

Atrito em escala nanométrica: Um estudo por simulação

RODRIGO ALVES DIAS

Universidade Federal de Minas Gerais - UFMG
Instituto de Ciências Exatas - ICEx

13 de julho de 2007

Orientador: Prof. Dr. Bismack Vaz da Costa
Co-orientador: Prof. Dr. Pablo Zimmermann Coura
Laboratório de Simulação
<http://www.fisica.ufmg.br/~simula>



Sumário

- ▶ Introdução:
- ▶ Como funciona o AFM / FFM / MFM?
- ▶ Modelo de Tomlinson:
- ▶ Simulações de FFM:
- ▶ Atrito em Dispositivos Magnéticos:
- ▶ Conclusões:
- ▶ Perspectivas:

Introdução

O que é atrito?

1. Forças que se opõem ao movimento relativo de dois corpos.
2. Dissipação de energia entre duas superfícies em movimento relativo.



Teoria Clássicas de Atrito (Observações Fenomenológicas)

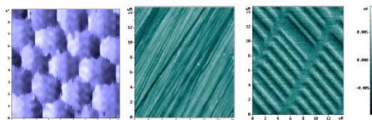
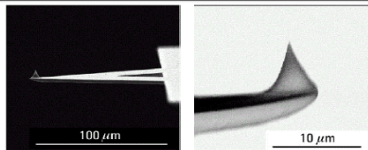
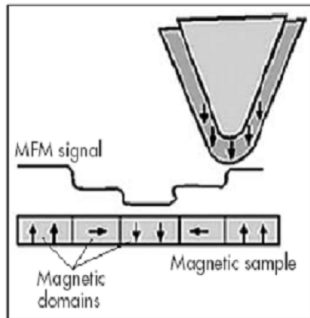
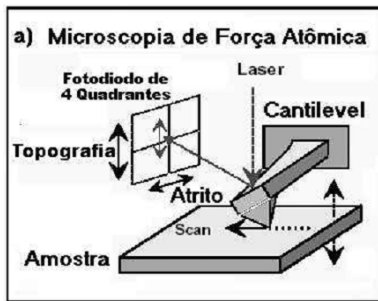
Pioneiros da tribologia:

1. Leonardo da Vinci.
2. Guillaume Amonton.
3. Charles Augustin Coulomb.

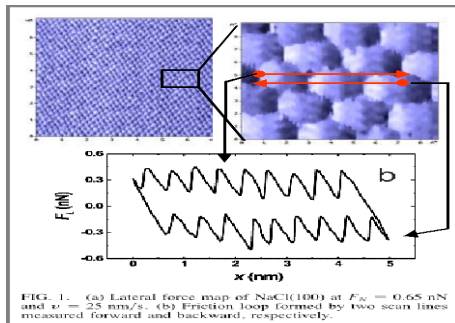
Leis Clássicas do Atrito:

1. *Independência da Área de Contato*: O atrito é independente da área de contato aparente.
2. *Lei de Amonton*: Atrito é proporcional ao peso aplicado. A razão $\mu = \frac{F_{lateral}}{F_{normal}}$ é chamada coeficiente de atrito. Sendo maior para o atrito estático do que para atrito cinético.
3. *Lei de Coulomb*: O atrito cinético é independente da velocidade.

Como funciona o AFM / FFM / MFM?



Comportamento típico de medições em FFM

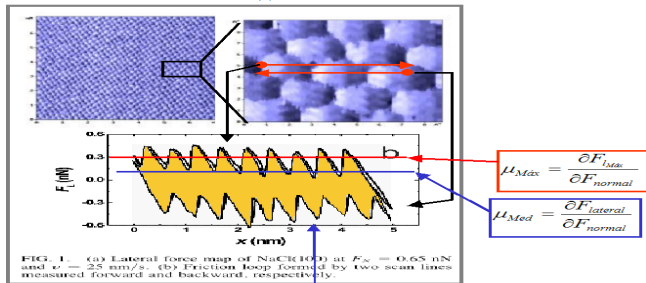


Gnecco, et. al., P.R.L. **84**(6), 2000

- ▶ Força Lateral(atrito) não nula.
- ▶ Dependência do ângulo de varredura.
- ▶ Preservação de Simetria translacional.

- ▶ Loop de histerese.
- ▶ Stick-Slip.

Comportamento típico de medições em FFM

Gnecco, et. al., P.R.L. **84**(6), 2000

Área interna do loop de histerese
Energia total dissipada

- ▶ Força Lateral(atrito) não nula.
- ▶ Dependência do ângulo de varredura.
- ▶ Preservação de Simetria translacional.

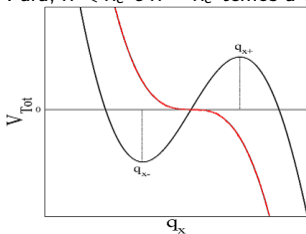
- ▶ Loop de histerese.
- ▶ Stick-Slip.

Barreira de Energia Dinâmica-1D

O potencial que a ponta sente é da forma:

$$V_{Tot}(q_x, x) = V(q_x) + \frac{\epsilon}{2}(q_x - x)^2$$

Para, $x < x_c$ e $x = x_c$ temos a curva,



Expandindo em serie de Taylor obtemos:

$$V_{Tot}(x, q_x) \approx A + B(x - x_c) + C(x - x_c)(q_x - q_{xc}) + D(x - x_c)^2 + E(q_x - q_{xc})^3 \dots$$

[1]Y. Sang et. al, Phys. Rev. Lett. **87**, 174301, (2001)

Derivando em, q_x , e igualando a zero temos:

$$q_{x\pm} - q_{xc} = \pm \left(\frac{C}{3E} \right)^{1/2} (x_c - x)^{1/2}.$$

Definiremos a barreira de energia por:

$$\Delta E(t) = V(\vec{q}_+(t)) - V(\vec{q}_-(t)).$$

Assim obtemos,

$$\Delta E \approx \frac{8}{3} \left(\frac{1}{3E} \right)^{1/2} [C(x_c - x)]^{3/2}.$$

Que pode ser simplificada para,

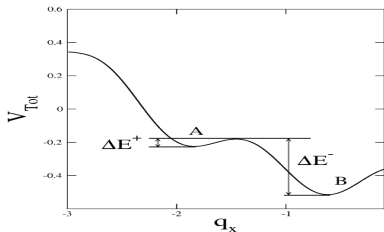
$$\Delta E(t) = \frac{1}{\lambda} (F_{xc} - f_x(t))^\alpha \cdot [1]$$

onde $\alpha = 3/2$ e $1/\lambda = 8/(3(3E)^{1/2})$.

Dependência com a Temperatura e a Velocidade

Considere a equação Mestre:

$$\frac{\partial p(A,t)}{\partial t} = \nu_0 e^{-\beta \Delta E^-} p(B,t) - \nu_0 e^{-\beta \Delta E^+} p(A,t)$$



Dado que,

$$\Delta E^- \gg \Delta E^+ \Rightarrow e^{-\beta \Delta E^-} \ll e^{-\beta \Delta E^+}$$

assim:

$$\frac{\partial p(t)}{\partial t} = -\nu_0 e^{-\beta \Delta E^+(t)} p(t)$$

e considerando que:

$$\Delta E(t) = \frac{1}{\lambda} (F_{xc} - f_x(t))^\alpha.$$

obtemos:

$$f_x = F_{xc} - \left\{ k_B T \lambda \left[\ln \left(\frac{\nu_0}{\nu} \right) - (\alpha - 1) \ln \left(1 - \frac{f_x}{F_{xc}} \right) \right] \right\}^{1/\alpha}, \quad (1)$$

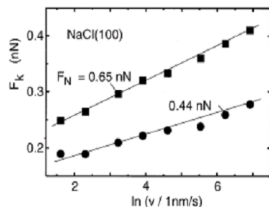
onde ν_0 , λ e ν são relacionados pela expressão: $\nu_0 = \frac{\nu_0 k_B T \lambda}{\alpha K_{eff}^x (F_{xc})^{\alpha-1}} [2]$

[2]E. Riedo et. al, Phys. Rev. Lett. **91**, 084502, (2003)

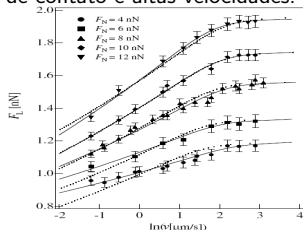
Evidencias experimentais.

$$f_x = F_{xc} - \left\{ k_B T \lambda \left[\ln \left(\frac{v_0}{v} \right) - (\alpha - 1) \ln \left(1 - \frac{f_x}{F_{xc}} \right) \right] \right\}^{1/\alpha}$$

► Persson et. al.[3], $\alpha = 1$, maiores áreas de contato e baixas velocidades.



► Sang et. al.[1], $\alpha = 3/2$, pequenas áreas de contato e altas velocidades.



Load [nN]	$\ln(v_0 [\mu\text{m/s}])$	$F^* \text{ [nN]}$	$f_0 \text{ [kHz]}$	$\beta \text{ (}\times 10^6\text{) [N}^{3/2}\text{/J]}$	$\beta_{\text{sin}} \text{ (}\times 10^6\text{) [N}^{3/2}\text{/J]}$
4	0.54 ± 0.12	1.19	53 ± 10	0.42 ± 0.01	0.22
6	0.22 ± 0.15	1.33	28 ± 6	0.6 ± 0.2	0.23
8	0.42 ± 0.09	1.56	23 ± 4	1.0 ± 0.2	0.25
10	0.34 ± 0.13	1.74	16 ± 4	1.4 ± 0.2	0.27
12	0.26 ± 0.07	1.94	13 ± 2	1.64 ± 0.01	0.29

[3]B.N.J. Persson et. al., Wear **254**, 835, (2003)

Barreira de Energia - 3D - Influência da Força Normal.

O potencial que a ponta sente é da forma:

$$V_{Tot}(\vec{q}, \vec{r}) = V(\vec{q}) + \frac{1}{2}(\vec{q} - \vec{r}) \cdot \overset{\leftrightarrow}{k} \cdot (\vec{q} - \vec{r})$$

Expandindo em serie de Taylor obtemos:

$$\begin{aligned} V_{Tot} \approx & A(x, y, z) + C_1(x - x_c)(q_x - q_{xc}) + C_2(y - y_c)(q_y - q_{yc}) + C_3(z - z_c)(q_z - q_{zc}) \\ & + \frac{E_3}{2}(q_z - q_{zc})^2 + C_{13}(q_x - q_{xc})(q_z - q_{zc}) + C_{23}(q_y - q_{yc})(q_z - q_{zc}) + \\ & \frac{E_1}{6}(q_x - q_{xc})^3 + \frac{E_2}{6}(q_y - q_{yc})^3 + \dots \end{aligned}$$

Utilizando a condição $\nabla_{\vec{q}} V_{Tot} = 0$ obtemos a seguinte forma para a barreira de energia:

$$\Delta E(t) = \frac{1}{\lambda_1(\theta)} \left[F'_{Lc}(f_z(t)) - f_L(t) \right]^{3/2}.$$

$$F'_{Lc} = \sqrt{F_{Lc}^2 + (\mu_{0x}^2 + \mu_{0y}^2)(f_z(t) - F_{zc})^2 + 2F_{Lc}(\mu_{0x} \cos(\theta) + \mu_{0y} \sin(\theta))(f_z(t) - F_{zc})}$$

$$\lambda_1(\theta) = \frac{2\frac{7}{2}}{3} \left\{ \frac{|\cos(\theta)|^{\frac{3}{2}}}{E_1^{\frac{1}{2}}} + \frac{|\sin(\theta)|^{\frac{3}{2}}}{E_2^{\frac{1}{2}}} \right\} ; \mu_{0x} = \frac{C_{13}}{E_3} ; \mu_{0y} = \frac{C_{23}}{E_3}$$

Dependência com a Temperatura, Velocidade e Força Normal

Lembrando que:

$$\frac{\partial p(t)}{\partial t} = -\nu_0 e^{-\beta \Delta E^+(t)} p(t)$$

e considerando que:

$$\Delta E(t) = \frac{1}{\lambda_1(\theta)} \left[F'_{Lc}(f_z(t)) - f_L(t) \right]^{3/2},$$

obtemos:

$$f_L = F'_{Lc}(f_z) - \left\{ k_b T \lambda_1(\theta) \left[\ln \left(\frac{v_0(f_z)}{|\varphi v_L + \kappa_{eff}^z (1-\gamma) v_z|} \right) - \frac{1}{2} \ln \left(1 - \frac{f_L}{F'_{Lc}(f_z)} \right) \right] \right\}^{2/3}$$

Definindo o coeficiente de atrito por $\mu = \frac{\partial f_L}{\partial f_z}$ obtemos:

$$\mu(t) = \gamma + (2k_b T \lambda_1)^{2/3} \frac{\left[\frac{\partial \varphi}{\partial f_z} v_L - \kappa_{eff}^z \frac{\partial \gamma}{\partial f_z} v_z \right]}{\left[\varphi v_L + \kappa_{eff}^z (1-\gamma) v_z \right]} \frac{\left\{ \ln \left(\frac{v_0}{|\varphi v_L + \kappa_{eff}^z (1-\gamma) v_z|} \right) - \frac{1}{2} \ln \left(1 - \frac{f_L}{F'_{Lc}} \right) \right\}^{2/3}}{\left\{ 1 + 3 \left[\ln \left(\frac{v_0}{|\varphi v_L + \kappa_{eff}^z (1-\gamma) v_z|} \right) - \frac{1}{2} \ln \left(1 - \frac{f_L}{F'_{Lc}} \right) \right] \right\}}$$

$$v_x = v_l \cos(\theta) ; \quad v_y = v_l \sin(\theta) ; \quad \gamma(\theta, f_z) = \frac{(\mu_{0x}^2 + \mu_{0y}^2)(f_z(t) - F_z^*) + F_{Lc}(\mu_{0x} \cos(\theta) + \mu_{0y} \sin(\theta))}{F'_{Lc}}$$

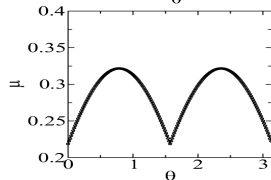
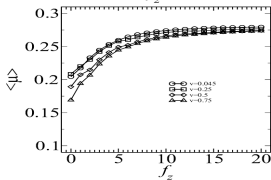
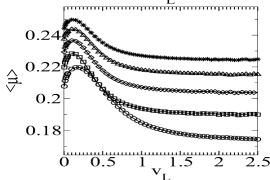
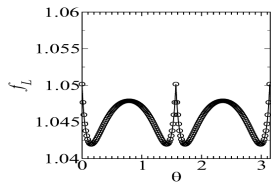
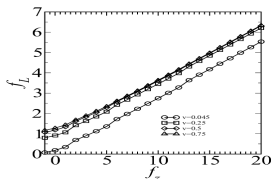
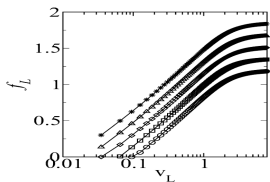
$$v_0(f_z) = \frac{2\nu_0 k_b T \lambda_1(\theta)}{3(F'_{Lc})^{1/2}} ; \quad \varphi(\theta, f_z) = \kappa_{eff}^x \cos(\theta) + \kappa_{eff}^y \sin(\theta)$$

Resultados teóricos:

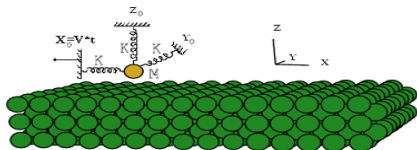
Dado um arranjo BCC(001) podemos escrever que o potencial total é:

$$V_{Tot} = \frac{1}{2} \left[(\vec{q} - \vec{r}) \cdot \vec{k} \cdot (\vec{q} - \vec{r}) \right] + U_0(q_z) + 2U_1(q_z)[\cos(G_x q_x) + \cos(G_y q_y)].$$

Assim definindo as funções U_0 e U_1 obtemos:



Simulações de FFM:



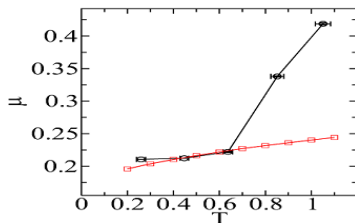
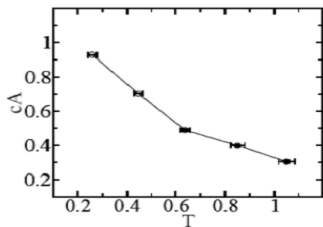
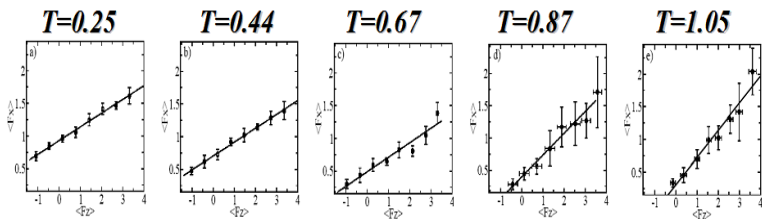
A energia de interação entre as partículas do sistema pode ser descrita pelo seguinte hamiltoniano,

$$H = \sum_{i=1}^{N1} \frac{\vec{p}_{1i}^2}{2m_{1i}} + \sum_{i=1}^{N2} \frac{\vec{p}_{2i}^2}{2m_{2i}} + U_1 + U_2 + U_{12} \quad , \quad \text{onde}$$

$$U_1 = \sum_{\langle i,j \rangle} 4\epsilon_{1ij} \left[\left(\frac{\sigma_{1ij}}{r_{1ij}} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma_{1ij}}{r_{1ij}} \right)^6 \right] \quad ; \quad U_{12} = \sum_{\langle i,j \rangle} 4\epsilon_{1i2j} \left[\left(\frac{\sigma_{1i2j}}{r_{1i2j}} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma_{1i2j}}{r_{1i2j}} \right)^6 \right]$$

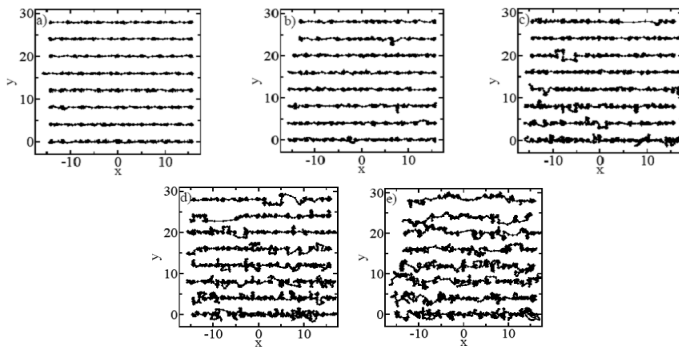
$$U_2 = \sum_{i=1}^{N2} \frac{C_m^{ext}}{2} (\vec{r}_{2i} + \vec{r}_{20i})^2$$

Resultados das simulações de FFM[4]



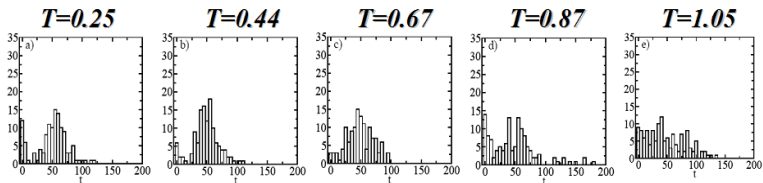
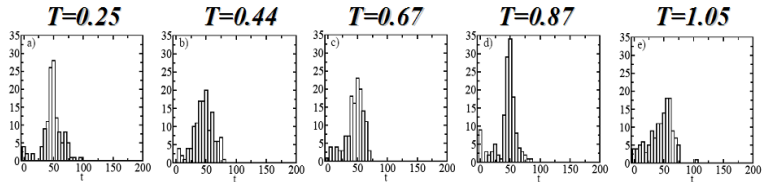
Trajetória da Ponta na Superfície:

Movie T=0.4 Pesp. Movie T=0.4 Cima ; Movie T=0.8 Pesp. Movie T=0.8 Cima

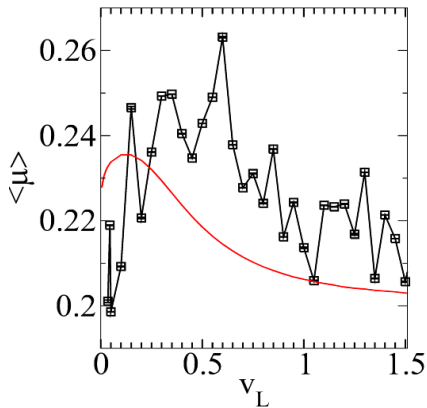
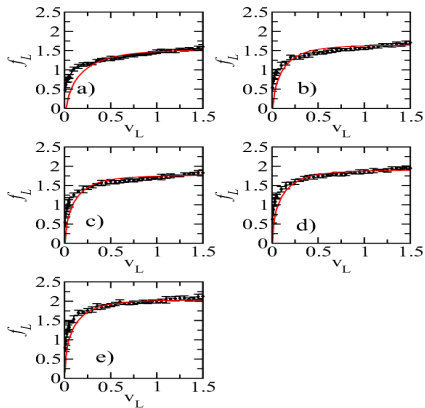


[4]R.A. Dias et. al., Brazilian Journal of Physics **36-3A**, 741-745, (2006)

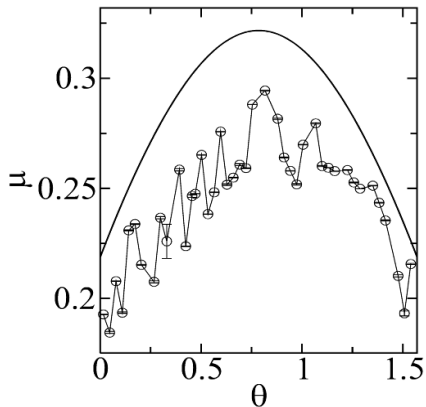
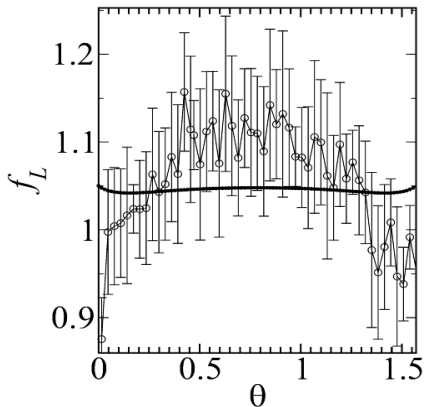
Histogramas:



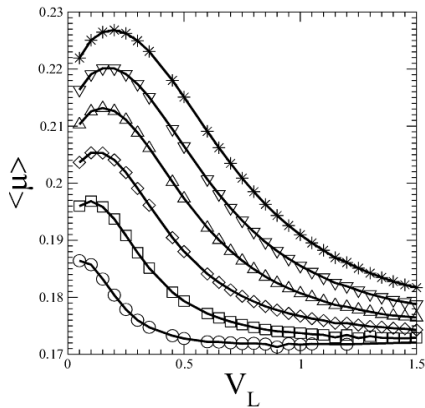
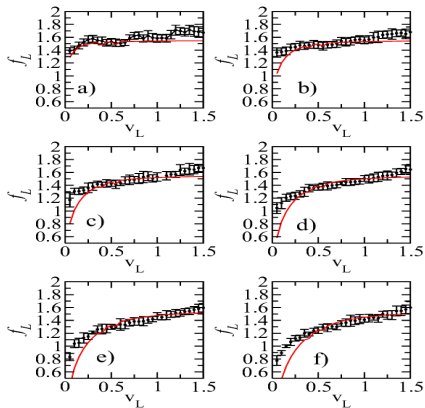
Dependência com a velocidade e força normal:



Dependência com o Ângulo de Varredura e Força Normal.



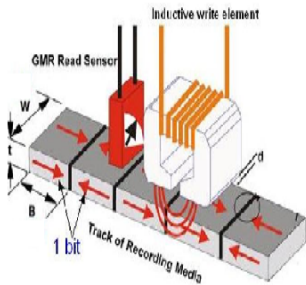
Dependência com a velocidade e a temperatura:



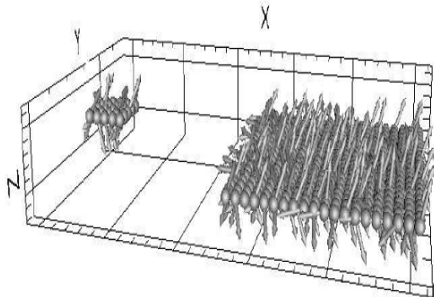
Atrito em Dispositivos Magnéticos.

Motivação:

1. Discos Magnéticos

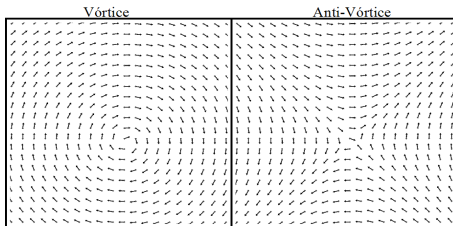


2. Esquema da Simulação



O que queremos responder?

Modelos magnéticos do tipo XY e Heisenberg anisotrópico apresentam estados com estruturas de pares de vórtices e anti-vórtices em temperaturas finitas.



Será que?

1. A energia cinética transferida para a superfície é suficiente para induzir pares de vórtice e anti-vórtice?
2. Caso seja possível a indução de vórtices, qual sua contribuição para a dissipação de energia?.

Modelo Mecânico

Considere o seguinte hamiltoniano clássico:

$$H = \sum_{i=1}^{N1} \frac{\vec{P}_{1i}^2}{2m_{1i}} + \sum_{i=1}^{N2} \frac{\vec{P}_{2i}^2}{2m_{2i}} + U_1 + U_2 + U_{12} \quad , \quad (2)$$

$$U_1 = -\frac{J}{2} \sum_{\langle i,j \rangle} (S_{1i}^x S_{1j}^x + S_{1i}^y S_{1j}^y + \lambda_1 S_{1i}^z S_{1j}^z) - \sum_{i=1}^{N1} D_1 (S_{1i}^z)^2 \quad , \quad (3)$$

$$U_2 = -\frac{J}{2} \sum_{\langle i,j \rangle} (S_{2i}^x S_{2j}^x + S_{2i}^y S_{2j}^y + \lambda_2 S_{2i}^z S_{2j}^z) - \sum_{i=1}^{N2} D_2 (S_{2i}^z)^2 \quad , \quad (4)$$

$$U_{12} = -\sum_{i,j} J_{12}(r_{1i2j}) \vec{S}_{1i} \cdot \vec{S}_{2j} \quad , \quad J_{12} = J_0 \exp(-\alpha_g (r_{1i2j} - r_0)^2). \quad (5)$$

Anisotropia cristalina de eixo e plano fácil. Anisotropia de troca de plano fácil.

1. $D_1=D_2=0.1J$ e $\lambda_1=\lambda_2=1$
2. $D_1=D_2=-0.1J$ e $\lambda_1=\lambda_2=1$

3. $D_1=D_2=0.0$ e $\lambda_1=\lambda_2=0.6$
4. $D_1=D_2=0.0$ e $\lambda_1=\lambda_2=0.9$

Efeito dos Parâmetros λ (anisotropia de troca) e D (anisotropia de sítio).

▶ $D = 0$ e $\lambda \neq 0$

1. λ controla o tipo de vórtice que é mais estável na rede, e Existe um $\lambda_c \approx 0.7J$.
2. $\lambda < \lambda_c$ a energia do vórtice será mínima quando os spins do centro do vórtice estiverem no plano(in-plane configuration).
3. $\lambda > \lambda_c$ a energia do vórtice será mínima quando os spins do centro do vórtice estiverem uma grande componente fora do plano(out-of-plane configuration).

Efeito dos Parâmetros λ (anisotropia de troca) e D (anisotropia de sítio).

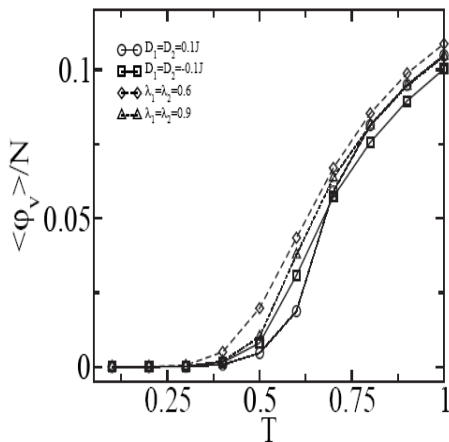
▶ $D > 0$ e $\lambda = 1$

1. Classe de universalidade de Ising.
2. Apresenta uma transição de fase de segunda, do tipo ordem desordem.
3. $D \gg \lambda \rightarrow T_c = T_c(D)$.

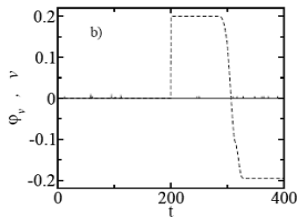
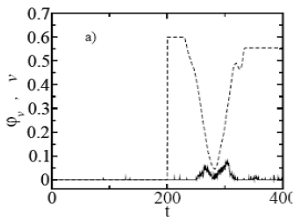
$D < 0$ e $\lambda = 1$

1. Classe de universalidade XY .
2. Apresenta uma transição de fase do tipo Berezinskii-Kosterlitz-Thouless(BKT).
3. Desligamento de pares de vórtice-anti-vórtice, sem ordem de longo alcance.
4. $D \ll \lambda \rightarrow T_{BKT} = T_{BKT}(D)$.
5. $D = \lambda = 0 \rightarrow T_{BKT} \approx 0.7$.

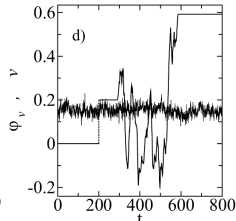
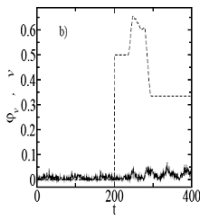
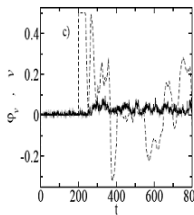
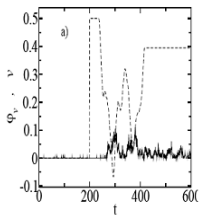
Resultados: Densidade de Vórtice como função da temperatura.



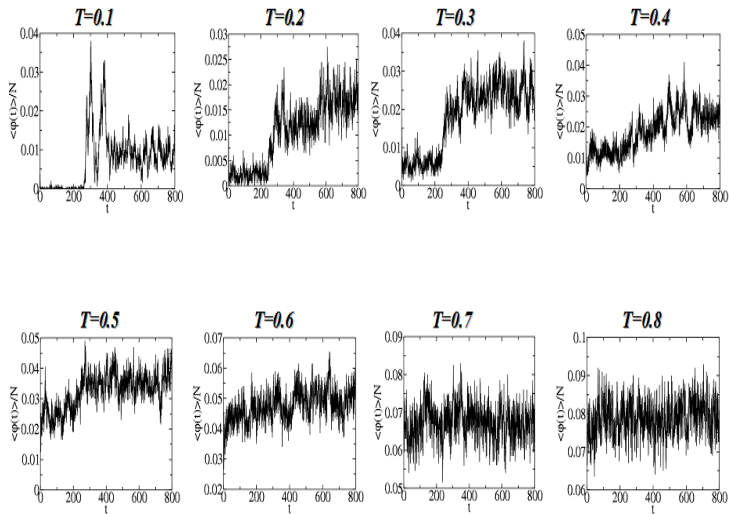
Comportamentos Interessantes



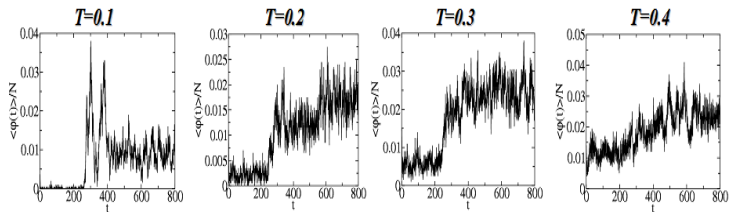
Movie T=0.1, Vista Lateral. Movie V=0.2, Vista Superior.



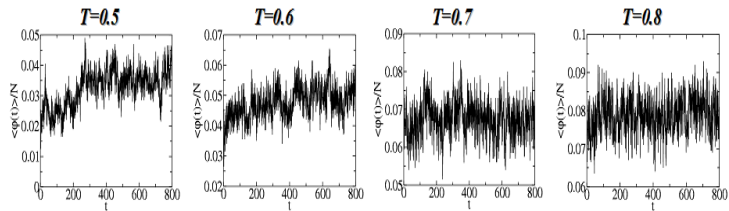
$$D_1 = D_2 = 0.1 \text{ e } \lambda_1 = \lambda_2 = 1.0$$



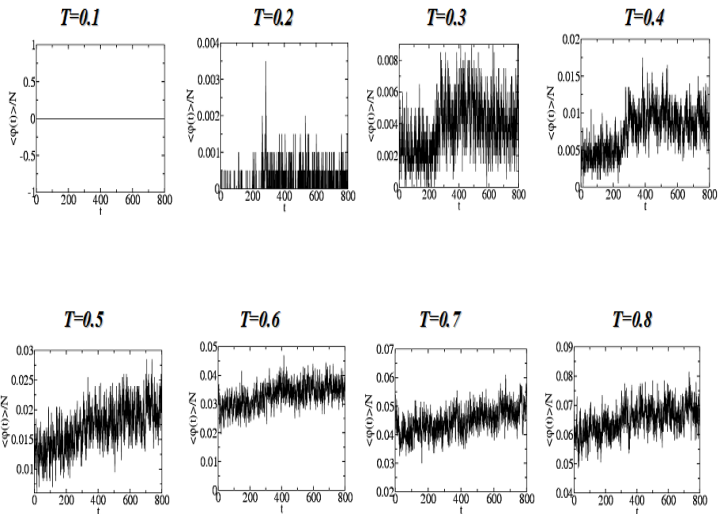
$$D_1 = D_2 = 0.1 \text{ e } \lambda_1 = \lambda_2 = 1.0$$



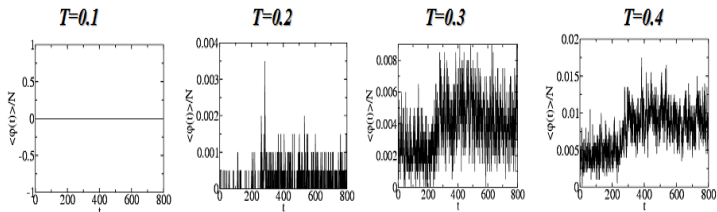
- Baixa energia de excitação dos vórtices! Movie $T=0.1, T=0.2$



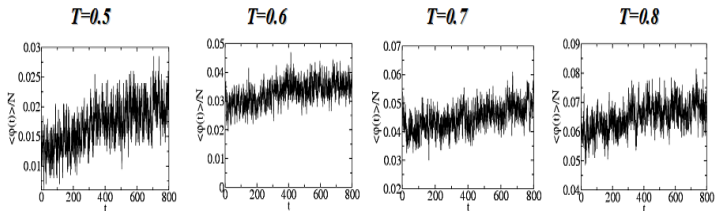
$$D_1 = D_2 = -0.1 \text{ e } \lambda_1 = \lambda_2 = 1.0$$



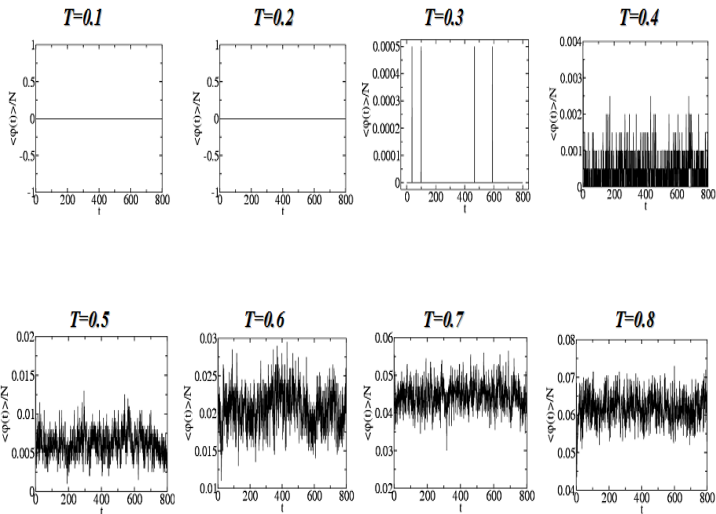
$$D_1 = D_2 = -0.1 \text{ e } \lambda_1 = \lambda_2 = 1.0$$



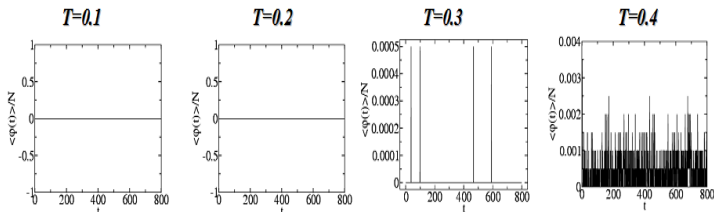
- Alta energia de excitação dos vórtices! Movie T=0.2



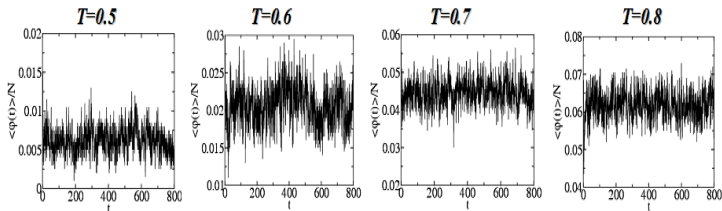
$$D_1 = D_2 = 0 \text{ e } \lambda_1 = \lambda_2 = 0.6$$



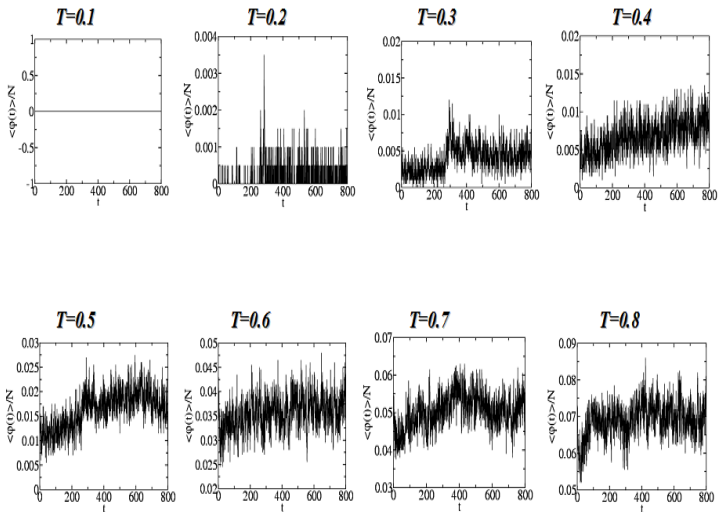
$$D_1 = D_2 = 0 \text{ e } \lambda_1 = \lambda_2 = 0.6$$



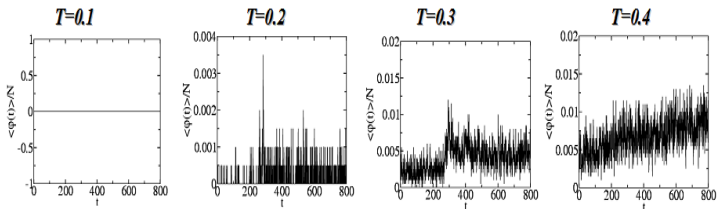
- Alta energia de excitação dos vórtices! Movie $T=0.1$, $T=0.4$



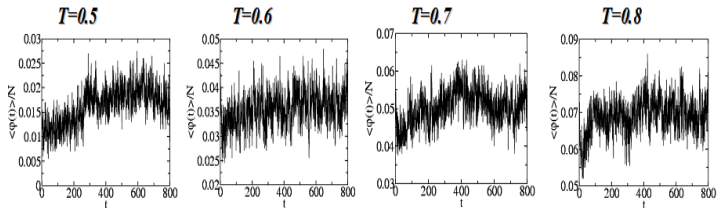
$$D_1 = D_2 = 0 \text{ e } \lambda_1 = \lambda_2 = 0.9$$



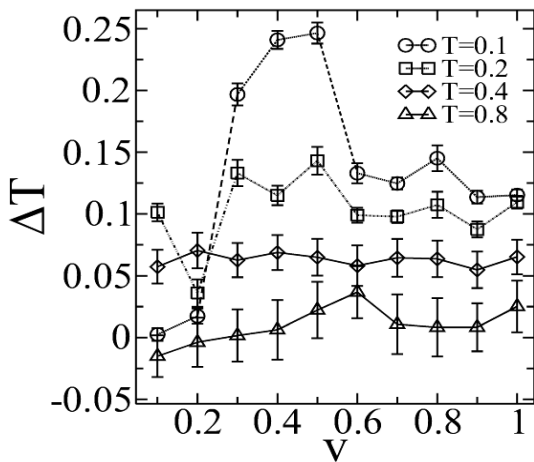
$$D_1 = D_2 = 0 \text{ e } \lambda_1 = \lambda_2 = 0.9$$



- Baixa energia de excitação dos vórtices! Movie T=0.3,



Variação da temperatura com a velocidade.



Conclusões: FFM

Observamos:

1. Dependência das forças de adesão e do coeficiente de atrito com a temperatura para um sistema adesivo, modelado pelo potencial de LJ.
2. O coeficiente de atrito \rightarrow pré-fusão da superfície (surface premelting).
3. Aumento da temperatura \rightarrow fechamento dos canais na superfície.
4. Urbakh: "Os regimes de stick e slip podem ser indicadores de diferentes estados (líquido, sólido, vítreo) de filmes confinados ou interfaces?"
5. Observamos uma assinatura do processo de pré-fusão da superfície, indicando que os processos de stick-slip podem indicar diferentes fases em interfaces.

Conclusões: Atrito em Dispositivos Magnéticos

Observamos:

1. Fortes evidências de que vórtices desempenham um papel importante nos mecanismos de dissipação entre superfícies magnéticas.
2. Para certas condições iniciais: A ponta pode oscilar, atravessar a superfície perdendo ou ganhando velocidade, ou ser repelida pela superfície
3. Na colisão quase elástica não foi observado mudança na densidade de vórtices.
4. Se a densidade de vórtices aumenta a energia cinética da ponta diminui.
5. Não há resposta instantânea entre a diminuição da energia cinética e aumento da densidade de vórtices. Suspeita de um mecanismo intermediário envolvendo excitações de ondas de spin.

Perspectivas:

Com relação às simulações de dispositivos magnéticos existem alguns pontos interessantes para se estudar:

1. Qual o efeito de forças normais aplicadas ao sistema ?
2. Como os efeitos observados acima dependem da área de contato entre as superfícies?
3. Qual o efeito do acoplamento de modos magnéticos com vibrações da rede?
4. Qual a contribuição de graus de liberdade magnético no modelo teórico para as forças de atrito?

Agradecimentos!

Agradeço carinhosamente à,

- ▶ Meu Pai, minha mãe e toda a minha família, por todo o apoio e compreensão!!
- ▶ Ao Bismarck, pelo apoio e competência como orientador!
- ▶ A minha namorada, Pricila, que esteve sempre ao meu lado!
- ▶ A todos os amigos, amigas e funcionários da UFMG que me ajudaram durante todos estes anos!

Fim!!

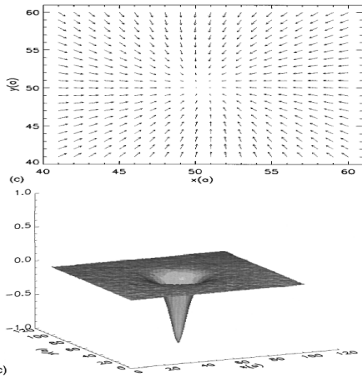
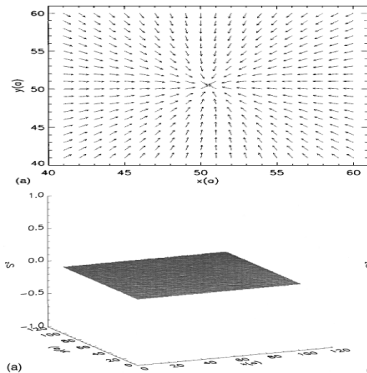
▶ Fim!!

Fim!!

- ▶ Play sound-1!
- ▶ Play sound-2!

Vórtice mais estável!

Componentes de Spin do plano para uma rede quadrada.

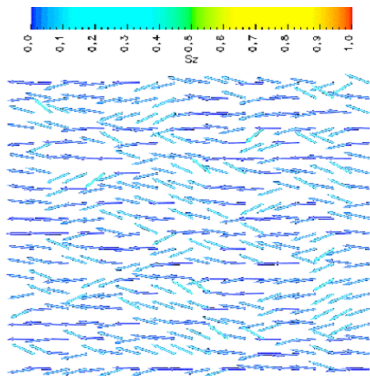
[▶ Retornar!](#)1. $\lambda = 0.7$ 2. $\lambda = 0.9$ 

Vórtice mais estável!

Componentes de Spin do plano para uma rede quadrada.

[▶ Retornar!](#)

1. $D < 0$



2. $D > 0$

