior contribuição do termo fonônico à expressão 2.2.

2.1.2 Origem Fonônica do Atrito

Tomlinson publicou, em 1929, um estudo sobre a origem do atrito em micro-escalas. Neste modelo, quando duas superfícies deslizam uma sobre a outra, o atrito pode ocorrer através da vibração das camadas formadas por átomos.

Átomos que estão muito próximos de uma superfície entram em movimento pela ação deslizante dos átomos da superfície oposta. Estas vibrações são chamadas de fônons, ou ondas acústicas. Os fônons dissipam energia na forma de calor, e este processo microscópico é manifestado no atrito. Em termos mais gerais, pode-se dizer que o fundamento em que está baseada a hipótese fonônica é a provável excitação ressoante de alguns modos de vibração dos adátomos como resultado do movimento do substrato.

A equação fundamental utilizada no estudo do caráter fonônico do atrito é

$$H = \sum_n \frac{p_n^2}{2M} + v(|x_n - x_{n-1}|) + \varphi(x_n), \quad (2.3)$$

onde $v(r)$ é o potencial de interação com os adátomos vizinhos e $\varphi(r)$ é o potencial externo que

representa a interação dos adátomos com o substrato.

Partindo de uma equação similar à eq. 2.3 e aplicando o teorema da resposta da flutuação estática, Sacco et al. obtiveram que o tensor de atrito viscoso experimentado pelos adátomos é dado pela expressão

$$\overleftrightarrow{\eta}(\vec{v}) = \left(\frac{\pi}{2k_B T} \right) \sum_{\vec{q}} \vec{q} \vec{q} |\varphi_{\vec{q}}|^2 S(\vec{q}, \omega = \vec{q} \cdot \vec{v}), \quad (2.4)$$

onde \vec{v} é a velocidade dos adátomos (supõe-se que $\vec{F} = \overleftrightarrow{\eta} \vec{v}$, sendo \vec{F} a força externa por partícula aplicada ao sistema), \vec{q} são os vetores recíprocos da rede do substrato e $\varphi_{\vec{q}}$ são os coeficientes da série de Fourier em que é expandido o potencial que descreve o substrato.

Nota-se que, tomando o primeiro termo da expansão em série de Fourier do potencial gerado pelo substrato e considerando um sistema unidimensional obtém-se que

$$\eta \propto u_0^2$$

Esta proporcionalidade entre o coeficiente de atrito viscoso e o quadrado da corrugação do substrato (amplitude do potencial de interação do substrato com átomo adsorvato) também foi obtida por Cieplak et al. [15], (em que t_{ph} é o tempo de vida média dos fônons)

$$\tau(q) = \frac{1}{\eta(q)} \propto u_0^{-2} t_{ph}(q),$$

Granato et al. [32] obtiveram

$$\eta = \sum u_0^2(\vec{r}, \vec{q}) S(\vec{q}, \omega = 0);$$

onde $S(\vec{q}, \omega = 0) = \int_0^\infty dt \langle u_{q,a}(t)^* u_{q,a}(0) \rangle$ é a estrutura do fator dinâmico. Persson e Nitzan [33], no caso de v e F linear, obtiveram

$$\eta = \eta_e + C \eta_e u_0^2,$$

onde o primeiro termo do lado direito é a contribuição eletrônica ao atrito viscoso e o segundo termo é a contribuição fonônica, que na expressão é proporcional à contribuição eletrônica.

2.2 Cálculos por Dinâmica Molecular

Devido à complexidade dos fenômenos que ocorrem em sistemas estudados pela nanotribologia, as pesquisas com dinâmica molecular se mostraram uma ferramenta muito eficiente no auxílio de cálculos analíticos e na compreensão de resultados experimentais. A complexidade computacional porém é tanta que muitas pesquisas usando dinâmica molecular são realizadas considerando-se apenas modelos unidimensionais.

De acordo com os potenciais de interação entre os adátomos e o substrato existem basicamente dois modelos utilizados atualmente. Se o potencial for do tipo harmônico, os modelos são chamados de Frenkel-Kontorova (**FK**), e, se são potenciais do tipo de Lennard-Jones (**LJ**), este é o nome atribuído ao modelo. Estes dois modelos são similares, pois a interação entre as partículas é direta, ou seja a partícula i interage com a $i + 1$ e $i - 1$ diretamente. No primeiro modelo desenvolvido para entender o atrito em nível nanoscópico, a interação não era direta, e sim mediada por um terceiro corpo, em um modelo conhecido como modelo de Tomlinson em homenagem ao seu criador.

2.2.1 Modelo de Tomlinson

Apesar de ter sido proposto há quase 80 anos o modelo consegue explicar diversos resultados obtidos experimentalmente nos últimos anos. Este modelo pode explicar a ocorrência do atrito cinético e estático, a origem do movimento desliza-pára e a transição de estados deslizantes. Tomlinson propôs um modelo em que os átomos da última camada da superfície superior estariam ligados ao corpo por molas, como osciladores harmônicos independentes. Esta superfície

se desloca sem contato direto através da outra superfície inferior, que por sua vez é representada por um potencial do tipo senoidal fixo (Figura 2.1).

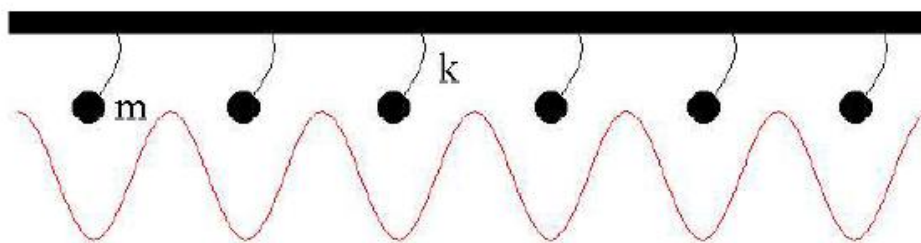


Figura 2.1: Modelo de Tomlinson, onde m é a massa das partículas adsorvidas e k é uma medida da interação destas partículas com o resto do corpo.

Aplicando uma força na superfície superior, fazendo-a deslizar, os átomos “sentem” o potencial do substrato, resultando numa vibração. A energia cinética das vibrações é dissipada integralmente para o corpo: não há uma interação de átomos com seu vizinhos. A equação de movimento para o l -ésimo átomo, no caso unidimensional e a temperatura zero é

$$m \frac{d^2 x_l}{dt^2} = -\gamma \frac{dx_l}{dt} - f \sin \left(\frac{2\pi}{a} x_l \right) - k (x_l - x_l^0), \quad (2.5)$$

onde m é a massa do átomo, x_l é sua posição na rede e γ é uma constante de amortecimento fenomenológica que dissipa o calor gerado. O termo $f \sin \left(\frac{2\pi}{a} x_l \right)$ representa o substrato.

2.2.2 Modelo de Frenkel-Kontorova

O modelo de Frenkel-Kontorova é um dos mais simples e ricos modelos de mecânica clássica. Ele é usado nas pesquisas teóricas de ondas carregadas, condutores super-iônicos, filmes adsorvidos em superfícies, junções de Josephson, crescimento epitaxial de filmes, fases incommensuráveis em dielétricos, cadeias magnéticas, modelos não lineares de DNA e etc. Na versão clássica, o modelo descreve um conjunto de partículas que interagem entre si através de

um potencial harmônico e que estão sujeitas a um potencial externo periódico:

$$m \frac{d^2 x_l}{dt^2} + \frac{2\pi u_0}{a} \sin\left(\frac{2\pi}{a} x_l\right) - k(x_{l+1} + x_{l-1} - 2x_l) = 0, \quad (2.6)$$

onde m é a massa das partículas, u_0 e a são a amplitude e o período do potencial externo, e k é a constante elástica de acoplamento inter-partícula.

2.2.3 Modelo de Lennard-Jones

Nesta subseção apresentamos o modelo de Lennard-Jones (LJ) e a comparação de resultados de uma série de pesquisas feitas com este modelo. A diferença principal deste modelo em relação ao FK é que o FK se destina a simulações em sistemas sem potenciais específicos, ou seja, potenciais harmônicos, enquanto o LJ é usado em trabalhos teóricos com potenciais específicos, conseguindo resultados mais similares com os estudos experimentais, como os obtidos na MBQ.

A equação diferencial que determina a posição da i -ésima partícula, no modelo de LJ é

$$m \frac{d^2 \mathbf{r}_i}{dt^2} - m \boldsymbol{\eta}_e \frac{d\mathbf{r}_i}{dt} = \sum_{j \neq i} \frac{\partial V(|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|)}{\mathbf{r}_i} + \frac{\partial U(\mathbf{r}_i)}{\mathbf{r}_i} + \mathbf{f}_i + \mathbf{F}_{ext} \quad (2.7)$$

onde m é a massa dos átomos e $\boldsymbol{\eta}_e$ é a matriz dos coeficientes de atrito que simula a conversão de energia através das interações dos elétrons, que pode ser descrita por

$$\boldsymbol{\eta}_e = \begin{pmatrix} \eta_{\parallel} & 0 & 0 \\ 0 & \eta_{\parallel} & 0 \\ 0 & 0 & \eta_{\perp} \end{pmatrix}. \quad (2.8)$$

$V(|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|)$ equivale ao potencial de interação entre os átomos i -ésimo e j -ésimo. Neste caso, o potencial de Lennard-Jones é

$$V(|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|) = \varepsilon \left[\left(\frac{r_0}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|} \right)^{12} - 2 \left(\frac{r_0}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|} \right)^6 \right]. \quad (2.9)$$

\mathbf{F}_{ext} é a força externa aplicada. \mathbf{f}_i é a força estocástica que simula os movimentos de vibração do substrato, definido por suas propriedades estatísticas (ruído branco)

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{f}_i(t) \rangle &= 0 \\ \langle \mathbf{f}_i(t), \mathbf{f}_j(t') \rangle &= 2\eta k_B T \delta(t - t') \delta(i, j) / m. \end{aligned} \quad (2.10)$$

$U(\mathbf{r}_i)$ é o potencial resultante da interação dos adátomos com o substrato, que na sua forma mais genérica pode se escrever na forma proposta por Steel:

$$U(\mathbf{r}_i) = U_0(z) + U_1(z) \sum_{j=1}^n \cos(\mathbf{k}_j \cdot \mathbf{r}_i), \quad (2.11)$$

onde \mathbf{k}_j são os vetores recíprocos da rede. O primeiro termo em 2.11 descreve a interação média dos adátomos com o substrato e o segundo termo descreve a corrugação periódica. Expressões para $U_0(z)$ e $U_1(z)$ foram deduzidas por Steel supondo que o potencial $U(\mathbf{r}_i)$ seja a soma de potenciais de Lennard-Jones entre a primeira camada de átomos e o substrato. Quando usado para simular substratos metálicos, porém, é necessário ter em consideração o alinhamento da nuvem eletrônica.

Usando este modelo, Cieplak et al. [15] estudaram um sistema parecido ao abordado por Krim et al. com a MBQ [12], só que para a relação Kr/Au . A forma do potencial de interação dos adsorvatos com o substrato é

$$U(\mathbf{r}) = \varepsilon' \left[U_0(z) + f U_1(z) \sum_{i=1}^3 \cos(k_i \cdot \mathbf{r}) \right], \quad (2.12)$$

onde k_i são os vetores de rede no plano (111) no espaço recíproco e $U_1(z)$ é dado por uma expressão calculada por Steel supondo a superfície composta por átomos que interagem através

do potencial de LJ,

$$U_1(z) = \alpha \exp(-g_1 z) \sqrt{\frac{\pi}{2g_1 z}} \left[\frac{\sigma_{Kr/Au}^6}{30} \left(\frac{g_1}{2z} \right)^5 - 2 \left(\frac{g_1}{2z} \right)^2 \right], \quad (2.13)$$

onde $\alpha = 4\pi\epsilon_{Kr/Au}A^6/\sqrt{3}$ com $\epsilon_{Kr/Au}/\epsilon_{Kr} = 1.19$, $g_1 = 4\pi/\sqrt{3}$ e $z\sigma_{Kr/Au}/\sigma_{Kr} = 0.97$, sendo ϵ_{Kr} e σ_{Kr} os parâmetros de LJ no caso do *Kr*. Com este modelo, Cieplak et al. [15] conseguiram reproduzir os resultados experimentais obtidos por Krim et al., ajustando o parâmetro f da equação 2.12. Eles esperavam que este parâmetro fosse aproximadamente 0.1 ou 0.2, dado que a modelagem da interação do substrato com os adátomos através do potencial de LJ não é apropriada (porque os elétrons do *Au* são não localizados) porém a diminuição foi além do esperado. O resultado obtido, de $f = 0.03$, não pôde ser explicado.

Além de reproduzir os resultados experimentais de Krim et al. [10], Cieplak et al. estudaram o efeito do estado do adsorvato sobre o atrito. Descobriram que, quando este se encontra no estado líquido, o atrito do *Kr* é maior do que na fase sólida (Figura 2.2). Simultaneamente, eles estudaram o efeito da corrugação do substrato. Como era esperado, observaram que, no caso de grande corrugação, o sistema experimentou atrito estático. Diminuindo esta corrugação, o atrito estático desaparecia. Este trabalho permitiu compreender os resultados obtidos por Krim et al. [10], porém provocou uma polêmica: segundo eles o atrito em nível nanoscópico teria sua origem nas interações fonônicas, contradizendo o afirmado no trabalho teórico de Persson [33].

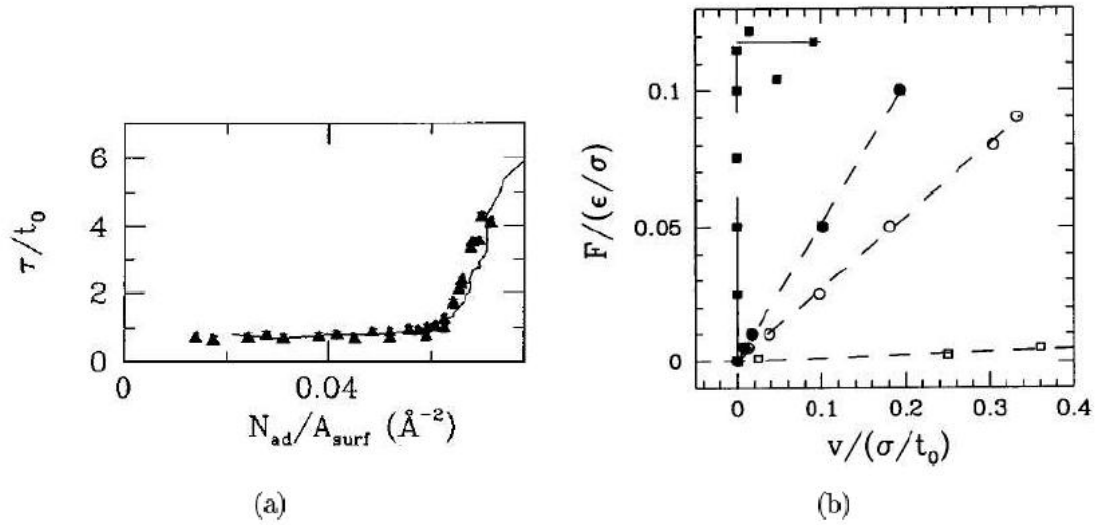


Figura 2.2: (a) Resultados da simulação (triângulos) realizada por Cieplak et al. [15]. A curva contínua representa o resultado experimental obtido por Krim et al [10]. Os dados foram todos divididos pelo tempo característico, t_0 e logo divididos por 1000 a fim de ajustar a curva experimental. (b) Relação entre v e F para diferentes comensurações do sistema ($\sigma = 1.12r_0$, $t_0 = \sqrt{m\sigma^2/\epsilon}$). Na figura, os círculos cheios representam o sistema no estado fluido e os círculos abertos o estado sólido; quadrados cheios para estado de corrugação grande, e quadrados vazios para estados de corrugação pequena.

Utilizando Dinâmica Molecular Persson e Nitzan [33] estudaram o sistema $Xe/Ag(111)$, com a finalidade de abordar os resultados experimentais obtidos por Krim et al. [10] (ver Figura 1.14). Para isto, eles utilizaram a seguinte equação para simular o potencial gerado pelos átomos do substrato:

$$U(\mathbf{r}) = E_B[e^{-2\alpha(z-z_0)} - 2e^{-\alpha(z-z_0)}] \quad (2.14)$$

$$+ U_o[2 - \cos(\frac{2\pi}{a}x) - \cos(\frac{2\pi}{a}y)]e^{-\alpha(z-z_0)}, \quad (2.15)$$

onde α está relacionado à frequência de ressonância de vibração perpendicular dos átomos do

substrato ($\omega \approx 22 \text{ cm}^{-1}$) e E_B é a energia de ligação do sistema $Xe/Ag(111)$ ($E_B \approx 0.23$).

Usando o método mais usual para o cálculo do coeficiente de atrito em regimes lineares, ou seja, F/v , eles estudaram o efeito da cobertura (definiram a cobertura como $\theta = N/M$, sendo que N é o número de partículas no adsorvato e M o número de partículas que compõem o substrato) sobre o referido coeficiente. Observaram que, no caso de uma camada completa de átomos de Xe (68/144), o coeficiente de atrito total é praticamente igual ao coeficiente de atrito ad-hoc ($\eta_e/\eta_t = 0.98 \pm 0.04$). Já no caso em que se têm duas camadas de átomos de Xe, eles obtiveram que o coeficiente de atrito total é 20% maior que o ad-hoc ($\eta_e/\eta_t = 0.83 \pm 0.02$). Ou seja, estes resultados tinham total compatibilidade com seus trabalhos teóricos, mas o impasse continuava.

Tomassone et al. [16] também estudaram o sistema $Xe/Ag(111)$. Eles simularam o potencial gerado pelo substrato da mesma forma que Cieplack et al., utilizando as equações 2.12 e 2.13. A fim de determinar o coeficiente de atrito total experimentado pelos adátomos, Tomassone et al. aplicaram a mesma força a todos os adátomos por aproximadamente $100t_0$ (onde $t_0 = \sqrt{\frac{m\sigma^2}{\epsilon}}$). Imediatamente após transcorrido este tempo, a força externa era retirada do conjunto de partículas, juntamente com o termostato externo, o que resulta num decaimento exponencial da velocidade do centro de massas cujo expoente é o inverso do coeficiente de atrito total experimentado pelos adátomos.

Além deste método eles utilizaram outro no qual não era aplicada força externa, baseados na lei de impedância de Drude-Darcy. A autocorrelação de velocidades,

$$C(t-t') = \frac{\langle v_x(t) v_x(t') \rangle}{\langle v_x(0) \rangle}, \quad (2.16)$$

tem um comportamento exponencial, cujo expoente é o inverso do coeficiente de atrito ou tempo característico,

$$C(t-t') = \exp\left(-\frac{|t-t'|}{\tau}\right).$$

Diferentemente do resultado obtido por Persson e Nitzan, Tomassone et al. conseguiram reproduzir os resultados experimentais de Krim et al. com ambos os métodos. A consequência principal (Figura 2.3) deste trabalho foi, que ao se retirar o termostato no primeiro método, o resultado está livre da ação da contribuição eletrônica, que é levada em consideração através do coeficiente η_e . Desta forma, Tomassone et al. evidenciam o papel principal desempenhado pela contribuição fonônica ao atrito total e contradizem diretamente o exposto por Persson e Nitzan.

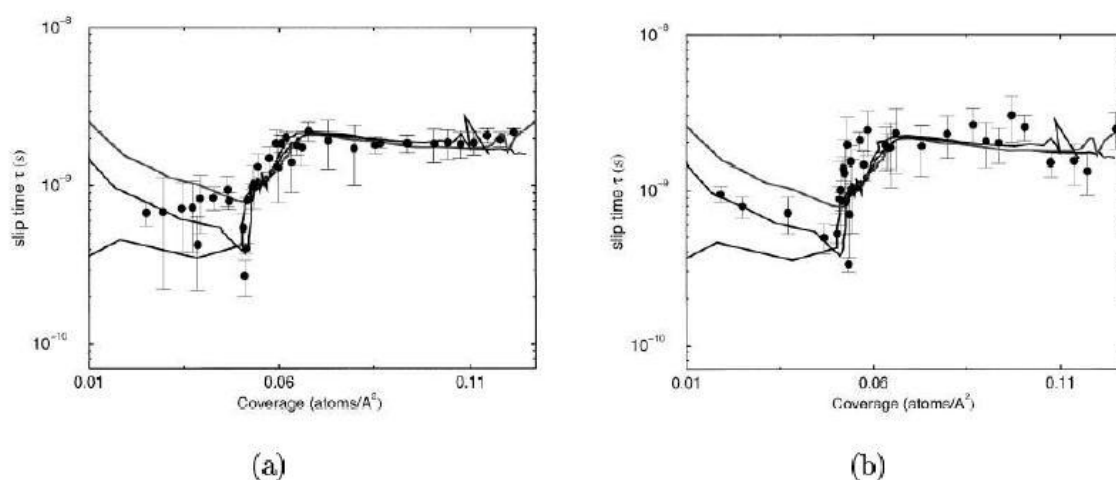


Figura 2.3: Tempo de deslizamento (em segundos) vs a cobertura do substrato (em unidade do número de partículas por área), como obtido por Tommasone et al. [16] utilizando o (a) método de relaxação da velocidade e (b) o método de autocorrelação de velocidades. As linhas em ambos gráficos são resultados experimentais obtido por Krim et al.

Liebsh et al. [34] também estudaram o sistema $Xe/Ag(111)$ simultaneamente ao sistema $Xe/Ag(100)$. Para isto utilizaram o mesmo potencial do substrato utilizado por Persson e Nitzan. Eles obtiveram para estes sistemas a dependência quadrática de η_{ph} com u_0 , resultados previsto por diferentes pesquisas prévias. Além disto, eles observaram que a topologia adotada, pelos adsorvatos em relação ao substrato, modifica o valor do coeficiente do atrito medido: para um mesmo conjunto de parâmetros era possível obter dois valores diferentes para o coeficiente de atrito. Contudo eles não foram capazes de reproduzir os resultados experimentais de Krim et al.. Eles argumentaram que a razão disto pode ser o valor utilizado para a corrugação do

substrato. Um fato interessante que surge ao se compararem os resultados obtidos por Persson e Nitzan, com os obtidos por Liebsh et al. é que mesmo utilizando sistemas iguais, os resultados foram muito diferentes. Por exemplo, Persson e Nitzan utilizando $\eta_e = 0.62 \text{ ns}^{-1}$, obtiveram que $\eta_{ph} \approx 0.001 \text{ ns}^{-1}$, enquanto que Liebsh et al. obtiveram que $\eta_{ph} = 0.3 \text{ ns}^{-1}$. A razão de tamanha divergência pode estar na sensibilidade do atrito fonônico com a rotação relativa da camada.

2.3 Comensurabilidade

A relação estrutural entre duas camadas que deslizam uma sobre a outra tem profunda influência na contribuição fonônica do atrito. Os fônons criados durante o deslizamento podem depender de vários fatores, como o tamanho do adsorvato, a forma do adsorvato, o tipo de deslizamento, a velocidade do deslizamento e várias outras configurações. Sistemas podem ser comensurados ou incomensurados. Comensurabilidade é definido quando a razão, entre a distância das posições entre os átomos vizinhos do substrato, e a distância das posições entre átomos vizinhos do adsorvato é um racional. Assim $a/b = 6.5$ é comensurável, mas $a/b = \sqrt{2}$ não é. Existem graus de comensurabilidade, onde comensurabilidade = 1, é um grau de comensurabilidade maior que = 0.1. Estudos indicam que sistemas comensurados podem ter um atrito até 10^{10} vezes superior a sistemas não comensurados. Portanto, em sistemas não comensurados o atrito fonônico pode ter regimes em que o atrito estático vai para zero. Para entender o assunto é necessário acompanhar uma série de pesquisas que se encontram reunidas nos itens a seguir.

2.3.1 Superlubrificação

Em março de 2004, Martin Dienwiebel et al. [35] descobriram evidências da superlubrificação no grafite usando um MFA. Dienwiebel et al. capturaram um “flocó” de grafite e grudaram ele na ponta de prova do MFA, medindo o atrito conforme ela se movia ao longo de

linhas do cristal da superfície do grafite (área de contato entre o “flocó” de grafite e o substrato de grafite foi estimada em 96 átomos). O “flocó” tinha alta comensurabilidade com o substrato e medidas foram feitas girando o “flocó” antes do movimento, obtendo assim curvas do atrito pelo ângulo que o alinhamento dos átomos do “flocó” fazia com os átomos do substrato (Figura 2.4).

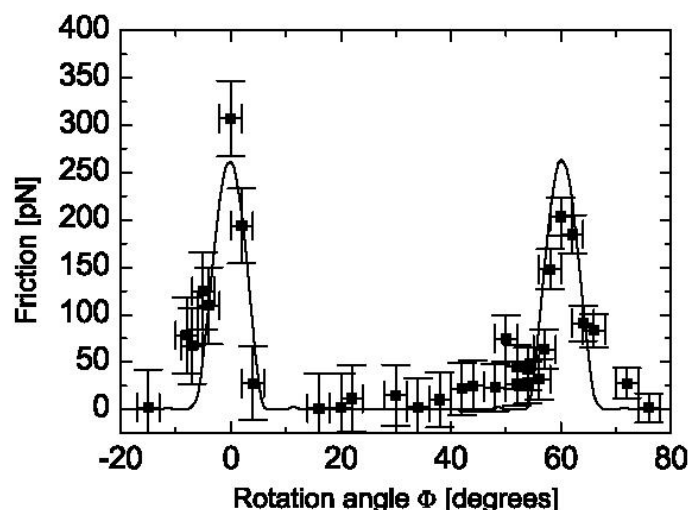


Figura 2.4: Média da força do atrito pelo ângulo feito pelo “flocó” de grafite em relação com o substrato de grafite. Dois picos são observados.

Alto atrito foi observado para comensurabilidade e baixo atrito para não comensurabilidade. Os dois picos observados são quando o “flocó” encontra-se em comensurabilidade perfeita com o substrato. A 0° existe comensurabilidade. O outro pico é consequência direta do diâmetro do “flocó”. Se fosse um átomo deslizando sempre seria atrito máximo, e se fosse uma superfície infinita deslizando sempre teria atrito mínimo. Logo, para o diâmetro usado era de se esperar que o pico ocorresse nos 60° .

Na tese de doutorado de E. A. S. Torres [36], foram obtidos (Figura 2.5) resultados gerais sobre a relação entre comensurabilidade e o atrito, para um modelo unidimensional de uma cadeia de átomos deslizando sobre um substrato periódico com diferentes temperaturas. Pode-se observar como em regiões com comensurabilidade o atrito é maior.

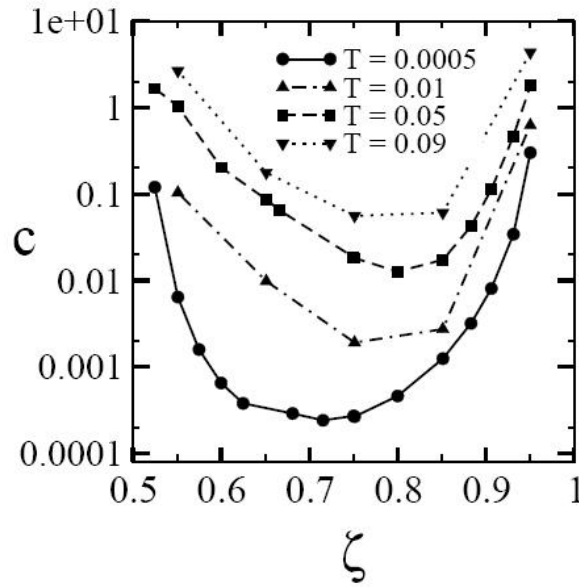


Figura 2.5: Comportamento do coeficiente c , relação quadrática entre o atrito total e a corrugação do substrato, como função da comensurabilidade do sistema e da temperatura.

2.3.2 Atrito de um Dímero Unidimensional

Nesta subseção serão discutidos resultados obtidos por Fusco, Fasolino e Gonçalves et al. [17] que identificaram em simulações de dinâmica molecular um fenômeno ressoante no atrito de um pequeno objeto, um dímero, movimentando-se sobre um substrato periódico. Em 2003 estes autores desenvolveram um trabalho em que estudam a dinâmica de um dímero movendo-se num substrato periódico unidimensional. O objetivo da simulação foi descrever a dinâmica microscópica de moléculas diatômicas em superfícies periódicas. No trabalho, a interação entre partícula e o substrato era

$$U(x_1, x_2) = U_0(2 - (\cos kx_1) - (\cos kx_2)),$$

onde $k = 2\pi/a$, e a representa o comprimento de rede do substrato. A maioria dos resultados foram obtidos usando um potencial harmônico do tipo

$$V(x_1, x_2) = \frac{K}{2}(x_2 - x_1 - l)^2,$$

onde K é a força constante e l é o comprimento de equilíbrio da mola. As equações de movimento resultante são

$$\begin{cases} m\ddot{x}_1 = K(x_2 - x_1 - l) - kU_0 \sin(kx_1) \\ m\ddot{x}_2 = K(x_1 - x_2 - l) - kU_0 \sin(kx_2) \end{cases} \quad (2.17)$$

Um importante resultado obtido é o mostrado na Figura 2.6. Pode-se observar as simulações numéricas para os potenciais harmônico e LJ. As duas simulações representam casos de ressonância. Existe uma transferência de energia relacionada com a velocidade do centro de massa do dímero para um energia relacionada com a velocidade de vibração do dímero.

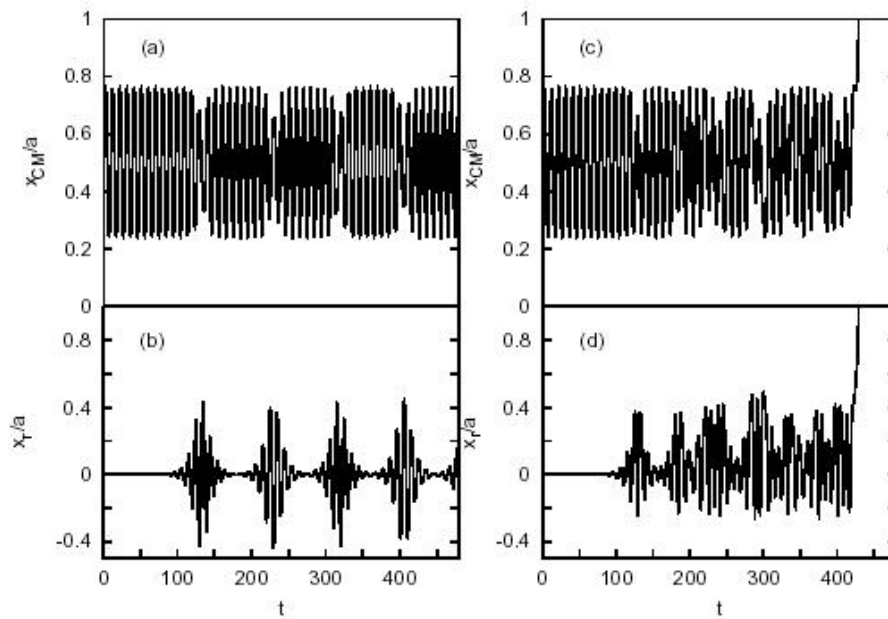


Figura 2.6: Simulações numéricas das equações de movimento do dímero para potencial harmônico (a), (b) e LJ (c), (d). O movimento do centro de massa CM e movimento relativo são mostrados [17].

Em [18], os mesmos autores investigaram a difusão de adátomos e dímeros num substrato unidimensional com e sem influência da temperatura. As equações resolvidas são praticamente iguais às do trabalho anterior (agora são equações de Langevin), porém há 3 termos a mais na equação: uma força externa, um termostato e um termo responsável pelo atrito proporcional à velocidade das partículas ($m\eta\dot{x}$), de forma a amortecer o sistema. O principal resultado aparece na Figura 2.7.

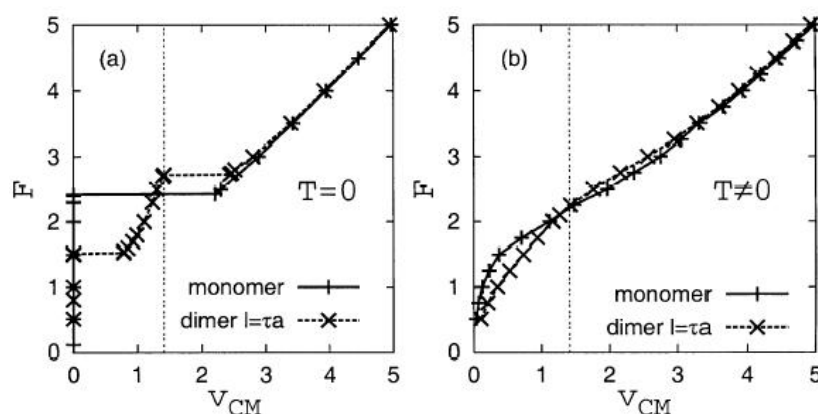


Figura 2.7: Comparação entre as curvas características entre um monômero e um dímero. (a) $T = 0$, (b) $T \neq 0$ [18].

A comparação das curvas características entre o adátomo e o dímero mostram que, com a temperatura nula, existe um segundo platô para o dímero. O primeiro é representado pelo atrito estático, e o segundo foi interpretado como grau ressonante entre a força externa aplicada e a energia de vibração do dímero.

2.3.3 Dinâmica não Linear de um Dímero; Estudo da Comensurabilidade

Nesta subseção será vista a dinâmica de um dímero sujeito a forças externas num potencial unidimensional, analisando o fenômeno ressonante frente à comensurabilidade estudado por Gonçalves et al. [19]. Após resultados obtidos por Fusco, Gonçalves et al. estudaram a

dinâmica de um dímero movendo-se num substrato periódico unidimensional sujeito à força externa. As equações resolvidas pelos cálculos numéricos foram as de Langevin. No trabalho viu-se que com diferentes comensurações as curvas características do dímero são diferentes, mostrando o papel decisivo da comensurabilidade frente às ressonâncias observadas por Fusco et al (Figura 2.8). Pode-se observar que, quando existe comensurabilidade $a/b = 1$, o atrito experimentado pelo dímero é menor do que o regime de $a/b = 0.5$, indo contra resultados que dizem que o atrito é maior em sistemas comensurados.

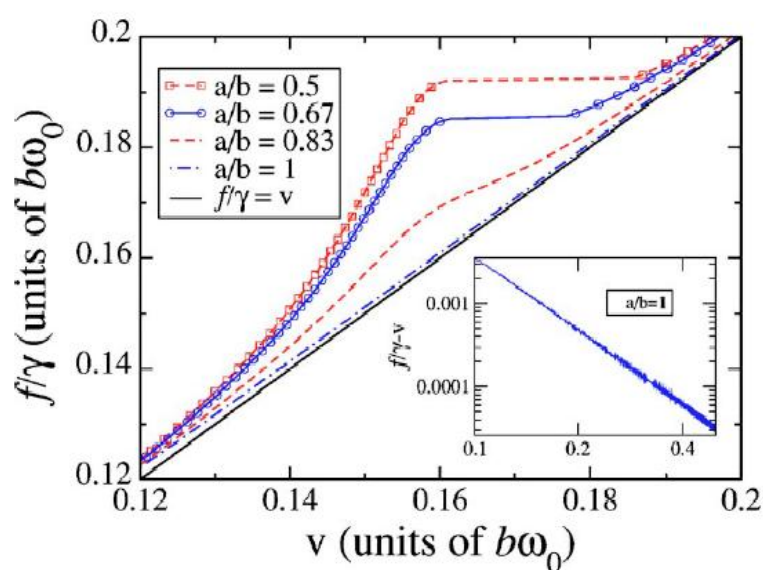


Figura 2.8: Relação de velocidade e força, obtida por simulações numéricas para diferentes valores de a/b (a = comprimento de equilíbrio do dímero, b = parâmetro de rede do substrato) [19].

Outros resultados obtidos foram a histerese (Figura 2.9) que acontece com o sistema quando a força é aplicada começando de zero e logo após voltando para zero. Gonçalves et al. concluíram que o fenômeno de ressonância ocorrido com o dímero é o mesmo mecanismo que ocorre no caso não linear de modelos com FK.

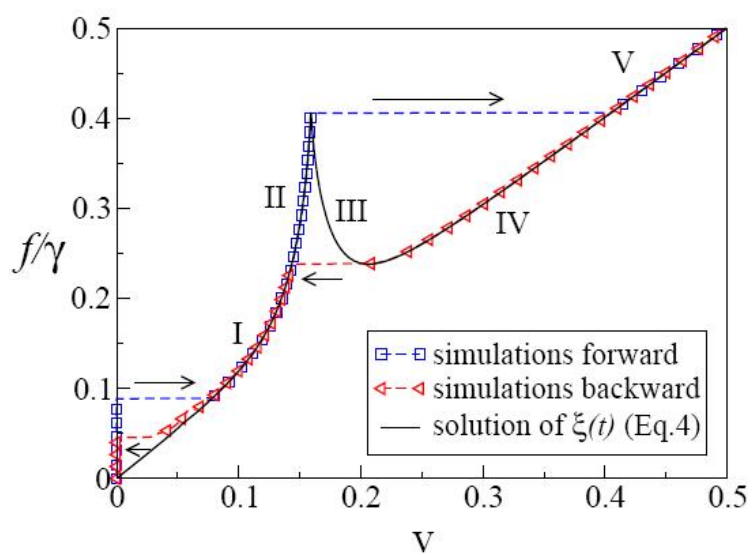


Figura 2.9: Histerese obtida na relação de velocidade e força [19].

3 *Modelo e Metodologia Utilizada*

3.1 Descrição do Modelo

Neste trabalho, o modelo proposto foi o de um dímero, duas partículas com atração harmônica, deslizando por um substrato periódico bidimensional com dissipação e sujeito a uma força externa. A Figura 3.1 apresenta um esquema do modelo.

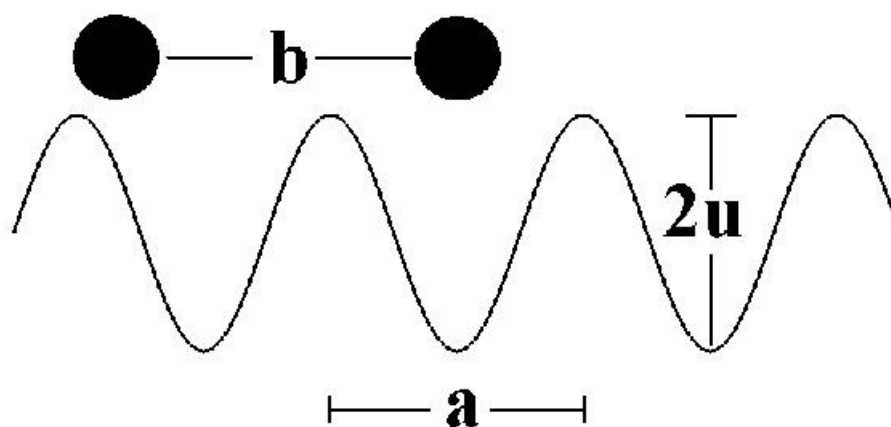


Figura 3.1: Modelo do sistema (vista de corte).

A equação resolvida pelos cálculos numéricos foi a equação de Langevin:

$$\begin{cases} m \frac{d^2 \vec{r}_1}{dt^2} = -\kappa(\sqrt{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} - b) - \nabla \mathbf{V}_1 - m\eta \frac{d\vec{r}_1}{dt} + F_{ext} \\ m \frac{d^2 \vec{r}_2}{dt^2} = +\kappa(\sqrt{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} - b) - \nabla \mathbf{V}_2 - m\eta \frac{d\vec{r}_2}{dt} + F_{ext} \end{cases}, \quad (3.1)$$

em que \mathbf{V}_1 é

$$\mathbf{V}_1 = u \cos\left(\frac{2\pi}{a}x_1\right) + u \cos\left(\frac{2\pi}{a}y_1\right), \quad (3.2)$$

onde m é a massa da partícula, \vec{r}_1 é o vetor composto por coordenadas bidimensionais da partícula 1 do dímero, \vec{r}_2 é o vetor composto por coordenadas bidimensionais da partícula 2 do dímero, κ a constante elástica, b é o comprimento de equilíbrio do dímero, a é o parâmetro de rede do substrato, u é a metade da amplitude do potencial (corrugação), η é a dissipação e F_{ext} é força externa. O primeiro termo da equação é o potencial responsável pela interação das partículas do dímero. Aqui poderia ter sido usado o modelo LJ. Porém, devido a possibilidade de dissociação das partículas, foi escolhido o potencial apresentado acima. O estudo foi proposto inicialmente com a finalidade de investigar o sistema com partículas que não pudessem se dissociar, fica para trabalhos posteriores a possibilidade de dissociação. O segundo termo é o potencial do substrato sentido pelas partículas do dímero. O terceiro termo representa a dissipação e o quarto termo é uma força externa.

3.2 Algoritmo de Integração

A integração das equações diferenciais foi realizada utilizando o algoritmo velocity-verlet:

$$x(t + dt) = x(t) + v(t)dt + \frac{a(t)dt^2}{2}$$

$$v(t + dt) = v(t) + \frac{(a(t) + a(t + dt))dt}{2},$$

onde $x(t)$ é a posição da partícula no instante t , $v(t)$ é a velocidade pela partícula no instante t , $a(t)$ é a aceleração da partícula pela força resultante no instante t e dt é o incremento infinitesimal de tempo. Para o primeiro passo temos que saber $x(0)$, $v(0)$, $a(0)$ e $a(dt)$, de forma a obter $x(t + dt)$ e depois $v(t + dt)$. O tempo característico livre do dímero é $1/w_0 = \sqrt{m/2k}$. O algoritmo foi resolvido usando passos de $\Delta t = 0,0007w_0^{-1}$. Portanto, todos resultados estarão normalizados para valores de $t = idt = w_0^{-1}$, velocidades normalizadas para $v = aw_0^{-1}$ e forças normalizadas para F/m , logo também unidades de aw_0^{-1} .

3.3 Metodologia

O objetivo do trabalho é analisar a inclusão de uma dimensão no estudo já realizado por Gonçalves et al. [19] e analisar como esta inserção afeta o sistema. Em duas dimensões e um dímero não rígido, espera-se conseguir um modelo mais próximo da realidade se comparado a trabalhos anteriores. Nesta situação, o dímero deslizando sobre uma superfície fica livre para mover-se no sentido de translação, de vibração e, mais interessante, de rotação. Os primeiros esforços analisaram se o algoritmo construído estava correto. Para tal foi feita uma bateria de testes simulando condições que coincidiam com os trabalhos unidimensionais anteriores. Logo após foi estudado o novo sistema obtido, pois não existe nenhum trabalho anterior de simulação de dinâmica molecular de um dímero deslizando sobre uma superfície bidimensional. Foram usadas diversas ferramentas computacionais para a certificação da compreensão plena do sistema, desde gráficos tridimensionais até filmes mostrando a dinâmica do dímero. Após este trabalho de reconhecimento do novo sistema, começaram os esforços para o estudo sistemático do problema.

3.3.1 Variáveis Relevantes

No trabalho unidimensional, a energia total do dímero E_{tot} é dada por

$$E_{tot} = E_{tra} + E_{vib},$$

onde E_{tra} e E_{vib} são respectivamente as energias de translação e de vibração do dímero. No caso bidimensional existem 4 graus de liberdade: dois de translação, um de rotação e um de vibração.

Logo tem-se

$$E_{tot} = E_{tra} + E_{vib} + E_{rot},$$

onde surge mais um termo, E_{rot} , devido à energia de rotação do dímero.

Considerando a posição do centro de massa do dímero como:

$$\vec{r}_{cm} = \frac{\vec{r}_1 + \vec{r}_2}{2},$$

podemos escrever

$$E_{tra} = \frac{m\dot{r}_{cm}^2}{2}. \quad (3.3)$$

$$E_{rot} = \frac{I\omega^2}{2}. \quad (3.4)$$

onde $I = m(b/2)^2$ representa o momento de inércia do dímero.

Sabe-se que a frequência de vibração w de um bloco com massa m , preso por uma mola com constante elástica k cuja outra extremidade esteja ligada a um ponto fixo, é dada por:

$$w = \sqrt{\frac{k}{m}}.$$

Para um dímero, a relação pode ser interpretada da seguinte maneira: imagine que no sistema bloco-mola temos a mola presa em outro sistema bloco-mola, e não em um ponto fixo, resul-

tando em um dímero. O bloco analisado agora sente o dobro da força que sentia antes; como a única influência sobre o bloco é a mola, pode-se concluir que k tenha duplicado, resultando em

$$w = \sqrt{\frac{2k}{m}}, \quad (3.5)$$

onde tem-se que w é a frequência de vibração do dímero.

Transformando as velocidades das partículas em coordenadas radiais e tangenciais em relação ao eixo do dímero, é possível ter uma interpretação de todos graus de energias associadas ao dímero (translacional, vibracional e rotacional) (Figura 3.2).

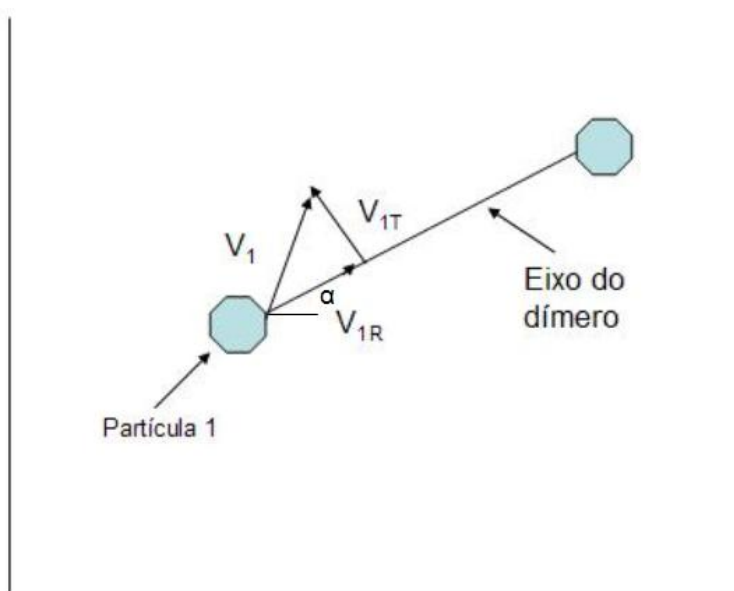


Figura 3.2: Velocidade da partícula 1 do dímero escrita em coordenadas do eixo do dímero, V_{1T} = velocidade tangencial, ou de rotação da partícula 1, V_{1R} = velocidade radial, ou de vibração da partícula 1. α = ângulo que o eixo faz com o sistema de coordenadas, chamado de ângulo de orientação.

A tabela 3.1 traz valores das constantes utilizadas:

Tabela 3.1: Valores das constantes usadas no modelo.

Constantes	Valor
η	0.5
κ	100
u	0.1
m	1

As simulações foram efetuadas no regime sub-amortecido, $\eta = 0.5$. Para os valores usados de u e κ tem-se um dímero fortemente ligado frente à corrugação do substrato. A massa foi normalizada como uma unidade de maneira a simplificar os cálculos e o algoritmo. Valendo-se do fato que $(V_{1T} - V_{2T})/(b/2) = W$ (W velocidade angular) e $(V_{1R} - V_{2R}) = V_R$ (V_R velocidade radial ou interna do dímero) estes são os valores medidos e mais importantes junto com V_{CM} para a compreensão do presente trabalho.

3.3.2 Exposição dos Métodos

Na primeira parte do trabalho estudamos como a inclusão de uma nova dimensão (ocasionando a aparição de dois novos graus de liberdade em relação ao modelo unidimensional) faria a sua dinâmica mudar. Para tanto, foram obtidas curvas características do dímero em relação a uma velocidade inicial de translação e o seu tempo de parada (regime transiente). Cada curva era representada pela aplicação de outra velocidade, uma velocidade de rotação ou tangencial. Na primeira curva a velocidade de rotação do dímero era zero, simulando portanto o caso unidimensional. Depois variou-se o ângulo de orientação do dímero (regime no limiar de deslizamento), modificando assim a comensurabilidade. Finalmente estudou-se curvas características do dímero frente a diferentes forças (regime estacionário), giros iniciais e comensurações de maneira a obter o máximo de informação relevante a este sistema.

4 *Resultados e Discussão*

Neste capítulo discute-se os resultados obtidos e sua análise. O objetivo deste trabalho é o estudo do sistema composto por um dímero não rígido deslizando num potencial periódico bidimensional. A parte inicial contextualiza o presente trabalho com a literatura corrente, sendo que os resultados serão discutidos na parte final do mesmo.

4.1 Verificação do Modelo

Nesta seção será discutido a validade do modelo. No trabalho desenvolvido por Gonçalves et al. [19] temos como principal ferramenta para comparação a curva característica representada na Figura 2.9. Simulando as mesmas características para uma curva qualquer da Figura 2.9 no modelo bidimensional e sobrepondo estas duas curvas, chega-se a Figura 4.1. Pode-se observar que as curvas são muito parecidas, sendo que o modelo bidimensional reproduziu satisfatoriamente a característica linear e o fenômeno ressonante na mesma região. Pode-se concluir que o modelo bidimensional proposto neste trabalho reproduz perfeitamente os resultados do modelo unidimensional, de maneira a que os passos seguintes foram feitos sobre um modelo com base confiável e segura.

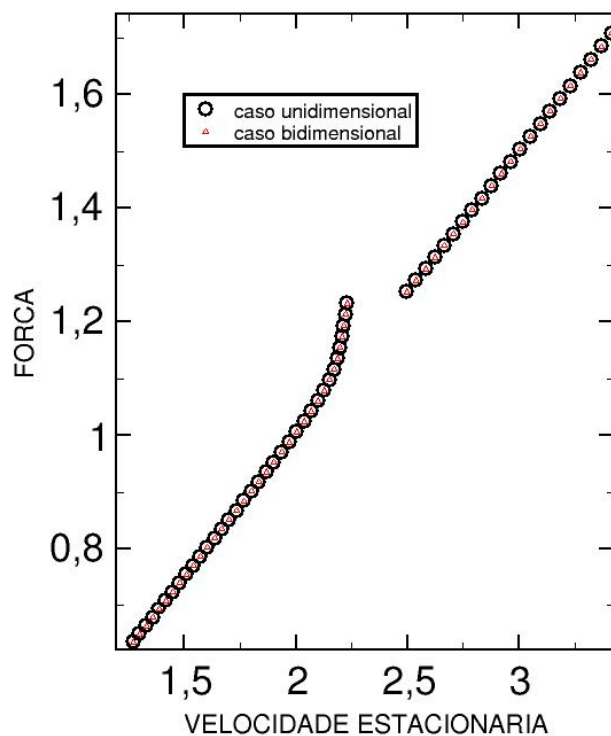


Figura 4.1: Gráfico das curvas características do dímero. A ressonância ocorre para os mesmos valores de forças e a característica linear da dependência do atrito para forças no regime alto também é obtida.

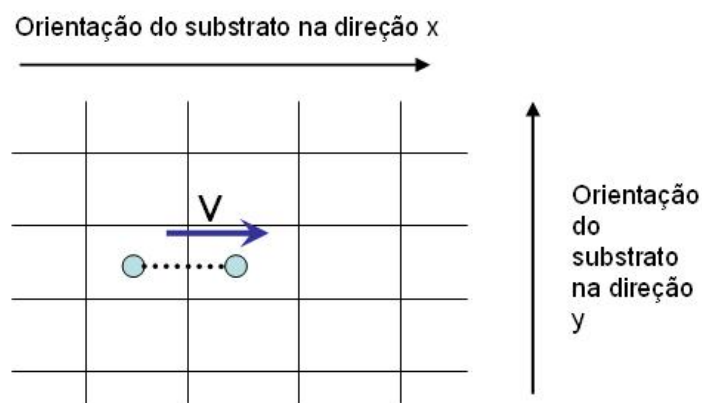
4.2 Regime Transiente

4.2.1 Estudo de Casos

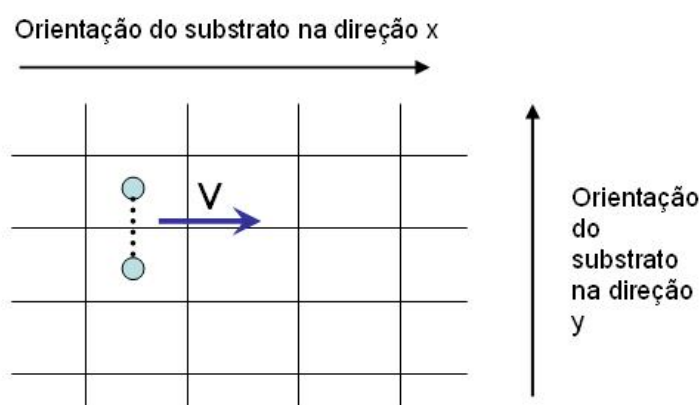
Aqui serão expostas 3 configurações diferentes para uma familiarização com o modelo.

Na primeira dinâmica estudada tem-se inicialmente as partículas do dímero posicionadas

sobre mínimos do potencial da rede (ver Figura 4.2. Todos esquemas são para $b/a = 1$, os casos simulados para $b/a = 0.5$, apenas uma das partículas fica posicionada sobre um mínimo):



(a) Posição inicial do dímero para o primeiro ponto da simulação.



(b) Posição inicial do dímero para o último ponto da simulação.

Figura 4.2: Esquemas representando as posições iniciais do dímero. O ângulo de orientação do dímero é o ângulo que o eixo do dímero faz com a orientação do substrato na direção x . Os nós da matriz representam os máximos do potencial do substrato.

Algumas informações a respeito do movimento são necessárias. O dímero começa com uma velocidade inicial e obtém-se o tempo de parada para cada uma de suas componentes da velocidade: velocidade translacional (VCM), velocidade vibracional (VR) e velocidade rotacional (VT). Nos dois primeiros casos VT foi sempre zero e portanto não está representada nos gráficos. Foi definido que quando o dímero adquire uma velocidade contrária à que tinha inicialmente, paramos a contagem do tempo de translação. O mesmo vale para a rotacional (quando ele começa a girar no sentido inverso ao que girava inicialmente paramos a contagem do tempo

de giro). Está definido que a velocidade vibracional cessa quando alguns valores muito baixos de oscilação são alcançados pelos átomos do dímero. Na Figura 4.3 tem-se o tempo de parada das velocidades no eixo y, e o ângulo de orientação inicial do dímero no eixo x.

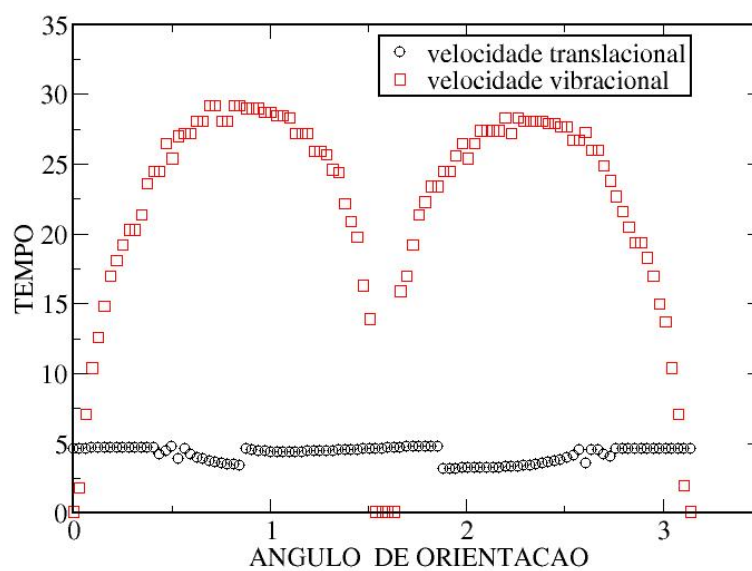


Figura 4.3: Velocidade inicial das partículas = 3; $b/a = 1$.

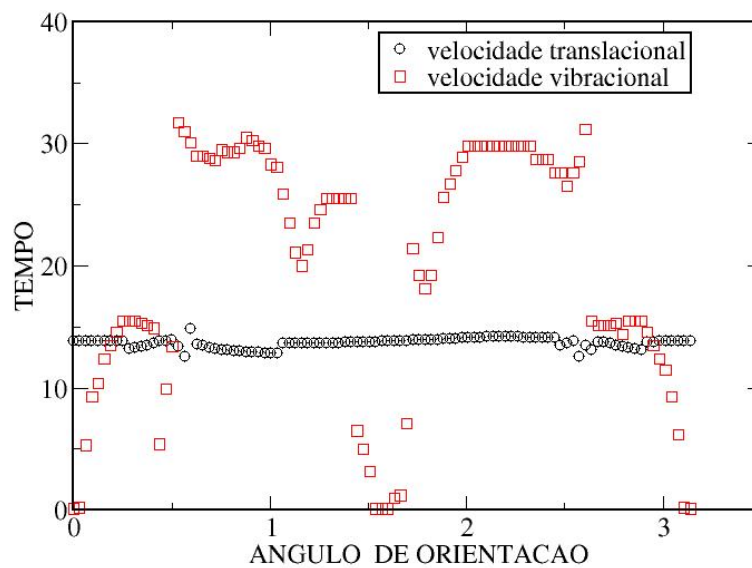


Figura 4.4: Velocidade inicial das partículas = 300; $b/a = 1$.

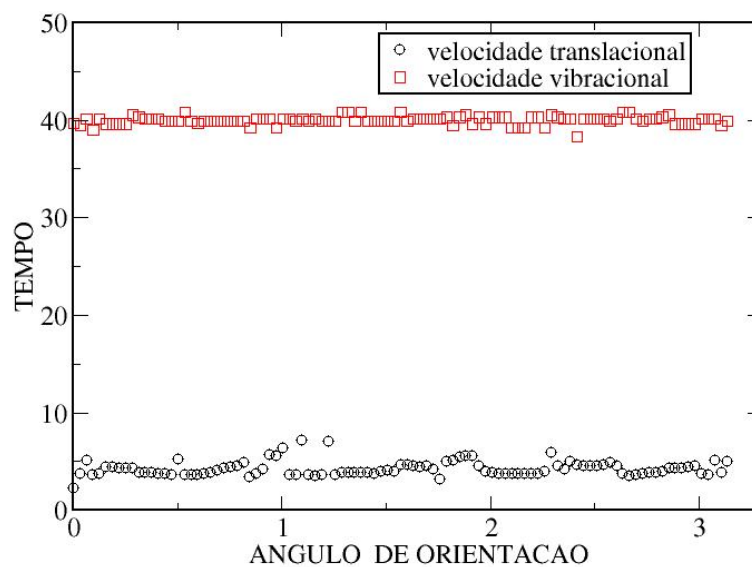


Figura 4.5: Velocidade inicial das partículas = 3; $b/a = 0.5$.

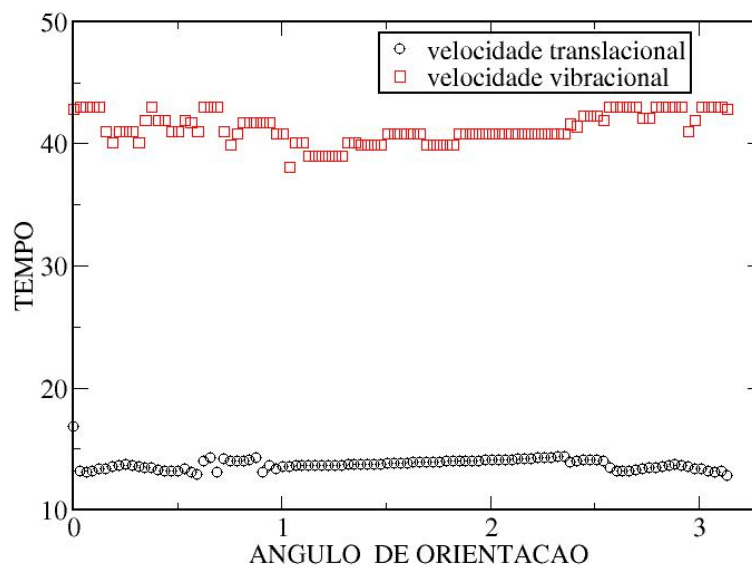


Figura 4.6: Velocidade inicial das partículas = 300; $b/a = 0.5$.

Comparando as figuras em que $b/a = 1$ tem-se que VR assume valores de tempo de parada menores que os comparados com os sistemas com $b/a = 0.5$.

Na próxima dinâmica a ser analisada, o dímero é lançado com o sentido da velocidade igual ao da sua orientação inicial(Figura 4.7).

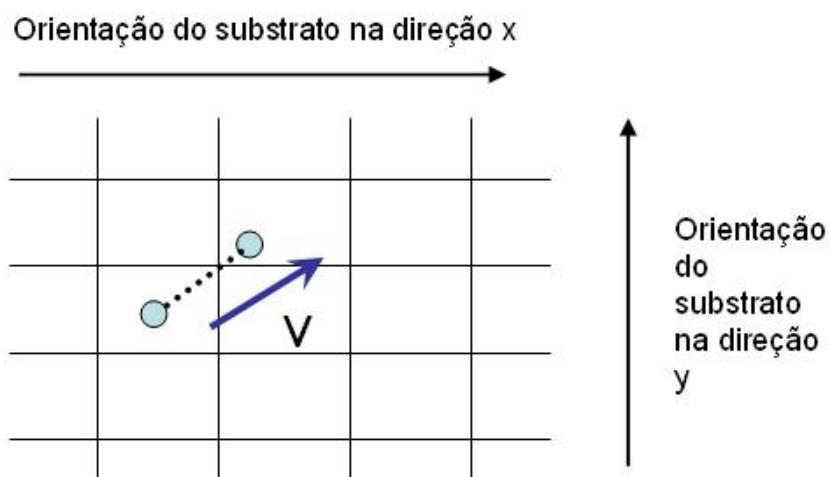


Figura 4.7: Esquema do dímero lançado com a direção da velocidade igual à orientação inicial.

Os resultados obtidos são mostrados na Figura 4.8 e são iguais para $b/a = 0.5$.

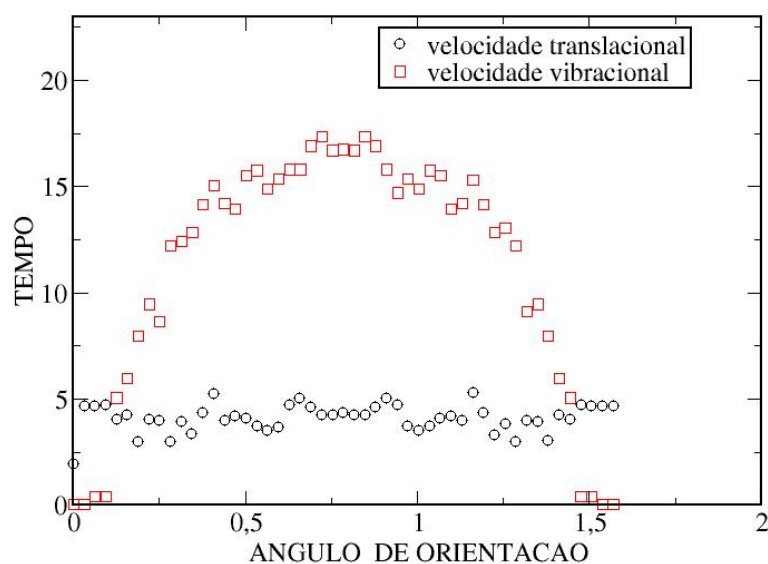


Figura 4.8: Velocidade inicial das partículas = 3; $b/a = 1$. Neste gráfico, o ângulo de orientação do dímero foi variado até $\pi/4$ pelo fato da dinâmica assumir simetria perfeita no intervalo de $\pi/4$ até $\pi/2$.

Logo temos que, neste caso, a comensurabilidade não exerce papel importante. É possível observar que em relação à dinâmica anterior existe uma dispersão maior do tempo de parada da VCM (levando em conta a comparação com os casos análogos, ou seja, a Figura 4.3) e a VR tem um tempo de parada menor.

Na última dinâmica analisada o dímero é lançado com uma velocidade translacional na direção de uma cadeia de átomos e uma velocidade de giro. Agora, o valor que varia é a velocidade de giro (Figura 4.9). Esta velocidade é de 2 para cada partícula, ou seja, elas começam com uma velocidade tangencial igual a 2 (mais a velocidade translacional, que no caso foi utilizada de valor de 3). Nas Figuras 4.10 e 4.11 é possível analisar os resultados. Neste ponto ainda não se pode observar se a adição de um giro no movimento do dímero causa uma diferença em sua dinâmica. O ponto importante é saber se agora, em duas dimensões, a possibilidade do dímero girar tem alguma influência decisiva na sua dinâmica, diferentemente do que acontecia em uma dimensão. O primeiro ponto lógico a ser analisado é o caso acima para velocidades de giro variando, com velocidade de centro de massa fixas.

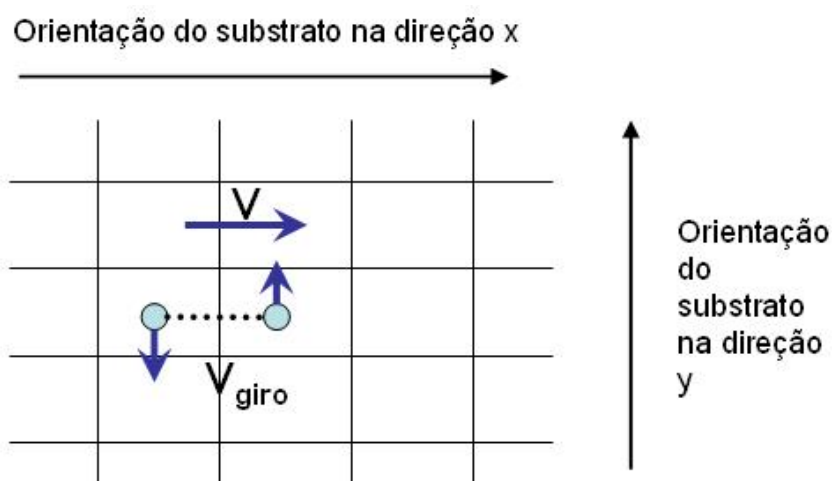


Figura 4.9: Esquema utilizado para conhecimento do sistema com uma velocidade de giro.

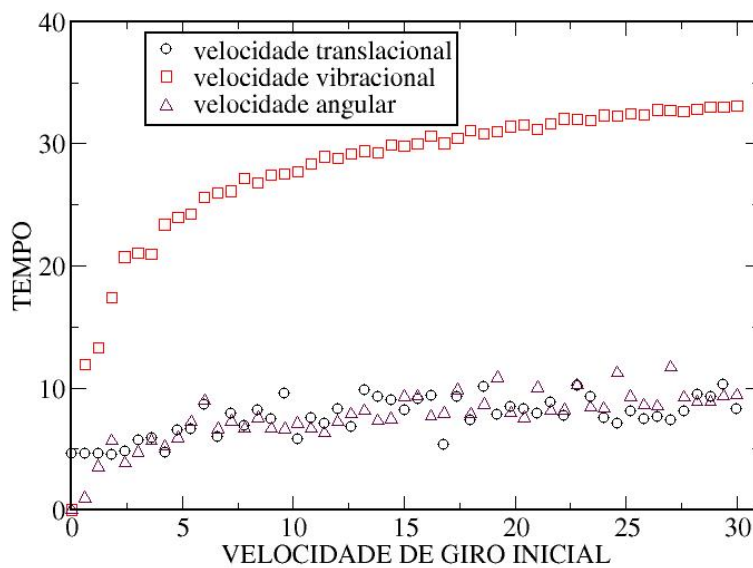


Figura 4.10: Velocidade tangencial variando de 0 a 30; $b/a = 1$.

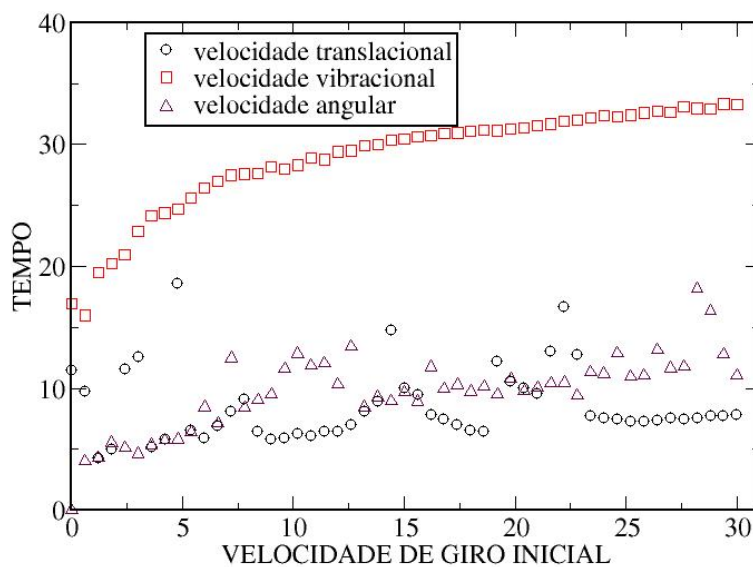


Figura 4.11: Velocidade tangencial variando de 0 a 30; $b/a = 0.5$.

4.2.2 Verificação da Influência do Giro

O passo decisivo consiste em analisar um gráfico em que se toma os tempos de parada para o dímero unidimensional com velocidades iniciais de translação variando e comparar com o modelo bidimensional adicionado de velocidades de rotação com os mesmos valores de velocidades translacionais iniciais do modelo unidimensional. Dahmen et. al. [37] estudaram um problema similar, porém para atrito em escala macroscópica. Comparando tempos de parada para a velocidade translacional, de um disco (em que é aplicada uma VCM inicial) deslizando sobre uma superfície, com velocidades de giro iniciais diferentes, obtiveram que para VT maiores o tempo de parada para VCM era maior.

Os resultados obtidos na Figura 4.12 foram fitados por uma curva descrita por potências de ordem 10. No eixo x tem-se VCM inicial e no eixo y tem-se tempo de parada para VCM. Estão representadas 4 curvas com VT inicial respectivos aos da legenda.

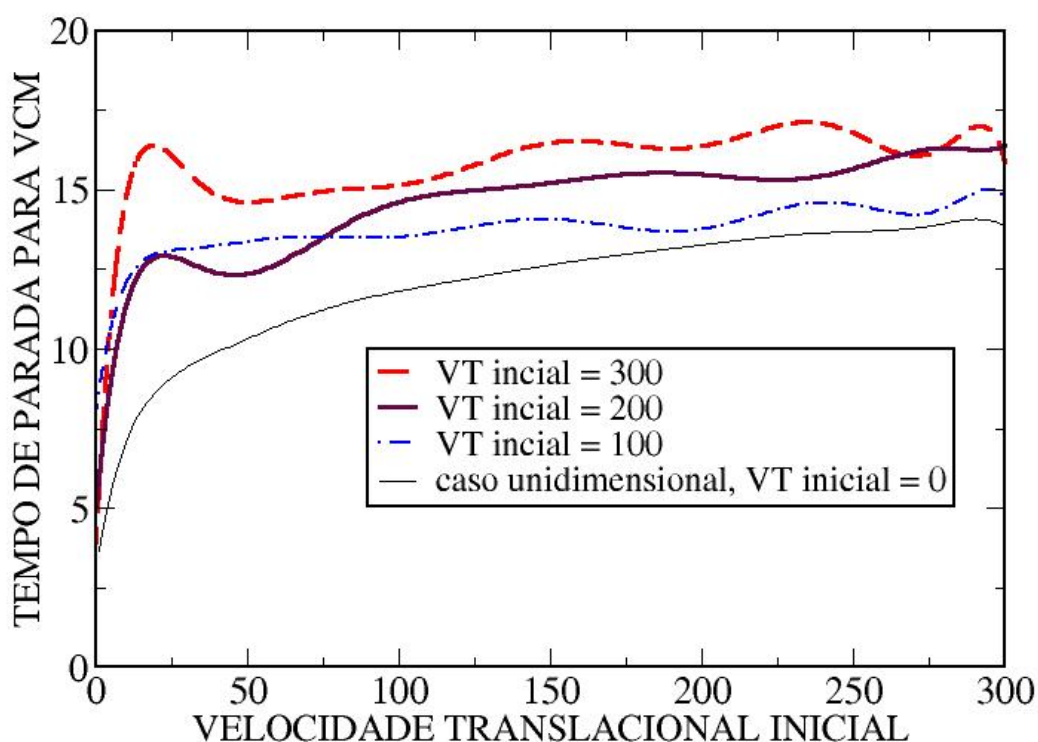


Figura 4.12: Velocidade tangencial inicial com valores = 0, 100, 200 e 300; $b/a = 1$.

Na Figura 4.12 pode-se notar que de fato existe mudança na dinâmica, e que quanto maior for o giro inicial, maior será esta mudança na dinâmica. Portanto este resultado está de acordo com o trabalho de Dahmen et. al. [37], fazendo uma relação direta com o atrito macroscópico. Existe uma transferência de energia pelos graus de liberdade relacionados com VT e VCM, de forma que o atrito efetivo diminuía quando o dímero estava dotado de VT inicial, aumentando o tempo de parada e percorrendo uma distância maior. Convém notar que existem na Figura 4.12 certos valores do tempo de parada para VCM que diminuem a medida que VT inicial aumenta. Isso acontece porque existem alguns casos em que a posição inicial do dímero na iminência do movimento contribui para um atrito efetivo menor. Estes casos de configuração inicial serão discutidos detalhadamente na próxima seção. Em suma, a inclusão de uma dimensão a mais no sistema leva a uma dinâmica diferente comparada com a unidimensional. Surge então a idéia

do estudo com aplicação de forças.

4.3 Regime no Limiar de Deslizamento

De acordo com os dados apresentados na seção superlubrificação, os sistemas com graus de comensurabilidade mais altos sentem mais atrito, ao passo que com certos graus de comensurabilidade mais baixos ou incomensurados existe a possibilidade de um super-deslizamento. Aquele experimento foi feito com uma superfície pequena deslizando sobre uma outra muito maior.

Esta dissertação se ocupa de um dímero, o objeto mais simples com graus de liberdades internos embutidos num espaço bidimensional. A metodologia utilizada nesta parte é simples: varia-se o ângulo de orientação do dímero de 0 a $\pi/4$ com uma força constante aplicada no dímero e estudam-se suas curvas características frente a 2 valores diferentes para a comensurabilidade.

4.3.1 Condições Iniciais

Fazendo uma análise detalhada da dinâmica frente a variação de parâmetros iniciais foi possível observar que existem 2 condições iniciais fundamentais. A primeira é referente a posição inicial ocupada pelas partículas do dímero. Existem dois casos distintos, ambos representados na Figura 4.13.

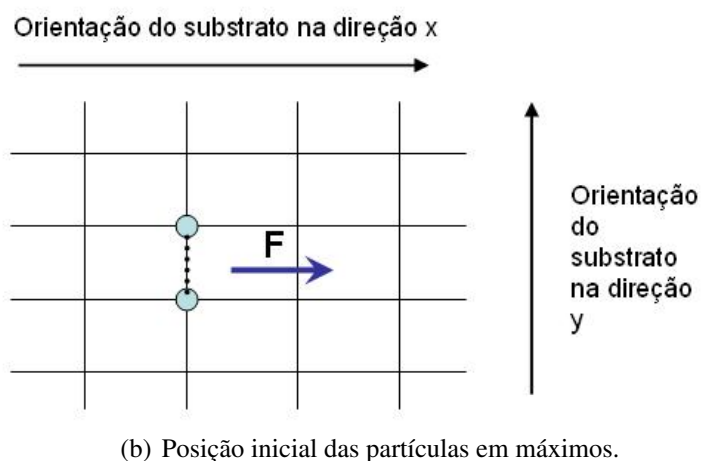
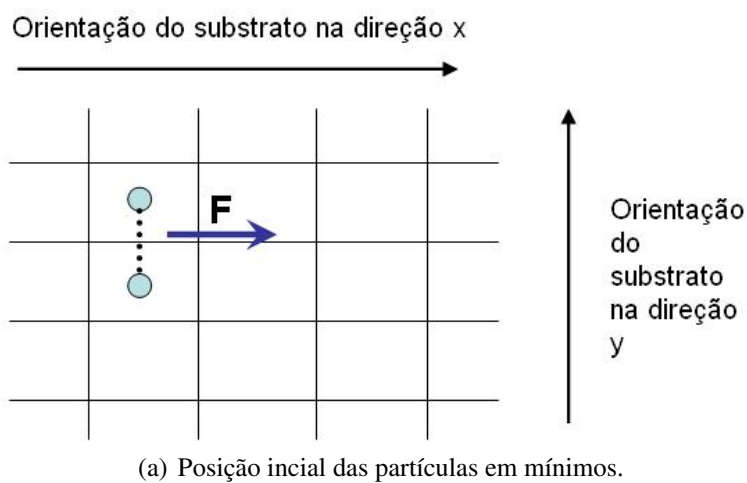


Figura 4.13: Esquemas representando as posições iniciais do dímero em mínimos e máximos.

No esquema (a) as partículas encontram-se em 2 mínimos do potencial do substrato. Encontram-se em posição de equilíbrio e portanto espera-se que colocá-las em movimento seja mais difícil que a configuração mostrada no esquema (b), onde as partículas encontram-se em máximos. Na Figura 4.14 tem-se VCM contra tempo para as duas configurações de força aplicada.

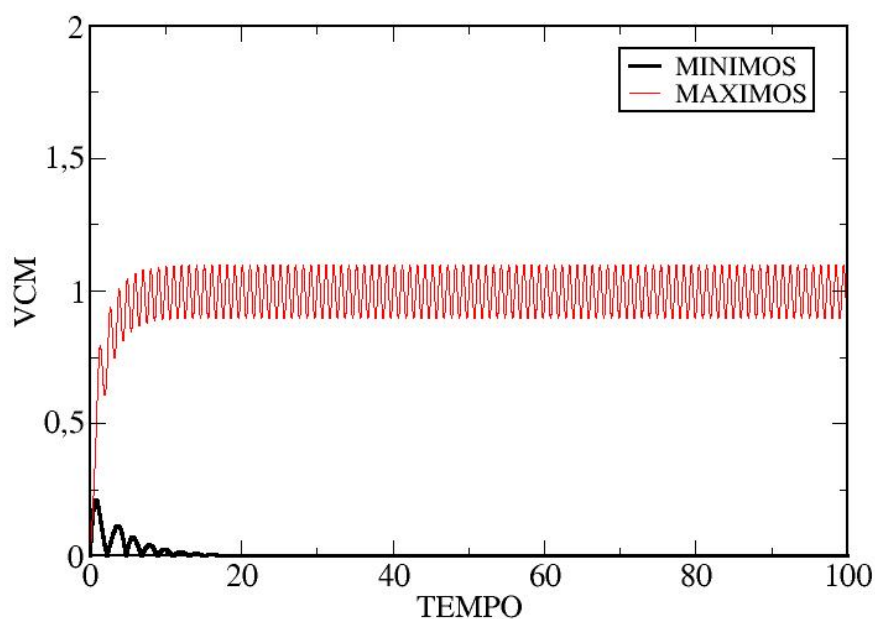


Figura 4.14: Dinâmica das duas condições iniciais diferentes. Mesma força aplicada para as duas configurações, enquanto que para máximos o dímero inicia um movimento de translação, para os mínimos ele não consegue sair da posição inicial.

Na Figura 4.14 fica evidente que na configuração (b) da Figura 4.13 o dímero entra em movimento mais facilmente, resultando num atrito estático menor.

A segunda condição inicial é a velocidade de giro inicial do dímero. Considerando uma configuração inicial do centro de massa das partículas do dímero existem infinitas posições iniciais para as partículas. Neste conjunto de posições iniciais existem certas configurações em que colocar o dímero em movimento de translação é mais fácil. Na Figura 4.15 com o dímero configurado como no esquema (a) da Figura 4.13 é possível observar que ele entra em movimento com a mesma força aplicada anteriormente, porém agora com $VT = 1$.

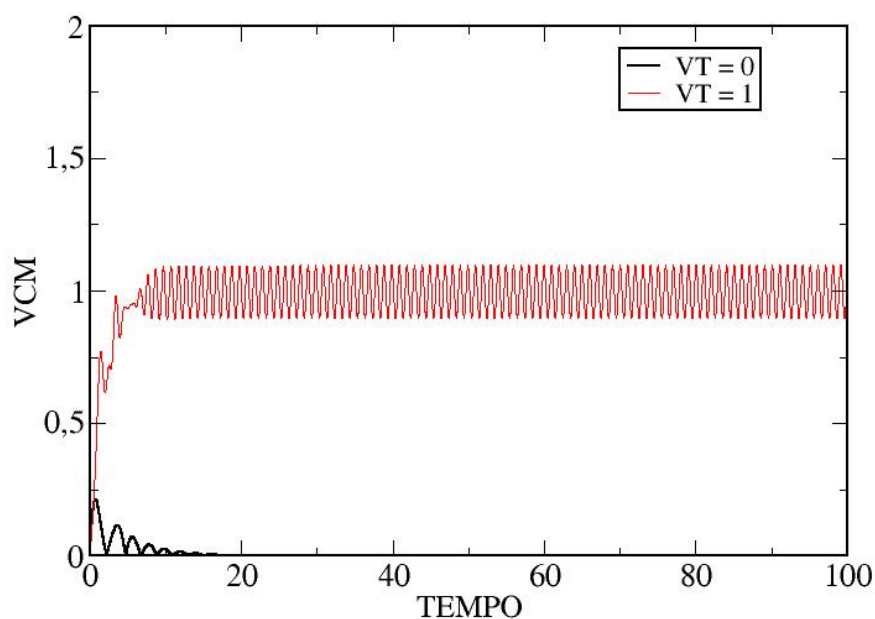


Figura 4.15: Dinâmica das duas posições iniciais iguais. Mesma força aplicada, porém diferentes VT.

Quando o dímero recebe uma velocidade de giro inicial grande o suficiente, essa VGI faz o dímero assumir todas configurações possíveis de orientação inicial. Se existir uma força impulsionando o dímero para alguma direção, o dímero entrará em movimento de translação mais facilmente do que sem essa VGI. Isso acontece pelo fato de que em algum momento o dímero irá assumir a configuração inicial em que tem mais facilidade de entrar em movimento translacional (suas partículas posicionados sobre dois máximos por exemplo), logo, a VGI serve como um facilitador de movimento. Outra interpretação possível é que conforme VGI aumenta, o dímero aumenta sua energia, sendo que com uma VGI muito alto é suficiente apenas uma pequena força para colocar o dímero em movimento translacional.

4.3.2 $b/a = 1$

O primeiro caso a ser analisado é o com grau de comensurabilidade mais alto. Note porém, que conforme o ângulo de orientação (α) assume valores diferentes, a comensurabilidade vai variando, de maneira que a projeção do eixo do dímero (em alguma direção x ou y da orientação do substrato) se torna a comensurabilidade efetiva. Será mostrado a influência da mudança no sentido da força e a influência da mudança da amplitude da força. O primeiro caso é analisado com a força em quatro sentidos diferentes, de forma a um entendimento maior, e depois será analisado para apenas dois sentidos diferentes ($b/a = 0.5$). Cada comensurabilidade será analisada em duas posições iniciais distintas. Para $b/a = 1$ com as partículas posicionadas inicialmente sobre dois mínimos e depois sobre dois máximos e para $b/a = 0.5$ com a posição inicial de uma partícula sobre um mínimo e depois sobre um máximo, conforme a Figura 4.16.

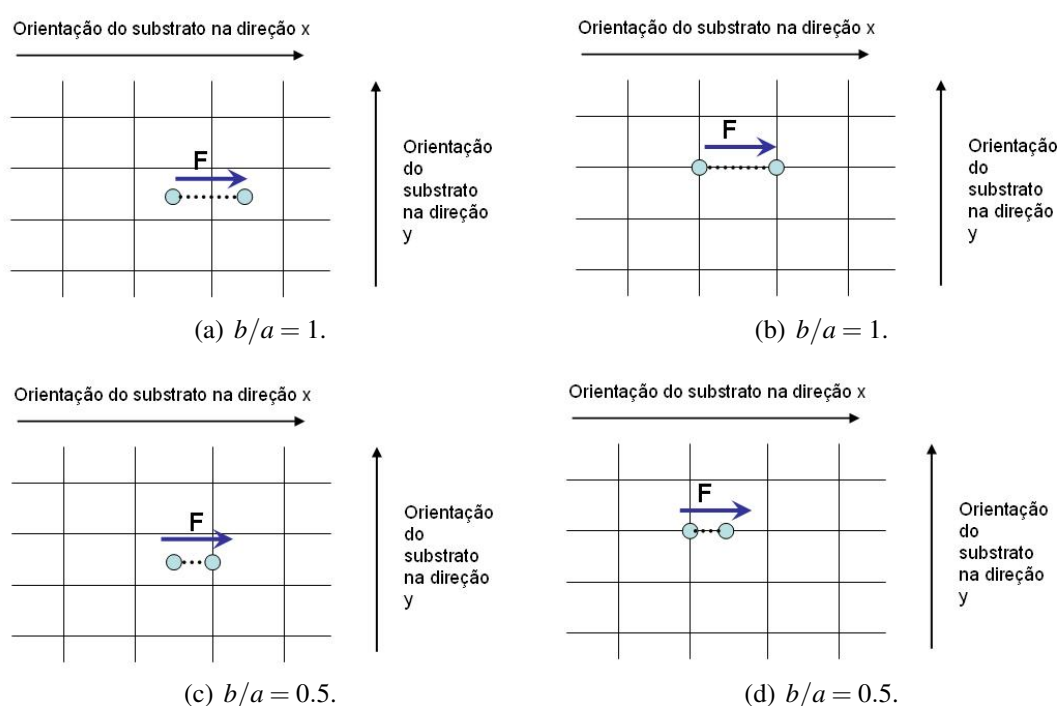
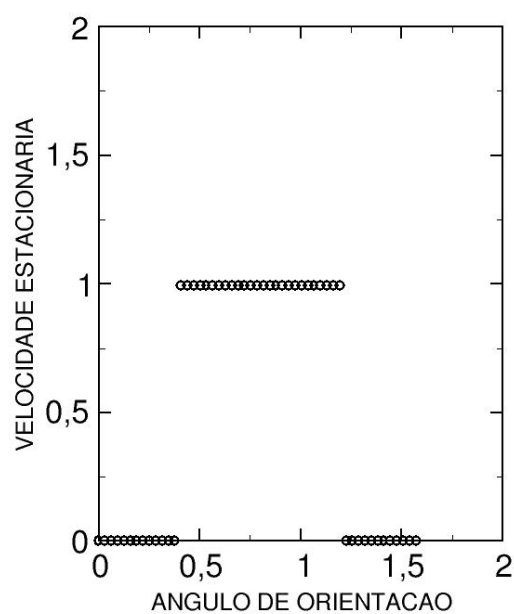


Figura 4.16: Esquemas representando as posições iniciais do dímero para cada dinâmica analisada.

Na Figura 4.17 pode-se analisar, respectivamente, as forças aplicadas no sentido de 0 , $\pi/8$, $\pi/4$ e $3\pi/8$ em relação a direção x de orientação do substrato. O dímero é arremessado de diferentes posições angulares iniciais, de 0 a $\pi/2$. Os gráficos são representados no eixo x pelo ângulo de orientação inicial e no eixo y pela VCM estacionária, obtida pela média da mesma

após um tempo de relaxamento ($\tau_r = 5000$). Pode-se observar um ângulo limite para o dímero. Outra observação é que o sentido da força faz variar apenas a intensidade da VCM estacionária.



(a) Sentido da força = 0.

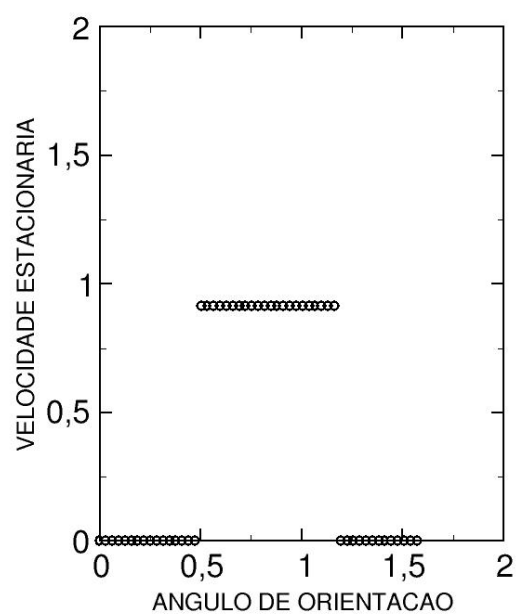
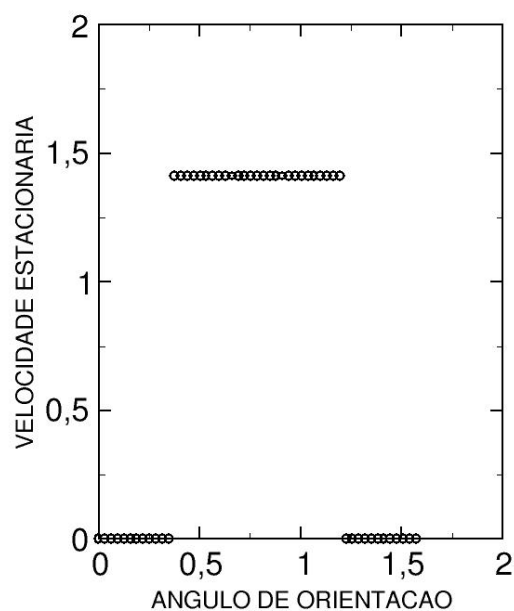
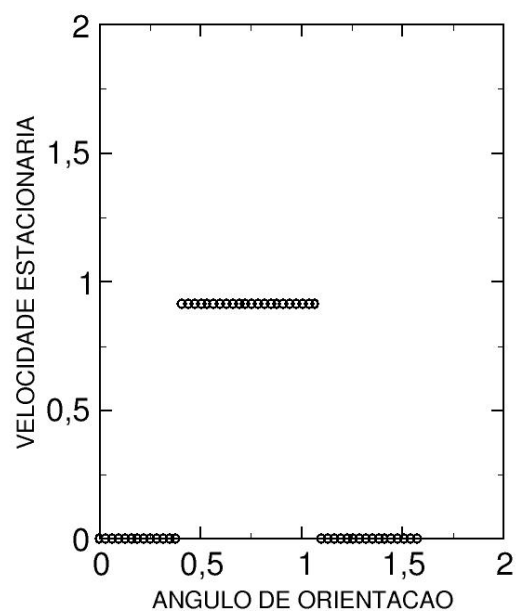
(b) Sentido da força = $\pi/8$.(c) Sentido da força = $\pi/4$.(d) Sentido da força = $3\pi/8$.

Figura 4.17: Dinâmica frente à comensurabilidade com sentido da força variando. $F_{ext} = 0.5$, $b/a = 1$

Na Figura 4.18 estão expostas as curvas características para diferentes amplitudes de forças

aplicadas. Nesta figura fica evidente que existe uma força limite para cessar a efeito da comensurabilidade, de maneira que o dímero sempre vence o potencial do substrato e sempre entra em movimento não importando sua orientação. Vale notar também que com diferentes amplitudes da força aplicada obtêm-se diferentes amplitudes de velocidades estacionárias.

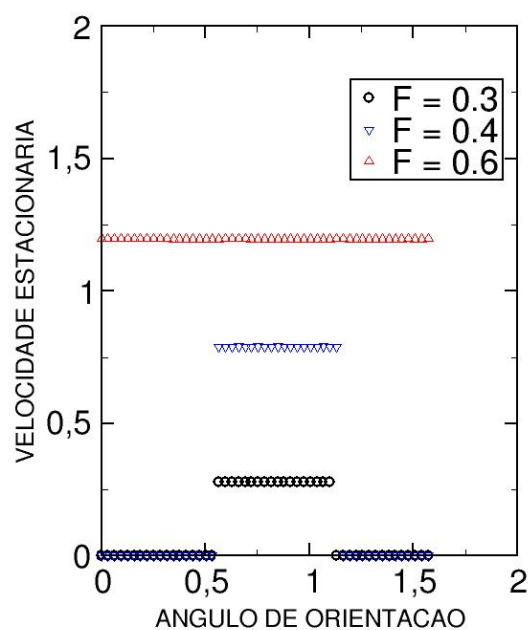
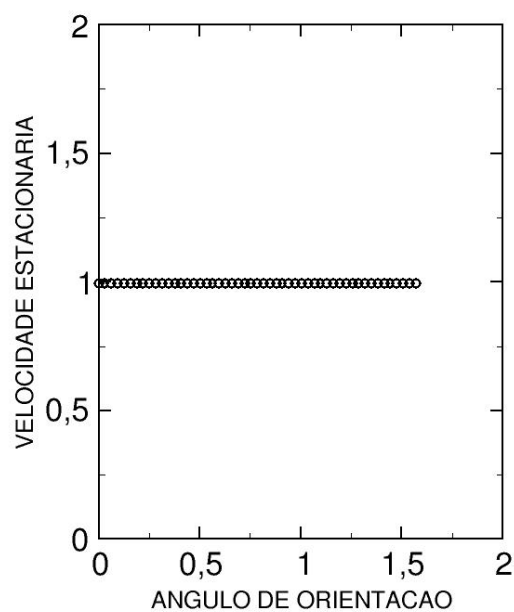


Figura 4.18: Dinâmica frente à comensurabilidade com amplitude da força variando, sentido da força = 0, $b/a = 1$.

Com as partículas do dímero no esquema inicial (b) tem-se a Figura 4.19.



(a) Sentido da força = 0.

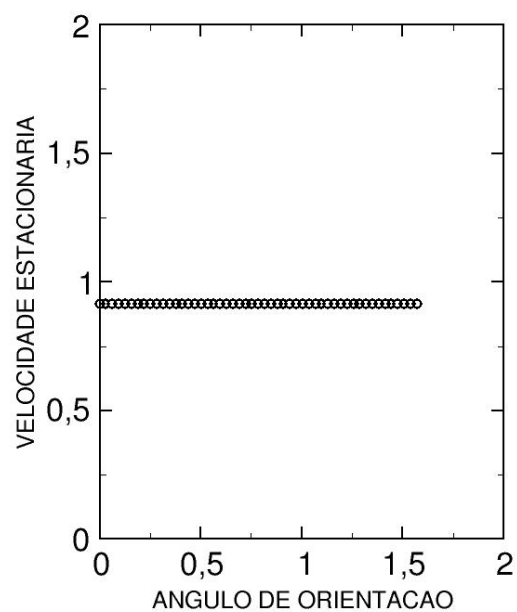
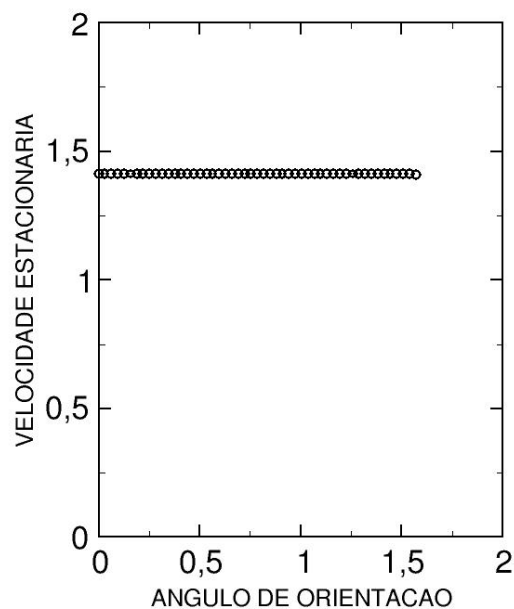
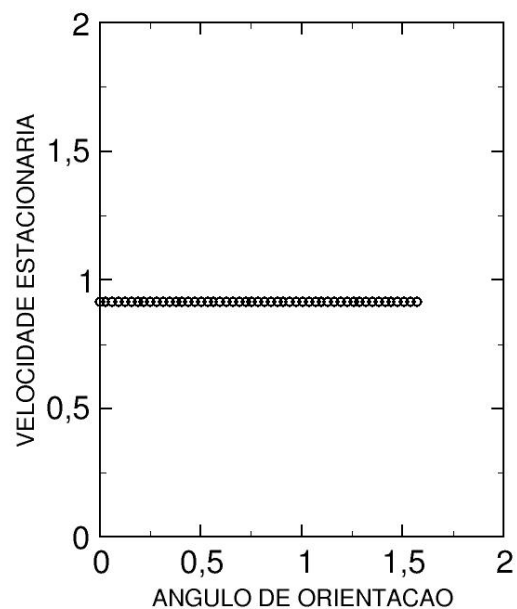
(b) Sentido da força = $\pi/8$.(c) Sentido da força = $\pi/4$.(d) Sentido da força = $3\pi/8$.

Figura 4.19: Dinâmica frente à comensurabilidade com sentido da força variando. $F_{ext} = 0.5$, $b/a = 1$

Portanto, como as partículas do dímero estavam posicionadas sobre máximos elas sempre en-

tram em movimento com a mesma força aplicada referente ao caso em que as partículas estavam inicialmente posicionadas sobre mínimos.

4.3.3 $b/a = 0.5$

Na Figura 4.20 tem-se como configuração inicial o esquema (c) da Figura 4.16 e na Figura 4.21 como configuração inicial o esquema (d).

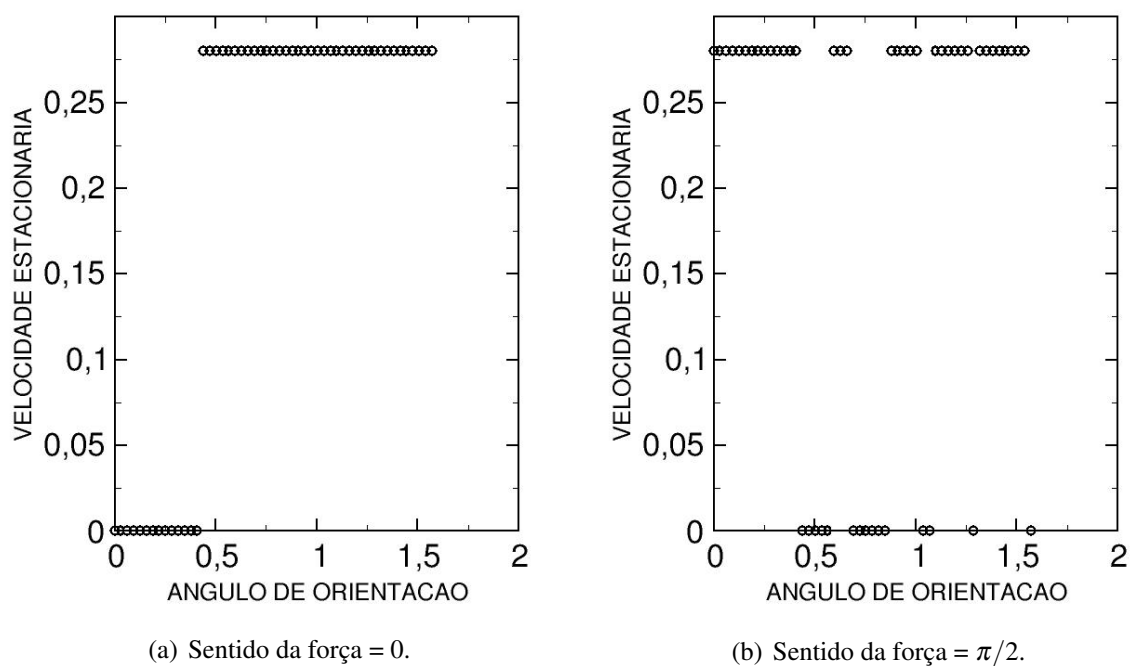


Figura 4.20: Dinâmica frente à comensurabilidade com sentido da força variando. $F_{ext} = 0.5$, $b/a = 0.5$

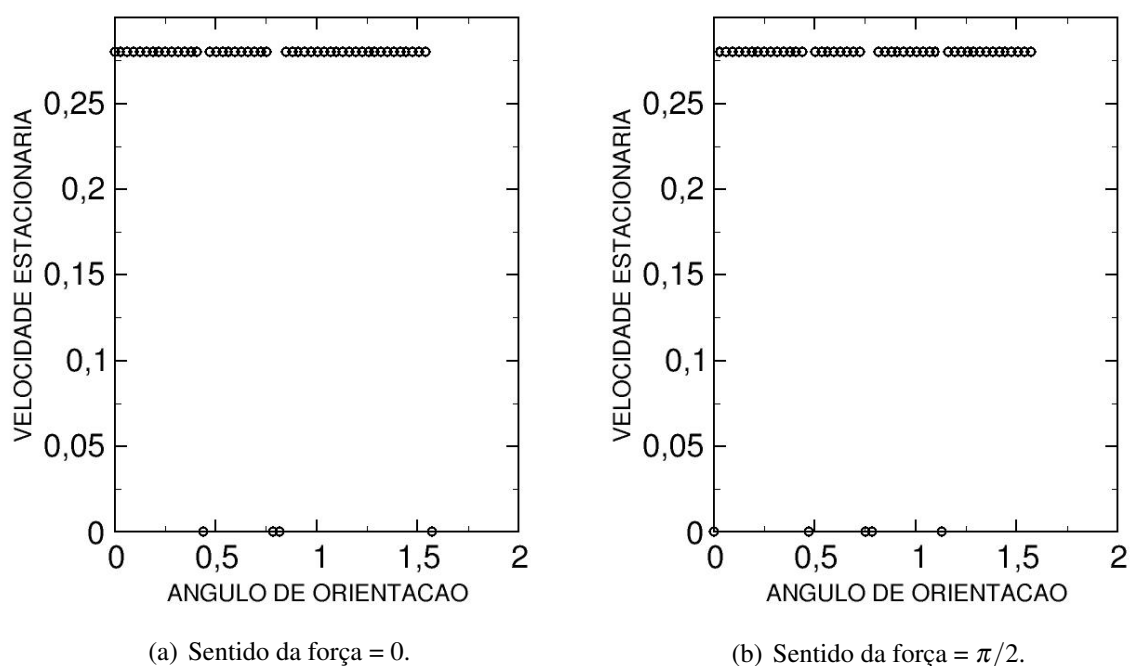


Figura 4.21: Dinâmica frente à comensurabilidade com sentido da força variando. $F_{ext} = 0.5$, $b/a = 0.5$

Com a mesma força aplicada neste caso também fica evidente que com a configuração inicial do esquema (d) existe uma maior facilidade do dímero entrar em movimento que em relação ao esquema (c). Tem-se que para $b/a = 1$, o maior grau de comensurabilidade, existe uma uniformidade na distribuição dos pontos nas curvas de VCM estacionária contra ângulo de orientação e existe um ângulo limite. Já para $b/a = 0.5$ não nota-se uma semelhança no limiar de deslizamento.

4.4 Regime Estacionário

Nesta seção foi estudado como a velocidade translacional estacionária do dímero se comporta frente a diferentes forças aplicadas. Inicialmente é dada uma velocidade de giro inicial ao dímero para ativar a configuração inicial em que ele tem mais facilidade de entrar em

movimento translacional. O estudo foi feito para 4 valores de comensurabilidades diferentes ($b/a = 0.5, 1, 1.25, 1.5$) e para três direções de forças (os valores são medidos com o ângulo que ela faz com a orientação na direção x do substrato, $0, \pi/4$ e $\pi/2$). Foi analisado se a região linear referente ao modelo unidimensional continuava a existir, se a descontinuidade referente ao fenômeno ressonante se mantém frente a outras comensurabilidades bem como o surgimento de outros fenômenos. Existem três tipos de figuras nesta seção. As primeiras foram obtidas a partir da média de várias sementes. O conjunto de valores para as sementes escolhidas foram vários valores de velocidades angulares iniciais, ou de giro iniciais (W , 20 valores diferentes). O segundo é a sobreposição das curvas de três sementes diferentes, necessário para estudar casos em que a média não traz a máxima informação possível. O último tipo de figura trata-se das dinâmicas em particular dos casos mais interessantes.

4.4.1 Força na Direção 0

4.4.1.1 $b/a = 0.5$

Na Figura 4.22 pode-se observar três regiões distintas: uma região linear e duas descontínuas. A parte linear e a parte descontínua para regime de forças altas está em completo acordo com o modelo unidimensional. Esta parte não apresenta uma descontinuidade muito visível pelo fato que para diferentes VGI obtem-se curvas diferentes (Figura 4.23). A média destes valores gera o aspecto desta descontinuidade na Figura 4.22.

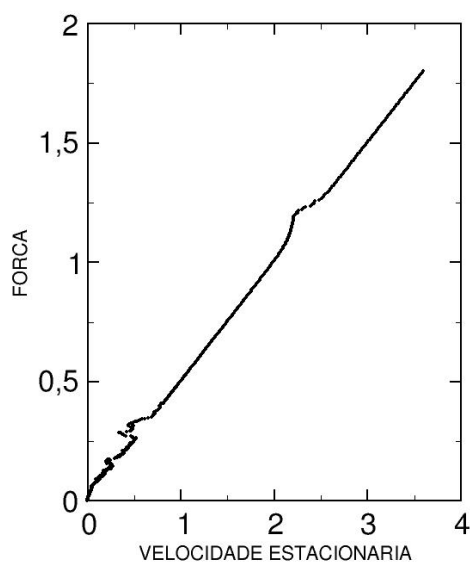


Figura 4.22: Média das sementes, direção da força = 0, $b/a = 0.5$.

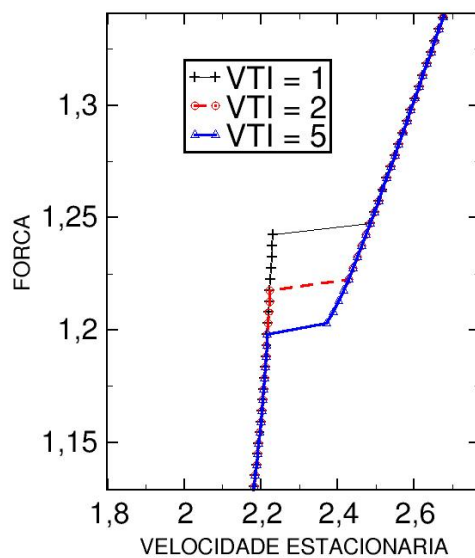


Figura 4.23: Ampliação no região descontínua com forças altas, três sementes estão representadas.

Surge uma região descontínua para valores de forças menores, mostrada com mais detalhe na Figura 4.24. Esta região está subdividida em três outras. No início temos que a força aplicada é suficiente para colocar o dímero em movimento, assumindo um caráter linear, onde só existe movimento do centro de massa. Logo após surge a primeira descontinuidade, o dímero inicia um movimento pendular com uma amplitude e frequências bem definidas, de modo que a medida que a força aumenta, aumenta a amplitude. Isso foi observado através de filmes da simulação e dos gráficos da dinâmica do dímero referente a certos valores de força fixos obtidos na Figura 4.22. A velocidade estacionária do centro de massa do dímero diminui pelo fato de haver uma transferência de energia translacional para a energia rotacional. A velocidade de rotação está naturalmente associada à velocidade pendular que foi observada. Tem-se uma segunda região distinta, onde o dímero começa com movimentos pendulares. Existe aí porém pontos de giro completo do dímero. Na Figura 4.25 pode-se observar melhor esta dinâmica: o dímero tem uma certa velocidade translacional, mas num certo instante o movimento pendular atinge uma amplitude tão alta que uma rotação completa ocorre. Neste momento a velocidade translacional diminui chegando a valores próximos de zero e logo aumenta. Conseqüentemente diminui abruptamente a velocidade pendular (ou de rotação), reproduzindo o movimento arranca-pára devido ao acoplamento roto-translacional. Ao aumentar mais a força tem-se permanências menores de velocidade translacional do dímero para valores mais baixos que o máximo. Logo acontece um salto, outra descontinuidade. Nesta segunda região (com força variando de aproximadamente 0.29 a 0.31), a amplitude do movimento pendular diminui com o aumento da força, ocasionando uma aumento na velocidade do centro de massa para valores crescentes de força. Na terceira área temos mais uma descontinuidade. Na Figura 4.25 pode-se observar dinâmicas referentes a este caso. Nesta região o dímero não dá voltas completas. Ele somente possui movimento pendular, similar ao da primeira região. Neste caso porém a amplitude do movimento pendular diminui com o aumento da força, de forma que as velocidades estacionárias do centro de massa também aumentam. Isso continua até o movimento pendular cessar, ocasionando outra descontinuidade e retornando à reta.

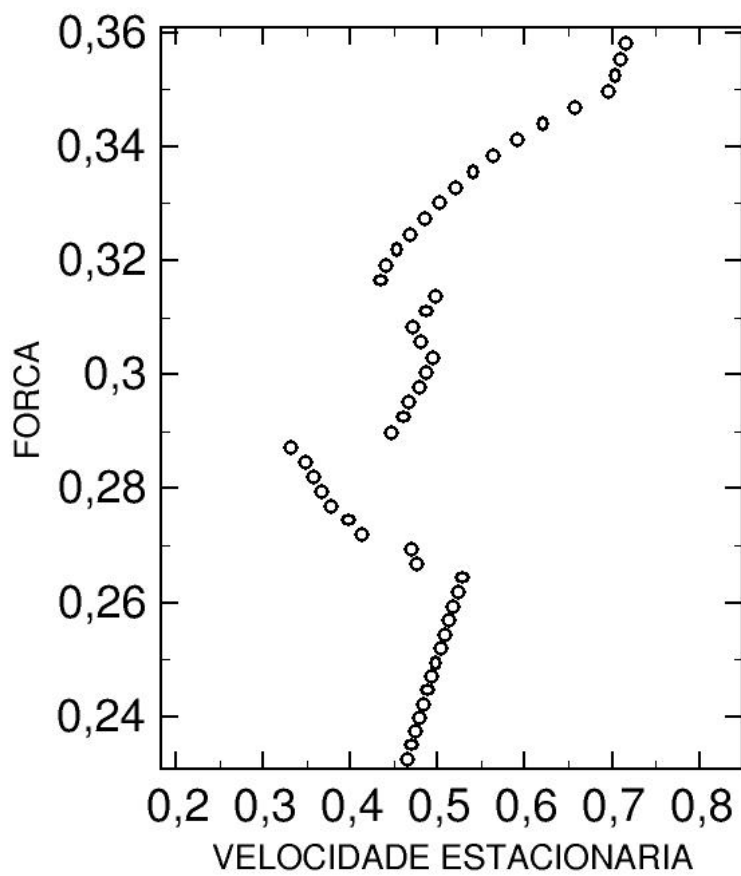


Figura 4.24: Ampliação da área com a descontinuidade na região de forças baixas, média das sementes, direção da força = 0, $b/a = 0.5$.

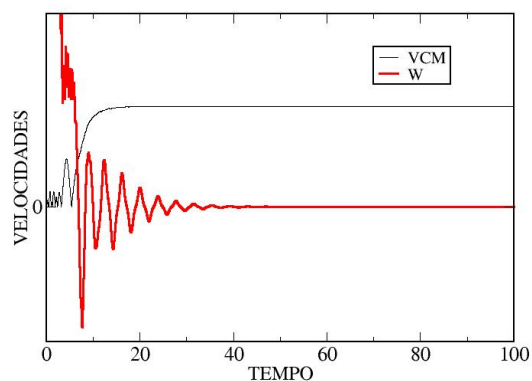
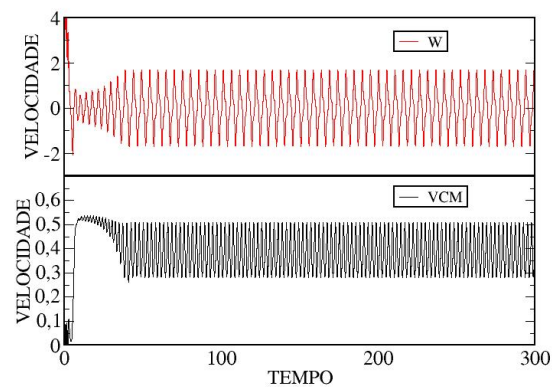
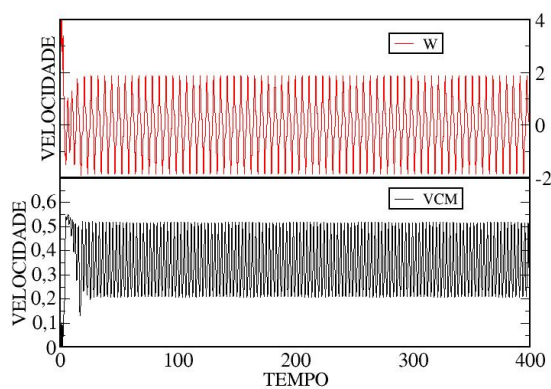
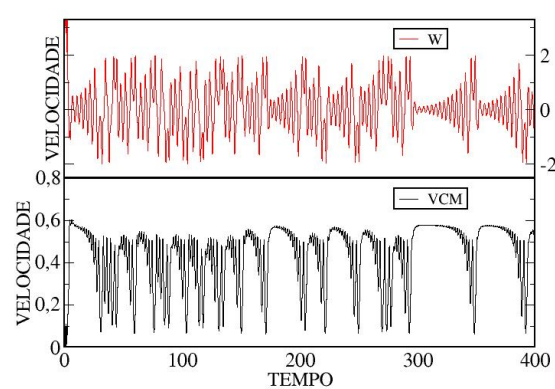
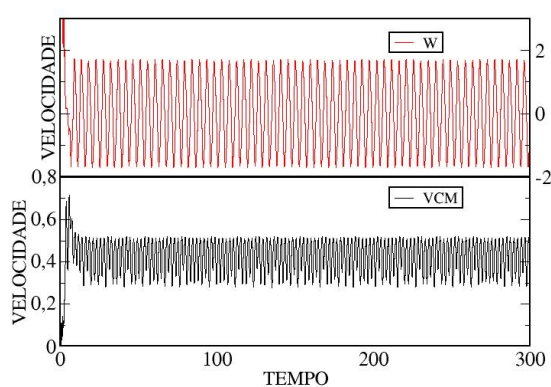
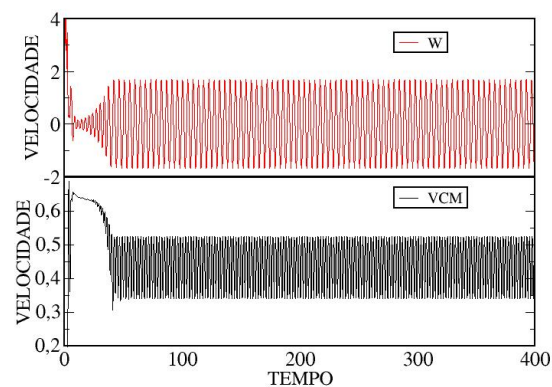
(a) $F = 0.26$.(b) $F = 0.275$.(c) $F = 0.285$.(d) $F = 0.29$.(e) $F = 0.315$.(f) $F = 0.32$.

Figura 4.25: Estudo do caso com $a/b = 0.5$, na figura (a) a força aplicada ainda está no regime linear, nas figuras (b) e (c) está na primeira área, na figura (d) na segunda área e nas figuras (e) e (f) está na terceira área.

4.4.1.2 $b/a = 1$

Na Figura 4.26 percebe-se uma região não linear. Após a análise das dinâmicas nesta região foi possível concluir que, dependendo do giro inicial, a VCM estacionária se encontrava certas vezes numa região linear (uma continuação inferior da região linear do regime de forças altas). Outras vezes era zero. A VCM estacionária pode ter um valor diferente de zero e conforme a força aumentava esta VCM pode retornar a ser zero (Figura 4.27).

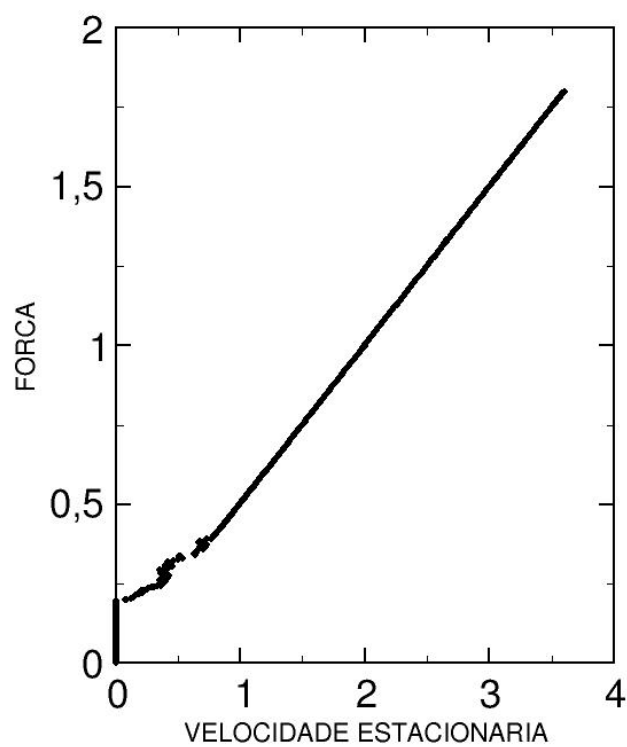


Figura 4.26: Média das sementes, direção da força = 0, $b/a = 1$.

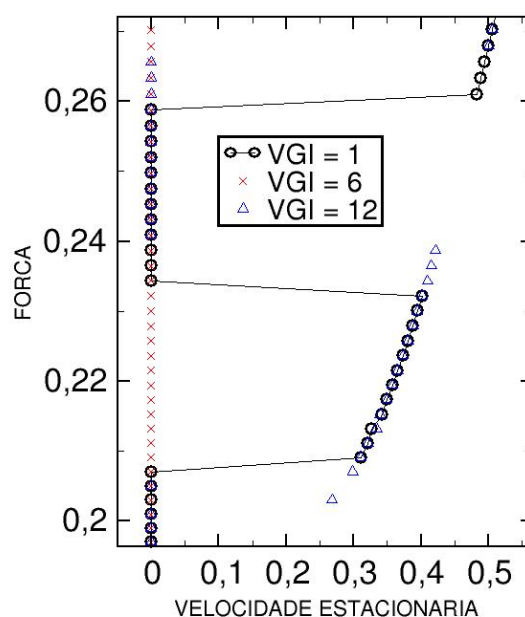


Figura 4.27: Ampliação da área na região de forças baixas, média das sementes, direção da força = 0, $b/a = 1$.

Isto é possível pelo fato de que o dímero sempre sai do primeiro estado de equilíbrio (mínimos do potencial do substrato) mas, após sair deste, a sua velocidade angular combinada com uma força maior contribuíam para que o dímero ocupasse uma orientação muito desfavorável para o deslizamento, encaixando uma das partículas em algum mínimo, resultando que a força aplicada não era suficientemente alta para tirar o dímero desta configuração. Este efeito também foi observado para os outros casos de comensurabilidade. Porém, para este caso, o efeito é maximizado pelo fato de o dímero poder estar perfeitamente encaixado nos mínimos do potencial do substrato. Os resultados estão em concordância com o modelo unidimensional quanto ao fato do não aparecimento da região não linear para forças mais altas.

4.4.1.3 $b/a = 1.25$

Na Figura 4.28 pode-se notar 3 regiões distintas, uma linear que cobre a maior parte da curva, outra linear (irregular e de declividade menor), e uma região descontínua para regime de forças mais altas. A descontinuidade reflete os resultados já obtidos pelo modelo unidimensional, com a perturbação sendo menor em relação com o caso de $b/a = 0.5$ e maior que para $b/a = 1$. A região linear de menor proporção é uma média de valores de VCM estacionária entre zero e valores que se encontram numa continuação da maior região linear nesta área. Em todas as simulações, a força com que a VCM estacionária deixa de ser zero, vencendo o atrito estático e indo ocupar um valor na região linear, eram diferentes. Esta é a origem da região linear de menor declividade. É possível observar também que o valor de força ($F = 0.2$) necessário para vencer o atrito estático é muito similar ao do caso com $b/a = 1$.

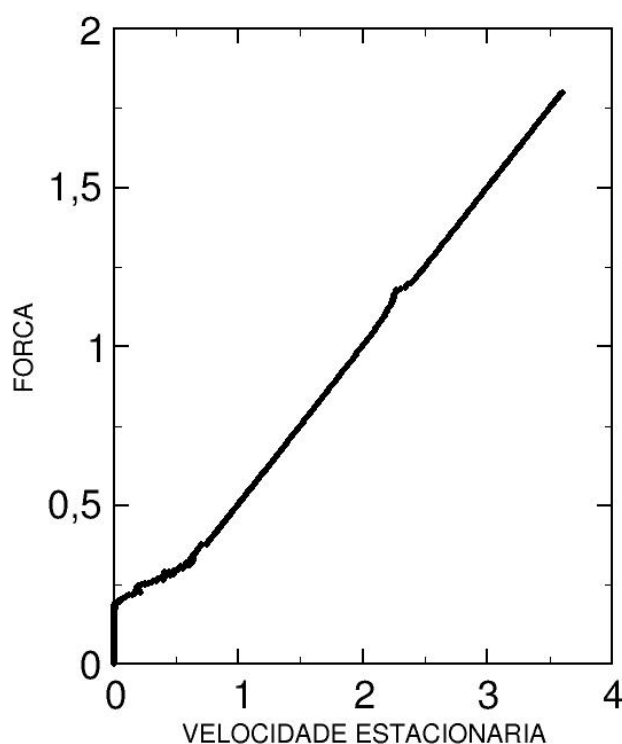


Figura 4.28: Média das sementes, direção da força = 0, $b/a = 1.25$.

4.4.1.4 $b/a = 1.5$

Para este valor de comensurabilidade pode-se observar na Figura 4.29 que o atrito estático é vencido mais facilmente pelos mesmos mecanismos do caso $b/a = 0.5$. Similiarmente ao caso $b/a = 0.5$ existe uma diminuição efetiva do limiar de deslizamento devido as médias entre sementes diferentes. É possível notar também a presença do fenômeno ressonante que existe no modelo unidimensional.

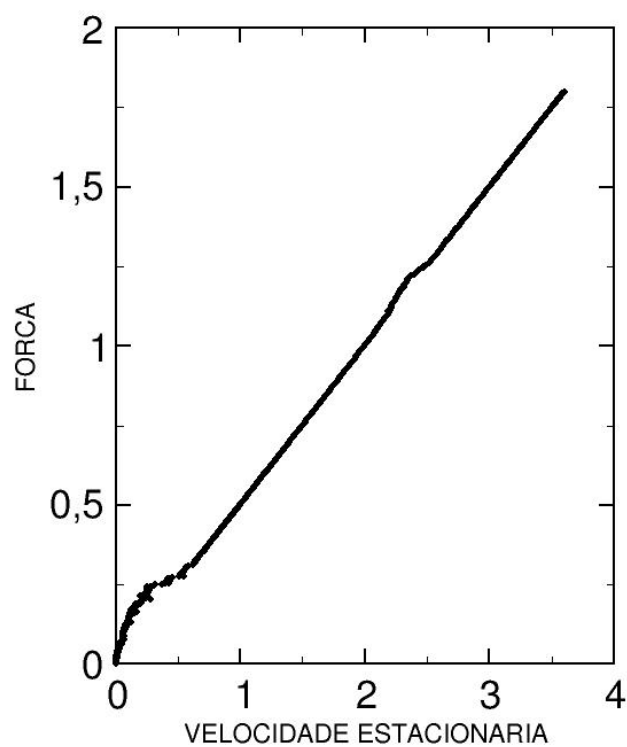


Figura 4.29: Média das sementes, direção da força = 0, $b/a = 1.5$.

4.4.2 Força na Direção de $\pi/2$

O substrato é invariante frente à uma rotação de $\pi/2$, porém a combinação da posição mais favorável para o limiar de deslizamento com a direção da força aplicada gera possibilidades de comportamentos diferentes da dinâmica do dímero em relação a força aplicada na direção 0. Para todas comensurabilidades estudadas as diferenças são pequenas, menos para o caso de $b/a = 1$. Novamente, quando tem-se o grau mais alto de comensurabilidade os efeitos são maximizados pela possibilidade de encaixe perfeito com o substrato.

4.4.2.1 $b/a = 0.5$

Pode-se perceber analisando a Figura 4.30 que esta dinâmica é similar ao caso $b/a = 0.5$ com força na direção 0.

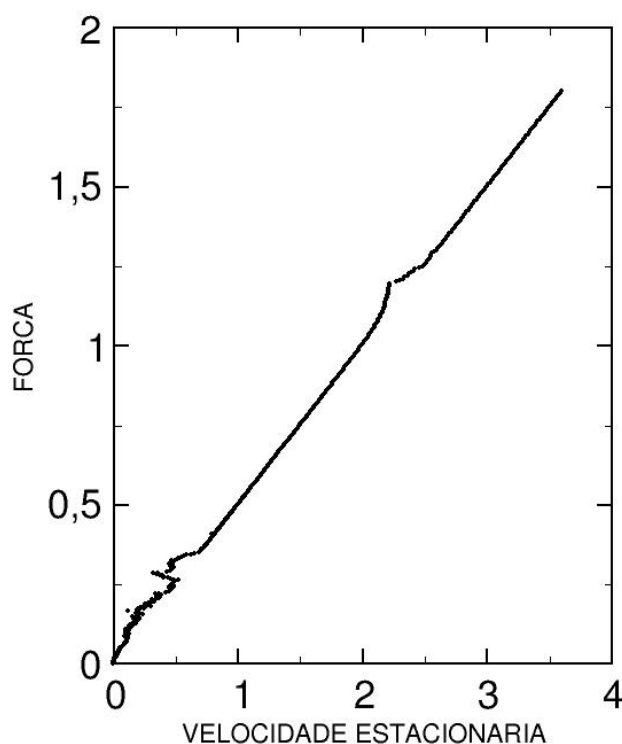


Figura 4.30: Média das sementes, direção da força = $\pi/2$, $b/a = 0.5$.

4.4.2.2 $b/a = 1$

A Figura 4.31 representa a média de várias sementes escolhidas, sendo que três delas estão representadas na Figura 4.32 para uma região de forças que começa na iminência de movimento e vai até o início da parte linear. Nesta última figura pode-se observar quatro regiões lineares distintas. A primeira é o atrito estático. A segunda (com F entre 0.2 - 0.275) e a terceira (com F entre 0.275 - 0.35) apresentam um coeficiente de atrito (γ) muito maior que o coeficiente da quarta região; $\gamma_{eff} \gg \gamma_{ad-hoc}$. Nestas duas regiões o dímero adquire um movimento pendular representado na Figura 4.33. A quarta região pode se estender para valores de força menores do que 0.35, como é o caso da curva com $VGI = 16$, levando ao aspecto da Figura 4.31.

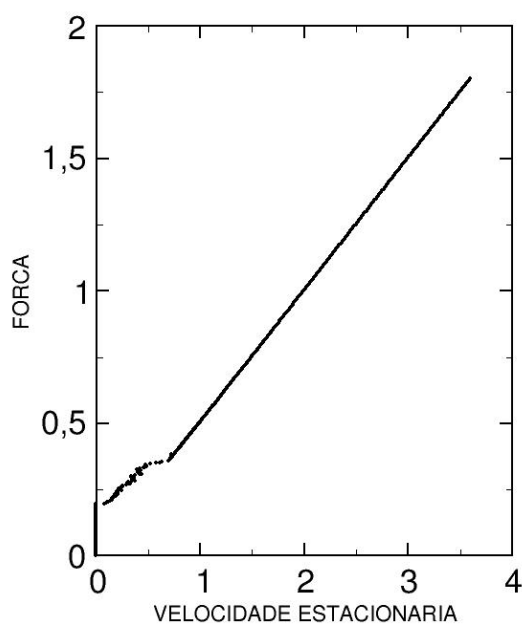


Figura 4.31: Média das sementes, direção da força = $\pi/2$, $b/a = 1$.

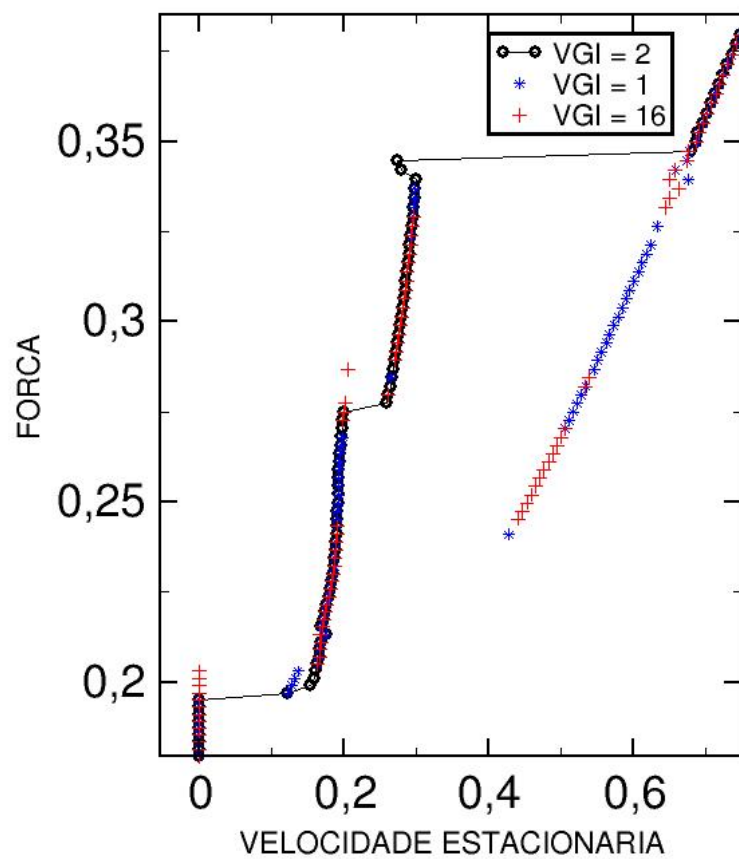


Figura 4.32: Ampliação da área na região de forças baixas, 3 sementes, direção da força = $\pi/2$, $b/a = 1$.

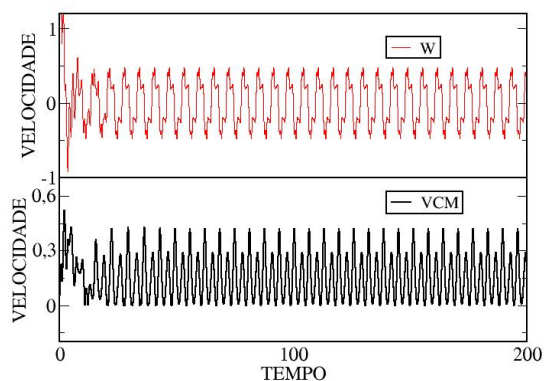
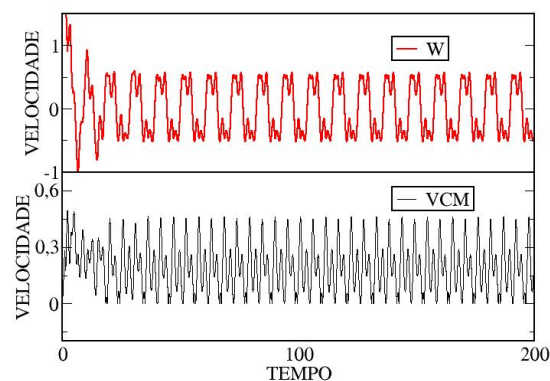
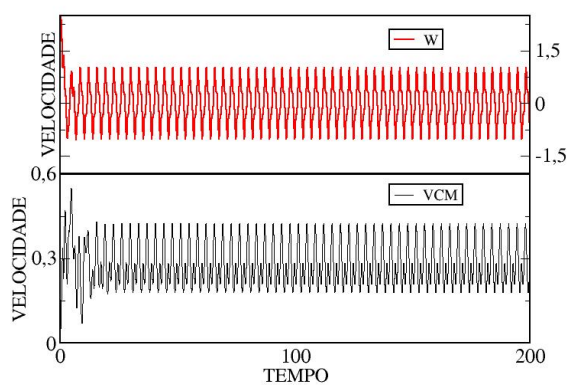
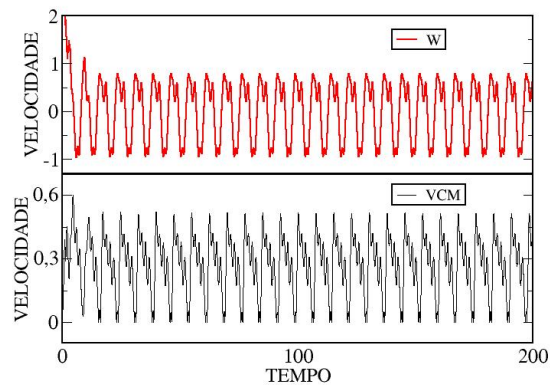
(a) $F = 0.2$.(b) $F = 0.25$.(c) $F = 0.3$.(d) $F = 0.35$.

Figura 4.33: Dinâmica para força na direção de $\pi/2$, $b/a = 1$ e $VGI = 2$.

4.4.2.3 $b/a = 1.25$

Caso similar (Figura 4.34) ao da força na direção 0 e a mesma comensurabilidade. Vale notar que o valor da força para vencer o atrito estático é muito próximo ao observado anteriormente, $F = 0.2$.

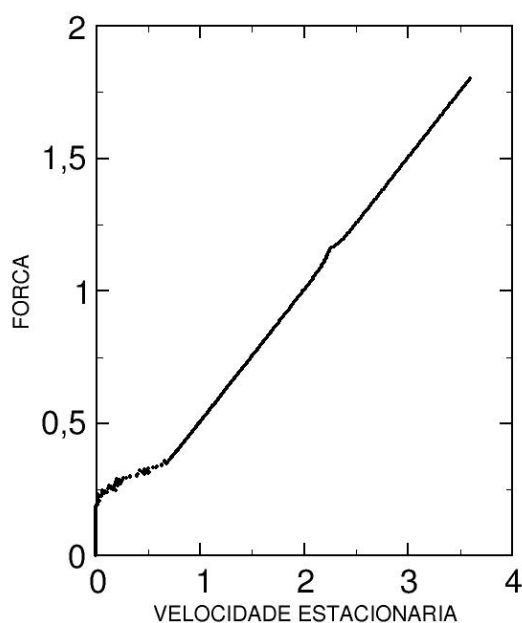


Figura 4.34: Média das sementes, direção da força = $\pi/2$, $b/a = 1.25$.

4.4.2.4 $b/a = 1.5$

Nesta dinâmica (Figura 4.35) a iminência do movimento para o dímero não é facilmente alcançada como era quando a força é aplicada na direção 0. Analisando a dinâmica de algumas sementes foi possível observar que no intervalo de força de 0.25 - 0.3, grande parte obteve VCM estacionária = 0 e também que a maioria não reproduz a descontinuidade já observada para o caso unidimensional.

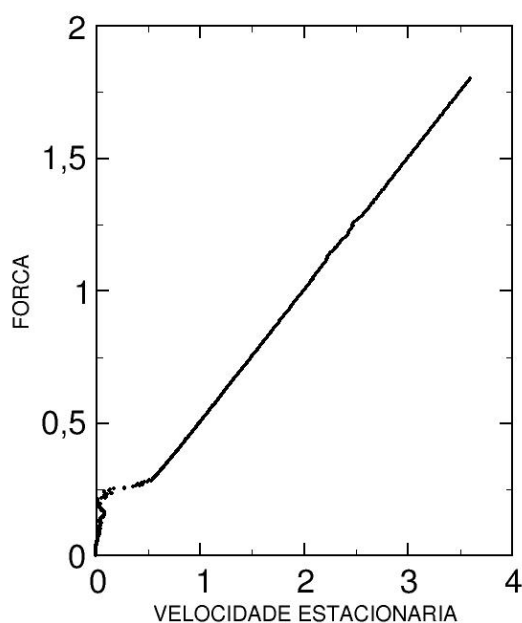


Figura 4.35: Média das sementes, direção da força = $\pi/2$, $b/a = 1.5$.

4.4.3 Força na Direção de $\pi/4$

4.4.3.1 $b/a = 0.5$

Na Figura 4.36 está representada a média das sementes. Pode-se observar o fenômeno ressonante referente ao modelo unidimensional, mas aqui localizado em valores maiores de forças quando comparadas com outras direções de forças aplicadas. Para o regime de forças baixas observa-se uma média de duas regiões lineares, representadas na Figura 4.37 que foram obtidas via simulações de três valores de sementes.

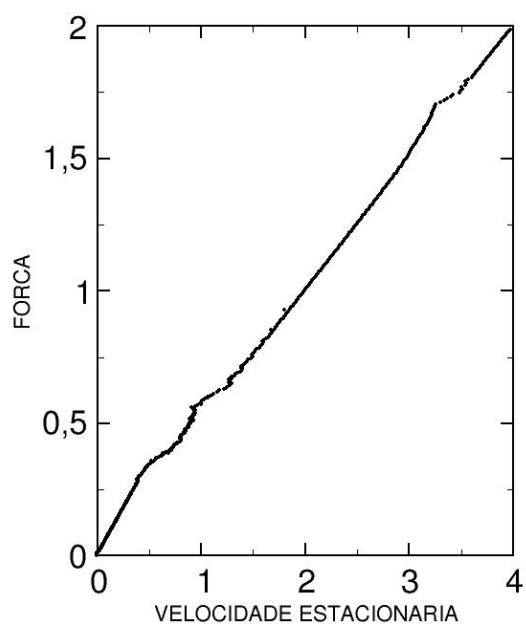


Figura 4.36: Média das sementes, direção da força = $\pi/4$, $b/a = 0.5$.

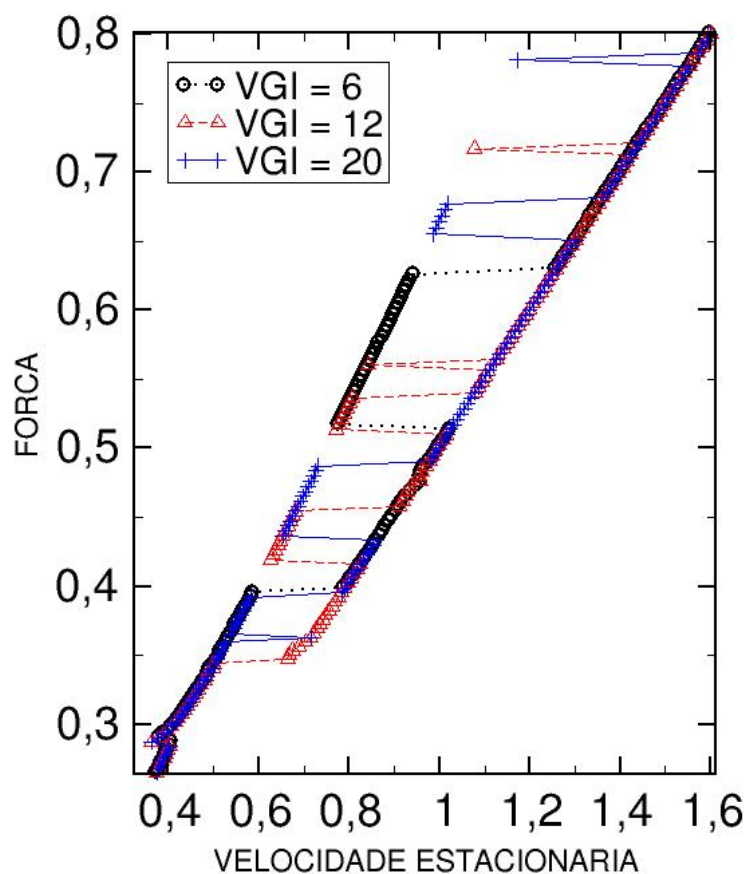


Figura 4.37: Ampliação da área na região de forças baixas, 3 sementes, direção da força = $\pi/4$, $b/a = 0.5$.

Pode-se observar que na região de forças com valores de 0.3 - 0.8, a VCM estacionária pode se encontrar sempre em apenas duas regiões lineares. Na região linear com menor VCM estacionária o dímero tem uma velocidade rotacional (Figura 4.38), portanto tem um movimento rotacional que é diferente de zero, deslocando-se na direção da força aplicada. É interessante notar que à medida que a força aumenta nas proximidades do valor 0.3, a VCM estacionária aumenta. Ao passar pela descontinuidade a VCM estacionária diminui. Isso ocorre devido ao acoplamento roto-translacional: energia é trocada entre estes dois graus de liberdades, de maneira a diminuir a VCM estacionária e aumentar W . Isto ocorre identicamente quando existe

a passagem da primeira região linear para a segunda no regime de forças baixas. A energia agora é transferida do grau de liberdade rotacional para o translacional, aumentando assim a VCM estacionária para uma semente qualquer. Na outra região linear o dímero não tem velocidade rotacional (Figura 4.38) e portanto desliza apenas com velocidade translacional. Nesta região linear (até o valor de força próximo a 0.5) o dímero começa seu movimento na direção da força aplicada. Porém em pouco tempo ele canaliza numa direção paralela a direção x de orientação do substrato e desloca-se apenas com velocidade translacional na direção x . Este fenômeno será discutido mais detalhadamente no caso seguinte.

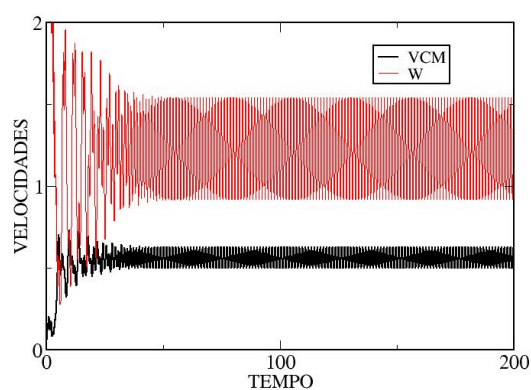
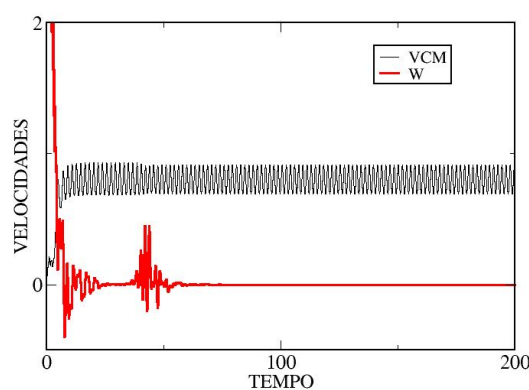
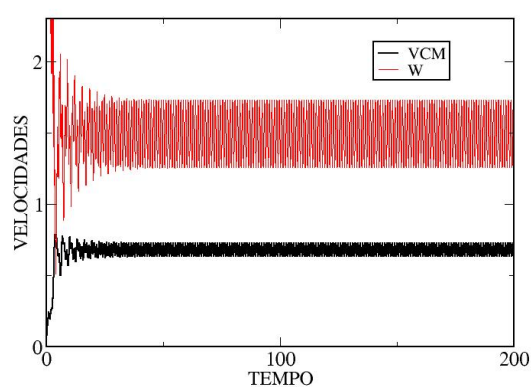
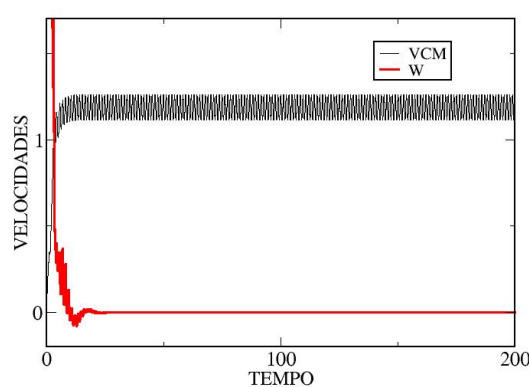
(a) Amplitude de giro = 6 e $F = 0.379$.(b) Amplitude de giro = 12 e $F = 0.4$.(c) Amplitude de giro = 12 e $F = 0.45$.(d) Amplitude de giro = 20 e $F = 0.59$.

Figura 4.38: Estudo do caso com $b/a = 0.5$ e com força na direção de $\pi/4$.

4.4.3.2 $b/a = 1$

Na Figura 4.39 tem-se as médias das sementes utilizadas. A similaridade desta curva com a que foi aplicada força na direção de $\pi/2$ pode ser melhor visualizada analisando-se o detalhe da região descontínua para o regime de forças baixas na Figura 4.40, em que foi obtida para três valores de VGI diferentes.

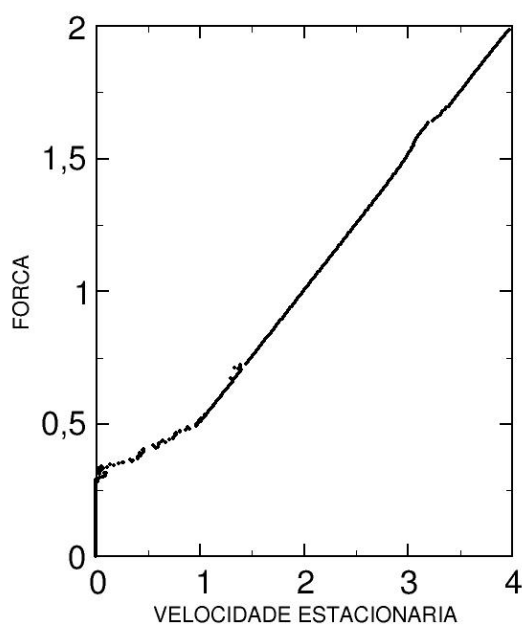


Figura 4.39: Média das sementes, direção da força = $\pi/4$, $b/a = 1$.

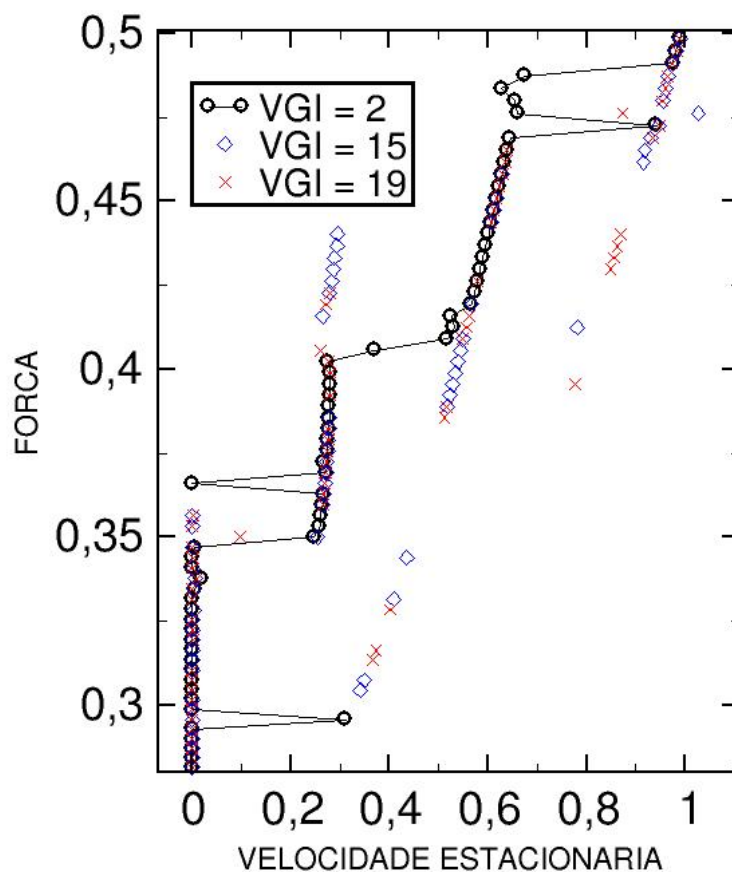


Figura 4.40: Ampliação da área na região de forças baixas, 3 sementes, direção da força = $\pi/4$, $b/a = 1$.

Nota-se novamente o aspecto das duas regiões lineares com $\gamma_{eff} \gg \gamma_{ad-hoc}$. A diferença em relação ao caso com mesma comensurabilidade é que a dinâmica do dímero não é igual nestas duas regiões lineares. Na Figura 4.41 pode-se analisar mais detalhadamente o que acontece. Na primeira região linear (gráficos (a) e (b)) o dímero tem movimento de rotação, mas o mais interessante é a VCM. Ela apresenta valores diferentes de zero para os dois graus de liberdade associados com a velocidade translacional que, e periodicamente assumem valores negativos e positivos. Na segunda região linear a dinâmica do dímero também está representada na Figura 4.41 (gráficos (c) e (d)). Nesta região ele começa seu movimento com giro, deslizando na

direção da força aplicada. Porém, em pouco tempo ela se alinha em relação à alguma orientação do substrato, perdendo W e mantendo VCM apenas na direção de uma dimensão. Logo espera-se que VCM estacionária seja maior que para a primeira região linear, fato que é evidenciado. Na região de forças altas percebe-se o surgimento do fenômeno ressonante já analisado para o caso unidimensional. Porém, aqui com $b/a = 1$ surge tal efeito pelo fato de o dímero nesta região se propagar com o ângulo de orientação igual ao da direção da força aplicada e na mesma direção da força, portanto a comensurabilidade projetada em alguma direção de orientação do dímero (x ou y), tem um valor efetivo de $1/\sqrt{2}$ e é diferente de 1.

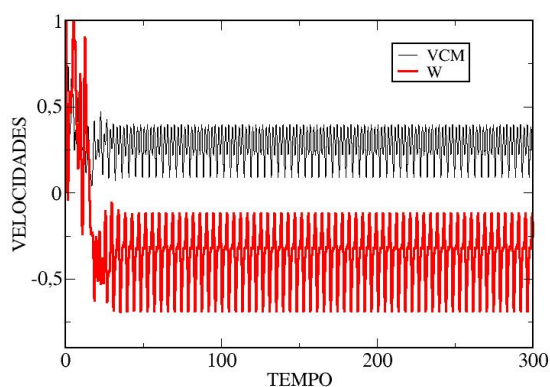
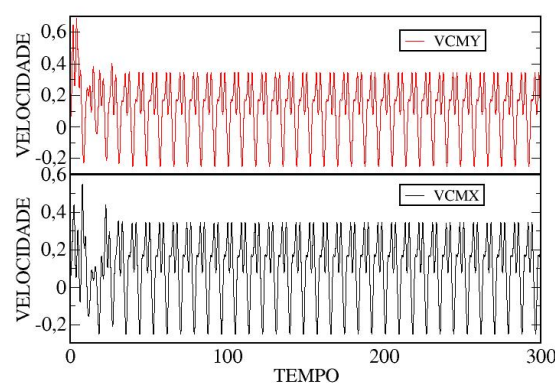
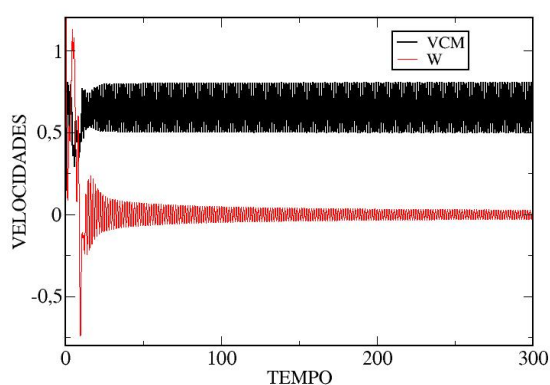
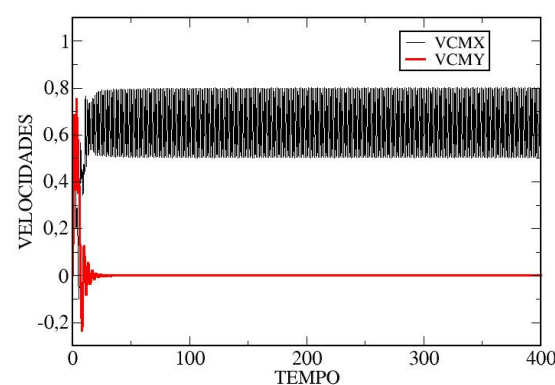
(a) $F = 0.38$.(b) $F = 0.38$, componentes de VCM .(c) $F = 0.46$.(d) $F = 0.46$, componentes de VCM .

Figura 4.41: Estudo do caso com $b/a = 1$, $VGI = 2$ e com força na direção de $\pi/4$.

4.4.3.3 $b/a = 1.25$

Analisando as Figuras 4.42 e 4.43 percebe-se um conjunto de curvas similar ao de $b/a = 0.5$ com força na direção de $\pi/4$, porém com atrito estático. Para a primeira região linear da Figura 4.43 tem-se que o dímero segue apenas deslizando na direção y de orientação do substrato (Figura 4.44 gráficos (a) e (b)), canalizando nesta orientação no início de seu movimento. Para a segunda região linear, nos valores de força mais baixos ele possui V_{CMX} e V_{CMY} diferentes num mesmo tempo (Figura 4.44 gráficos (c) e (d)), mas eles vão se tornando iguais conforme a força aplicada vai aumentando. Também pode-se notar o fenômeno ressonante reconhecido no modelo unidimensional, aqui novamente para valores de força mais altos.

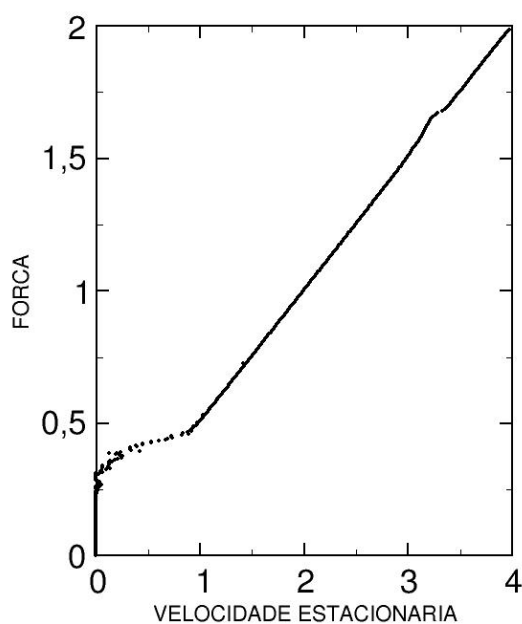


Figura 4.42: Média das sementes, direção da força = $\pi/4$, $b/a = 1.25$.

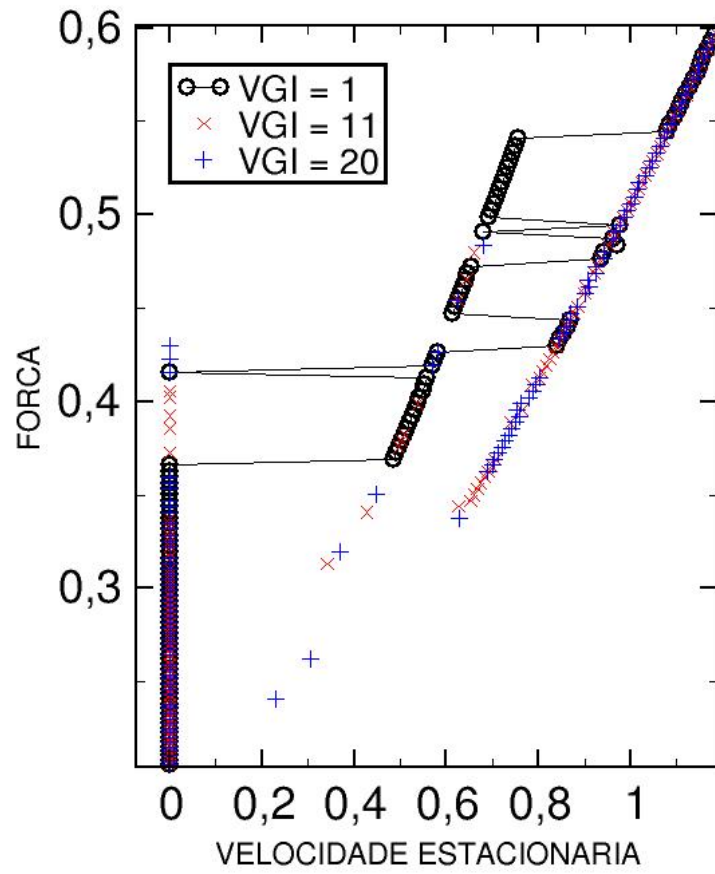


Figura 4.43: Ampliação da área na região de forças baixas, 3 sementes, direção da força = $\pi/4$, $b/a = 1.25$.

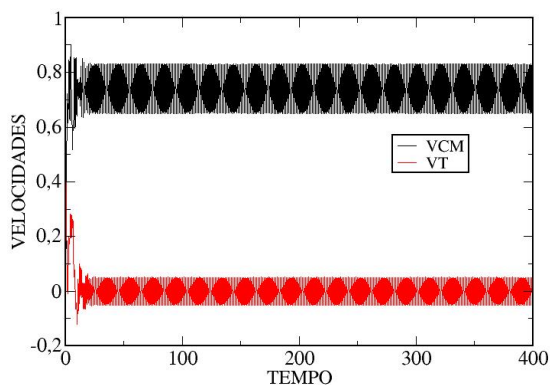
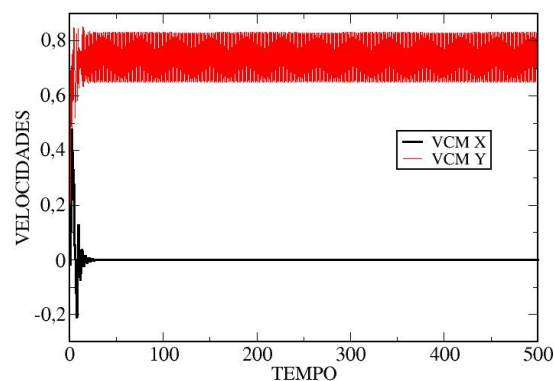
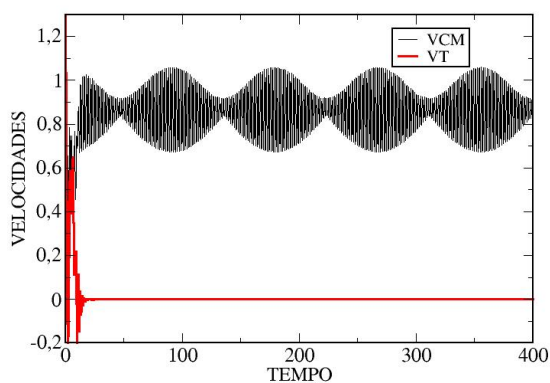
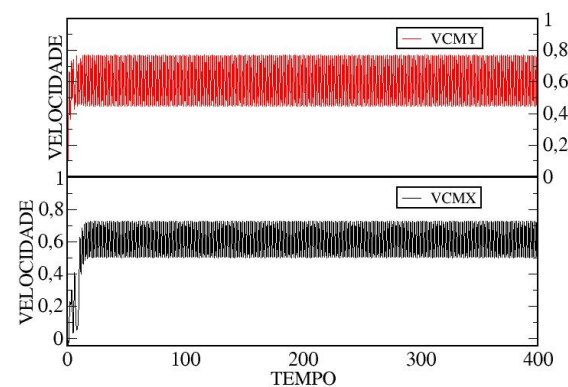
(a) $F = 0.4$.(b) $F = 0.4$, componentes de VCM .(c) $F = 0.44$.(d) $F = 0.44$, componentes de VCM .

Figura 4.44: Estudo do caso com $b/a = 1.25$, $VGI = 1$ e com força na direção de $\pi/4$.

4.4.3.4 $b/a = 1.5$

Nas Figuras 4.45 e 4.46 pode-se analisar esta dinâmica. Surgem 3 regiões lineares, como mostra a Figura 4.46. Para a região com VCM estacionária mais baixa o dímero canaliza, deslizando apenas em uma dimensão, similar para o caso $b/a = 1.25$, em que ele desliza na direção da força aplicada e tem componentes de VCM diferentes, até que com uma força suficientemente grande elas igualem seus valores. Na última região linear o dímero desliza na direção da força, mas gira também, similar a dinâmica da primeira região linear do caso com $b/a = 0.5$ com força na direção $\pi/4$. Aqui também é possível observar a descontinuidade

analisada no caso unidimensional.

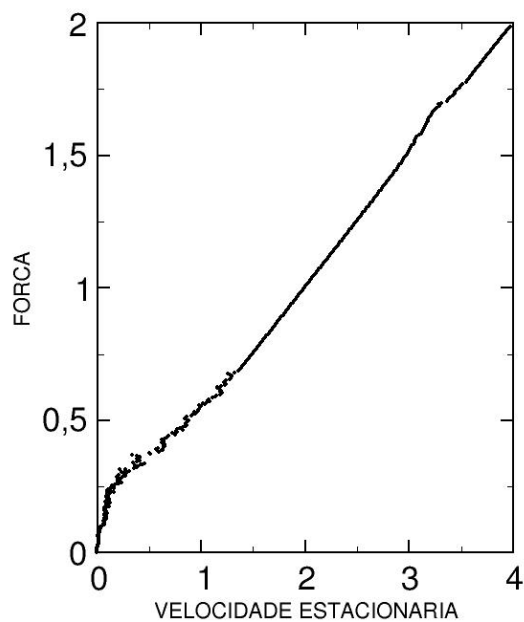


Figura 4.45: Média das sementes, direção da força = $\pi/4$, $b/a = 1.5$.

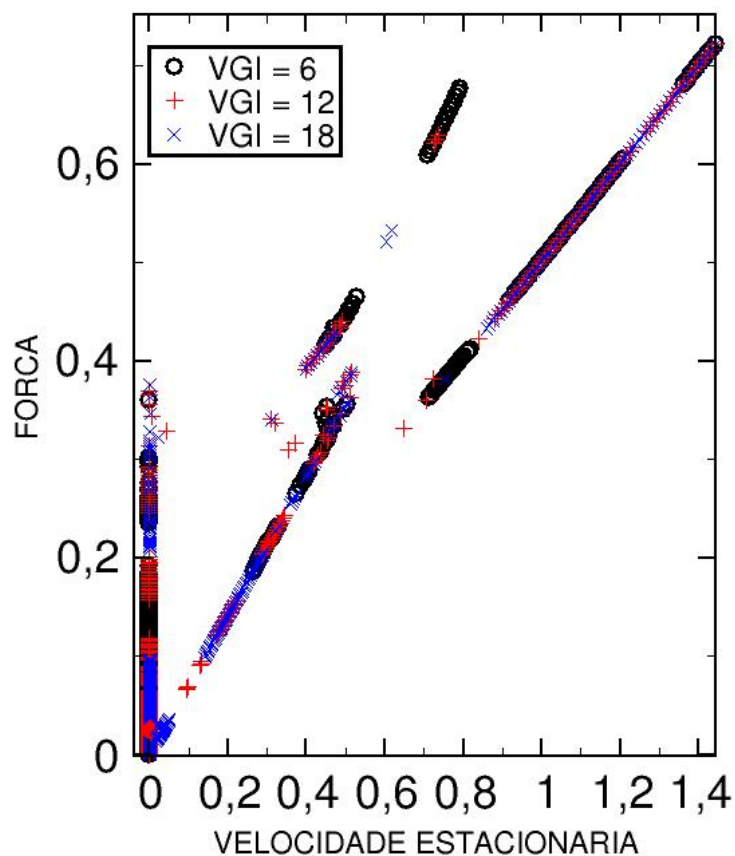


Figura 4.46: Ampliação da área na região de forças baixas, 3 sementes, direção da força = $\pi/4$, $b/a = 1.5$.

4.5 Energia

Nesta seção apresentamos resultados da energia em alguns casos. O primeiro é representado na Figura 4.47 e é referente ao gráfico (d) da Figura 4.25 e o segundo é representado na Figura 4.48 e é referente ao gráfico (c) da Figura 4.38.

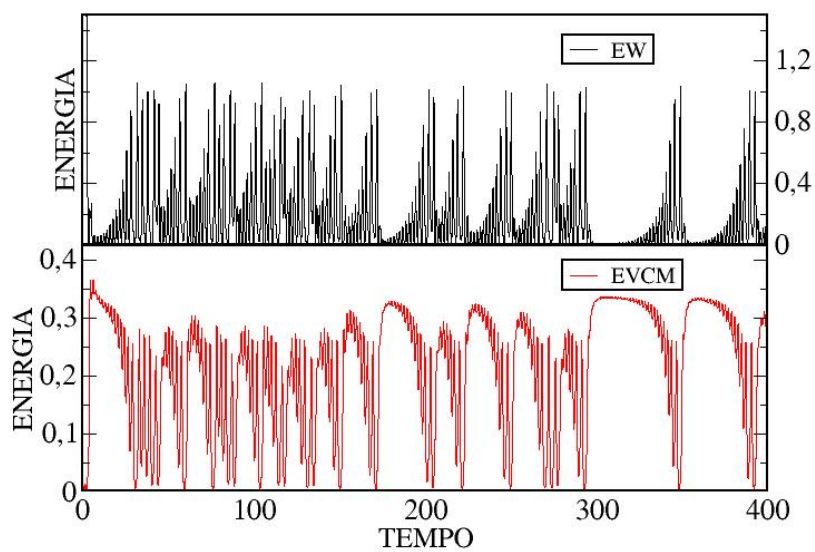


Figura 4.47: Comportamento das energias do dímero (referente ao gráfico (d) da Figura 4.25).

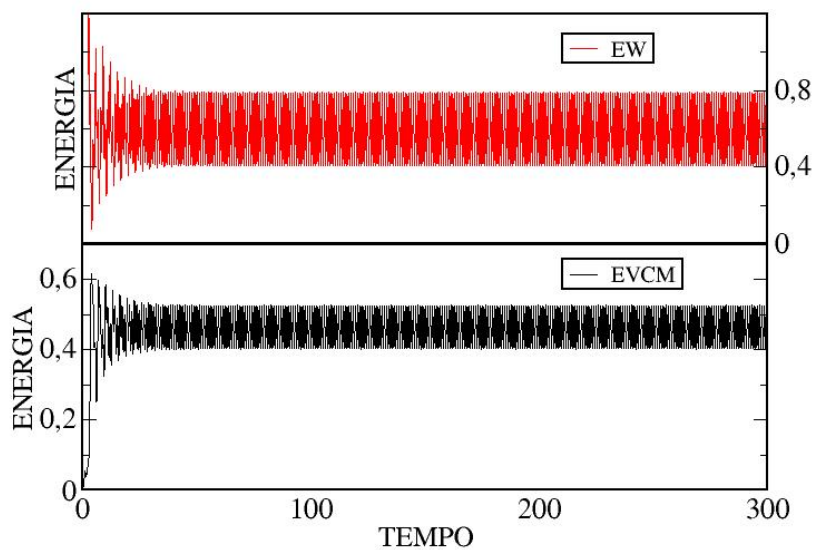


Figura 4.48: Comportamento das energias do dímero (referente ao gráfico (c) da Figura 4.38).

Está representada apenas as energias translacional e a rotacional, pois a de vibração é prati-

camente zero para ambos os casos. Na Figura 4.46 pode-se observar a transferência de energia translacional para a angular e vice-versa, mostrando o acoplamento roto-translacional. Na Figura 4.47, em que o dímero tem uma velocidade angular sempre diferente de zero, pode-se observar uma periodicidade desta transferência de energia. Os gráficos das energias em função do tempo reforçam a ideia já antecipada que explica o movimento de arranca-pára pelo acoplamento dos movimentos de translação e rotação mediados pelo substrato. Logo existem momentos em que o dímero aumenta sua energia rotacional ao ponto de parar o movimento de translação.

5 *Conclusão*

Um tópico muito recente, que tem se destacado na literatura da tribologia, é a comensuração. O estudo da comensuração frente à tribologia tem trazido resultados intrigantes e renovadores. Esta é uma área muito nova, sendo que o primeiro experimento com âmbito de estudá-la especificamente foi realizado apenas em 2004. Deste modo a comensuração deve se beneficiar bastante com os caminhos abertos com a descoberta da superlubrificação. Um destes caminhos foi explorado por Fusco et al. [17, 18] com objetos pequenos, dímeros. Gonçalves et al. [19] trouxeram a idéia de estudar o dímero frente à comensurabilidade, mas o modelo usado ainda está longe de ser um modelo real.

A nossa pesquisa, apresentada nesta dissertação de mestrado, é uma continuação do estudo do modelo unidimensional. O principal objetivo aqui foi a criação e o estudo de um modelo novo (muito mais próximo da realidade que os estudados anteriormente) e de sua Física. Resultados envolvendo comensurabilidade mostram diretamente que sistemas com maiores graus de comensurabilidade apresentam forte dependência do atrito. Os três resultados principais obtidos na nossa pesquisa mostram que, de fato, a inclusão de uma dimensão no modelo sugere uma dinâmica diferente. Esses três resultados estão divididos em três regimes apresentadas no presente trabalho: regime transiente (sem força aplicada), regime no limiar de deslizamento (estudo da orientação frente a possibilidade de movimento) e o regime estacionário (estudo com forças aplicadas).

Primeiramente mostrou-se que o modelo bidimensional proposto reproduz os dados já publicados por Gonçalves et al. [19] para o modelo unidimensional.

O primeiro resultado foi a prova que esta dinâmica diferente existe. No regime transiente, isto foi feito comparando os tempos de parada de um dímero girando fortemente contra o de um dímero que não gira, sendo os dois lançados com mesma velocidade translacional. Observa-se que o dímero que é lançado girando fortemente tem um tempo de parada muito maior que o outro. Nossos resultados são compatíveis com resultados obtidos para atrito macroscópico desenvolvido por Dahmen et. al. [37].

No limiar de deslizamento, o segundo resultado foi uma tentativa de exploração máxima do regime do dímero variando seu ângulo de orientação frente a diferentes tipos de condições iniciais, força e comensurabilidade. Foram analisadas comensurabilidades de $b/a = 0.5$, $b/a = 1$. Cada caso apresentou peculiaridades e curvas características diferentes. Os resultados mais interessantes foram o surgimento de um ângulo limite para o início do movimento do dímero no caso de $b/a = 0.5$ com as partículas posicionadas inicialmente em mínimos. Novamente, nestes resultados observa-se que quando existe um grau alto de comensurabilidade, o atrito é maior. Pode-se notar isso claramente na Figura 4.17, em que no início do movimento, não importando a orientação da força, o sistema está fortemente comensurado e o dímero não desliza até que o estado inicial dele consiga achar uma configuração de um grau de comensurabilidade mais baixo.

Finalmente, no regime estacionário há uma série de resultados. Este estudo foi dividido em três partes: três direções diferentes de aplicação de força para quatro graus de comensurabilidade. O estudo sistemático da média de várias sementes e a análise da sobreposição de algumas semente nos permitiu analisar quais casos eram os mais importantes e assim identificar os fenômenos físicos mais interessantes na sua dinâmica. Pelo fato de o modelo ser bidimensional tem-se quatro graus de liberdades associados, e portanto 4 energias associadas. Abaixo um resumo dos resultados mais importantes obtidos neste regime:

- O fenômeno ressonante obtido no modelo unidimensional para forças altas é reproduzido com fidelidade, sempre tendo em vista a comensurabilidade efetiva resultante da orientação do dímero.

- Para o caso $b/a = 0.5$ e força na direção x de orientação do substrato existe uma região para forças baixas em que VCM estacionária tem um comportamento anormal: o dímero assume movimentos pendulares e angulares através de um acoplamento roto-translacional, reproduzindo o movimento arranca-pára.
- Para o caso $b/a = 1$ e força na direção y de orientação do substrato existe uma região para forças baixas em que VCM estacionária tem um comportamento anormal: o dímero tem um movimento pendular nesta região, vezes mais fortes, vezes mais fracos, resultando num $\gamma_{eff} \gg \gamma_{ad-hoc}$.
- Os casos com força na direção de $\pi/4$ tem várias dinâmicas distintas, das quais é possível citar casos em que ocorrem canalizações do dímero em alguma orientação do substrato, de forma assim a deslizar com velocidade translacional apenas em uma dimensão. Nestes casos as componentes da velocidade translacional variam e são diferentes daqueles em que o dímero desliza rotando.

Para uma interpretação melhor de todos resultados foi sugerido o estudo da histerese nas regiões de descontinuidades e a instabilidade perante a pequenas mudanças de parâmetros. Estes serão elucidados num trabalho posterior.

Neste trabalho estudou-se o objeto mais simples com graus de liberdade internos (um dímero) inserido num cenário bidimensional. Um caminho interessante seria estudar comparativamente vários dímeros deslizando no substrato, de maneira a que estes dímeros pudessem se enxergar e assim simular um lubrificante molecular.

Bibliografia

- [1] BHUSHAN, B. *Introduction to tribology*. New York: John Wiley & son, Inc, 2002.
- [2] PERSSON, B. N. J. *Sliding friction. Physical principles and applications*. Berlin: Springer-Verlag, 1998.
- [3] KRIM, J. Surface science and atomic-scale origins of friction: what once old is new again. *Surface Science*, Amsterdam, v. 500, n. 3, p. 741–758, Dec. 2002.
- [4] BOWDEN, F. P. A discussion on friction: The mechanism of friction. *Proc. Roy. Soc. A*, London, v. 112, n. 111, p. 439–449, May. 1952.
- [5] SHEFIELLD, T. T. R. L. A. T. U. O. *What is Tribology?* 2003. Disponível em: <<http://www.shef.ac.uk/mecheng/tribology/teaching/whatistribology.htm>>.
- [6] BHUSHAN, B.; ISRAELACHVILI, J. N.; LANDMAN, U. Nanotribology: friction, wear and lubrication at the atomic scale. *Nature*, London, v. 374, n. 6523, p. 607–616, Apr. 1995.
- [7] KRIM, J. Progress in nanotribology: Experimental probes of atomic scale friction. *Comments Cond. Mat. Phys.*, Malaysia, v. 17, n. 8, p. 263–280, Aug. 1995.
- [8] TECHNOLOGIES, A. *What is AFM?* 2003. Disponível em: <<http://afm.tm.agilent.com/whatisafm.html>>.
- [9] MATE, C. M. et al. Atomic-scale friction tungsten tip on a graphite surface. *Physical Review Letters*, Woodbury, v. 59, n. 24, p. 1942–1945, Dec. 1987.
- [10] KRIM, J.; WIDOM, A. Damping of a crystal oscillation by an adsorbed monolayer and its relation to interfacial viscosity. *Phys. Rev. B*, Woodbury, v. 38, n. 17, p. 12184–12189, Dec. 1988.
- [11] WATTS, E. T.; KRIM, J.; WIDOM, A. Experimental observation of interfacial slippage at the boundary of molecularly thin film with gold substrate. *Phys. Rev. B*, Woodbury, v. 41, n. 6, p. 3466–3472, Feb. 1990.
- [12] KRIM, J.; WATTS, E. T.; DIEGEL, J. Slippage of simple liquid films adsorbed on silver and gold substrate. *J. Vac. Sci Technol. A*, v. 8, n. 4, p. 3417–3420, Aug. 1990.
- [13] DALY, C.; KRIM, J. Sliding friction of solid xenon monolayers and bilayers on ag(111). *Physical Review Letters*, Woodbury, v. 76, n. 5, p. 803–806, Jan. 1996.
- [14] DAYO, A.; ALNASRALLAH, W.; KRIM, J. Superconductivity-dependent sliding friction. *Physical Review Letters*, Woodbury, v. 80, n. 8, p. 1690–1693, Feb. 1998.

- [15] CIEPLAK, M.; SMITH, E. D.; ROBBINS, O. M. Molecular origins of frictions: The force on adsorbate layers. *Science*, New York, v. 265, n. 5176, p. 1209–1212, Aug. 1994.
- [16] TOMASSONE, M. S. et al. Dominance of phonon friction for a xenon film on silver (111) surface. *Physical Review Letters*, Woodbury, v. 79, n. 24, p. 4798–4801, Dec. 1997.
- [17] FUSCO, C.; FASOLINO, A.; JANSSEN, T. Nonlinear dynamics of dimers on periodic substrates. *European Physical Journal B*, v. 31, p. 95, Jan. 2003.
- [18] FUSCO, C.; FASOLINO, A. Microscopic mechanisms of thermal and driven diffusion of non rigid molecules on surfaces. *Thin Solid Films*, v. 428, p. 34, 2003.
- [19] GONÇALVES, S. et al. Bistability and hysteresis in the sliding friction of a dimer. *Physical Review B*, Woodbury, v. 72, p. 195418, Nov. 2005.
- [20] PERSSON, B. N. J. Surface resistivity and vibrational damping in adsorbed layers. *Physical Review B*, Woodbury, v. 44, n. 7, p. 3277–3298, Aug. 1991.
- [21] JOST, H. P.; SCHFIELD, J. Energy saving through tribology a techno-economic study. *Proc. IMechE*, v. 195, p. 151–174, Jun. 1981.
- [22] HADFIELD, M.; CIANTAR, C. Proc of the first international conference on tribology in environmental design. *Bournemouth*, p. 3–118, Sep. 2000.
- [23] AMONTONS, G. *La resistance causée dans les machines*. [S.l.]: French Royal Academy of Sciences, 1699.
- [24] COULOMB, C. *Théorie des machines simples*. [S.l.]: Memoires de Mathematiques et de Physique de la Academie des Sciences, 1785.
- [25] W.HARDY. Boundary lubrication. *Phil. Mag.*, v. 38, n. 49, 1919.
- [26] BOWDEN, F. P.; TABOR, D. *Friction and Lubrication of Solids, Part I*. Oxford: Oxford University Press, 1954.
- [27] MYERS, C. J. Tribology: Science in motion. *Physics in Technology*, London, v. 6, p. 54–59, Mar. 1975.
- [28] PERSSON, B. N. J.; TOSATTI, E. The puzzling collapse of the electronic sliding friction on a superconductor surface. *Surface Science*, Amsterdam, v. 411, p. L855–L857, 1998.
- [29] SOKOLOFF, J. B.; TOMASSONE, M. S.; WIDOM, A. Strongly temperature dependent sliding friction for a superconducting interface. *Physical Review Letters*, Woodbury, v. 84, n. 3, p. 515–517, Jan. 2000.
- [30] NOVOTNÝ, T.; VELICKÝ, B. Electronic sliding friction of atoms physisorbed at superconductor surface. *Physical Review Letters*, Woodbury, v. 83, n. 20, p. 4112–4115, Dec. 1999.
- [31] REKHVIASHVILI, S. S. The phenomenon of decrease in the friction force upon transition to the superconducting state. *Technical Physics Letters*, v. 30, n. 1, p. 4–5, 2004.

- [32] GRANATO, E.; ALA-NISSILA, T.; YING, S. C. Anomalous sliding friction and peak effect near the flux lattice melting transition. *PHYSICAL REVIEW B*, v. 62, n. 17, p. 11834 – 11837, Jan. 2000.
- [33] PERSSON, B. N. J.; NITZAN, A. Linear sliding friction: On origin of microscopic friction for xe on silver. *Surface Science*, Amsterdam, v. 367, n. 3, p. 261–275, Dec. 1996.
- [34] LIEBICH, A.; GONÇALVES, S.; KIWI, M. Electronic vs phononic friction of xenon on silver. *Physical Review B*, Woodbury, v. 60, n. 7, p. 5034–5043, Aug. 1999.
- [35] DIENWIEBEL, M. et al. Superlubricity of graphite. *Physical Review Letters*, Woodbury, v. 92, n. 12, p. 126101, Mar. 2004.
- [36] TORRES, E. A. S. *Modelo Unidimensional do Atrito em Escala Atômica: um Estudo por Dinâmica Molecular*. Tese (Tese de Doutorado) — Instituto de Física da Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Porto Alegre, Brasil, Abril 2006.
- [37] DAHMEN, S. R. et al. Macroscopic diagnostics of microscopic friction phenomena. *Physical Review E*, v. 71, p. 066602, Jun. 2005.