

Atrito em escala nanométrica
Um estudo por simulação

RODRIGO ALVES DIAS

Maio de 2007

Atrito em escala nanométrica
Um estudo por simulação

RODRIGO ALVES DIAS

Orientador: Prof. Dr. Bismarck Vaz da Costa

Co-orientador: Prof. Dr. Pablo Zimmermann Coura

Tese apresentada à
UNIVERSIDADE FEDERAL DE MINAS GERAIS,
como requisito parcial para a obtenção do grau de
DOUTOR EM CIÊNCIAS.

Maio de 2007

Pensamentos

Eu sou aquilo que
atravessa grades,
move montanhas.
Possuo toda a força e
leveza.

Eu sou o Pensamento,
Sou as idéias em movimento.

Agradecimentos

Ao Bismarck, por sua dedicação e competência como orientador.

Ao Pablo, por sua dedicação e competência como co-orientador.

Aos meus irmãos Rômulo e Rogério(Em Memória).

A Priscila que em muito me ajudou nos momentos difíceis.

A todos os meus tios(as), primos(as) e parentes em geral.

Aos colegas do Grupo de simulação Flávio, Anderson, Marcela, Mol, Julio e todos os alunos de iniciação científica, pela ajuda e paciência .

Aos funcionários do departamento de Física, pessoal das secretarias e bibliotecárias, em especial Marluce, Edina e Perpétua.

A todos os professores que ajudaram na minha formação na UFMG e UCB em especial ao Prof. Dr. Paulo Eduardo de Brito e Prof. Dr. Araken Verneck

Ao professor Ricardo Vagner pela ajuda e disposição.

Aos irmãos Luiz Gustavo, Cabelo, Philippe, Braulio, Lauro, Arapiraca, Damião, Marquim, Mário, Custela, dentre outros.

Às amigas Mariana, Madá, Julia.

Ao pessoal da lama: Gordinho, Thiago e Ana Júlia, Lets , Pará, Schneider, Herildo, Breno, Álvaro, Humberto, Claudião, Indhira, Moisés, Rafael, Clarissa, Gabriela, Mancebo, Vinícius, Alex, Alexandre, Miquita e outros que eu porventura tenha esquecido.

Aos colegas da pós-graduação.

Ao CNPq, que financiou este trabalho.

Resumo

Nesta tese estudamos o fenômeno do atrito, em escalas nanométricas, sob aspectos como a influência da temperatura, velocidade, forças normais e a contribuição de graus de liberdade magnéticos. Nosso trabalho tem duas vertentes principais:

Na primeira parte do trabalho propomos um modelo tri-dimensional para descrever as forças de atrito. Esse novo modelo tem como ponto de partida os trabalhos anteriores de Gnecco, Riedo e Sang et. al. [40, 41, 42, 43] e inclui a dependência das forças normais. Com isso conseguimos definir de forma consistente o que chamamos de coeficiente de atrito dinâmico. A eficácia do modelo é comprovada utilizando-se simulações de dinâmica molecular e resultados experimentais.

Na segunda parte, procuramos determinar qual a contribuição de graus de liberdade magnéticos para o atrito. Este ponto é importante quando se trata do movimento relativo de duas superfícies magnéticas como é o caso de leitoras de discos e fitas magnéticas. Suspeitamos que quando duas superfícies magnéticas se deslocam próximas umas à outra, vórtices são desenvolvidos nas respectivas superfícies, como um mecanismo de dissipação. Para estudar este fenômeno simulamos duas redes magnéticas que podem se deslocar, uma relativa a outra. Usando dinâmica de spins e dinâmica molecular, fazemos a evolução temporal do sistema, calculando as grandezas de interesse a cada passo de tempo.

Abstract

In this tese we study the friction phenomenon in nanometric scale under certain aspects such as: the temperature, normal applied force, velocity and the contributions of magnetic degrees of freedom. Our work has two main sources:

In the first part of the work we consider a three-dimensional model to describe the friction forces. This new model has as starting point the previous works of Gnecco, Riedo and Sang et. al.[40, 41, 42, 43] and includes the dependence of the normal forces. With this we obtain to define of consistent form what we call coefficient of dynamic friction. The effectiveness of the model is proven using molecular dynamics simulations and experimental results.

In the second parte of this work, we intended to determine the influence of magnetic degrees of freedom on the friction. This is an important point when, we are dealing with two magnetic surfaces in relative movement, as in case of magnetic records and ribbons readers. We suspect that when two magnetic surfaces dislocate close to one another, vortices are developed in the respective surfaces, as a waste mechanism. To study this phenomenon we simulate two magnetic nets that can be dislocated, one relative to another. Using Classical Spin Dynamics and Molecular Dynamics we have made the system temporal evolution, calculating the important physical quantities in each time step.

Conteúdo

PENSAMENTOS	i
AGRADECIMENTOS	ii
RESUMO	iii
ABSTRACT	iv
1 Introdução, Motivação e Modelos Teóricos	1
1.1 Introdução	1
1.1.1 Observações Fenomenológicas ou Teorias Clássicas de Atrito	2
1.2 Motivação - Atrito e Desgaste	6
1.2.1 “Ploughing”	6
1.2.2 Atrito Sem Desgaste	7
1.3 Visão Moderna do Atrito	8
1.3.1 Microscopia por Força Atômica-AFM	8
1.3.2 Microscopia por Força de Atrito - FFM	10
1.3.3 Microscopia por Força Magnética - MFM	14
1.4 Modelos Teóricos - Análise moderna do Mecanismo de Tomlinson	17
1.4.1 Modelo de Tomlinson Unidimensional-MTU	18
1.4.2 Modelo de Tomlinson Bidimensional - MTB	21
1.4.3 Dependência com a Velocidade e Temperatura	23
1.4.4 Análise qualitativa para as taxas de transições entre regiões de estabilidade	24
1.4.5 Definição da barreira de energia.	27
1.4.6 Cálculo das forças de atrito baseado no MTU.	27

1.4.7	Dependência da barreira de energia com a força normal e influência nas forças de atrito.	29
1.4.8	Cálculo dos Parâmetros para a Modelo Analítico	34
2	Dinâmica Molecular(DM)	41
2.1	Introdução - Simulações Atômicas.	41
2.2	Condições de Contorno	42
2.3	Divisão Celular	42
2.4	Tabela de Vizinhos de Verlet	43
2.5	Configuração Inicial	44
2.6	Algoritmo de Integração Numérica	46
2.7	Controle de Temperatura	47
2.7.1	Renormalização de Velocidades	47
2.8	Potenciais de Interação	48
2.8.1	Potencial (12-6) de Lennard-Jones(LJ)	48
2.8.2	Corte em Potenciais - Potencial (12-6) LJ Modificado	49
2.9	Unidades Reduzidas	50
3	Simulação de Microscopia por Força de Atrito-FFM	52
3.1	Simulação de uma Superfície.	52
3.1.1	Termodinâmica.	52
3.2	Detalhes da simulação de FFM	53
3.3	Resultados da Simulação de FFM.	55
3.3.1	Dependência com a Temperatura e Força Normal	55
3.3.2	Dependência com a Velocidade e Força Normal	63
3.3.3	Dependência com a Temperatura e Velocidade.	65
4	Atrito em Dispositivos Magnéticos	67
4.1	Movimento Relativo entre duas Superfícies Magnéticas	74
4.1.1	Resultados das Simulações	76
5	Conclusões e Perspectivas.	85
5.1	Conclusões para as simulação de FFM.	85

5.2	Conclusões para as simulação de Atrito em Dispositivos Magnéticos.	86
5.3	Perspectivas	87
A	Apêndice	88
A.1	Programa	88
A.2	Gráficos da Força de atrito como função do tempo.	89
A.3	Artigos Publicados	94
A.4	Artigos a serem Submetidos	94

Lista de Figuras

1.1	Modelo baseado nas irregularidades das superfícies propostas por Leonhard Euler.	3
1.2	O mecanismo de Ploughing(a),similar a um processo de litografia(b).[1, 2]	6
1.3	(a) Desenho esquemático do princípio de funcionamento da técnica de AFM. O fotodetector monitora a deflexão da alavanca durante a varredura através da mudança na reflexão de um feixe de Laser incidente. (b) Curva esquemática mostrando a dependência da força de interação sonda-amostra em função da separação entre elas. Note que esta curva se assemelha bastante a uma curva de força derivada de um potencial (12-6) de Lennard-Jones(Capítulo 2)[1].	9
1.4	Figura ilustrativa dos modos de operação do aparato da AFM.[2]	9
1.5	(a) Desenho esquemático do princípio de funcionamento da técnica de FFM.[18]	10
1.6	Força de atrito como função da posição x do cantilever(Esquerda) e geralmente conhecido como, Loop de força de atrito. Força normal como função da posição z do cantilever(Direita) e geralmente conhecido como, Loop de força normal.	11
1.7	Posição de equilíbrio, (q_x,x) (esquerda) e a troca dos eixos (x,q_x) (direita) para $c < c_{crit}$ (linha cheia) e $c > c_{crit}$ (linha pontilhada). Perceba que para $c < c_{crit}$ no gráfico de (x,q_x) , não podemos definir uma função $q_x = f(x)$	19
1.8	A relação $V_{Tot}(x)$ comparado com a relação $q_x(x)$ para $c < c_{crit}$ (esquerda) e $c > c_{crit}$ (direita). A continuação instável de $q_x(x)$ e $V_{Tot}(x)$ é mostrada (Linha Pontilhada). O contorno da energia é mostrado em uma varredura para a direita na linha cheia. Saltos ocorrem na posição $dx(q_x)/dq_x = 0$	20
1.9	Mapeamento $(q_x, q_y) \mapsto (x(q_x, q_y), y(q_x, q_y), V_{Tot}(q_x, q_y))$ para $c < c_{crit}$ (esquerda) e $c > c_{crit}$ (direita). Os pontos em verde representam as posições críticas em que a equação (1.28) é satisfeita.	24

1.10	Potencial Total(V_{Tot} , definido pela eq. 1.16) e potencial de interação ponta-substrato(V_{Sub} , definido pela equação. 1.17), usado no modelo de Tomlinson Unidimensional em quatro diferentes posições do cantilever. Note que à medida que o cantilever se move para a direita(1 \rightarrow 4), a barreira de energia que impede um salto irreversível diminui até que a partícula salta para o próximo mínimo e o processo se repete.[1]	25
1.11	Potencial V_{Tot} usado no modelo de Tomlinson.	26
1.12	Figura ilustrativa para os pontos de máximo e mínimo do potencial próximos do ponto crítico. .	29
1.13	Os parâmetros $\mu_{0x} = \mu_{0y} = \mu_0$ (esquerda), λ_1 (centro) e $U_{int}(\vec{q}_{ } = (a_1, a_1), q_z)$ (direita) como função de q_z para $\theta = 0$, $\sigma_{ts} = 1.2\sigma_{ss}$, $\varepsilon_{ts} = 0.5\varepsilon_{ss}$ (linha cheia) , $0.1\varepsilon_{ss}$ (linha pontilhada). . .	37
1.14	Força de atrito(esquerda) e coeficiente de atrito(direita) como função da velocidade para diferentes valores da força normal definidos pelas equações (1.63) e (1.65). (\circ) $f_{N1} < (\square)f_{N2} < (\diamond)f_{N3} < (\Delta)f_{N4} < (*)f_{N5}$	38
1.15	Resultados experimentais apresentados por <i>Riedo et.al.</i> [42] para a força de atrito como função do logaritmo da velocidade para diferentes valores da força normal. Os pontos são os resultados experimentais e as linhas são os ajustes baseados no modelo unidimensional apresentado nas seções anteriores.	39
1.16	Força de atrito(esquerda) e coeficiente de atrito(direita) como função da força normal para 4 diferentes valores da velocidade, $v = 0.45(\circ)$, $0.25(\square)$, $0.5(\diamond)$ e $0.75(\Delta)$	39
1.17	Dependência da força de atrito(esquerda) e do coeficiente de atrito(direita) como função do ângulo de varredura θ relativo à direção (100) da rede.	40
2.1	Esquema ilustrativo do método de Divisão Celular em conjunto com o método de Tabela de Vizinhos de Verlet.	44
2.2	Ilustração dos 14 tipos de redes de Bravais.(1) Triclínica simple, (2) Monoclínica simples,(3) monoclínica de base centrada, (4) Ortorrômbica simples, (5) Ortorrômbica de base centrada, (6) Ortorrômbica de corpo centrado, (7) Ortorrômbica de face centrada, (8) hexagonal,(9) Romboédrica, (10) tetragonal simples, (11) tetragonal de corpo centrado, (12) cúbica simples, (13) cúbica de corpo centrado(BCC) e (14) cúbica de face centrada(FCC)	45
2.3	(Esquerda) Potencial LJ sem modificação. (Direita) Potencial LJ com modificação.	50
3.1	Energia como função da temperatura para a simulação com condições de contorno abertas em x , y e z . A temperatura de fusão é estimada como o ponto de inflexão sendo $T_m \approx 1.1$	53
3.2	Visão esquemática de nosso aparato de simulação.	54

3.3	A figura mostra a força de atrito, $\langle F_x \rangle$ como função da força normal, $\langle F_z \rangle$ para várias temperaturas. A força $\langle F_x \rangle$ e $\langle F_z \rangle$ são medidas em unidades de ϵ_1/σ_1 . As figuras, <i>a, b, c, d, e</i> são para os valores de $T = 0.25, 0.44, 0.67, 0.85, 1.05$ respectivamente. Os círculos são nossos resultados de MD e as linhas correspondem a um ajuste linear.	56
3.4	Plot de cA (esquerda) e μ (direita) como função da temperatura. A linha é somente um guia para os olhos, os pontos com símbolos circulares(\circ) são os resultados das simulações de MD e os pontos com símbolos quadrados(\square) é a previsão teórica.	57
3.5	Caminho percorrido pela ponta sobre a superfície (plano xy) para varias temperaturas e forças normais. De a) até e) nos temos $T = 0.25, 0.44, 0.67, 0.85, 1.05$ respectivamente. As forças normais são definidas na fig. 3.3. Os gráficos foram mostrados deslocados por um valor constante na direção y para melhor visualização.	59
3.6	Histograma para o tempo de residência. As forças normais são respectivamente $F_z = -1.09, -1.02, -0.95, -0.42, -0.14$	60
3.7	Histograma para o tempo de residência. As forças normais são respectivamente $F_z = 2.05, 2.09, 2.13, 2.52, 2.56$	61
3.8	Força de atrito como função da velocidade para várias normais. De a) até e) termos respectivamente $\langle f_z \rangle \sim 0.95, 1.54, 2.25, 2.75, 2.50$. Os pontos são os resultados da simulação e a linha são as previsões teóricas.	63
3.9	Coefficiente de atrito médio como função da velocidade, calculado a partir da figura 3.8. Os pontos são os resultados da simulação e a linha é a previsão teórica.	64
3.10	Força de atrito como função da velocidade para várias temperaturas, onde resultados da simulação são os pontos e a previsão teórica são as linhas. Os resultados de a) até f) correspondem respectivamente para $T = 0.1, 0.2, 0.3, 0.4, 0.5, 0.6$	65
3.11	coeficiente de atrito médio como função da velocidade para várias temperaturas. Nesta figura, as linhas são apenas guias para os olhos, e os pontos são as previsões teóricas. Os resultados são respectivamente, (\circ) $T = 0.1$, (\square) $T = 0.2$, (\diamond) $T = 0.3$, (\triangle) $T = 0.4$, (∇) $T = 0.5$, ($*$) $T = 0.6$	66
4.1	Visão esquemática de um vórtice (esquerda) e um anti-vórtice (direita) para spins que tenham o mesmo tamanho.	70

4.2	Visão esquemática de nosso arranjo computacional. A cabeça é simulada como uma rede 5×5 de partículas rígida cada uma com seu respectivo spin \vec{S} . A superfície é simulada com um arranjo similar ao da cabeça, porém de tamanho 20×20 . A cabeça pode deslizar sobre a superfície com velocidade inicial $v = v_0 \hat{x}$. Usamos condições de contorno periódicas nas direções dos planos e as setas representam os spins.	71
4.3	Densidade de vórtices como função da temperatura.	77
4.4	Densidade de vórtices como função do tempo para $D_1 = D_2 = 0.1J$ e $\lambda_1 = \lambda_2 = 1$. Os gráficos da esquerda para a direita e de cima para baixo correspondem às temperaturas $T = 0.1, 0.2, 0.3, 0.4, 0.5, 0.6$. O sistema tem simetria fora do plano(out-of-plane symmetry).	78
4.5	Densidade de vórtices como função do tempo para $D_1 = D_2 = -0.1J$ e $\lambda_1 = \lambda_2 = 1$. As temperaturas são as mesmas da figura 4.4. O sistema tem simetria no plano(in-plane symmetry).	79
4.6	Densidade de vórtices como função do tempo para $\lambda_1 = \lambda_2 = 0.6$ e $D_1 = D_2 = 0$. As temperaturas são as mesmas da figura 4.4. Os vórtices tem estrutura plano(in-plane structure).	80
4.7	Densidade de vórtices como função do tempo para $\lambda_1 = \lambda_2 = 0.9$ e $D_1 = D_2 = 0$. As temperaturas são as mesmas da figura 4.4. Os vórtices tem estrutura fora do planar(out-of-plane structure).	81
4.8	Velocidade instantânea e densidade de vórtices como função do tempo para $D_1 = D_2 = 0.1J$ e $\lambda_1 = \lambda_2 = 1$. A linha cheia é a densidade de vórtices e a linha tracejada é a velocidade instantânea da cabeça. A temperatura para a figura a) é $T = 0.1$ e para as figuras b) e c) é $T = 0.2$. A velocidade inicial é $v = 0.5$ em todos os casos.	82
4.9	Velocidade instantânea e densidade de vórtices como função do tempo para $D_1 = D_2 = 0.1J$ e $\lambda_1 = \lambda_2 = 1$. A linha cheia é a densidade de vórtices e a linha tracejada é a velocidade instantânea da cabeça. A temperatura é $T = 0.2$ em ambos os casos. Nas figuras a) e b) as velocidades iniciais são respectivamente, $v = 0.6, 0.2$	83
4.10	Variação da temperatura como função da velocidade para várias temperaturas iniciais e $D_h = D_s = 0.1J$	84
A.1	Força atrito(F_x) como função do tempo para vários valores de força normal($\langle F_z \rangle$).A temperatura é $T = 0.2$	89
A.2	Força atrito(F_x) como função do tempo para vários valores de força normal($\langle F_z \rangle$).A temperatura é $T = 0.4$	90
A.3	Força atrito(F_x) como função do tempo para vários valores de força normal($\langle F_z \rangle$).A temperatura é $T = 0.6$	91

A.4	Força atrito(F_x) como função do tempo para vários valores de força normal($\langle F_z \rangle$).A temperatura é $T = 0.8$	92
A.5	Força atrito(F_x) como função do tempo para vários valores de força normal($\langle F_z \rangle$).A temperatura é $T = 1.0$	93

Capítulo 1

Introdução, Motivação e Modelos Teóricos

1.1 Introdução

Forças de atrito têm um importante papel em diversos fenômenos [1, 2, 3, 4]. Com um pouco de cuidado podemos perceber sua importância em áreas tão distintas quanto geologia e biologia. Em tecnologia, o desenvolvimento de superfícies duráveis com baixo atrito e filmes lubrificantes tornaram-se um importante fator na miniaturização de componentes móveis para várias aplicações. É conveniente lembrar que técnicas tribológicas e de lubrificação convencionais, usadas para objetos macroscópicos, podem ser ineficientes em escalas nanométricas e requerem novos métodos de controle.

Em nível conceitual e teórico, recentes avanços revelaram a enorme complexidade de processos tribológicos, aparentemente simples[5, 6, 7]. O atrito está intimamente relacionado à adesão e desgaste, requerendo um entendimento de processos altamente fora do equilíbrio a nível molecular[8]. Superfícies podem ser lisas ou rugosas, duras ou macias, elásticas, viscoelásticas ou plásticas, quebradiças ou dúcteis e de diferentes tipos de elementos.

Sob o ponto de vista teórico, simulações em computadores vêm desempenhando um importante papel no entendimento de processos tribológicos[9]. Estes tornam possível realizar, “experimentos numéricos” controlados, onde a geometria, condições de deslizamento e interações entre átomos podem ser modificados à von-

tade para explorar seus efeitos no atrito, lubrificação e desgaste. Esta poderosa ferramenta nos possibilita seguir e analisar a dinâmica completa de todos os átomos. Sob o ponto de vista puramente analítico não existe, em geral, uma teoria para analisar processos como atrito e desgaste, por serem constituídos por processos fora do equilíbrio. Não há, por exemplo, um princípio como minimização da energia livre que determine o estado estacionário de sistemas fora do equilíbrio. Portanto, simulações são de grande ajuda para o estudo destes fenômenos.

1.1.1 Observações Fenomenológicas ou Teorias Clássicas de Atrito

O atrito desempenha um importante papel em nossa experiência diária, por exemplo, no deslocamento de um carro ou em nosso caminhar. Assim, é natural que, durante séculos, se procurasse um entendimento minucioso sobre este fenômeno. Os grandes pioneiros da tribologia, Leonardo da Vinci, Guillaume Amontons e Charles Augustin Coulomb [1], enunciaram três leis fenomenológicas:

- Independência da área de Contato
O atrito é independente da área de contato aparente.
- Lei de Amonton
Atrito é proporcional ao peso aplicado. A razão $\mu = \frac{F_{lateral}}{F_{normal}}$ é chamada coeficiente de atrito, e esta é maior para atrito estático do que para atrito cinético.
- Lei de Coulomb
O atrito cinético é independente da velocidade.

Estas três leis fundamentais do atrito, que são baseadas em experimentos macroscópicos, não são completamente entendidas em termos de processos micro ou nanoscópicos mais fundamentais.

O primeiro estudo sistemático a respeito de atrito foi feito por Leonardo da Vinci (1452-1519). Ele fez medidas da força necessária para deslizar uma massa M , sobre uma superfície inclinada, medindo o ângulo α , definido como aquele no instante que o corpo começa a deslizar. Com isso fez duas importantes observações: 1) Concluiu que a força de atrito dobrava quando o peso dobrava, o que queria dizer, $F \propto L$; e 2) Concluiu que a força de atrito era independente da largura e

do tamanho da superfície, logo F era independente da área de contato aparente, A , entre as superfícies deslizantes.

Dois séculos depois de da Vinci o Físico francês Guillaume Amontons (1663-1705) considerou o problema do atrito outra vez, e usando molas para medir a força lateral, ele confirmou as observações feitas anteriormente por da Vinci e conseguiu diferenciar atrito estático de cinético. No entanto, alguns autores[1] afirmam que Amontons não tinha consciência da diferença entre os dois fenômenos de fricção.

Outra importante personalidade, muito pouco conhecido por seus trabalhos no campo da física de atrito, mais famoso por seus trabalhos em matemática foi o cientista Leonhard Euler (1707-1783). Ele encontrou uma solução analítica, após os estudos do mecanismo de deslizamento de um corpo em um plano inclinado (baseado nos experimentos de Leonardo Da Vinci), onde atribuiu à rugosidade das superfícies a causa da existência do atrito. A figura abaixo ilustra de maneira exagerada o modelo que Euler propôs sobre as irregularidades das superfícies:

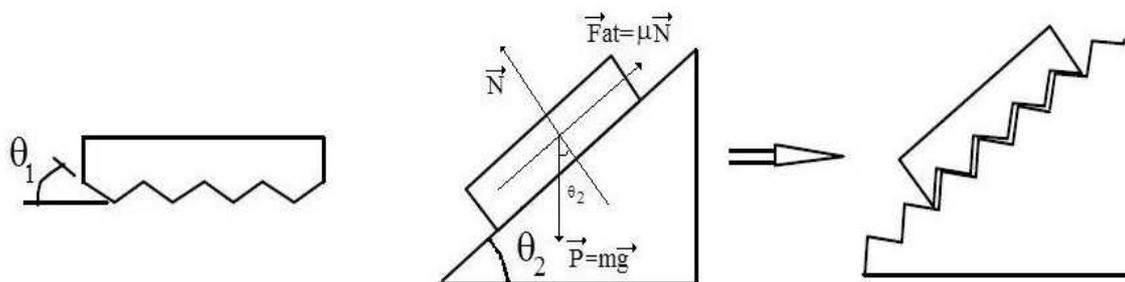


Figura 1.1: Modelo baseado nas irregularidades das superfícies propostas por Leonhard Euler.

Ao colocar um bloco sobre um plano inclinado, Euler imaginava que o “emaranhamento” entre as superfícies impediam que o bloco deslizesse, ou seja, a força de atrito resulta da força gravitacional, onde o próprio atrito minimiza a energia potencial do objeto na extremidade do plano inclinado. A partir deste modelo, ele pode prever que o bloco estaria na iminência de deslizar quando uma das “faces” das irregularidades estivesse na horizontal baseado em uma relação geométrica entre o ângulo de inclinação do plano θ_2 e o ângulo de inclinação dos serrilhamentos θ_1 .

Com isso ele previu que, o deslizamento acontece quando θ_2 for maior que θ_1 (em qualquer uma das duas superfícies) e assim ele concluiu que o coeficiente de atrito seria proporcional à tangente do ângulo θ_2 . Pode-se chegar às mesmas conclusões que Euler chegou nos baseando nas Leis de Newton e no equilíbrio de forças. Logo, se θ_2 é o ângulo que o plano inclinado faz, relativo a horizontal, e m a massa do objeto, então a força normal realizada pela gravidade é $F_N = mg \cos \theta_2$ (Ver figura 1.1). O objeto começa a deslizar quando a força tangencial $mg \sin \theta_2$ excede a força de atrito estática F_s . Logo, se o ângulo em que o deslizamento se inicia é θ_s , então $F_s = mg \sin \theta_s = F_N \tan \theta_s$ e assim, $\mu_s \equiv \frac{\partial F_s}{\partial F_N} = \tan \theta_s$. Com seus estudos Euler foi a primeira pessoa a concluir que, deveria haver distinção entre atrito estático e cinético, sendo que, o estático é sempre maior que o cinético.

Um nome bastante importante no estudo do atrito entre sólidos é Charles Augustin Coulomb (1736-1806). Engenheiro de formação, foi principalmente físico, e mundialmente conhecido por seus trabalhos sobre Eletricidade e o Magnetismo. Coulomb que não tinha interesse apenas no estudo do coeficiente de atrito, estudou também a dependência temporal da força de atrito estática com o tempo de repouso entre as superfícies. Ele encontrou um aumento da força de atrito com o tempo de repouso e fez uma descrição matemática do fenômeno. Seus maiores resultados foram publicados no “Essai sur théorie du frottement”, geralmente referido como as “Leis do Atrito de Coulomb”. Dentre seus trabalhos se destaca o trecho:

“Para madeira sobre madeira ou metal sobre metal, em condições secas, a velocidade tem muito pouco efeito no atrito cinético, mas no caso de madeira sobre metal o atrito cinético aumenta com a velocidade.”

Sua afirmativa que destaca a independência do atrito cinético com a velocidade é conhecido hoje em dia como a “Lei de Coulomb”.

Como já comentado, o coeficiente de atrito foi inicialmente definido pela razão entre a força lateral (atrito) F_L e pela força normal (externamente aplicada) F_N [10],

$$\mu \equiv \frac{F_L}{F_N} \quad (1.1)$$

ou

$$\mu' \equiv \frac{\partial F_L}{\partial F_N} \quad (1.2)$$

Na primeira definição, $F_L = 0$ em $F_N = 0$; i.e., a força de atrito é zero em força normal zero, enquanto na segunda definição, a força de atrito pode ser finita quando

a força normal é zero e o coeficiente de atrito é dado pela inclinação da curva de força de atrito \times força normal. A equação 1.2 é mais abrangente pois é uma definição local de coeficiente de atrito. Como veremos nas próximas sessões, esta quantidade não é uma constante pois, depende do tipo de material, e toma diferentes valores para diferentes condições (Por exemplo: umidade, morfologia, temperatura, velocidade e etc...) das superfícies deslizantes.

Como um exemplo de aplicação destas equações, alguns autores (Veja referências em [10].) baseados em observações experimentais propuseram a seguinte forma para a força atrito,

$$F_L = \mu_0(F_{N0} + F_N).$$

Aqui, F_{N0} é uma força normal “interna” que é adicionada à força normal externa F_N para contabilizar a presença de forças inter-moleculares adesivas, que por sua vez está relacionado de maneira não trivial com a área de contato efetiva entre as superfícies [1]. Veja que se usarmos a definição dada pela equação (1.1) temos $F_L/F_N = \mu_0(1 + F_{N0}/F_N)$ que para $F_N \rightarrow 0$, $\mu \rightarrow \infty$, mas usando a equação 1.2 obtemos um coeficiente de atrito, que em primeira aproximação é uma constante, $\mu = \mu_0$, convencionalmente definida em muitos casos. Portanto, de agora em diante quando nos referirmos ao coeficiente de atrito neste trabalho, estaremos pensando na definição dada pela equação 1.2. A título de informação, o coeficientes de atrito entre vários materiais estão tabulados em manuais e handbooks e são necessários no projeto de maquinários e na indústria de construção.

1.2 Motivação - Atrito e Desgaste

1.2.1 “Ploughing”

O termo “Ploughing”, que tem como tradução “Aração”, é uma técnica muito bem conhecida e usada à muitos anos no campo da agricultura, e é o processo de revolver um terreno agrícola com um arado, equipamento mecânico tracionado. Se fizermos uma mudança de escala desta ferramenta para o tamanho de alguns nanômetros e combinando esta com técnicas convencionais de microscopia de varredura (Ver seção 1.3.1), podemos realizar nano-litografia [2, 3] com resolução de poucos nanômetros (Ver figura 1.2). Esta técnica consiste basicamente em passar uma ponta nanométrica sobre uma superfície, com uma grande força normal, tal que se possa remover material da superfície, deixando caminhos ou “riscos” muito bem definidos que tem a forma da ponta (“arado”) usada.

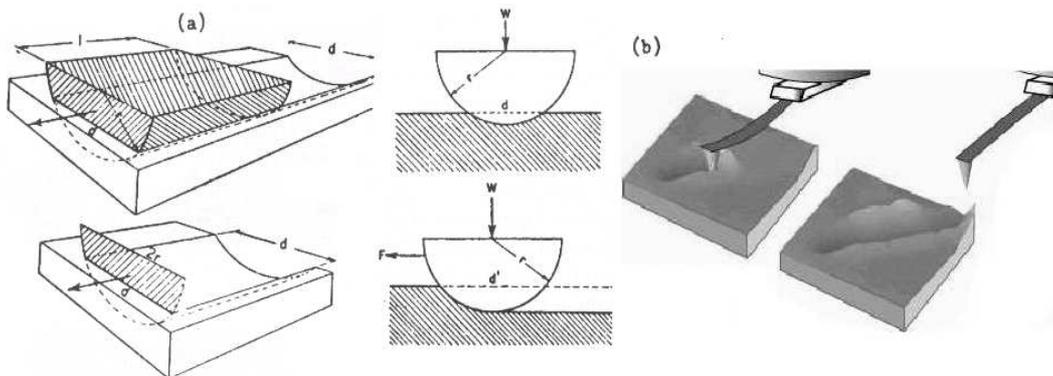


Figura 1.2: O mecanismo de Ploughing(a), similar a um processo de litografia(b). [1, 2]

Este processo é conhecido como nano-litografia e possui vantagens tais como a precisão do alinhamento, comparado às técnicas do feixe de elétron ou de ions não há perda de definição, a ausência de etapas de processamento adicionais e etc. Nano-litografia vem sendo aplicada com sucesso no modelamento de superfícies para aplicações tecnológicas, como por exemplo, para se produzir pontos quântico [11]. Entretanto, é, atualmente, difícil fazer um dispositivo com precisão elevada usando esta técnica, porque o mecanismo de litografia na escala atômica não é bem com-

preendido. Isto é particularmente verdade quando se tem interesse de fazer muitos riscos ou pontos com larguras e profundidades controladas. Simulações de dinâmica molecular em três dimensões[12, 13, 14] tem se mostrado úteis no estudo de adesão, fricção, fratura, na criação de defeitos em superfície e corte em um escala atômica.

Tendo em vista a natureza desta técnica, que acabamos de apresentar, é natural se pensar que esta esteja intimamente ligada com processos de desgaste. De fato é bem conhecido que o deslizamento causa desgaste na superfície de contato, até mesmo em escala macroscópica, e que a energia mecânica é transformada em energia de deformação em um pequeno comprimento de escala. Desgaste é uma possível origem para dissipação em um processo de fricção. Porém, se calcularmos a taxa de desgaste devido ao trabalho mecânico, usando a teoria de junções plásticas [1], as rodas de uma locomotiva iriam ser totalmente desgastadas em poucos quilômetros de viagem.

1.2.2 Atrito Sem Desgaste

Em 1961 J. F. Archard apontou que deformações plásticas iriam danificar toda máquina depois de alguns minutos de trabalho. Ele enunciou [15]:

“A análise experimental do desgaste sugere que a maioria dos eventos que ocorrem em borrachas são contatos entre protuberâncias que são deformadas elasticamente e que se separam sem desgaste; uma irregularidade se desgasta em eventos relativamente raros.”(Princípio de Archard)”.

Portanto, deve existir algum mecanismo de dissipação, que cause mudanças infinitesimais à estrutura da superfície de contato, tal que, estas mudanças desapareçam depois que as superfícies sejam separadas. Em tais processos, trabalho mecânico é continuamente transformado em calor. Estes processos estão diretamente relacionados à criação de excitações elementares, tais como fônons, magnons, pares vórtice-anti-vórtice e elétron-buraco.

Em 1929 Tomlinson propôs um novo mecanismo de dissipação, conhecido hoje em dia como, “Mecanismo de Tomlinson”, que introduz na conta a importância da adiabaticidade mecânica e o papel de instabilidades. A maior realização do trabalho de Tomlinson foi considerar a existência de coordenadas instáveis que se tornam importantes no mecanismo de atrito. Voltaremos a tratar este assunto nas seções seguintes.

1.3 Visão Moderna do Atrito

1.3.1 Microscopia por Força Atômica-AFM

Para compreender o comportamento de duas superfícies reais deslizando uma sobre a outra, é necessário que se entenda o fenômeno em um nível microscópico. Com o aparecimento do Microscópio de Força Atômica (AFM) tornou-se possível estudar em nível molecular junções individuais deslizantes [1, 2, 3, 4, 16, 17]. A AFM é uma ferramenta ideal para se fazer experimentos tribológicos em pequenas escalas medindo forças normais, laterais e desgaste entre superfícies.

Na AFM, uma sonda extremamente fina (~ 10 a 100\AA de diâmetro na extremidade da sonda) varre a superfície da amostra em inspeção. A sonda é montada sobre a extremidade livre de uma alavanca que mede de 100 a $200\mu\text{m}$ de comprimento. Quando a sonda se aproxima da superfície da amostra, forças de interação sonda-amostra surgem e fazem a alavanca defletir. Esta deflexão é monitorada por um detector à medida que a sonda varre a superfície, conforme ilustra a figura 1.3(a). As forças de interação sonda-amostra podem ser atrativas ou repulsivas, dependendo da distância sonda-amostra, conforme mostra a figura 1.3(b). A longas distâncias ($d > 1\mu\text{m}$), praticamente não há qualquer interação. À medida que a sonda se aproxima da amostra ($d \leq 50\text{nm}$), forças atrativas passam a atuar entre a sonda e a amostra - tipicamente, forças de Van der Waals. A força atrativa aumenta com a aproximação da sonda, conforme mostra a figura 1.3(b), até que a separação seja da ordem da separação inter-atômica ($d \approx 0.5\text{nm}$). A partir deste ponto, fortes forças eletrostáticas repulsivas entre as nuvens eletrônicas das camadas de valência da sonda e da amostra passam a atuar, e a força resultante total passa a ser repulsiva. Nesta região, diz-se que a sonda está em contato físico com a superfície da amostra.

Conforme o caráter da interação, atrativo ou repulsivo, pode-se definir alguns modos de operação na técnica de AFM. São eles: Não-Contato (NC), onde a interação sonda-amostra é atrativa; Contato (C), com interação repulsiva; e Contato Intermitente (CI), onde o regime ora é atrativo, ora é repulsivo (Ver figuras 1.3(b) e 1.4).

O modo Contato, permite obter imagens com altíssima resolução, a nível atômico, mas o atrito entre a sonda e a amostra pode danificar a superfície, caso ela

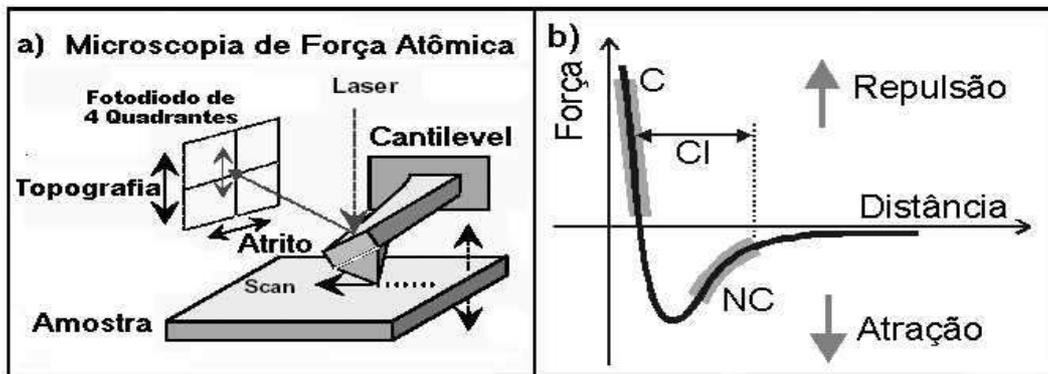


Figura 1.3: (a) Desenho esquemático do princípio de funcionamento da técnica de AFM. O fotodetector monitora a deflexão da alavanca durante a varredura através da mudança na reflexão de um feixe de Laser incidente. (b) Curva esquemática mostrando a dependência da força de interação sonda-amostra em função da separação entre elas. Note que esta curva se assemelha bastante a uma curva de força derivada de um potencial (12-6) de Lennard-Jones(Capítulo 2)[1].



Figura 1.4: Figura ilustrativa dos modos de operação do aparato da AFM.[2]

seja macia, produzindo uma imagem distorcida. O modo Não-Contato, apresenta a vantagem de não danificar a amostra, porém a resolução normalmente fica limitada a algumas dezenas de nanômetros, que é a distância sonda-amostra. No Contato Intermitente, a sonda oscila sobre a superfície da amostra, tocando-a periodicamente. Este modo de operação reúne vantagens dos dois modos anteriores: como há contato físico entre a sonda e a amostra, consegue-se altas resoluções ($\sim 1\text{nm}$). No entanto, como a movimentação é feita com a sonda no ar, a força de atrito entre a sonda e amostra é bastante reduzida, eliminando os problemas de deformação da amostra, presentes no modo Contato.

Existem hoje em dia muitas variações da técnica de AFM, como por exemplo, a Microscopia de Força de Atrito (FFM, Frictional Force Microscopy) que é o uso de AFM para medir simultaneamente forças laterais (atrito) e força vertical (normal) em modo contato (Ver figura 1.5), a Microscopia de Força Magnética (MFM, Magnetic Force Microscopy) que é o uso de AFM para medir a força magnética entre uma ponta recoberta por material magnético e uma superfície que apresente domínios magnéticos, e diversas outras variações[2] que não entraremos em detalhes

por não terem uma relação direta com este trabalho. Nas próximas duas seções apresentaremos algumas características da técnica de FFM e MFM.

1.3.2 Microscopia por Força de Atrito - FFM

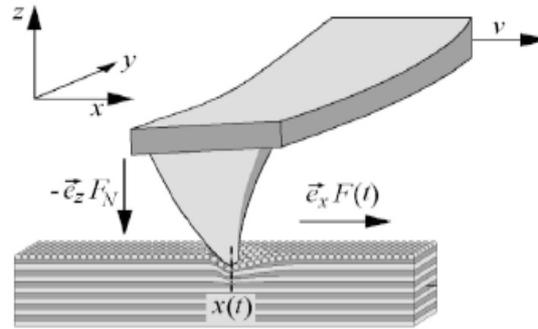


Figura 1.5: (a) Desenho esquemático do princípio de funcionamento da técnica de FFM.[18]

A FFM é uma técnica útil para se estudar atrito, adesão, lubrificação e desgaste. Com esta técnica, podemos visualizar variações das forças de atrito com a superfície. Sobre certas condições (pequenas forças normais, pequeno raio de curvatura, superfícies não reativas,...) somente um único contato é formado e atrito sem desgaste é observado. Neste regime, vários grupos observaram que a força de atrito é proporcional à área de contato efetiva, apresentando uma dependência logarítmica com a velocidade em que o cantilever é puxado. Observa-se dependência com a temperatura da superfície de contato, com a umidade relativa, com o ângulo de varredura relativo à orientação cristalográfica da superfície, dentre outras [1, 3].

Na figura (1.6) à esquerda, apresento um loop de histerese típico que é medido tanto experimentalmente como a partir de simulações de computadores. Esta curva é a principal fonte de informação obtida a partir da técnica da FFM. Note que esta curva apresenta algumas características básicas: A varredura em um sentido produz uma curva de força similar a uma varredura no sentido oposto e apresenta uma forma tipo dentes de serra, conhecida como, movimento “stick-slip”. As regiões de “stick” correspondem às linhas cheias e inclinadas, no qual a ponta se encontra presa em um mínimo local do potencial, dado que a força feita na ponta é menor ou

igual à força de interação ponta-superfície. Quando a força na ponta é maior que a força de interação ponta-superfície, inicia-se o deslizamento (“slip”) que corresponde às regiões de círculos que estão na vertical. Outras informações que podem ser extraídas desta figura são: a) Para baixas velocidades de arraste do cantilever, obtém-se o espaçamento da rede cristalina, definido como a distância entre dois pontos que separam um “stick” de um “slip”. Para altas velocidades a ponta pode saltar uma distância equivalente à dois ou mais espaçamentos da rede. b) As linhas pontilhadas definem respectivamente, a força de atrito estática (máxima) e a força de atrito cinética (média). c) A área interna da figura nos fornece a energia total dissipada no processo, sendo definida por: $\Delta W = \int \vec{f}_l \cdot d\vec{x}$.

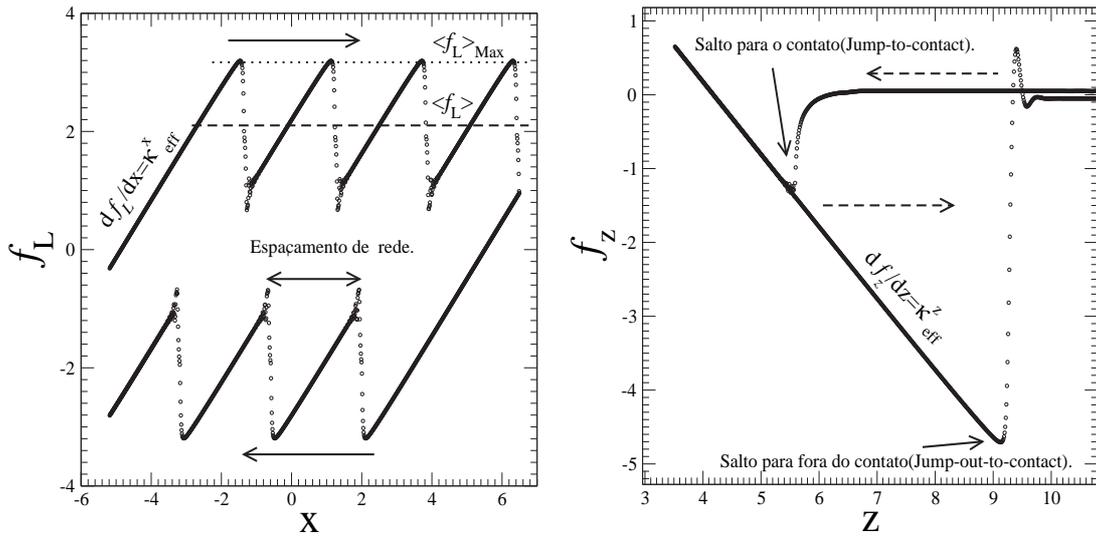


Figura 1.6: Força de atrito como função da posição x do cantilever(Esquerda) e geralmente conhecido como, Loop de força de atrito. Força normal como função da posição z do cantilever(Direita) e geralmente conhecido como, Loop de força normal.

Na figura (1.6) à direita, apresento uma curva de força normal(f_z) como função da posição z do cantilever. Esta figura é útil para definirmos o domínio de forças normais em que se pode trabalhar na FFM, dado que este experimento é realizado em modo contato. Esta medida é realizada fixando um dado ponto no plano da superfície a uma altura z em que não há interação entre a ponta e a superfície. A

partir daí diminuimos a distância z da haste, gradativamente, até ocorrer o contato com a superfície (jump-to-contact). Feito este procedimento, inicia-se o processo reverso de afastar a haste da amostra até que ocorra o rompimento do contato (jump-out-to-contact), que é definida como a força normal mínima que se pode obter para uma dada superfície.

Medida da rigidez de contato normal - Normal Contact stiffness

Como já comentado que a força de atrito depende da área de contato efetiva. Faz-se necessário, ter-se uma maneira confiável de medir esta área efetiva. Uma das primeiras maneiras sugeridas foi a medida da, rigidez de contato normal, que é essencialmente a medida da “constante de mola” normal do contato. De acordo com o modelo de Hertz, a rigidez de contato normal, $\kappa_{contato}^z$, que é definida por,

$$\kappa_{contato}^z = 2aE^* \quad (1.3)$$

onde a é o raio efetivo de contato e

$$E^* = \left(\frac{1 - \nu_1^2}{E_1} + \frac{1 - \nu_2^2}{E_2} \right)^{-1}. \quad (1.4)$$

Aqui, E_1 e E_2 são os módulos de Young e ν_2 , ν_1 são os coeficientes(ou raios) de Poisson [19, 20] da superfície e da ponta. O módulo de Young é definido como a razão entre a tensão (ou pressão) exercida e a deformação sofrida pelo material ($E = \frac{F/A}{\Delta L/L}$), e o coeficiente(ou raio) de Poisson é definido como, o negativo da razão entre a deformação transversal associada a uma deformação longitudinal na direção do esforço de deformação ($\nu = -\frac{\Delta A/A}{\Delta L/L}$).

Assim, a área de contato pode ser determinada da medida da rigidez de contato normal, quando as propriedades elásticas da amostra e da ponta são conhecidas. No entanto, se dever ter certeza de que não existe deformações plásticas e se o modelo de Hertz pode ser aplicado.

A rigidez de contato normal pode ser medida fazendo-se uma modulação da deformação da amostra na direção z por, Δz e medindo a resposta elástica do cantilever Δz_{level} . O comportamento elástico do cantilever é modelado por um acoplamento em série de molas e assim o deslocamento normal da amostra é dado por: $\Delta z = \Delta z_{contato} + \Delta z_{level}$, onde $\Delta z_{contato}$ é a deformação elástica do contato.

Dado que força normal atuando em cada mola é igual, a rigidez de contato efetiva ou constante de mola, é dada por:

$$\kappa_{eff}^z = \frac{\partial f_z}{\partial z} \quad (1.5)$$

calculado enquanto a ponta estiver em contato, como mostra a figura (1.6) à direita, e

$$\kappa_{eff}^z = \left(\frac{1}{\kappa_{contato}^z} + \frac{1}{c_z} \right)^{-1} \quad (1.6)$$

Assim conhecendo a constante de mola do cantilever, c_z , e medindo a rigidez de contato efetiva pode-se determinar a rigidez do contato, $\kappa_{contato}^z$, utilizando a equação 1.5. Para contatos do tamanho de alguns nanômetros feitos entre materiais comuns, tais como metais ou cerâmicos, a rigidez de contato normal está compreendido no domínio de $\kappa_{contato}^z = 50 - 500 N/m$.

Medida da rigidez de contato normal - Lateral Contact stiffness

Outra maneira proposta para a medida da área efetiva, foi a medida da rigidez de contato lateral, pois valores típicos da constante de mola lateral do cantilever são da ordem de $50 - 200 N/m$, e assim, obtém-se uma melhor precisão na medida da área de contato, comparado com a obtida utilizando a rigidez de contato normal. Para uma ponta com uma geometria esférico-plana, a rigidez de contato lateral, $\kappa_{contato}^x$, é dada por,

$$\kappa_{contato}^x = 2aG^* \quad (1.7)$$

onde

$$G^* = \left(\frac{2 - \nu_1^2}{G_1} + \frac{2 - \nu_2^2}{G_2} \right)^{-1} \quad (1.8)$$

e G_1 e G_2 são os módulos de cisalhamento e ν_2 , ν_1 são os coeficientes(ou raios) de Poisson [19, 20] da superfície e da ponta.

Em analogia ao tratamento feito para a rigidez de contato normal, a resposta elástica no esquema experimental é descrito por molas em série. Um deslocamento lateral da amostra, Δx , é distribuído entre três molas, $\Delta x = \Delta x_{contato} + \Delta x_{ponta} +$

$\Delta x_{cantilever}$, onde $\Delta x_{contato}$ é a deformação elástica do contato, Δx_{ponta} é a deformação elástica da ponta e $\Delta x_{cantilever}$ é a deformação elástica do cantilever. Dado que a força lateral que atua em cada uma das molas é a mesma, a constante de mola efetiva é definida como:

$$\kappa_{eff}^x = \frac{\partial f_x}{\partial x} \quad (1.9)$$

e

$$\kappa_{eff}^x = \left(\frac{1}{\kappa_{contato}^x} + \frac{1}{\kappa_{ponta}^x} + \frac{1}{c_x} \right)^{-1} \quad (1.10)$$

onde $\kappa_{contato}^x$, κ_{ponta}^x são respectivamente a rigidez do contato e da ponta e c_x é a constante de mola do cantilever.

O procedimento experimental para se determinar, κ_{eff}^x , é a medida da inclinação da região de “stick” no loop de força de atrito (Figura 1.6 à esquerda). Portanto, conhecendo a rigidez de contato efetiva, podemos utilizar a equação 1.9 para obter a rigidez do contato e daí calcular a área de contato efetiva. Um ponto de bastante relevância é a dependência da rigidez do contato, $\kappa_{contato}^x$, e por sua vez a rigidez efetiva, κ_{eff}^x (Eq. 1.10), com a força normal. Esta dependência como veremos nas próximas seções, irá aparecer de maneira crucial na dedução do coeficiente de atrito teórico que apresentaremos. Este modelo para a rigidez de contato é conhecido como Modelo de Fogden e White [21, 22, 23, 24] e de acordo com eles temos a seguinte forma:

$$\kappa_{contato}^x = \kappa_{contato}^y = 8G^* \left[\frac{3R}{4E^*} (f_z + F_p) \right]^{1/3} \quad (1.11)$$

onde, R é a resistência elétrica do contato, F_p é a força necessária para desfazer o contato (jump-out-to-contact). Com isso finalizaremos nossa descrição sobre FFM, o que apresentamos até agora não é nem de longe toda a informação que se pode obter com esta técnica, para mais informações consulte as referências deste trabalho. Na próxima seção faremos uma breve descrição à respeito da técnica de Microscopia por Força Magnética (MFM).

1.3.3 Microscopia por Força Magnética - MFM

Micro e nano-estruturas magnéticas desempenham um importante papel no desenvolvimento tecnológico e científico. Quase todo o armazenamento de informação

nos computadores atuais é baseada na gravação em meios magnéticos. Por estes e outros motivos, muitos esforços foram feitos para se investigar forças magnéticas utilizando AFM. Este tipo de microscopia é conhecida como Microscopia por Força Magnética(MFM) [1, 2, 25, 26] e é uma ferramenta muito eficiente para a investigação magnética em escala micro e nanométricas.

A imagem obtida pela MFM é a distribuição espacial de algum parâmetro que possa caracterizar a interação magnética da sonda com a amostra, por exemplo, a força de interação, a amplitude de vibração da sonda magnética, entre outra. As sondas de MFM são geralmente um cantilever de silício(ou nitrato de silício) recoberto por filmes finos magnéticos. Medidas de MFM nos possibilitam investigar com alta resolução fases diamagnéticas, paredes de domínios magnéticas, processos dissipativos, magnetização, localização e tamanho dos domínios, processos dinâmicos de paredes e domínios, estudo de correntes em circuitos, dispositivos de armazenamento de dados, ligas ferromagnéticas, dinâmica de materiais com a aplicação de campos externos, etc.

Existem dois modos de operação da técnica de MFM, que são conhecidos por MFM-DC e MFM-AC. Em ambas as técnicas a primeira coisa que deve ser feita é a separação da informação magnética da informação topográfica. Para resolver este problema as medidas magnéticas são feitas em duas etapas. A primeira que é comum às duas técnicas, é a determinação da topografia em modo contato ou contato intermitente.

Na segunda etapa para a MFM-DC, o cantilever é levantado até uma altura, h_z , que é mantida fixa em cada ponto da amostra, abaixando ou levantando o cantilever, relativo à leitura da topografia feita no primeiro passo. Esta separação h_z deve ser grande o suficiente para eliminar forças de Van der Waals durante a segunda varredura e assim o cantilever é afetado somente por forças magnéticas de longo alcance, que são obtidas medindo-se a variação da posição do cantilever vezes a constante de mola normal do cantilever. Dado o pequeno tamanho da ponta magnética do cantilever, é possível considerar a ponta como um momento de dipolo pontual e nesta aproximação a força \vec{F} atuando na ponta, durante o segundo passo, é dada baseando-se na energia Zeeman e pode ser escrita como:

$$U = -\vec{m} \cdot \vec{B} \quad \Rightarrow \quad \vec{F} = -\nabla U = (\vec{m} \cdot \nabla)\vec{B} \quad (1.12)$$

onde \vec{m} é o momento de dipolo efetivo da ponta, \vec{B} é o campo magnético da amostra.

A segunda etapa para a MFM-AC é muito similar ao modo DC. O cantilever novamente seguirá a topografia, para uma dada altura, h_z . Porém, aplica-se uma oscilação de frequência ω na ponta, na direção normal à superfície e, neste caso, mede-se o gradiente de força magnética, que determinará a frequência de ressonância do cantilever, a fase e amplitude de oscilação da ponta [27, 28, 29, 30]. No regime de funcionamento harmônico, a frequência de ressonância do cantilever pode ser escrita por, $\omega_0 = c(m)\sqrt{c_z}$, onde $c(m)$ é uma constante que depende da massa da ponta e do cantilever e c_z é a constante de mola normal do cantilever. O efeito de um gradiente de força F' na frequência de oscilação será dada por, $\omega_F = c(m)\sqrt{c_z - F'}$. E assim podemos medir a diferença de fase devido a interação que é dada por,

$$\begin{aligned}\Delta\omega &= \omega_0 - \omega_F = \frac{\omega_0}{2c_z}F' \\ F' &= m_z \frac{\partial^2 B_z}{\partial z^2}\end{aligned}$$

e assim se obtém,

$$\Delta\omega = \frac{m_z\omega_0}{2c_z} \frac{\partial^2 B_z}{\partial z^2}. \quad (1.13)$$

Com isso finalizamos nossa descrição da técnica de MFM. Para maiores detalhes pode-se consultar as referências inclusas neste trabalho.

1.4 Modelos Teóricos - Análise moderna do Mecanismo de Tomlinson

Os potenciais atômicos são conservativos, pois dependem apenas de posição, logo estes não possuem o caráter dissipativo de atrito. Isto leva à seguinte questão: Como potenciais conservativos entre átomos podem produzir atrito não nulo, até mesmo nos casos sem desgaste, onde o sistema se mantém no mesmo estado depois do processo de deslizamento? Uma possível solução deste problema foi proposta por Tomlinson em 1929[1, 31], e hoje é conhecida como **Mecanismo de Tomlinson**, que discutiremos abaixo.

Tomlinson propôs em seus trabalhos que, em sistemas controlados, pode-se distinguir entre dois tipos de variáveis: as de controle e as de sistema. As variáveis de controle são aquelas controladas diretamente pelo mundo externo, já as variáveis de sistema são aquelas que constituem as respostas do sistema. As equações que descrevem o sistema vão constituir uma relação da seguinte forma:

$$\text{Variáveis de Sistema} = f(\text{Variáveis de Controle}) \quad (1.14)$$

Quando a função f tem um comportamento linear entre as variáveis de sistema e de controle, não há problema para controlar o sistema, pois neste caso sua história não é importante. Por outro lado, quando f tem um comportamento não linear, a história do sistema torna-se importante para obter uma completa informação do sistema de variáveis. O problema da função f não ser linear leva ao problema da *irreversibilidade* desta função, ou seja, (1.14) não tem uma inversa,

$$\text{Variáveis de Controle} = g(\text{Variáveis de Sistema}). \quad (1.15)$$

Este fato tornar-se um critério fundamental para a ocorrência de histerese, dissipação de energia e atrito estático e cinético.

Em estudos sobre atrito, é de fundamental importância distinguir entre diferentes comprimentos de escala. Portanto, podemos fazer uma analogia entre irregularidades deslizando de forma elástica sobre uma superfície rugosa, e uma ponta de AFM deslizando sobre uma superfície atômica. O modelo de Tomlinson obteve sucesso no modelamento destes sistemas, sendo válido em ambos os casos.

1.4.1 Modelo de Tomlinson Unidimensional-MTU

Considere a ponta de AFM deslocando-se em um potencial unidimensional periódico que descreve a interação com um arranjo periódico de átomos. No limite quase estático do movimento entre os dois corpos, a energia potencial total é descrita pela soma de um potencial de interação entre a ponta e a superfície na direção x e a energia elástica armazenada no cantilever,

$$V_{Tot}(q_x, x) = V(q_x) + \frac{c}{2}(q_x - x)^2 \quad (1.16)$$

onde c é a constante de mola do cantilever, q_x a posição da ponta e x é a posição do cantilever (posição de equilíbrio da mola). Assumiremos por simplicidade que o potencial $V(q_x)$ possui a periodicidade da rede cristalina e assim podemos escrever,

$$V(q_x) = U_0 \cos(k_x q_x) \quad (1.17)$$

onde $k_x = 2\pi/a$ e a é o parâmetro de rede do substrato. Neste caso q_x é a variável de sistema e x a variável de controle. Em um processo quase estático, os rearranjos atômicos acontecem sempre em equilíbrio estável. Matematicamente, esta condição diz que a derivada da energia com respeito ao sistema de variáveis é zero e que a segunda derivada é positiva:

$$\frac{dV_{Tot}}{dq_x} = \frac{dV(q_x)}{dq_x} + c(q_x - x) = -U_0 k_x \sin(k_x q_x) + c(q_x - x) = 0 \quad (1.18)$$

$$\frac{d^2V_{Tot}}{dq_x^2} = \frac{d^2V(q_x)}{dq_x^2} + c = -U_0 k_x^2 \cos(k_x q_x) + c > 0 \quad (1.19)$$

Podemos reescrever a posição de equilíbrio como,

$$x(q_x) = \frac{1}{c} \frac{dV(q_x)}{dq_x} + q_x = -\frac{U_0 k_x}{c} \sin(k_x q_x) + q_x \quad (1.20)$$

Note que esta equação consiste de um termo linear e um periódico. Assim, para pequenos valores da constante de mola, c , esta equação não é inversível, pois a amplitude do termo periódico se torna muito grande fazendo com que $q_x(x)$ não possa ser definida como função, sendo que, para um dado ponto do domínio temos mais de um ponto na imagem da função.

Da equação (1.19), podemos definir $\kappa = \frac{U_0 k_x^2}{c}$ e o valor crítico da constante de mola, como sendo o menor valor de c acima do qual o mapeamento 1.20 seja definido por uma função[32]. Assim, c_{crit} é tal que $\kappa = 1$ e com isso obtemos, $c_{crit} \equiv U_0 k_x^2$.

Na figura (1.7), apresento um gráfico da posição do cantilever x como função da posição da ponta q_x (esquerda) e a inversão de eixos (q_x, x) (direita) para $c > c_{crit}$ (linha pontilhada) e $c < c_{crit}$ (linha cheia).

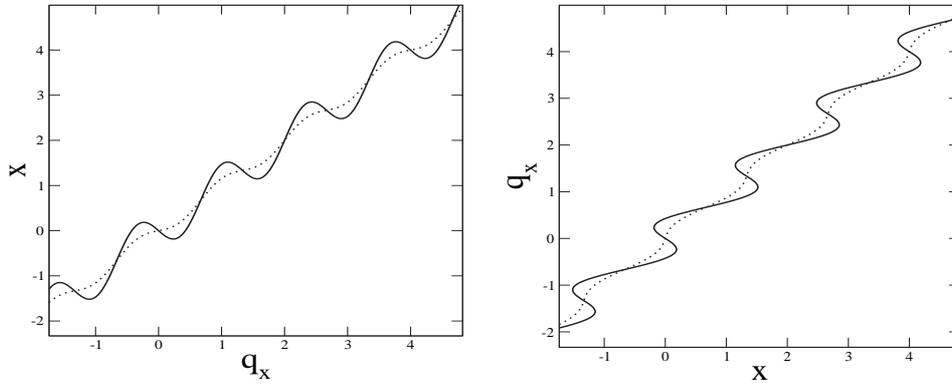


Figura 1.7: Posição de equilíbrio, (q_x, x) (esquerda) e a troca dos eixos (x, q_x) (direita) para $c < c_{crit}$ (linha cheia) e $c > c_{crit}$ (linha pontilhada). Perceba que para $c < c_{crit}$ no gráfico de (x, q_x) , não podemos definir uma função $q_x = f(x)$.

Como podemos ver, $\kappa < 1$ ($c > c_{crit}$), existe somente uma posição estável da partícula, $q_x = f(x)$ para uma dada posição x do cantilever. Neste caso, à medida que puxamos lentamente o cantilever, com uma dada velocidade v , a partícula também irá se mover lentamente com uma velocidade $\dot{q}_x = f'(x)v$, proporcional a v . [33]

Um comportamento interessante do sistema ocorre, quando o equilíbrio estável se torna instável. Este tipo de comportamento somente é possível para $\kappa > 1$ ($c < c_{crit}$). Para entendermos o processo, vamos analisar a energia total que é função da posição da ponta e do suporte. A relação $V_{Tot}(q_x, x)$ pode ser reduzida a uma função $V_{Tot}(q_x)$ usando a condição de equilíbrio:

$$\frac{dV_{Tot}(q_x, x)}{dq_x} = \frac{dV(q_x)}{dq_x} + c(q_x - x) = 0 \quad \Rightarrow \quad q_x - x = -\frac{1}{c} \frac{dV(q_x)}{dq_x} \quad (1.21)$$

↓

$$V_{Tot}(q_x) = V(q_x) + \frac{c}{2}(q_x - x)^2 = V(q_x) + \frac{1}{2c} \left(\frac{dV(q_x)}{dq_x} \right)^2 \quad (1.22)$$

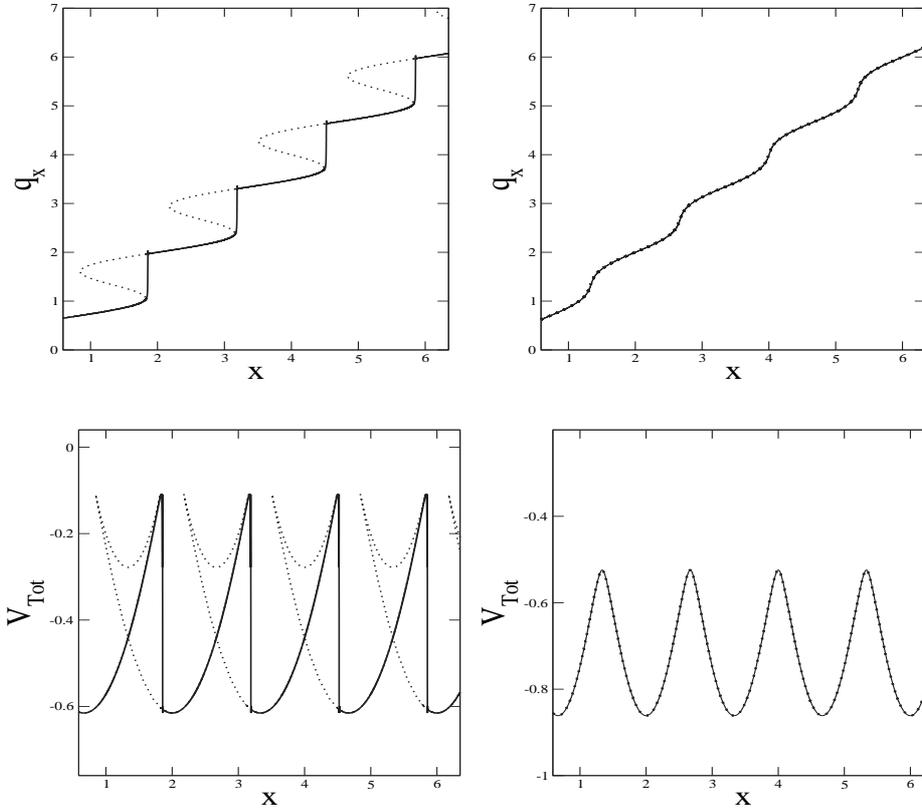


Figura 1.8: A relação $V_{Tot}(x)$ comparado com a relação $q_x(x)$ para $c < c_{crit}$ (esquerda) e $c > c_{crit}$ (direita). A continuação instável de $q_x(x)$ e $V_{Tot}(x)$ é mostrada (Linha Pontilhada). O contorno da energia é mostrado em uma varredura para a direita na linha cheia. Saltos ocorrem na posição $dx(q_x)/dq_x = 0$.

Como se pode ver, a equação (1.22) define um potencial que é só função da posição da ponta q_x . Dado que para valores de $c < c_{crit}$ a equação (1.20) não pode ser invertida, então, não podemos fazer $V_{Tot}(q_x) \rightarrow V_{Tot}(x)$ de maneira unívoca, ou seja, fazer um ponto no domínio x corresponder a uma só imagem V_{Tot} . No entanto,

uma função paramétrica, $q_x \mapsto (x(q_x), V_{Tot}(x))$, usando a posição da ponta q_x como parâmetro, pode ser definida sem ambigüidade. Esta é mostrada na figura (1.8) para $c < c_{crit}$ (esquerda) e $c > c_{crit}$ (direita). O gráfico de $V_{Tot}(x)$ apresentado na figura 1.8(esquerda), mostra claramente o comportamento do sistema. A posição da ponta é estável nos vales de energia onde a curvatura é positiva.

1.4.2 Modelo de Tomlinson Bidimensional - MTB

O modelo de Tomlinson pode ser estendido para duas dimensões, de maneira que as equações para o caso bidimensional [31, 34, 35] são muito similares àquelas do caso unidimensional. No entanto, na análise aqui descrita, trataremos um modelo tri-dimensional onde a terceira dimensão irá aparecer como um parâmetro e nesse sentido o modelo é bidimensional. Em 3 dimensões a energia potencial total do sistema é dada por:

$$V_{Tot}(\vec{q}, \vec{r}) = V(\vec{q}) + \frac{1}{2}(\vec{q} - \vec{r}) \cdot \overset{\leftrightarrow}{\mathbf{k}} \cdot (\vec{q} - \vec{r}) \quad (1.23)$$

onde $\overset{\leftrightarrow}{\mathbf{k}}$ é a matriz elasticidade que contém as contribuições elásticas do cantilever e da ponta e definiremos esta por,

$$\overset{\leftrightarrow}{\mathbf{k}} = \begin{bmatrix} k_x & 0 & 0 \\ 0 & k_y & 0 \\ 0 & 0 & k_z \end{bmatrix} \quad (1.24)$$

Como comentado anteriormente, \vec{q} é a posição da ponta e \vec{r} é a posição do cantilever. A interação da ponta com a superfície é descrita pelo potencial adiabático $V(\vec{q})$ que tem as simetrias da superfície. *Steele* [36] mostrou que o potencial $V(\vec{q})$ pode ser expandido em uma série de Fourier, assumindo que o potencial entre a ponta (um filme de átomos) e todos os átomos do substrato é dado por uma soma de potenciais de Lennard-Jones (Capítulo 2). A expansão feita por ele tem a seguinte forma:

$$V(\vec{q}) = V(\vec{q}_{\parallel}, q_z) = U_0(q_z) + U_1(q_z) \sum_{\{\vec{G}_m\}} \cos(\vec{G}_m \cdot \vec{q}_{\parallel}) \quad (1.25)$$

onde \vec{q}_{\parallel} são as coordenadas da ponta paralelas ao substrato e $\{\vec{G}_m\}$ é o conjunto dos seis menores vetores da rede recíproca do substrato. O primeiro termo na equação

(1.25) descreve a interação média da ponta com o substrato e o segundo termo descreve o potencial periódico de corrugação. Expressões explícitas para os termos $U_0(q_z)$ e $U_1(q_z)$ foram descritas por vários autores[34, 36, 37, 38], para interações entre diferentes sistemas.

Se fizermos agora uma analogia ao caso unidimensional visto na seção 1.4.1, os pontos críticos foram determinados pelas posições, q_x , em que a primeira e a segunda derivada do potencial total com relação à posição da ponta são iguais a zero. No caso bidimensional temos condições análogas a estas. Se voltarmos nossa atenção para a equação (1.23), temos que pra uma dada posição \vec{r} do suporte e para uma dada posição q_z da ponta, os pontos críticos $\vec{q}_{\parallel c}$ são determinadas pelos zeros das equações,

$$\nabla_{\vec{q}_{\parallel}} V_{Tot} = \nabla_{\vec{q}_{\parallel}} V(\vec{q}_{\parallel}) + \overset{\leftrightarrow}{\mathbf{k}} \cdot (\vec{q}_{\parallel} - \vec{r}_{\parallel}) = 0 \quad (1.26)$$

em conjunto com os zeros do determinante da matriz Hessiana definida por,

$$H = (\partial^2 V_{Tot} / \partial q_{\alpha} \partial q_{\beta}) = \begin{bmatrix} \frac{\partial^2 V_{Tot}}{\partial q_x^2} & \frac{\partial^2 V_{Tot}}{\partial q_x \partial q_y} \\ \frac{\partial^2 V_{Tot}}{\partial q_y \partial q_x} & \frac{\partial^2 V_{Tot}}{\partial q_y^2} \end{bmatrix}, \quad (1.27)$$

aqui α e β representam as coordenadas x ou y e com isso obtemos,

$$\left[\left(\frac{\partial^2 V_{Tot}}{\partial q_x^2} \right) \left(\frac{\partial^2 V_{Tot}}{\partial q_y^2} \right) - \left(\frac{\partial^2 V_{Tot}}{\partial q_y \partial q_x} \right) \left(\frac{\partial^2 V_{Tot}}{\partial q_x \partial q_y} \right) \right] = 0. \quad (1.28)$$

A posição \vec{q}_{\parallel} é estável quando os dois autovalores da matriz Hessiana são positivos. No limite harmônico da energia do cantilever, a Hessiana não depende de \vec{r} mas somente de \vec{q} . Assim podemos rotular cada ponto no plano (q_x, q_y) sem ambigüidade, definindo regiões de estabilidade e instabilidade a partir dos sinais dos autovalores da matriz Hessiana e pontos críticos correspondendo aos zeros do seu determinante definidos pela equação (1.28).

A condição de equilíbrio (1.26), pode ser resolvida para \vec{r} da mesma forma que no caso unidimensional,

$$\vec{r}_{\parallel}(\vec{q}_{\parallel}) = (\overset{\leftrightarrow}{\mathbf{k}})^{-1} \cdot \nabla_{\vec{q}_{\parallel}} V(\vec{q}_{\parallel}) + \vec{q}_{\parallel} \quad (1.29)$$

sendo importante notar que é a posição do suporte \vec{r} e não a posição da ponta \vec{q} que é externamente controlada. O mapeamento $\vec{q} \mapsto \vec{r}$ não contém ambigüidade assim

como no caso unidimensional. Para um acoplamento isotrópico entre a ponta e o cantilever $\overleftrightarrow{k} = k\mathbf{1}$, existe um valor crítico de k , similar ao caso unidimensional, tal que o mapeamento $\vec{q} \mapsto \vec{r}$ não é mais inversível. Porém uma relação paramétrica pode ser escrita na forma:

$$(q_x, q_y) \mapsto (x(q_x, q_y), y(q_x, q_y), V_{Tot}(q_x, q_y)). \quad (1.30)$$

Este mapeamento é mostrado na figura 1.9 para $\kappa > 1$ (esquerda) e $\kappa < 1$ (direita) usando o potencial:

$$V(\vec{q}) = U_0(q_z) + 2U_1(q_z)[\cos(G_x q_x) + \cos(G_y q_y)]. \quad (1.31)$$

Derivado da equação (1.25) para uma simetria (001), onde $G_x = G_y = G = 2\pi/a$, a é o parâmetro de rede da superfície e $\kappa = U_1(q_z)G^2/k$. Perceba que κ , agora, depende não somente da constante de mola c mas, também, da posição q_z da ponta. Assim o valor crítico da constante de mola, passa a ser uma função da posição q_z . Para $\kappa > 1$, a figura 1.9(esquerda), apresenta regiões onde a curvatura é negativa, similar ao caso unidimensional (Ver figura 1.8), estas regiões são aquelas de equilíbrio instável. Os pontos críticos são justamente os pontos de transição entre o equilíbrio estável para o instável. A condição suficiente para a determinação destes pontos críticos é dada pela equação (1.28) como já comentado. Na figura 1.9(esquerda), estão representados em verdes as posições em que esta condição é satisfeita. Na figura 1.9(direita) não existe nenhum ponto onde esta condição é satisfeita, pois não existem regiões de instabilidade.

1.4.3 Dependência com a Velocidade e Temperatura

Nesta seção irei analisar o comportamento das forças de atrito com a velocidade[39]. O ponto de partida desta aproximação, é a relação entre a barreira de energia dinâmica $\Delta E(t)$, que impede o salto de uma posição de equilíbrio estável para outra, e a força lateral instantânea, f_x [40]. Na primeira aproximação, proposta por *Gnecco et al.* [41, 42], ele assumiu uma relação linear da forma $\Delta E \sim (const. - f_x)$ e com isso demonstrou que a força de atrito média, f_x , apresenta um crescimento logarítmico com a velocidade, válida no regime de baixas velocidades.

Uma aproximação mais abrangente válida em regimes de maiores velocidades, foi proposta por *Sang et al.* [43]. Ele sugeriu uma relação da forma $\Delta E \sim (F_x^* -$

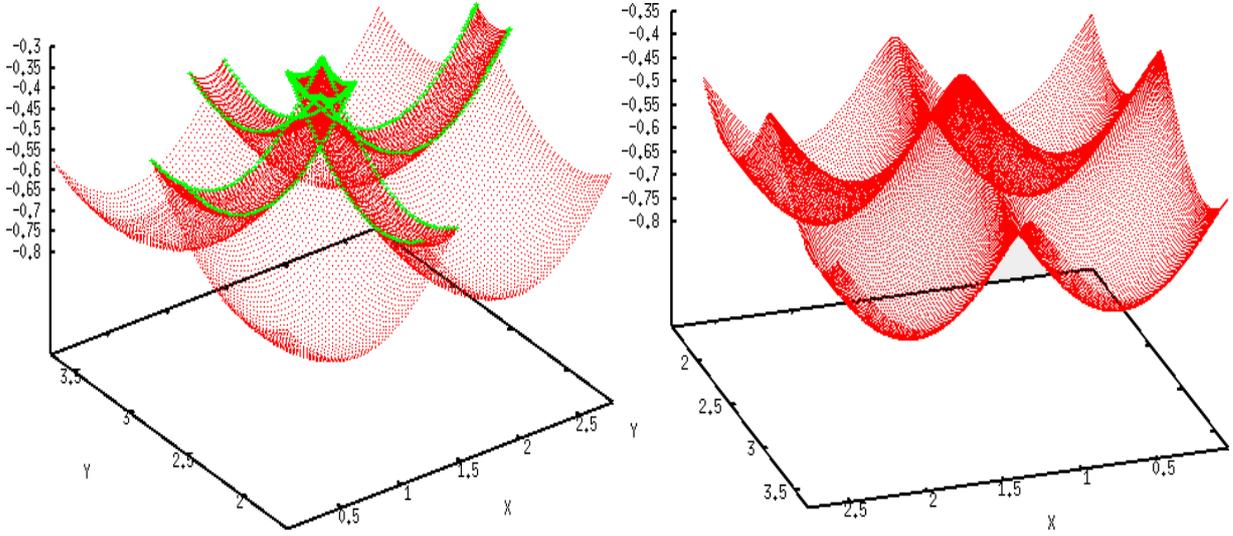


Figura 1.9: Mapeamento $(q_x, q_y) \mapsto (x(q_x, q_y), y(q_x, q_y), V_{Tot}(q_x, q_y))$ para $c < c_{crit}$ (esquerda) e $c > c_{crit}$ (direita). Os pontos em verde representam as posições críticas em que a equação (1.28) é satisfeita.

$f_x)^{3/2}$, onde F_x^* é a força lateral necessária para fazer com que a ponta salte de uma região de equilíbrio estável para outra[44]. Com esta aproximação ele mostrou que $f_x \sim |\ln(v)|^{2/3}$. Vale ressaltar que, *Person et al.* [33] demonstrou a partir de primeiros princípios que para pequenas áreas de contato, a barreira de energia é descrita pela relação proposta por *Sang* e que para áreas de contato maiores, a barreira de energia ΔE é melhor descrita pela relação linear proposta por *Gnecco*.

1.4.4 Análise qualitativa para as taxas de transições entre regiões de estabilidade

Em nossa dedução iremos nos basear no modelo de Tomlinson Unidimensional. Um esboço da energia total (1.16) é mostrado na figura 1.10(1-4) para quatro diferentes pontos $x(t) = vt$, mostrando que a medida que a posição x (força instantânea) aumenta, a barreira de energia que impede a partícula de saltar de um mínimo para outro diminui. Como citado na seção anterior, um salto irreversível da ponta ocorre quando o equilíbrio se torna instável. Ou seja, quando a diferença de energia ΔE^+ se torna nula (Ver figura 1.11).

Assim, quando uma instabilidade ocorrer, em $T = 0$, definiremos que a posição do cantilever $x(t)$ está em um ponto crítico e a força necessária para induzir um salto

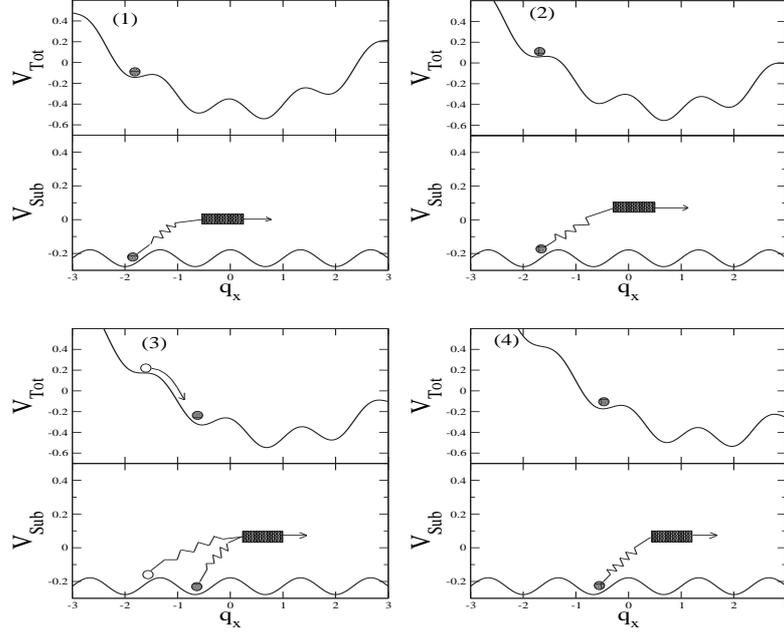


Figura 1.10: Potencial Total (V_{Tot} , definido pela eq. 1.16) e potencial de interação ponta-substrato (V_{Sub} , definido pela equação. 1.17), usado no modelo de Tomlinson Unidimensional em quatro diferentes posições do cantilever. Note que à medida que o cantilever se move para a direita (1 \rightarrow 4), a barreira de energia que impede um salto irreversível diminui até que a partícula salta para o próximo mínimo e o processo se repete.[1]

será F_{xc} . Vamos nos restringir aos casos onde a barreira de energia ΔE^+ é da ordem de $k_B T$ próximo a um ponto crítico. Com esta restrição podemos considerar um potencial contendo apenas dois mínimos, A e B , representados na figura 1.11.

A probabilidade de se encontrar a ponta em uma posição de mínimo de energia A ou B é dada por p e $1 - p$, respectivamente.

A mudança de probabilidade é caracterizada a partir da taxa de reação descrevendo o fluxo de probabilidade de A para B e vice-versa. A equação que descreve as probabilidades é a conhecida Equação Mestre [45] dada por,

$$\frac{\partial p(A, t)}{\partial t} = W(B \rightarrow A)p(B, t) - W(A \rightarrow B)p(A, t), \quad (1.32)$$

onde $W(B \rightarrow A)$ é a probabilidade de transição por unidade de tempo entre as configurações A e B . No equilíbrio, as probabilidades devem tender para os valores de Gibbs,

$$p_0(A) = \frac{1}{Z} e^{-\beta E(A)}, \quad (1.33)$$

onde Z é a função canônica de partição.

Uma condição suficiente para o equilíbrio é dada pela equação de balanço detalhado,

$$p_0(A)W(A \rightarrow B) = p_0(B)W(B \rightarrow A) \quad \Rightarrow \quad \frac{W(A \rightarrow B)}{W(B \rightarrow A)} = \frac{p_0(B)}{p_0(A)} \quad (1.34)$$

e

$$\frac{W(A \rightarrow B)}{W(B \rightarrow A)} = e^{-\beta(E(B)-E(A))} = e^{-\beta\Delta E}, \quad (1.35)$$

onde ΔE é a diferença de energia entre os estados A e B .

A equação (1.35), no entanto, não define de maneira unívoca as probabilidades de transição. Assim, podemos definir a frequência de transição, característica dos poços, como ν_0 , de modo que as probabilidades de transição, pela prescrição de Metropolis[45] são,

$$W(A \rightarrow B) = \begin{cases} \nu_0 e^{-\beta\Delta E} & , \text{ se } \Delta E \geq 0; \\ \nu_0 & , \text{ se } \Delta E < 0; \end{cases} \quad (1.36)$$

com isso a equação mestra pode ser escrita como,

$$\frac{\partial p(A, t)}{\partial t} = \nu_0 e^{-\beta\Delta E^-(t)} p(B, t) - \nu_0 e^{-\beta\Delta E^+(t)} p(A, t). \quad (1.37)$$

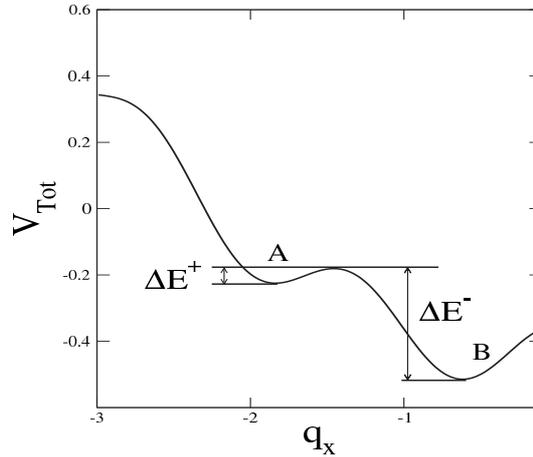


Figura 1.11: Potencial V_{Tot} usado no modelo de Tomlinson.

Da figura 1.11, podemos considerar que a energia de ativação $\Delta E^- \gg \Delta E^+$, logo $e^{-\beta\Delta E^-} \ll e^{-\beta\Delta E^+}$, que significa que transições de B para A são muito menos

prováveis, e assim podemos desprezar estas transições para escrevermos,

$$\frac{\partial p(t)}{\partial t} = -\nu_0 e^{-\beta \Delta E^+(t)} p(t). \quad (1.38)$$

Estamos interessados em encontrar a força lateral que corresponda a uma probabilidade de transição máxima de ocorrer um pulso de A para B . Assim, utilizando a condição para a probabilidade máxima de um salto $d^2 p/dt^2 = 0$ leva-nos à seguinte expressão:

$$\Delta E^+ = -\frac{1}{\beta} \ln \left(-\frac{\beta}{\nu_0} \frac{d\Delta E^+}{dt} \right) \quad (1.39)$$

Assim, utilizando a equação (1.39) basta definirmos uma expressão para a barreira de energia ΔE^+ , que tenha uma forma similar àquelas propostas por *Gnecco* ou *Sang* para calcularmos as forças de atrito.

1.4.5 Definição da barreira de energia.

De posse destes resultados, irei calcular ΔE reproduzindo o modelo proposto por *Person*[33] com o intuito de, posteriormente, inserir a dependência da barreira de energia com a força normal.

Como proposto por outros autores [41, 42, 43, 33], definiremos a barreira de energia dinâmica como,

$$\Delta E(t) = V(\vec{q}_+(t)) - V(\vec{q}_-(t)), \quad (1.40)$$

onde $V(\vec{q}, t)$ é o potencial total sentido pela ponta, definido pela equação (1.23). As quantidades $\vec{q}_+(t)$ e $\vec{q}_-(t)$ correspondem ao primeiro máximo e mínimo do potencial total próximos de um ponto crítico, determinados pela condição de equilíbrio (1.26).

1.4.6 Cálculo das forças de atrito baseado no MTU.

Para o caso unidimensional, onde a energia potencial total é determinada pela equação (1.16), os pontos críticos x_c e q_{xc} (posição crítica do cantilever e da ponta respectivamente) são determinados pelas condições:

$$\frac{dV_{Tot}}{dq_x}(x_c, q_{xc}) = 0 \quad \frac{d^2 V_{Tot}}{dq_x^2}(x_c, q_{xc}) = 0 \quad (1.41)$$

Dado que a expansão em serie de Taylor de uma função de n variáveis $\vec{s}(x_1, x_2, \dots, x_n)$ em torno de um conjunto de n pontos $\vec{\chi}(\chi_1, \chi_2, \dots, \chi_n)$ é dado por:

$$\begin{aligned} f(\vec{s}) &= f(\vec{\chi}) + \sum_{i=1}^n \frac{\partial f}{\partial x_i} \Big|_{\chi_i} (x_i - \chi_i) + \sum_{i,j=1}^n \frac{1}{2!} \frac{\partial^2 f}{\partial x_i \partial x_j} \Big|_{\chi_i, \chi_j} (x_i - \chi_i)(x_j - \chi_j) \\ &+ \sum_{i,j,k=1}^n \frac{1}{3!} \frac{\partial^3 f}{\partial x_i \partial x_j \partial x_k} \Big|_{\chi_i, \chi_j, \chi_k} (x_i - \chi_i)(x_j - \chi_j)(x_k - \chi_k) + \dots, \end{aligned} \quad (1.42)$$

podemos expandir $V_{Tot}(x, q_x)$ em torno dos pontos (x_c, q_{xc}) para obter:

$$\begin{aligned} V_{Tot}(x, q_x) &\approx V_{Tot}(x_c, q_{xc}) + \frac{\partial V_{Tot}}{\partial x} \Big|_{x_c} (x - x_c) + \frac{1}{3!} \frac{\partial^3 V_{Tot}}{\partial q_x^3} \Big|_{q_{xc}} (q_x - q_{xc})^3 \\ &+ \frac{1}{2!} \left[\frac{\partial^2 V_{Tot}}{\partial x^2} \Big|_{x_c} (x - x_c)^2 + 2 \frac{\partial^2 V_{Tot}}{\partial x \partial q_x} \Big|_{x_c, q_{xc}} (x - x_c)(q_x - q_{xc}) \right] + \dots, \end{aligned}$$

onde por questões de simplicidade de manipulação escreveremos,

$$\begin{aligned} V_{Tot}(x, q_x) &\approx A + B(x - x_c) + C(x - x_c)(q_x - q_{xc}) \\ &+ D(x - x_c)^2 + E(q_x - q_{xc})^3 \dots \end{aligned} \quad (1.43)$$

Para esclarecer o que estamos interessados em calcular, na figura 1.12 mostro um gráfico do potencial total como função de q_x para um dado ponto $x = x_c$ (linha pontilhada) e $x < x_c$ (linha cheia). Note que para $x < x_c$, $V_{Tot}(x, q_x)$ exhibe uma poço de potencial onde a altura da barreira é dada justamente pela equação (1.40).

Utilizando a condição $\partial V_{Tot}/\partial x = 0$, na equação (1.43) para $x < x_c$ obtemos:

$$q_{x\pm} - q_{xc} = \pm \left(\frac{C}{3E} \right)^{1/2} (x_c - x)^{1/2} \quad (1.44)$$

e com isso a altura da barreira será dada por:

$$\Delta E \approx \frac{8}{3} \left(\frac{1}{3E} \right)^{1/2} [C(x_c - x)]^{3/2}. \quad (1.45)$$

C é justamente a segunda derivada cruzada do potencial total, que será igual ao negativo da constante de mola do cantilever. Fazendo as seguintes identificações, $-cx_c = F_{xc}$ sendo a força necessária para que a ponta sofra um salto “irreversível” e $cx = f_x$ sendo a força de atrito instantânea, podemos escrever a barreira de energia de maneira geral como:

$$\Delta E(t) = \frac{1}{\lambda} (F_{xc} - f_x(t))^\alpha, \quad (1.46)$$

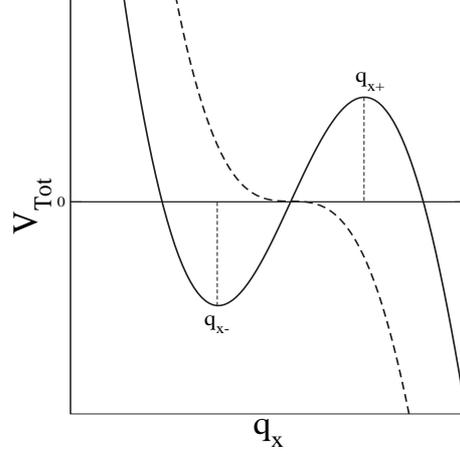


Figura 1.12: Figura ilustrativa para os pontos de máximo e mínimo do potencial próximos do ponto crítico.

onde $\alpha = 3/2$ e $1/\lambda = 8/(3(3E)^{1/2})$. Para finalizar, utilizamos a equação (1.35) e escrevendo,

$$\frac{d\Delta E}{dt} = -\frac{\alpha}{\lambda}(F_{xc} - f_x)^{\alpha-1} \frac{\partial f_x(t)}{\partial x} \frac{\partial x}{\partial t} = -\frac{\alpha}{\lambda}(F_{xc} - f_x)^{\alpha-1} K_{eff}^x v_x \quad (1.47)$$

obtemos a seguinte expressão para a força de atrito média, f_x :

$$f_x = F_{xc} - \left\{ k_B T \lambda \left[\ln \left(\frac{v_0}{v} \right) - (\alpha - 1) \ln \left(1 - \frac{f_x}{F_{xc}} \right) \right] \right\}^{1/\alpha}, \quad (1.48)$$

onde v_0 , λ e ν_0 são relacionados pela expressão:

$$v_0 = \frac{\nu_0 k_B T \lambda}{\alpha K_{eff}^x (F_{xc})^{\alpha-1}} \quad (1.49)$$

As equações 1.48 e 1.49 descrevem exatamente os resultados encontrado por *Gnecco et al.* [42, 41, 43] quando $\alpha = 1$ e $\alpha = 3/2$ respectivamente. Um ponto importante a se notar é que a relação entre λ e F_x^* dependem diretamente da forma do potencial de interação, enquanto que as equações 1.48 e 1.49 descrevem o caso geral para um potencial de interação arbitrário, sem a presença explícita de força normal dado que o modelo é unidimensional.

1.4.7 Dependência da barreira de energia com a força normal e influência nas forças de atrito.

Para inserir a dependência com a força normal[35] na barreira de energia, vamos considerar que o termo $V(\vec{q})$ no potencial total descrito pela equação (1.23) é uma

função que em princípio é desconhecida. Note que a equação (1.23) é uma função de seis variáveis onde três são as posições da ponta dadas por, $\vec{q}_{\parallel} = (q_x, q_y)$ e q_z e as outras três restantes são as posições do cantilever $\vec{r}_{\parallel} = (x, y)$ e z . Na sessão 1.4.2, mostramos que para uma dada posição q_z os pontos críticos no plano são determinados pelo zeros do determinante da matriz Hessiana dada pela equação (1.28) e pela condição de equilíbrio 1.26. Assim, fazendo uma expansão similar àquela definida pela equação (1.42), para as seis variáveis e identificando o vetor $\vec{\chi} = (\vec{q}_{\parallel c}, \vec{r}_{\parallel c}, q_{zc}, z_c)$ obtemos:

$$\begin{aligned} V_{Tot}(\vec{q}_{\parallel}, \vec{r}_{\parallel}, q_z, z) &\approx V_{Tot}(\vec{\chi}) + \left[\frac{\partial V_{Tot}}{\partial \vec{r}_{\parallel}} \Big|_{\vec{\chi}} \cdot (\vec{r}_{\parallel} - \vec{r}_{\parallel c}) + \frac{\partial V_{Tot}}{\partial z} \Big|_{\vec{\chi}} (z - z_c) \right] \\ &+ \frac{1}{2!} \left[\frac{\partial^2 V_{Tot}}{\partial z^2} \Big|_{\vec{\chi}} (z - z_c)^2 + (\vec{r}_{\parallel} - \vec{r}_{\parallel c}) \cdot \frac{\partial^2 V_{Tot}}{\partial \vec{r}_{\parallel}^2} \Big|_{\vec{\chi}} \cdot (\vec{r}_{\parallel} - \vec{r}_{\parallel c}) + 2 \frac{\partial^2 V_{Tot}}{\partial \vec{q}_{\parallel} \partial q_z} \Big|_{\vec{\chi}} \cdot (\vec{q}_{\parallel} - \vec{q}_{\parallel c})(q_z - q_{zc}) \right] \\ &+ \left[\frac{\partial^2 V_{Tot}}{\partial z \partial q_z} \Big|_{\vec{\chi}} (z - z_c)(q_z - q_{zc}) + (\vec{r}_{\parallel} - \vec{r}_{\parallel c}) \cdot \frac{\partial^2 V_{Tot}}{\partial \vec{r}_{\parallel} \partial \vec{q}_{\parallel}} \Big|_{\vec{\chi}} \cdot (\vec{q}_{\parallel} - \vec{q}_{\parallel c}) \right] \\ &+ \frac{1}{2!} \frac{\partial^2 V_{Tot}}{\partial q_z^2} \Big|_{\vec{\chi}} (q_z - q_{zc})^2 + \frac{1}{3!} \frac{\partial^3 V_{Tot}}{\partial \vec{q}_{\parallel}^3} \Big|_{\vec{\chi}} \cdot (\vec{q}_{\parallel} - \vec{q}_{\parallel c})^3 + \dots \end{aligned}$$

Definiremos como maneira de simplificação de nossos contas as seguintes constantes,

$$\begin{aligned} A(x, y, z) &= V_{Tot}(\vec{\chi}) + \left[\frac{\partial V_{Tot}}{\partial \vec{r}_{\parallel}} \Big|_{\vec{\chi}} \cdot (\vec{r}_{\parallel} - \vec{r}_{\parallel c}) + \frac{\partial V_{Tot}}{\partial z} \Big|_{\vec{\chi}} (z - z_c) \right] + \\ &\frac{1}{2!} \left[\frac{\partial^2 V_{Tot}}{\partial z^2} \Big|_{\vec{\chi}} (z - z_c)^2 + (\vec{r}_{\parallel} - \vec{r}_{\parallel c}) \cdot \frac{\partial^2 V_{Tot}}{\partial \vec{r}_{\parallel}^2} \Big|_{\vec{\chi}} \cdot (\vec{r}_{\parallel} - \vec{r}_{\parallel c}) \right] , \end{aligned}$$

$$C_1 = \frac{\partial^2 V_{Tot}}{\partial x \partial q_x} \Big|_{\vec{\chi}} ; C_2 = \frac{\partial^2 V_{Tot}}{\partial z \partial q_z} \Big|_{\vec{\chi}} ; C_3 = \frac{\partial^2 V_{Tot}}{\partial q_x \partial q_z} \Big|_{\vec{\chi}} ,$$

$$E_1 = \frac{\partial^3 V_{Tot}}{\partial q_x^3} \Big|_{\vec{\chi}} ; E_2 = \frac{\partial^3 V_{Tot}}{\partial q_y^3} \Big|_{\vec{\chi}} ; E_3 = \frac{\partial^2 V_{Tot}}{\partial q_z^2} \Big|_{\vec{\chi}} e$$

$$C_{13} = \frac{\partial^2 V_{Tot}}{\partial q_x \partial q_z} \Big|_{\vec{x}} ; C_{23} = \frac{\partial^2 V_{Tot}}{\partial q_y \partial q_z} \Big|_{\vec{x}} .$$

Estas definições levam a uma expressão mais simplificada para a expansão dada por,

$$\begin{aligned} V_{Tot} \approx & A(x, y, z) + C_1(x - x_c)(q_x - q_{xc}) \\ & + C_2(y - y_c)(q_y - q_{yc}) + C_3(z - z_c)(q_z - q_{zc}) \\ & + C_{13}(q_x - q_{xc})(q_z - q_{zc}) + C_{23}(q_y - q_{yc})(q_z - q_{zc}) \\ & + (E_1/6)(q_x - q_{xc})^3 + (E_2/6)(q_y - q_{yc})^3 + (E_3/2)(q_z - q_{zc})^2 + \dots , \end{aligned} \quad (1.50)$$

assim a utilização das condições de equilíbrio na equação (1.50) nos a:

$$(E_1/2)(q_x - q_{xc})^2 + C_{13}(q_z - q_{zc}) + C_1(x - x_c) = 0 , \quad (1.51)$$

$$(E_2/2)(q_y - q_{yc})^2 + C_{23}(q_z - q_{zc}) + C_2(y - y_c) = 0 , \quad (1.52)$$

$$E_3(q_z - q_{zc}) + C_{13}(q_x - q_{xc}) + C_{23}(q_y - q_{yc}) + C_3(z - z_c) = 0 . \quad (1.53)$$

$$(1.54)$$

Substituindo a equação (1.53) em (1.51), (1.52) e mantendo somente termos de primeira ordem em C_{13} , C_{23} obtemos duas equações quadráticas em q_x , q_y cujas soluções são dadas por,

$$q_{x\pm} - q_{xc} = \pm \frac{1}{E_1^{1/2}} \sqrt{2C_1(x'_c - x)} \quad e \quad (1.55)$$

$$q_{y\pm} - q_{yc} = \pm \frac{1}{E_2^{1/2}} \sqrt{2C_2(y'_c - y)} , \quad (1.56)$$

onde

$$\begin{aligned} C_1 x'_c &= C_1 x_c - (C_{13}/E_3) C_3 (z_c - z) \quad e \\ C_2 y'_c &= C_2 y_c - (C_{23}/E_3) C_3 (z_c - z) . \end{aligned}$$

Agora, usando as equações (1.55), (1.56), (1.53) e (1.50) encontramos que a barreira de energia tem uma forma muito similar àquela derivada para o modelo unidimensional, porém com algumas modificações importantes,

$$\Delta E(t) = \frac{1}{\lambda_1(\theta)} \left[F'_{lc}(f_z(t)) - f_t(t) \right]^{3/2} \quad (1.57)$$

onde definimos:

$$\begin{aligned}
 C_1x(t) &= f_l(t) \cos(\theta) \quad ; \quad C_2y(t) = f_l(t) \sin(\theta) \quad , \\
 C_1x_c &= F_{lc} \cos(\theta) \quad ; \quad C_2y_c = F_{lc} \sin(\theta) \quad , \\
 C_1x'_c &= F'_{lc} \cos(\theta) \quad ; \quad C_2y'_c = F'_{lc} \sin(\theta) \quad , \\
 \mu_{0x} &= \frac{C_{13}}{E_3} \quad ; \quad \mu_{0y} = \frac{C_{23}}{E_3} \quad , \\
 F_{zc} &= C_3z_c \quad ; \quad f_z(t) = C_3z(t) \quad ,
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 f_l(t) &= \sqrt{(C_1x(t))^2 + (C_2y(t))^2} \quad , \\
 F_{lc} &= \sqrt{(C_1x_c)^2 + (C_2y_c)^2} \quad , \\
 F'_{lc}(f_z(t))^2 &= F_{lc}^2 + (\mu_{0x}^2 + \mu_{0y}^2)(f_z(t) - F_{zc})^2 \\
 &\quad + 2F_{lc}(\mu_{0x} \cos(\theta) + \mu_{0y} \sin(\theta))(f_z(t) - F_{zc}) \quad e \quad (1.58)
 \end{aligned}$$

$$\lambda_1(\theta) = \frac{2^{\frac{7}{2}}}{3} \left\{ \frac{|\cos(\theta)|^{\frac{3}{2}}}{E_1^{\frac{1}{2}}} + \frac{|\sin(\theta)|^{\frac{3}{2}}}{E_2^{\frac{1}{2}}} \right\} . \quad (1.59)$$

Com este resultado, acabamos de mostrar que a barreira de energia, ΔE , apresenta uma dependência linear com a força normal, f_z , e com a direção definida pelo ângulo $0 \leq \theta \leq \pi$ em que o cantilever é puxado no plano xy . Com esta definição vamos ver agora, como esta dependência afeta a força de atrito. Utilizando as equações 1.57 e 1.39 podemos escrever,

$$\frac{d\Delta E}{dt} = -\frac{3}{2} \frac{1}{\lambda_1} \left[F'_{lc}(f_z) - f_l \right]^{1/2} |\varphi v_l + \kappa_{eff}^z (1 - \gamma) v_z| \quad , \quad (1.60)$$

sendo que,

$$\varphi(\theta, f_z) = \kappa_{eff}^x \cos(\theta) + \kappa_{eff}^y \sin(\theta) \quad (1.61)$$

$$\gamma(\theta, f_z) = \frac{(\mu_{0x}^2 + \mu_{0y}^2)(f_z(t) - F_z^*) + F_{lc}(\mu_{0x} \cos(\theta) + \mu_{0y} \sin(\theta))}{F'_{lc}} \quad , \quad (1.62)$$

onde κ_{eff}^α é a rigidez de contato efetiva[1] nas direções $\alpha = x, y, z$. É importante ressaltar que os $\kappa_{eff}^{x,y}$ são funções da força normal, assim como mostrado nas seções anteriores.

Assim, obtemos uma força de atrito dada por,

$$f_l = F'_{lc}(f_z) - \left\{ k_b T \lambda_1(\theta) \left[\ln \left(\frac{v_0(f_z)}{|\varphi v_l + \kappa_{eff}^z (1-\gamma) v_z|} \right) - \frac{1}{2} \ln \left(1 - \frac{f_l}{F'_{lc}(f_z)} \right) \right] \right\}^{2/3}, \quad (1.63)$$

onde

$$\begin{aligned} v_x &= v_l \cos(\theta) \quad ; \quad v_y = v_l \sin(\theta) \quad , \\ v_l &= \sqrt{(v_x)^2 + (v_y)^2} \quad , \\ v_0(f_z) &= \frac{2\nu_0 k_b T \lambda_1(\theta)}{3(F'_{lc})^{1/2}}. \end{aligned} \quad (1.64)$$

Note que este resultado tem uma forma muito similar àquela apresentado por *Riedo et.al.* [42] e que foi desenvolvido nas seções anteriores. No entanto, este novo modelo traz algumas informações novas tais como, a dependência da força de atrito com: *a*) a força normal que aparece explicitamente na equação (1.63) e que mostra claramente os motivos pelo qual os valores experimentais das constantes F'_x , v_0 e λ ajustados por *Riedo et.al.* [42] dependem da força normal. *b*) o ângulo relativo à uma certa direção da estrutura cristalina da superfície, em que o cantilever é puxado no plano xy . *c*) a velocidade normal, v_z ao plano, em que Jeon et. al.[46] mostrou experimentalmente e usando simulações.

Outro ponto importante a se destacar é que, dado a presença da força normal no modelo teórico para as forças de atrito, é natural pensarmos no coeficiente de atrito, do mesmo modo como foi definido na equação (1.1), e com isso obtemos,

$$\begin{aligned} \mu(t) &= \frac{\partial f_L(t)}{\partial f_z(t)} = \gamma - 2k_b T \lambda_1 \times \\ &\times \frac{\left[\frac{\partial \varphi}{\partial f_z} v_l - \kappa_{eff}^z \frac{\partial \gamma}{\partial f_z} v_z \right]}{[\varphi v_l + \kappa_{eff}^z (1-\gamma) v_z]} \frac{\left\{ \ln \left(\frac{v_0}{|\varphi v_l + \kappa_{eff}^z (1-\gamma) v_z|} \right) - \frac{1}{2} \ln \left(1 - \frac{f_l}{F'_{lc}} \right) \right\}^{2/3}}{\left\{ 1 + 3 \left[\ln \left(\frac{v_0}{|\varphi v_l + \kappa_{eff}^z (1-\gamma) v_z|} \right) - \frac{1}{2} \ln \left(1 - \frac{f_l}{F'_{lc}} \right) \right] \right\}} \end{aligned}, \quad (1.65)$$

onde

$$\frac{\partial \varphi}{\partial f_z} = \frac{\partial \kappa_{eff}^x}{\partial f_z} \cos(\theta) + \frac{\partial \kappa_{eff}^y}{\partial f_z} \sin(\theta) \quad e \quad (1.66)$$

$$\frac{\partial \gamma}{\partial f_z} = \frac{F_{lc}^2 [\mu_{0x} \sin(\theta) - \mu_{0y} \cos(\theta)]^2}{(F'_{lc})^3} . \quad (1.67)$$

Para finalizar é importante salientar que conhecendo o potencial entre a ponta e a superfície, com este resultado podemos fazer uma previsão teórica de qual é o valor para o coeficiente de atrito de forma analítica. Na próxima seção definiremos um potencial para a interação entre a ponta e a superfície e calcularemos os parâmetros do modelo e mostraremos os resultados para as forças de atrito e para o coeficiente de atrito calculados neste trabalho. No Capítulo 3 mostraremos o resultados de nossas simulações comparado com esta previsão analítica, sendo que estes indicam que o coeficiente de atrito depende da velocidade, da temperatura e da força normal como mostra a equação (1.65).

1.4.8 Cálculo dos Parâmetros para a Modelo Analítico

Nesta seção usando um potencial total conhecido, vamos calcular os parâmetros definidos no modelo analítico para a força de atrito. Para este propósito, usaremos o potencial total que surge de uma superfície sem graus de liberdade internos dados pela equação (1.25). Neste ponto definiremos um arranjo BCC(001) para os átomos e com isso o potencial total se torna,

$$V_{Tot} = \frac{1}{2} \left[(\vec{q} - \vec{r}) \cdot \overleftrightarrow{k} \cdot (\vec{q} - \vec{r}) \right] + U_0(q_z) + 2U_1(q_z) [\cos(G_x q_x) + \cos(G_y q_y)] . \quad (1.68)$$

Agora impondo as condições de estabilidade e equilíbrio definidas pelas equações (1.27) e (1.26) na equação (1.68) obtemos,

$$\begin{aligned} \left. \frac{\partial V_{Tot}}{\partial q_x} \right|_{\substack{x_c, y_c, z_c \\ q_x, q_y, q_z}} &= k_x (q_{xc} - x_c) - 2U_1(q_{zc}) \sin(G_x q_{xc}) G_x = 0 \quad , \\ \left. \frac{\partial V_{Tot}}{\partial q_y} \right|_{\substack{x_c, y_c, z_c \\ q_x, q_y, q_z}} &= k_y (q_{yc} - y_c) - 2U_1(q_{zc}) \sin(G_y q_{yc}) G_y = 0 \quad , \\ \left. \frac{\partial V_{Tot}}{\partial q_z} \right|_{\substack{x_c, y_c, z_c \\ q_x, q_y, q_z}} &= k_z (q_{zc} - z_c) + U'_0(q_z) + 2U'_1(q_{zc}) [\cos(G_x q_{xc}) + \cos(G_y q_{yc})] = 0 \quad , \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 V_{Tot}}{\partial q_x^2} &= k_x - 2U_1(q_z) \cos(G_x q_x) G_x^2 \quad , \\ \frac{\partial^2 V_{Tot}}{\partial q_y^2} &= k_y - 2U_1(q_z) \cos(G_y q_y) G_y^2 \quad , \end{aligned}$$

$$\frac{\partial^2 V_{Tot}}{\partial q_x \partial q_y} = 0 \quad ,$$

$$\left[\frac{\partial^2 V_{Tot}}{\partial q_x^2} \frac{\partial^2 V_{Tot}}{\partial q_y^2} - \left(\frac{\partial^2 V_{Tot}}{\partial q_y \partial q_x} \right)^2 \right] \Bigg|_{q_{xc}, q_{yc}, q_{zc}}^{x_c, y_c, z_c} = 0 \quad e$$

$$[k_x - 2U_1(q_{zc}) \cos(G_x q_{xc}) G_x^2] [k_y - 2U_1(q_{zc}) \cos(G_y q_{yc}) G_y^2] = 0 \quad .$$

Neste ponto definiremos,

$$\eta_x = \frac{k_x}{2U_1(q_{zc}) G_x^2} \quad , \quad \eta_y = \frac{k_y}{2U_1(q_{zc}) G_y^2} \quad , \quad (1.69)$$

$$q_{xc} = \frac{1}{G_x} \arccos(\eta_x) \quad ; \quad \sin(G_x q_{xc}) = \pm \sqrt{1 - \eta_x^2} \quad e$$

$$q_{yc} = \frac{1}{G_y} \arccos(\eta_y) \quad ; \quad \sin(G_y q_{yc}) = \pm \sqrt{1 - \eta_y^2} \quad . \quad (1.70)$$

Como se pode ver, encontramos os pontos críticos onde ocorre uma instabilidade mecânica, em outras palavras uma transição do tipo “stick-slip”. Usando esta informação, podemos agora calcular os parâmetros que estamos interessados. Os dois primeiros parâmetros que vamos calcular são F_{lc} e F_{zc} e assim obtemos,

$$C_1 = \frac{\partial^2 U_{Tot}}{\partial q_x \partial x} \Bigg|_{q_{xc}, q_{yc}, q_{zc}}^{x_c, y_c, z_c} = -k_x \quad ,$$

$$C_2 = \frac{\partial^2 U_{Tot}}{\partial q_y \partial y} \Bigg|_{q_{xc}, q_{yc}, q_{zc}}^{x_c, y_c, z_c} = -k_y \quad ,$$

$$C_3 = \frac{\partial^2 U_{Tot}}{\partial q_z \partial z} \Bigg|_{q_{xc}, q_{yc}, q_{zc}}^{x_c, y_c, z_c} = -k_z \quad , \quad (1.71)$$

$$(C_1 x_c) = -\frac{k_x}{G_x} \left(\arccos(\eta_x) + \frac{1}{\eta_x} \sqrt{1 - \eta_x^2} \right) \quad , \quad (1.72)$$

$$(C_2 y_c) = -\frac{k_y}{G_y} \left(\arccos(\eta_y) + \frac{1}{\eta_y} \sqrt{1 - \eta_y^2} \right) \quad , \quad (1.73)$$

$$F_{lc} = \sqrt{(C_1 x_c)^2 + (C_2 y_c)^2} \quad e \quad (1.74)$$

$$F_{zc} = C_3 z_c = -k_z q_{zc} - U'_0(q_{zc}) - \frac{U'_1(q_{zc})}{U_1(q_{zc})} \left[\frac{k_x}{G_x^2} + \frac{k_y}{G_y^2} \right] \quad . \quad (1.75)$$

Agora, vamos calcular os dois últimos parâmetros μ_0 e $\lambda_1(\theta)$. Iniciaremos calculando C_{13} , C_{23} e E_3 :

$$C_{13} = \frac{\partial^2 U_{Tot}}{\partial q_x \partial q_z} \Bigg|_{q_{x_c, q_{y_c}, q_{z_c}}}^{x_c, y_c, z_c} = -2U_1'(q_{z_c})G_x \sqrt{1 - \eta_x^2} \ , \quad (1.76)$$

$$C_{23} = \frac{\partial^2 U_{Tot}}{\partial q_y \partial q_z} \Bigg|_{q_{x_c, q_{y_c}, q_{z_c}}}^{x_c, y_c, z_c} = -2U_1'(q_{z_c})G_y \sqrt{1 - \eta_y^2} \ , \quad (1.77)$$

$$E_3 = \frac{\partial^2 U_{Tot}}{\partial q_z^2} \Bigg|_{q_{x_c, q_{y_c}, q_{z_c}}}^{x_c, y_c, z_c} = k_z + U_0''(q_{z_c}) + \frac{U_1''(q_{z_c})}{U_1(q_{z_c})} \left[\frac{k_x}{G_x^2} + \frac{k_y}{G_y^2} \right] \neq 0 \ , \quad (1.78)$$

$$\mu_{0x} = \frac{-2U_1'(q_{z_c})G_x \sqrt{1 - \eta_x^2}}{|E_3|} \quad \mu_{0y} = \frac{-2U_1'(q_{z_c})G_y \sqrt{1 - \eta_y^2}}{|E_3|} \ , \quad (1.79)$$

e, agora, calculando E_1 , E_2 chegamos a

$$E_1 = \frac{\partial^3 U_{Tot}}{\partial q_x^3} \Bigg|_{q_{x_c, q_{y_c}, q_{z_c}}}^{x_c, y_c, z_c} = \frac{k_x G_x}{\eta_x} \sqrt{1 - \eta_x^2} \ , \quad (1.80)$$

$$E_2 = \frac{\partial^3 U_{Tot}}{\partial q_y^3} \Bigg|_{q_{x_c, q_{y_c}, q_{z_c}}}^{x_c, y_c, z_c} = \frac{k_y G_y}{\eta_y} \sqrt{1 - \eta_y^2} \ , \quad (1.81)$$

$$\lambda_1(\theta) = \frac{2^{\frac{7}{2}}}{3} \left\{ \left(\frac{\eta_x}{k_x G_x} \right)^{1/2} \frac{|\cos(\theta)|^{\frac{3}{2}}}{(1 - \eta_x^2)^{1/4}} + \left(\frac{\eta_y}{k_y G_y} \right)^{1/2} \frac{|\sin(\theta)|^{\frac{3}{2}}}{(1 - \eta_y^2)^{1/4}} \right\} \ . \quad (1.82)$$

Note que todos os parâmetros F_{lc} , F_z^* , μ_0 , e λ_1 são funções do ponto crítico q_{z_c} . Portanto usando as funções $U_0(q_z)$ e $U_1(q_z)$ do potencial de Steele definidos por[36],

$$U_0(q_z) = \frac{2\pi q \sigma_{ts}^6 \varepsilon_{ts}}{a_s} \sum_{p=0}^{\infty} \frac{1}{(q_z + p\Delta q_z)^4} \left(\frac{2\sigma_{ts}^6}{5(q_z + p\Delta q_z)^6} - 1 \right) \ , \quad (1.83)$$

$$U_0'(q_z) = -\frac{8\pi q \sigma_{ts}^6 \varepsilon_{ts}}{a_s} \sum_{p=0}^{\infty} \frac{1}{(q_z + p\Delta q_z)^5} \left(\frac{\sigma_{ts}^6}{(q_z + p\Delta q_z)^6} - 1 \right) \ , \quad (1.84)$$

$$U_0''(q_z) = \frac{8\pi q \sigma_{ts}^6 \varepsilon_{ts}}{a_s} \sum_{p=0}^{\infty} \frac{1}{(q_z + p\Delta q_z)^6} \left(\frac{11\sigma_{ts}^6}{(q_z + p\Delta q_z)^6} - 5 \right) \ , \quad (1.85)$$

onde p é um inteiro, q é o numero total de átomos por célula unitária da superfície, Δq_z é a distância entre planos, $a_s = a_1^2$, é a área da célula unitária da superfície, $a_1 = \sigma_{ss}$, σ_{ss} é a distância entre os vizinhos mais próximos na superfície, σ_{ts} e ε_{ts} são os parâmetros do potencial (12-6) de Lennard-Jones entre a ponta e os átomos da superfície, e

$$U_1(q_z) = \frac{2\pi\sigma_{ts}^6\varepsilon_{ts}}{a_s} \left[\frac{\sigma_{ts}^6}{30} \left(\frac{g_1}{2q_z} \right)^5 K_5(g_1q_z) - 2 \left(\frac{g_1}{2q_z} \right)^2 K_2(g_1q_z) \right], \quad (1.86)$$

$$U_1'(q_z) = \frac{-2\pi\sigma_{ts}^6\varepsilon_{ts}}{a_s} \left\{ \frac{\sigma_{ts}^6}{30} \left(\frac{g_1}{2q_z} \right)^5 \left[\frac{10K_5(g_1q_z)}{q_z} + g_1K_4(g_1q_z) \right] - 2 \left(\frac{g_1}{2q_z} \right)^2 \left[\frac{4K_2(g_1q_z)}{q_z} + g_1K_1(g_1q_z) \right] \right\}, \quad (1.87)$$

$$U_1''(q_z) = \frac{2\pi\sigma_{ts}^6\varepsilon_{ts}}{a_s} \left\{ \frac{\sigma_{ts}^6}{30} \left(\frac{g_1}{2q_z} \right)^5 \left[\frac{110K_5(g_1q_z)}{q_z^2} + \frac{19g_1K_4(g_1q_z)}{q_z} + g_1^2K_3(g_1q_z) \right] - 2 \left(\frac{g_1}{2q_z} \right)^2 \left[\frac{20K_2(g_1q_z)}{q_z^2} + \frac{7g_1K_1(g_1q_z)}{q_z} + g_1^2K_0(g_1q_z) \right] \right\}, \quad (1.88)$$

onde K_n é a função de Bessel modificada de segundo gênero e $g_1 = G_x = G_y = 2\pi/a_1$.

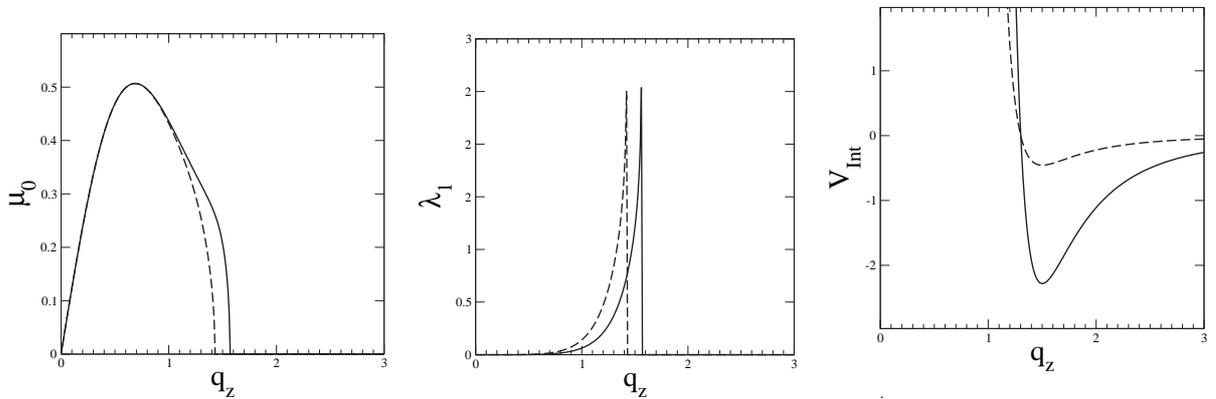


Figura 1.13: Os parâmetros $\mu_{0x} = \mu_{0y} = \mu_0$ (esquerda), λ_1 (centro) e $U_{int}(\vec{q}_{\parallel} = (a_1, a_1), q_z)$ (direita) como função de q_z para $\theta = 0$, $\sigma_{ts} = 1.2\sigma_{ss}$, $\varepsilon_{ts} = 0.5\varepsilon_{ss}$ (linha cheia), $0.1\varepsilon_{ss}$ (linha pontilhada).

Usando as equações (1.83) até (1.88) mostramos na figura 1.13 os parâmetros $\mu_{0x} = \mu_{0y} = \mu_0$, λ_1 e $U_{int}(\vec{q}_{||} = (a_1, a_1), q_z)$ como uma função de q_z , para valores de $\eta_x = \eta_y < 1$, sendo que estamos interessados em valores reais para os parâmetros F'_{Lc} e λ_1 , e para $\varepsilon_{ts} = 0.5\varepsilon_{ss}$ (linha cheia), $0.1\varepsilon_{ss}$ (linha pontilhada).

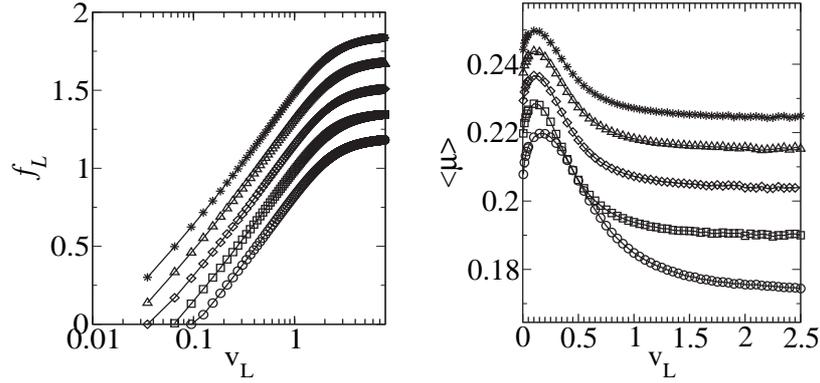


Figura 1.14: Força de atrito(esquerda) e coeficiente de atrito(direita) como função da velocidade para diferentes valores da força normal definidos pelas equações (1.63) e (1.65). (\circ) f_{N1} < (\square) f_{N2} < (\diamond) f_{N3} < (Δ) f_{N4} < ($*$) f_{N5}

Assim, selecionando um valor apropriado para q_{zc} , próximo do valor mínimo de U_{int} (direita), definidos na figura (1.13), e escolhendo valores para, ν_0 (frequência de transição de saltos) e $G^* \left[\frac{R}{E^*} \right]^{1/3}$ (Ver seção 1.3.2), as curvas de força de atrito teóricas como função da velocidade para diferentes valores da força normal, mostradas na figura (1.14)(esquerda) concordam qualitativamente com os resultados experimentais apresentados por *Riedo et.al.* [42] e mostrado na figura 1.15.

No capítulo 3 mostraremos que tanto nossa previsão teórica das forças de atrito(figura (1.14)(esquerda)) quanto do coeficiente de atrito(figura (1.14) (direita)) concordam tanto qualitativamente quanto quantitativamente bem com os resultados de nossas simulações de DM, confirmando que nossa generalização feita para o modelo unidimensional leva a uma previsão consistente do fenômeno de atrito.

Na figura 1.16 apresento a dependência da força de atrito(esquerda) e do coeficiente de atrito(direita) como função da força normal f_z . Note que apesar do termo logarítmico da força de atrito, descrita pela equação (1.63), esta continua apresentando um comportamento linear com a força normal. O coeficiente de atrito, apresenta um crescimento abrupto para pequenos valores de f_z e tende assintot-

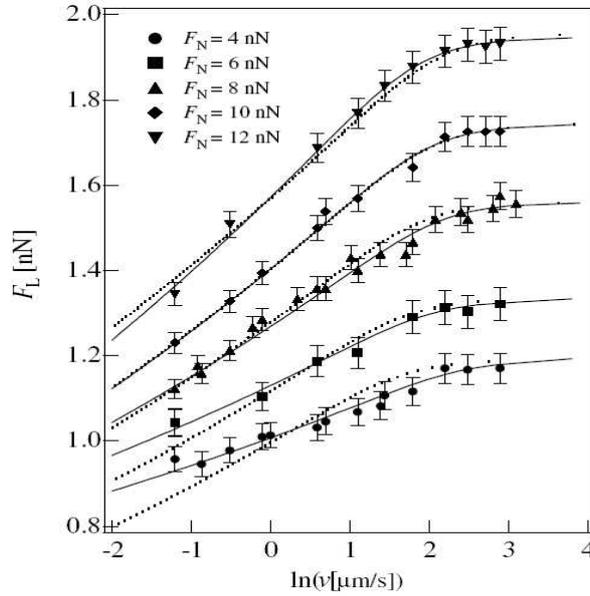


Figura 1.15: Resultados experimentais apresentados por *Riedo et.al.* [42] para a força de atrito como função do logaritmo da velocidade para diferentes valores da força normal. Os pontos são os resultados experimentais e as linhas são os ajustes baseados no modelo unidimensional apresentado nas seções anteriores.

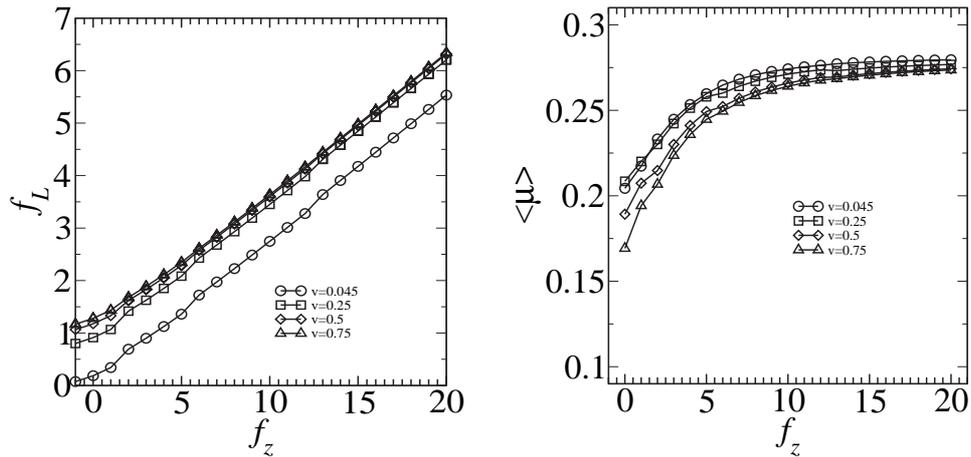


Figura 1.16: Força de atrito(esquerda) e coeficiente de atrito(direita) como função da força normal para 4 diferentes valores da velocidade, $v = 0.45(\circ)$, $0.25(\square)$, $0.5(\diamond)$ e $0.75(\triangle)$.

icamente para um valor constante quando a força normal tende para o infinito, $\mu_{f_z \rightarrow \infty} = Const.$

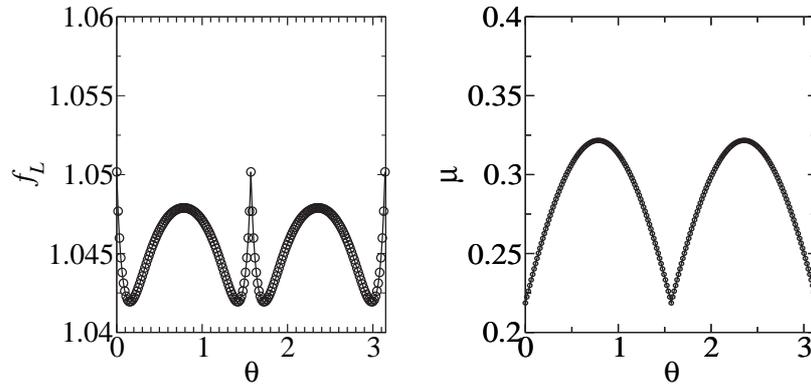


Figura 1.17: Dependência da força de atrito(esquerda) e do coeficiente de atrito(direita) como função do ângulo de varredura θ relativo à direção (100) da rede.

Na figura 1.17 apresento a dependência da força de atrito(esquerda) e do coeficiente de atrito(direita) como função do ângulo de varredura θ relativo à direção (100) da rede. É importante ressaltar que este resultado é um caso particular para o potencial definido pela equação (1.68) e que este irá depender fortemente das simetrias do substrato. Simulações que tentam comprovar se estas previsões estão corretas, estão sendo feitas. No entanto, note que este resultado respeita as simetrias da face (001) sendo que para $\theta = 0, \pi/2, \pi$ a força/coeficiente de atrito tomam os mesmos valores.

Capítulo 2

Dinâmica Molecular(DM)

2.1 Introdução - Simulações Atômicas.

As técnicas descritas neste capítulo, fazem parte de uma aproximação chamada Dinâmica Molecular Clássica (MD), que é descrita extensivamente em um grande número de livros e artigos de revisão.[47, 48, 49, 50, 51, 52, 53, 54].

Esta aproximação, inicia-se definindo o potencial de interação, que vai produzir as forças em uma partícula individual e a dinâmica destas partículas, tipicamente átomos e moléculas. O próximo passo, é especificar as condições de contorno e condições iniciais do problema. O tempo nas equações de movimento é discretizado e as equações integradas numericamente.

Em DM micro-canônica, usada comumente para estudos de difusão superficial, a solução das equações de movimento levam à conservação da energia total. A temperatura é calculada como uma média da energia cinética do sistema. Em alguns casos é preciso empregar DM canônica em que o sistema é acoplado a um termostato (banho térmico). Por exemplo, nas simulações de crescimento, a temperatura deve ser controlada externamente para evitar o aquecimento do sistema.

Os potenciais podem ser derivados de diversas aproximações, dependendo do grau de sofisticação desejado. Os potenciais tipicamente mais usados são potenciais do tipo Lennard-Jones, potenciais derivados de cálculos *ab-initio*(teoria de funcional da densidade, Hartre-Fock)[55] e potenciais semi-empíricos.

Um ponto importante em simulações de DM é que o esforço computacional cresce com o grau de complexidade do potencial. Além disso dois outros fatores

influenciam no tempo de computação: O número de partículas, N e o tempo total de simulação. É importante notar-se que o esforço aumenta substancialmente com a complexidade das interações, escalando linearmente com N para interações de curto alcance e com N^3 para interações de longo alcance ou aproximações de funcional densidade.

2.2 Condições de Contorno

O número de partículas e a forma como as interações entre elas são definidas são alguns dos fatores limitantes nos tamanhos das amostras nas simulações. Como regra geral as amostras nas simulações são muito menores que os sistemas calculados experimentalmente, levando a sérios efeitos devido ao tamanho finito. Uma das formas de minimizar estes efeitos é fazer uso de condições de contorno periódicas [47, 48, 51, 52, 53, 54]. Esta técnica consiste em considerar o sistema dentro de uma caixa cúbica, repetida nas direções espaciais para as quais se interessa minimizar os efeitos de borda, com o intuito de simular uma sistema sem fronteiras em tais direções. No decorrer da simulação quando uma partícula se move na caixa original, sua imagem periódica irá se mover, do mesmo modo, em cada um dos sistemas vizinhos. Assim, quando uma partícula deixa a caixa original, a sua imagem periódica entra no mesmo sistema pelo lado oposto.

Devemos nos questionar, se as propriedades do sistema limitado utilizando condições periódicas, se assemelham às do sistema macroscópico o qual representa. Isso dependerá tanto do alcance do potencial utilizado, quanto do comprimento de correlação do fenômeno estudado. O uso dessa condição inibe a ocorrência de flutuações de longo alcance. Portanto para uma caixa de lado L , a periodicidade irá aniquilar qualquer propriedade associada com comprimento de onda maior que L . A exigência mínima que deve ser feita, é que o sistema tenha uma dimensão maior que o alcance de qualquer correlação significativa do sistema.

2.3 Divisão Celular

Em simulações de DM os potenciais de interação podem, dentro de alguma aproximação, ser limitados a um raio de corte, r_c , de modo que a vizinhança de cada

partícula fica limitada a uma única esfera de raio r_c . Uma maneira ineficiente de se determinar os vizinhos de cada partícula é perguntar para todo o sistema quais átomos estão dentro do raio de corte r_c . O centro do volume limitado por r_c é a posição da partícula que se deseja fazer a procura. Assim, para cada partícula perguntaremos quais dos $N - 1$ átomos restantes serão os vizinhos. Logo, teremos um total de $N(N - 1)$ repetições em cada passo de tempo, o que torna este método demasiadamente demorado e inviável para sistemas grandes. Neste trabalho usaremos duas técnicas para diminuir o tempo de simulação: A divisão celular e a tabela de vizinhos de Verlet descrita abaixo.

Divisão celular fornece uma maneira de organizar a informação sobre a posição das partículas de forma a evitar trabalhos desnecessários. Imagine que o sistema simulado é dividido em uma rede de pequenas células com um volume $V_{cel} \geq r_c^3$. Assim, as possíveis interações são entre as partículas que estão na mesma célula ou nas células imediatamente adjacentes (ver figura 2.1). Logo, em 3 dimensões o número mínimo de células a ser examinadas para cada partícula é 27, diminuindo o tempo computacional para, $t_c \sim \frac{27N}{n_c}$, onde n_c é o número total de células. Supondo, $V_{cel} = r_c^3$ e que o número total de partículas, N , esteja igualmente distribuídos em uma região de volume V , tal que, $V \sim N$, o valor de n_c será dado por,

$$n_c = \frac{V}{r_c^3} \sim \frac{N}{r_c^3} \quad (2.1)$$

e com isso o tempo computacional gasto para cada partícula será $t_c \sim 27r_c^3$. Este método pode ser usado em conjunto com a Tabela de Vizinhos de Verlet.

2.4 Tabela de Vizinhos de Verlet

Este método consiste em construir uma lista de vizinhos para cada partícula do sistema [48]. Essa lista é construída dentro de um raio $r_v = r_c + \Delta r$, (ver figura 2.1), o valor Δr é determinado pela relação,

$$\Delta r \leq n \bar{v} \Delta t \quad (2.2)$$

onde Δt é o valor do tamanho do passo do tempo, \bar{v} é a velocidade média dos átomos e n o número de vezes que a lista é utilizada antes de ser renovada.

Durante o período que a lista não é renovada, as interações dos átomos serão realizadas consultando a tabela e verificando quais dos átomos estão a uma distância

r_c . O ganho computacional é bastante significativo e inversamente proporcional ao tempo gasto na construção dessa tabela que corresponde a uma das tarefas mais demoradas nos programas de simulação que utilizam DM.

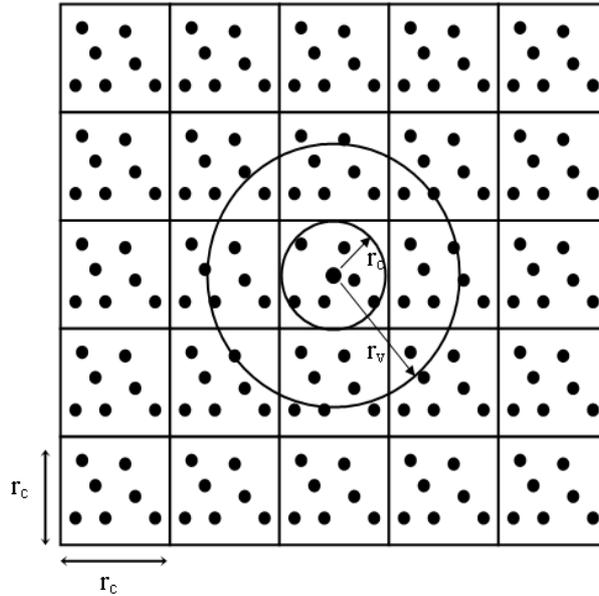


Figura 2.1: Esquema ilustrativo do método de Divisão Celular em conjunto com o método de Tabela de Vizinhos de Verlet.

2.5 Configuração Inicial

Nos sólidos cristalinos, como metais, os átomos estão arranjados de maneira regular. Um cristal ideal é definido como uma estrutura de átomos espacialmente ordenados para formar uma rede tri-dimensional que é determinada pelos vetores de translação \vec{a}_1 , \vec{a}_2 , \vec{a}_3 . Estes Vetores definem pequenas células, que se repetem, chamadas de células unitárias do cristal.[51, 56]

Definindo um ponto arbitrário \vec{r} como a origem dos três vetores podemos gerar uma rede pela translação da origem para X novos pontos definidos por $\vec{r}' = \vec{r} + n_1\vec{a}_1 + n_2\vec{a}_2 + n_3\vec{a}_3$ onde $X = n_1 + n_2 + n_3$ e n_1 , n_2 e n_3 são inteiros, cada um variando de 1 a n , e n é escolhido para produzir o cristal com o volume desejado. O conjunto de todos os pontos definidos por todas as combinações lineares, inteiras,

dos vetores de translação primitivos $\vec{r} = n_1\vec{a}_1 + n_2\vec{a}_2 + n_3\vec{a}_3$ é chamado de uma rede de Bravais [56]. Existem 14 diferentes tipos de redes de Bravais como mostra a figura 2.2, e estas redes são suficientes para descrever a simetria de translação de qualquer rede cristalina [57].

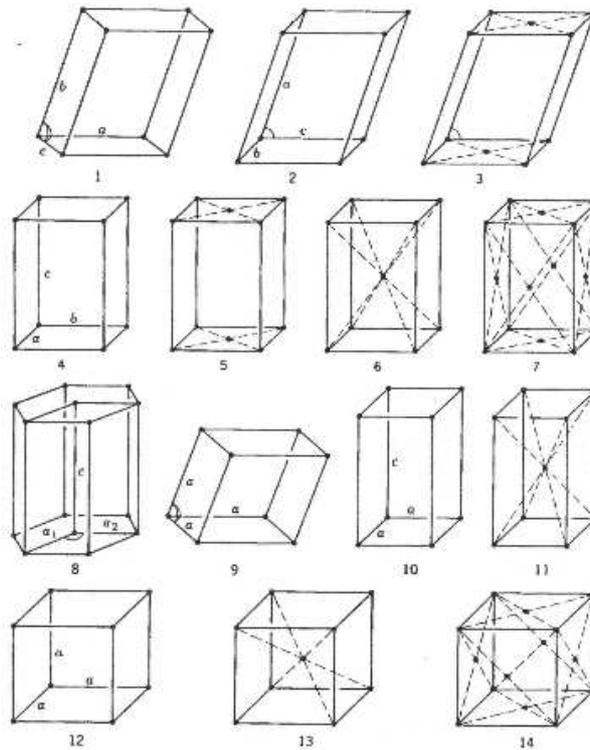


Figura 2.2: Ilustração dos 14 tipos de redes de Bravais.(1) Triclínica simple, (2) Monoclínica simples,(3) monoclínica de base centrada, (4) Ortorrômbica simples, (5) Ortorrômbica de base centrada, (6) Ortorrômbica de corpo centrado, (7) Ortorrômbica de face centrada, (8) hexagonal,(9) Romboédrica, (10) tetragonal simples, (11) tetragonal de corpo centrado, (12) cúbica simples, (13) cúbica de corpo centrado(BCC) e (14) cúbica de face centrada(FCC)

As configurações iniciais, normalmente utilizadas nas simulações de sólidos, são geradas dispondo os átomos nas posições que minimizam a energia de interação entre elas, ou seja, nas posições definidas pela rede de Bravais de interesse.

A energia cinética inicial do sistema esta diretamente relacionada com as velocidades iniciais das partículas que o compõem. Assim, como a energia cinética também esta relacionada com a temperatura pelo princípio de equi-partição da energia, a magnitude das velocidades iniciais tem seu valor definido de acordo com

a temperatura inicial que se deseja, sendo as direções escolhidas aleatoriamente, e a partir disto usamos renormalização de velocidades(Seção 2.7.1) para conduzir o sistema à temperatura escolhida [47, 48, 51, 54].

2.6 Algoritmo de Integração Numérica

Existe uma grande variedade de métodos numéricos de integração baseados em algoritmos de diferenças finitas, que resultam na discretização do tempo através da introdução de um pequeno intervalo de tempo Δt .

Os métodos de integração podem ser avaliados considerando os seguintes critérios [47, 48, 51, 54]:

- Eficiência - O passo no tempo Δt deve ser o maior possível e o tempo de execução o menor possível para permitir que o tempo total de simulação seja comparável aos tempos característicos do sistema real.
- Simplicidade - A rotina de integração deve ser simples e não requerer grande quantidade de memória.
- Precisão - Os desvios das trajetórias exatas devem ser pequenos e as leis de conservação devem ser satisfeitas.

Um método que se encaixa bem nos critérios citados acima é conhecido como algoritmo modificado de Beeman [50, 58, 59, 60]. Neste trabalho utilizaremos o algoritmo de Beeman em conjunto com o algoritmo de Runge-Kutta de ordem quatro[61]. Com o Runge-Kutta calculamos, a partir das configurações iniciais, as acelerações nos instantes $\vec{r}(t)$ e $\vec{r}(t + \Delta t)$ tendo em vista que o algoritmo de Beeman é um algoritmo de passos múltiplos, que necessita do conhecimento das acelerações em tempos anteriores, as seguintes transformações serão feitas $\vec{r}(t) \rightarrow \vec{r}(t - \Delta t)$ e $\vec{r}(t + \Delta t) \rightarrow \vec{r}(t)$. Assim, podemos evoluir as posições e as velocidades das partículas no algoritmo de Beeman como segue:

$$\vec{r}(t + \Delta t) = \vec{r}(t) + \Delta t \vec{r}(t) + \frac{\Delta t^2}{6} [4\vec{r}(t) - \vec{r}(t - \Delta t)] \quad (2.3)$$

e

$$\vec{r}(t + \Delta t) = \vec{r}(t) + \frac{\Delta t}{6} [5\vec{r}(t) + 2\vec{r}(t + \Delta t) - \vec{r}(t - \Delta t)]. \quad (2.4)$$

e as mesmas transformações citadas acima são realizadas a cada passo de tempo.

2.7 Controle de Temperatura

2.7.1 Renormalização de Velocidades

Para controlar a temperatura de nosso sistema usamos o teorema da equipartição da energia[45, 62, 63], que estabelece que cada termo quadrado em um hamiltoniano clássico produz uma contribuição na energia cinética da forma $\frac{1}{2}k_B T$ à cada grau de liberdade do sistema. Como exemplo, consideraremos o caso de um gás monoatômico clássico, definido pelo hamiltoniano

$$H = \sum_{i=1}^N \frac{\vec{P}_i^2}{2m_i} + \sum_{i,j; i>j}^N V(|\vec{r}_i - \vec{r}_j|), \quad (2.5)$$

onde $V(r)$ é um potencial entre pares com a mesma forma do potencial LJ (seção 2.8). Utilizando o formalismo canônico é fácil mostrar que a energia cinética média é dada por

$$\langle E_{cin} \rangle = \left\langle \sum_{i=1}^N \frac{1}{2m} \vec{p}_i^2 \right\rangle = \left\langle \sum_{i=1}^N \frac{1}{2m} (p_{ix}^2 + p_{iy}^2 + p_{iz}^2) \right\rangle = \frac{3}{2} N k_B T, \quad (2.6)$$

que corresponde a energia interna do sistema no caso de um gás ideal, k_B é a constante de Boltzmann e N o número total de partículas.

Em três dimensões a equação 2.6 define uma certa temperatura T_α , dada pelo conjunto de velocidades α , definida por:

$$\frac{3}{2} N k_B T_\alpha = \sum_{i=1}^N \frac{m_i}{2} [(\vec{v}_i)_\alpha]^2 = \langle E_\alpha^{cin} \rangle. \quad (2.7)$$

Estamos interessados em controlar a temperatura do sistema, logo o conjunto de valores de velocidades que levariam à uma desejada temperatura T é diferente dos que levaram à uma dada temperatura T_α . Assim, podemos fazer uso mais uma vez do teorema da equipartição da energia, para escrever

$$\langle E_T^{cin} \rangle = \frac{3Nk_B T}{2}. \quad (2.8)$$

Dividindo, as relações 2.7 e 2.8, temos

$$\frac{\langle E_T^{cin} \rangle}{\langle E_\alpha^{cin} \rangle} = \frac{T}{T_\alpha} \quad \Rightarrow \quad \langle E_T^{cin} \rangle = \frac{T}{T_\alpha} \sum_{i=1}^N \frac{m_i}{2} [(\vec{v}_i)_\alpha]^2$$

$$\langle E_T^{cin} \rangle = \sum_{i=1}^N \frac{m_i}{2} \left[\left(\frac{T}{T_\alpha} \right)^{1/2} (\vec{v}_i)_\alpha \right]^2 \quad (2.9)$$

Ou seja, devemos multiplicar todo o conjunto de velocidades que levaram à temperatura T_α por um fator $(\frac{T}{T_\alpha})^{1/2}$ para obter um novo conjunto de velocidades, cuja média irá fornecer uma temperatura cada vez mais próxima da desejada, cada vez que utilizarmos esta renormalização.

2.8 Potenciais de Interação

A energia de interação de N átomos é descrita por uma função potencial $\Phi(1, \dots, N)$. Esta função pode ser decomposta em contribuições de um corpo, dois corpos,... etc,

$$\Phi(1, \dots, N) = \sum_i v_1(i) + \sum_{i,j;i < j} v_2(i, j) + \sum_{i,j,k;i < j < k} v_3(i, j, k) + \dots + v_n(1, \dots, N) \quad (2.10)$$

Para este tipo de representação ser útil no modelamento teórico, é necessário que cada função v_n decresça rapidamente com o aumento de n . A priori, não é claro que isto aconteça, porém, mostra-se que para isolantes, semi-condutores como silício, germânio e semi-metais como grafite, os três primeiros termos são dominantes. No entanto, para metais onde temos elétrons de condução extremamente delocalizados a situação é diferente.

Simulações de metais geralmente usam potenciais que levam em conta termos de muitos corpos como “embedded atom method” [64] e “Tight-Binding method” [65], simulações de hidrocarbonetos geralmente usam potenciais como os propostos por Tersoff [66, 67] e Brenner [68], enquanto que simulações de semi-condutores como germânio e silício usam potenciais de Stillinger-Weber [69].

2.8.1 Potencial (12-6) de Lennard-Jones(LJ)

O potencial de LJ é um potencial de dois corpos que é comumente usado entre átomos ou moléculas com camadas eletrônicas fechadas [55], e mesmo em casos mais gerais, é capaz de levar a resultados qualitativos importantes.

Por exemplo, simulações de difusão de átomos sobre superfícies[51] usando este potencial, são de grande sucesso demonstrando que o coeficiente de difusão

superficial varia com a temperatura. Assim, esperamos que simulações de FFM usando este potencial possam nos informar da dependência das forças de atrito com a temperatura.

O potencial (12-6)LJ é um potencial de curto alcance que depende somente da distância entre os átomos e tem a forma,

$$V_{LJ}(r_{i,j}) = 4\varepsilon_{i,j} \left[\left(\frac{\sigma_{i,j}}{r_{i,j}} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma_{i,j}}{r_{i,j}} \right)^6 \right] \quad (2.11)$$

onde r_{ij} é a distância entre as partículas i e j , $\varepsilon_{i,j}$ é o mínimo de energia do potencial na distância de equilíbrio $r_0 = 2^{1/6}\sigma_{i,j}$. Por simplicidade, definiremos que $\sigma_{i,j} = \sigma_{ss}$ e $\varepsilon_{i,j} = \varepsilon_{ss}$ para partículas que fazem parte da superfície, pois como veremos esta definição será de grande utilidade em nossas simulações de FFM.

O termo com expoente 12, dominante para curtas distâncias, tem sua origem física baseada na repulsão coulombiana inter-atômica e nas forças de troca, relacionadas ao Princípio de Exclusão de Pauli[55]. O termo com expoente 6, dominante para longas distâncias constitui a parte atrativa e descreve a coesão do sistema. Esta associado à forças de atração de van der Waals provenientes de interações de dipolo-dipolo induzido. No entanto, dependendo do sistema outros valores podem ser usados.

2.8.2 Corte em Potenciais - Potencial (12-6) LJ Modificado

Para melhorar a performance das simulações introduzimos um corte no potencial a uma distância r_c , isto é

$$V(r) = \begin{cases} V_{LJ}(r) , & \text{se } r \leq r_c; \\ 0 & , \text{ se } r > r_c; \end{cases} \quad (2.12)$$

Com esta técnica aparecem descontinuidades no potencial e na força de interação entre os átomos, pois, estes não são necessariamente zero em $r = r_c$ (Ver figura 2.3 a esquerda). Para evitar descontinuidades na simulação usamos o potencial Lennard-Jones modificado[48, 51, 54]:

$$V_{LJ}^{Mod}(r_{i,j}) = \begin{cases} V_{LJ}(r_{i,j}) - V_{LJ}(r_c) - \left(\frac{dV_{LJ}(r_{i,j})}{dr_{i,j}} \right)_{r_{i,j}=r_c} (r_{i,j} - r_c) , & \text{se } r_{i,j} \leq r_c; \\ 0 & , \text{ se } r_{i,j} > r_c; \end{cases} \quad (2.13)$$

O potencial modificado, assim como a força calculadas a partir deste são mostrados na figura 2.3 à direita.

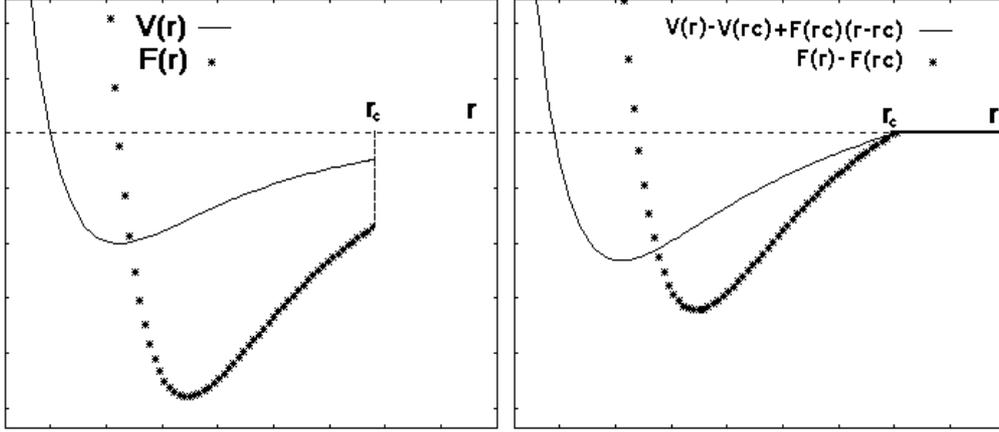


Figura 2.3: (Esquerda) Potencial LJ sem modificação. (Direita) Potencial LJ com modificação.

2.9 Unidades Reduzidas

Na solução das equações diferenciais usando DM pode aparecer um grande número de medidas da ordem da constante de Planck, energias de interação entre os átomos e distâncias inter-atômicas. Para evitar a manipulação destes números é comum realizar uma renormalização das medidas. Neste seção mostramos como se faz isso.

Considere um Hamiltoniano descrito por

$$H = \sum_{i=1}^N \frac{\vec{P}_i^2}{2m_i} + U(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_1) \quad (2.14)$$

onde

$$U(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N) = \sum_{\langle i,j \rangle} V_{LJ}(|\vec{r}_i - \vec{r}_j|) = \sum_{\langle i,j \rangle} 4\varepsilon_{ss} \left[\left(\frac{\sigma_{ss}}{r_{ij}} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma_{ss}}{r_{ij}} \right)^6 \right] \quad (2.15)$$

e ε_{ss} é o mínimo de energia do potencial na distância de equilíbrio $r_0 = 2^{1/6}\sigma_{ss}$ para as partículas pertencentes à superfície.

Considerando as equações de movimento podemos escrever

$$\dot{\vec{r}}_i = \frac{\partial H}{\partial \vec{P}_i} = \frac{\vec{P}_i}{m_i} = \vec{v}_i \quad (2.16)$$

$$\dot{\vec{v}}_i = -\frac{1}{m_i} \frac{\partial H}{\partial \vec{r}_i} = -\sum_j 48 \frac{\varepsilon_{ss}}{\sigma_{ss}^2 m_i} \left[\left(\frac{\sigma_{ss}}{r_{ij}} \right)^{14} - \frac{1}{2} \left(\frac{\sigma_{ss}}{r_{ij}} \right)^8 \right] \vec{r}_{ij} \quad (2.17)$$

Estas são duas equações diferenciais de primeira ordem que podem ser integradas no decurso do tempo usando métodos numéricos apropriados.

Estas equações estão em unidades fundamentais, contudo elas não são boas para simulações em computadores. Para coloca-las em unidades mais adequada fazemos as seguintes transformações:

$$\vec{r}_i = \sigma_{ss} \vec{r}_i^* \quad \Rightarrow \quad |\vec{r}_{ij}| = \sigma_{ss} r_{ij}^* \quad \Rightarrow \quad dr_{ij} = \sigma_{ss} dr_{ij}^* \quad (2.18)$$

$$t = \gamma t^* \quad \Rightarrow \quad dt = \gamma dt^* \quad (2.19)$$

Com estas equações podemos escrever

$$\vec{v}_i = \frac{\sigma_{ss}}{\gamma} \frac{d\vec{r}_i^*}{dt^*} = \frac{\sigma_{ss}}{\gamma} \vec{v}_i^* \quad \Rightarrow \quad \dot{\vec{v}}_i = \frac{\sigma_{ss}}{\gamma^2} \frac{d^2 \vec{r}_i^*}{dt^{2*}} = \frac{\sigma_{ss}}{\gamma^2} \dot{\vec{v}}_i^* \quad (2.20)$$

agora usando as equações (2.14)-(2.20) obtemos

$$\gamma = \sigma_{ss} \sqrt{\frac{m_i}{\varepsilon_{ss}}} \quad (2.21)$$

$$\dot{\vec{r}}_i^* = \vec{v}_i^* \quad (2.22)$$

$$\dot{\vec{v}}_i^* = - \sum_j 48 \left[(r_{ij}^*)^{-14} - \frac{1}{2} (r_{ij}^*)^{-8} \right] \vec{r}_{ij}^* \quad (2.23)$$

$$V(r_{ij})^* = \frac{V(r_{ij})}{\varepsilon_{ss}} \quad (2.24)$$

Da definição de temperatura 2.7 podemos escrever

$$\frac{3N}{2} \left(\frac{k_B T}{\varepsilon_{ss}} \right) = \sum_{i=1}^N \frac{1}{2} [\vec{v}_i^*]^2 = \frac{3N}{2} T^*$$

onde

$$T^* = \frac{k_B T}{\varepsilon_{ss}}. \quad (2.25)$$

Assim, nas simulações, trabalhamos com as grandezas marcadas com um *. Para obter os valores de laboratório basta fazer as transformações inversas.

Capítulo 3

Simulação de Microscopia por Força de Atrito-FFM

3.1 Simulação de uma Superfície.

Neste trabalho usamos DM para estudar a superfície (001) do cristal cúbico de corpo centrado (BCC)(Ver figura 3.2) em que as partículas interagem através do potencial modificado de Lennard-Jones (Capítulo 2). As equações de movimento são integradas através do algoritmo de Beeman com um passo no tempo de tamanho $\Delta t = 10^{-3}\gamma$. Inicialmente distribuímos N partículas ao redor das posições de equilíbrio da geometria BCC (001) com parâmetro de rede $a = \left(\frac{27}{33}\right)^{1/6} \sigma_{ss}$ preenchendo k camadas na direção z que é perpendicular ao substrato. A camada inferior em $z = 0$ é fixa para simular as características de "bulk". Usamos dois tipos de condições de contorno: A primeira, periódica nas direções paralelas à superfície e condição aberta na direção z e a segunda, aberta nas direções x,y e z . Para equilibrar o sistema usamos o método de renormalização de velocidades(Capítulo 2) deixando o sistema evoluir por $50 \times 10^3\gamma$ passos no tempo. As unidades de medidas do comprimento, massa e energia, tempo, velocidade e temperatura são as descritas no Capítulo 2.

3.1.1 Termodinâmica.

Antes de iniciar nossas simulações de FFM temos de estimar a temperatura de fusão superficial T_m do material. A Figura 3.1 mostra a energia total (por átomo) como função da temperatura. A temperatura de fusão é estimada como o ponto de

inflexão da curva. Nos encontramos $T_m \approx 1.1$ de acordo com trabalhos anteriores [51, 52, 53, 54, 70, 71]. Baseado neste resultado nossas simulações serão realizadas com $T < T_m$ e a temperatura vai ser especificada em cada resultado apresentado.

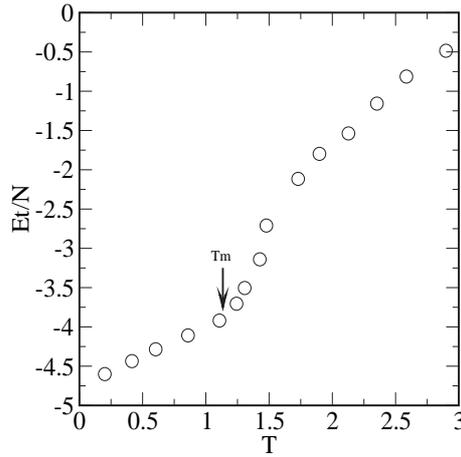


Figura 3.1: Energia como função da temperatura para a simulação com condições de contorno abertas em x , y e z . A temperatura de fusão é estimada como o ponto de inflexão sendo $T_m \approx 1.1$.

Na próxima seção apresentaremos os detalhes numéricos da DM para a simulação de FFM.

3.2 Detalhes da simulação de FFM

Nossa simulação de FFM foi feita da seguinte maneira. Nos consideramos a superfície simulada da seção anterior e adicionamos uma ponta sonda da AFM que poderá ser arrastada sobre a superfície. A figura 3.2 mostra uma visão esquemática de nossa simulação para reproduzir o mecanismo da FFM. O sistema é organizado em 4 camadas com condições de contorno periódicas nas direções $x - y$ e aberta em z . A primeira camada foi mantida congelada em seu arranjo inicial, de maneira a manter toda a estrutura o mais plana possível. A ponta foi simulada por uma única partícula de massa M , acoplada a três molas de constantes elásticas, $k_x = \varepsilon_{ss}/\sigma_{ss}^2$, $k_y = \varepsilon_{ss}/\sigma_{ss}^2$ e $k_z = \varepsilon_{ss}/\sigma_{ss}^2$, do qual, nos possibilita variar/medir a força normal (f_z)

e medir a força lateral (f_x e f_y).

Com a ponta próxima da superfície nos levamos o substrato à uma dada temperatura T (Ver seção 2.7.1). Depois do sistema entrar em equilíbrio térmico a ponta é puxada em uma dada direção paralela à superfície com velocidade constante, $v_{0x} = v_L \cos(\theta)$, $v_{0y} = v_L \sin(\theta)$, $v_{0z} = 0$, $v_L = v\sqrt{(\epsilon_{ss}/m)}$. Aqui θ foi definido relativo à direção (100) do substrato e v foi variado para se obter diferentes velocidades. Estes valores são mantidos fixos para cada simulação, assim como a distância z entre a posição de equilíbrio da mola e a superfície, para se ter o controle da força normal (f_z) atuando na mola.

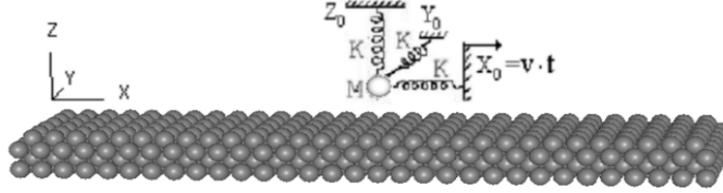


Figura 3.2: Visão esquemática de nosso aparato de simulação.

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

$$H = \sum_{i=1}^{N1} \frac{\vec{P}_{1i}^2}{2m_{1i}} + \sum_{i=1}^{N2} \frac{\vec{P}_{2i}^2}{2m_{2i}} + U_1 + U_2 + U_{12} \quad (3.1)$$

onde

$$U_1 = \sum_{\langle i,j \rangle} 4\epsilon_{1ij} \left[\left(\frac{\sigma_{1ij}}{r_{1ij}} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma_{1ij}}{r_{1ij}} \right)^6 \right] \quad U_{12} = \sum_{\langle i,j \rangle} 4\epsilon_{1i2j} \left[\left(\frac{\sigma_{1i2j}}{r_{1i2j}} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma_{1i2j}}{r_{1i2j}} \right)^6 \right] \quad (3.2)$$

$$U_2 = \sum_{i=1}^{N2} \frac{C_m^{ext}}{2} (\vec{r}_{2i} + \vec{r}_{20i})^2 \quad (3.3)$$

Os somatórios em U_1 e U_{12} são realizados nas partículas que estão no substrato e entre a ponta e o substrato, respectivamente. O termo U_2 esta associado com o potencial harmônico associado com o cantilever. Utilizando este hamiltoniano podemos escrever as equações de movimento para cada partícula

$$\dot{\vec{r}}_{1i} = \frac{\partial H}{\partial \vec{P}_{1i}} = \frac{\vec{P}_{1i}}{m_{1i}} = \vec{v}_{1i} \quad ; \quad \dot{\vec{r}}_{2i} = \frac{\partial H}{\partial \vec{P}_{2i}} = \frac{\vec{P}_{2i}}{m_{2i}} = \vec{v}_{2i} \quad , \quad (3.4)$$

$$\begin{aligned} \dot{v}_{1i} = -\frac{1}{m_{1i}} \frac{\partial H}{\partial \vec{r}_{1i}} &= \sum_j 48 \frac{\varepsilon_{1ij}}{\sigma_{1ij}^2 m_{1i}} \left[\left(\frac{\sigma_{1ij}}{r_{1ij}} \right)^{14} - \frac{1}{2} \left(\frac{\sigma_{1ij}}{r_{1ij}} \right)^8 \right] \vec{r}_{1ij} \\ &+ \sum_j 48 \frac{\varepsilon_{1i2j}}{\sigma_{1i2j}^2 m_{1i}} \left[\left(\frac{\sigma_{1i2j}}{r_{1i2j}} \right)^{14} - \frac{1}{2} \left(\frac{\sigma_{1i2j}}{r_{1i2j}} \right)^8 \right] \vec{r}_{1i2j} \quad , \end{aligned} \quad (3.5)$$

$$\begin{aligned} \dot{v}_{2i} = -\frac{1}{m_{2i}} \frac{\partial H}{\partial \vec{r}_{2i}} &= -\sum_j 48 \frac{\varepsilon_{1i2j}}{\sigma_{1i2j}^2 m_{2i}} \left[\left(\frac{\sigma_{1i2j}}{r_{1i2j}} \right)^{14} - \frac{1}{2} \left(\frac{\sigma_{1i2j}}{r_{1i2j}} \right)^8 \right] \vec{r}_{1i2j} \\ &- C_m^{ext} (\vec{r}_{2i} + \vec{r}_{20i}) \quad . \end{aligned} \quad (3.6)$$

Devemos notar que $\vec{r}_{20i} = v_{0x}t\hat{x} + v_{0y}t\hat{y} + z_0\hat{z}$ é a posição de equilíbrio da mola(cantilever), onde as constantes v_{0x} , v_{0y} são definidas da maneira descrita acima e z_0 é o parâmetro a ser variado em cada simulação para se obter diferentes forças normais.

3.3 Resultados da Simulação de FFM.

3.3.1 Dependência com a Temperatura e Força Normal

Nesta seção realizamos simulações para várias temperaturas e distâncias iniciais z entre a ponta e o substrato ou equivalentemente a força normal. Em todas as simulações usamos, $\sigma_{1ij} = \sigma_{ss} = 1$, $\varepsilon_{1ij} = \varepsilon_{ss} = 1$, $m_{1i} = m_{2i} = 1$, e $\sigma_{1i2j} = 1.2\sigma_{ss}$, $\varepsilon_{1i2j} = 0.5\varepsilon_{ss}$. Nesta seção fixemos $\theta = 0$ e $v = 0.05$. No Apêndice B estão os gráficos das forças de atrito como função do tempo para várias normais e temperaturas. Com base nestes resultados, na figura 3.3 mostramos gráficos da força de atrito como função da força normal para várias temperaturas.

A Lei de Amonton (Seção 1.1.1) afirma que a força de atrito é proporcional à força normal e independente da area de contato. Este tipo de comportamento foi observado em vários sistemas por vários autores [1], que ajustaram $\langle F_x \rangle$ como uma função linear da normal e da área de contato, A :

$$\langle F_x \rangle = \mu \langle F_z \rangle + cA. \quad (3.7)$$

Nesta equação μ é o coeficiente de atrito e o segundo termo cA é interpretado como a força de atrito mínima quando a força normal é nula. Ringlein et.

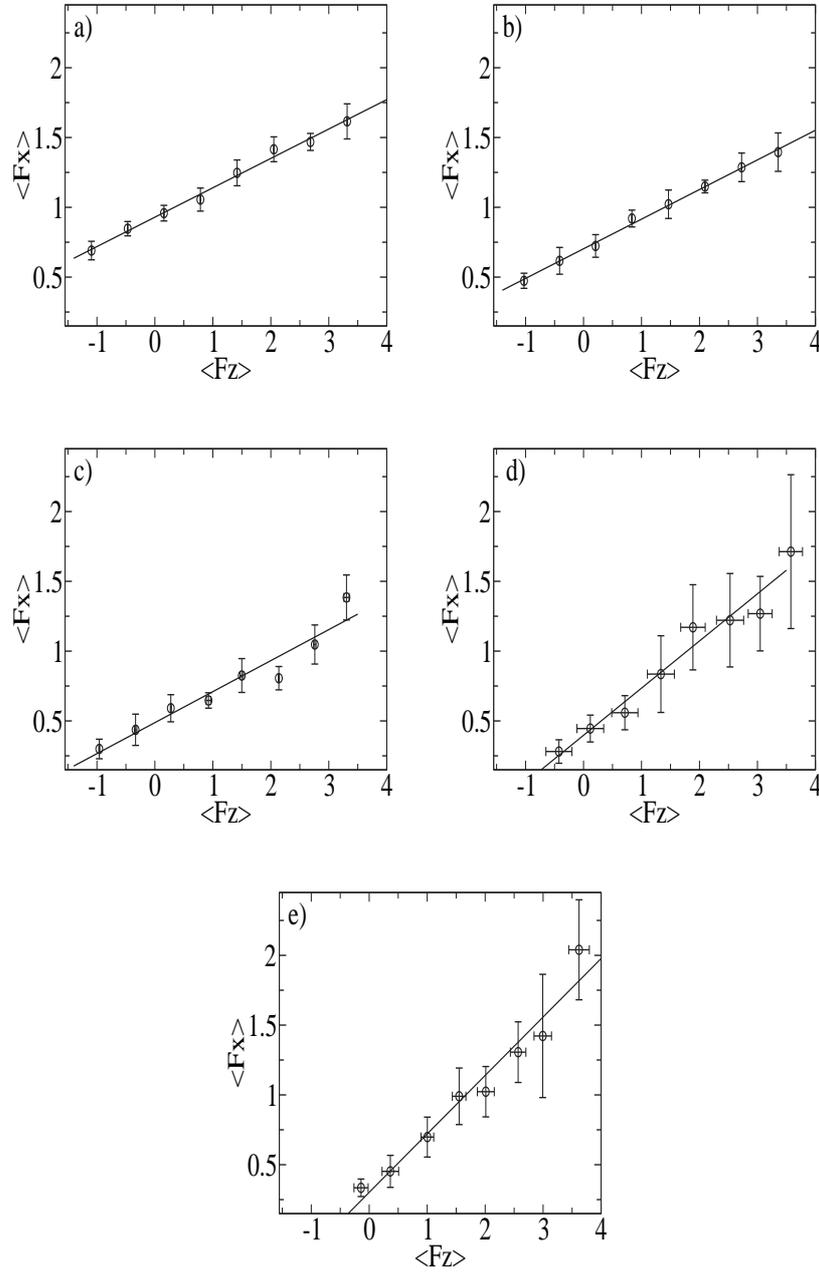


Figura 3.3: A figura mostra a força de atrito, $\langle F_x \rangle$ como função da força normal, $\langle F_z \rangle$ para várias temperaturas. A força $\langle F_x \rangle$ e $\langle F_z \rangle$ são medidas em unidades de ϵ_1/σ_1 . As figuras, *a, b, c, d, e* são para os valores de $T = 0.25, 0.44, 0.67, 0.85, 1.05$ respectivamente. Os círculos são nossos resultados de MD e as linhas correspondem a um ajuste linear.

al.[72] mostrou que, em escala nanométrica, sistemas adesivos apresentam uma dependência com a área de contato, quebrando a Lei de Amonton. Nosso sistema é efetivamente adesivo, dado que em nossas simulações utilizamos o potencial LJ entre a ponta e a superfície tendo uma parte atrativa. Assim, nossas simulações ilustram como uma força que viola a Lei de Amonton pode depender da temperatura[73, 74].

Na seção 1.4.7 mostramos que a força de atrito não é uma função linear da força normal. No entanto, a dedução deste modelo teórico foi feita posterior ao desenvolvimento desta análise. Desta forma, os cálculos do coeficiente de atrito, das seções seguintes foram feitos calculando de maneira numérica a derivada da força de atrito com relação à normal ($\partial f_l / \partial f_z$). Estes resultados indicaram que em média, esta é uma boa aproximação e com isso, resolvemos manter esta aproximação dada à sua simplicidade.

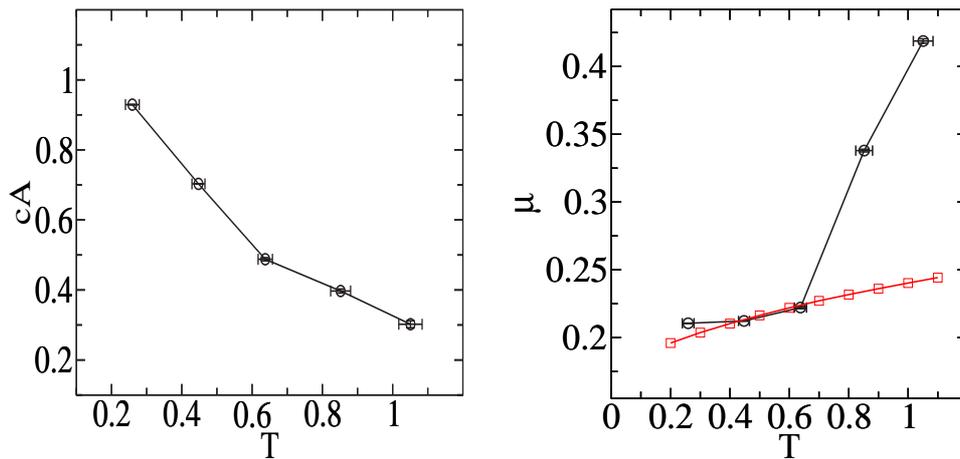


Figura 3.4: Plot de cA (esquerda) e μ (direita) como função da temperatura. A linha é somente um guia para os olhos, os pontos com símbolos circulares(\circ) são os resultados das simulações de MD e os pontos com símbolos quadrados(\square) é a previsão teórica.

Primeiramente, nos estudamos o comportamento do termo cA em função da temperatura T , como mostra a fig. 3.4(esquerda). Os resultados mostram que, quando a temperatura aumenta, a área de contato ou as forças de adesão diminuem. Este tipo de comportamento pode estar relacionado com o fato de que em baixas temperaturas os átomos na superfície executam saltos com baixa amplitude, assim,

o número de colisões com a ponta é baixo. Neste caso, a área de contato efetiva é alta porque a ponta fica um longo tempo em contato com a superfície. No entanto, quando a temperatura cresce o número de partículas da superfície flutuando com energia alta aumenta. Conseqüentemente, o número de colisões com alta energia na ponta cresce, levando a uma diminuição da área de contato efetiva.

Também observamos que, o coeficiente de atrito, figura 3.4 (direita) com símbolos circulares (\circ), apresenta um crescimento abrupto em $T \sim 0.7\epsilon_{ss}/K_b$. Abaixo, discutiremos o fato de que este comportamento pode estar relacionado a uma pré-fusão da superfície (surface pre-melting). Note que a linha com símbolos quadrados (\square), é a previsão teórica da dependência da força de atrito com a temperatura, e esta apresenta um crescimento contínuo. Este fato é mais um ponto que indica a presença de uma pré-fusão da superfície, dado que o modelo teórico não leva em conta efeitos não lineares, presentes no aquecimento de superfícies.

Na figura 3.5 mostramos um gráfico do caminho percorrido pela ponta sobre a superfície para várias temperaturas e forças normais. Como era esperado, os caminhos são bem definidos para baixas temperaturas tornando-se aleatório quando a temperatura aumenta.

Para entendermos melhor o que está acontecendo, nos calculamos o tempo de residência da ponta em cada sítio, definido como o tempo que a ponta fica na vizinhança de um sítio específico, por exemplo, a distância a algum sítio sendo menor que alguma distância δ . Sem perda de generalidade, nos escolhemos $\delta = a$, o parâmetro de rede. Na figura 3.6 e 3.7 nos mostramos o histograma para forças normais $F_z = -1.09, -1.02, -0.95, -0.42, -0.14$ e $F_z = 2.05, 2.09, 2.13, 2.52, 2.56$ respectivamente, obtido usando um tamanho de feixe $t_{beam} = 5$ para várias temperaturas.

Para valores negativos de F_z o tempo de residência é bem definido até mesmo para altas temperaturas, tendo sua média em $\delta t \approx 50$. A ponta está em contato com a superfície porém sendo puxada, assim, esta pode facilmente se mover ao longo de canais na superfície do cristal. O movimento é fortemente direcionado na direção do movimento do cantilever.

Na fig. 3.7 nos mostramos o histograma para valores positivos de F_z . As temperaturas são as mesmas da fig. 3.3. Para baixas temperaturas o comportamento é similar ao de $F_z < 0$. Porém, quando a temperatura cresce, o tempo de residência

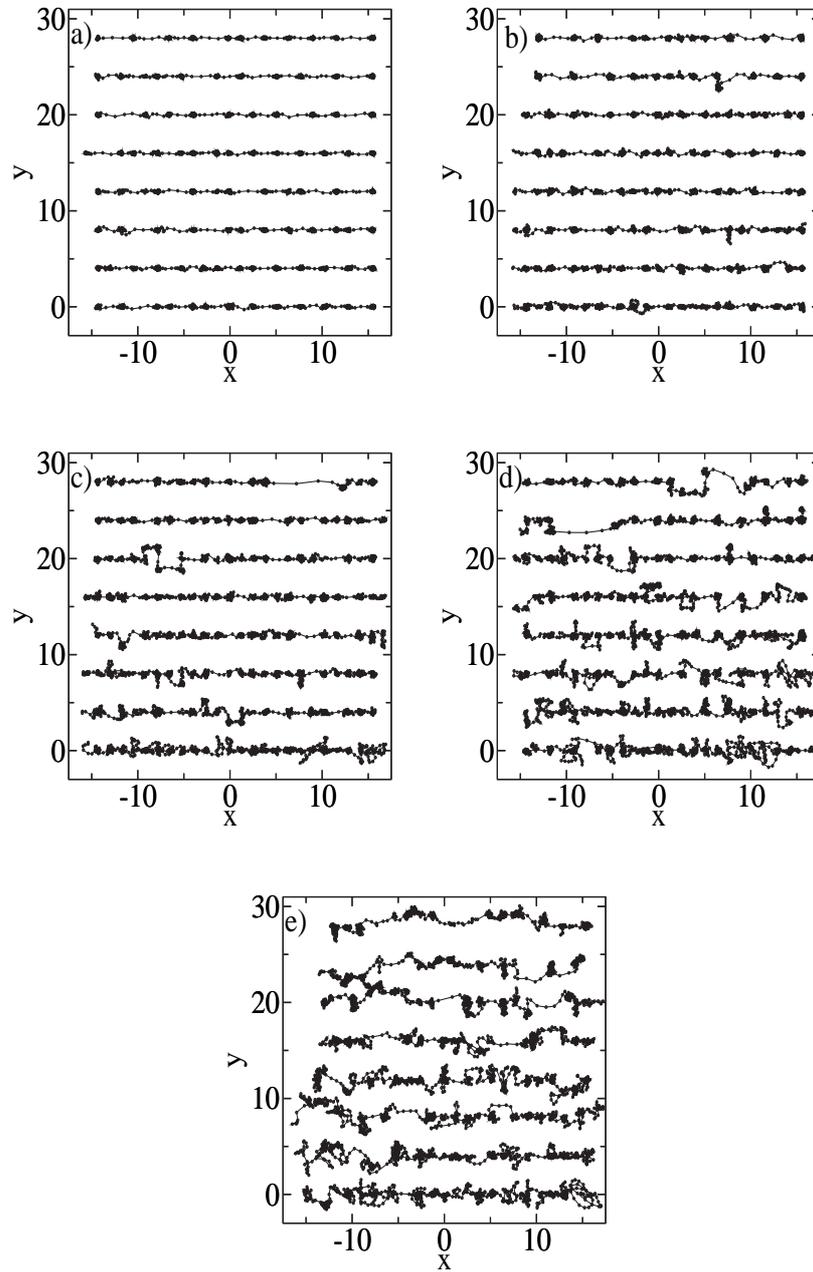


Figura 3.5: Caminho percorrido pela ponta sobre a superfície (plano xy) para varias temperaturas e forças normais. De a) até e) nos temos $T = 0.25, 0.44, 0.67, 0.85, 1.05$ respectivamente. As forças normais são definidas na fig. 3.3. Os gráficos foram mostrados deslocados por um valor constante na direção y para melhor visualização.

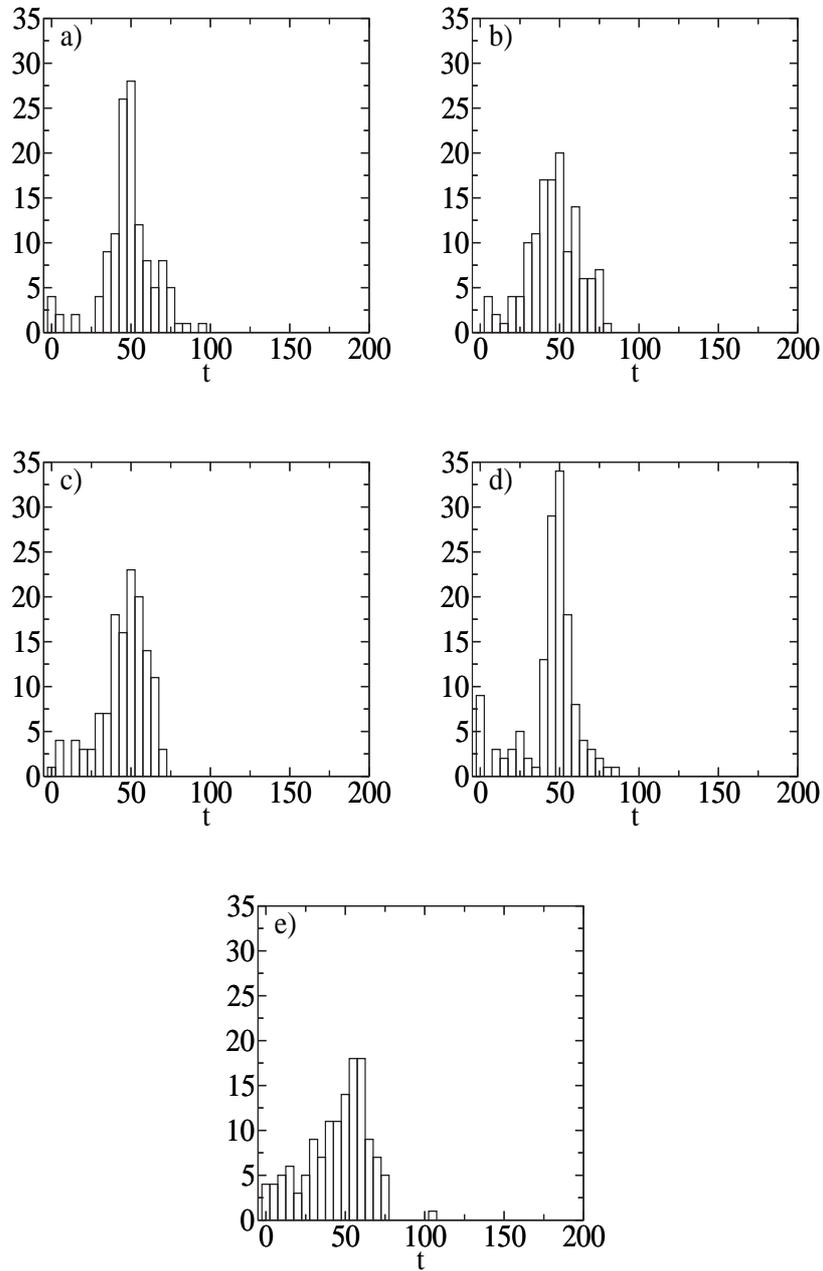


Figura 3.6: Histograma para o tempo de residência. As forças normais são respectivamente $F_z = -1.09, -1.02, -0.95, -0.42, -0.14$.

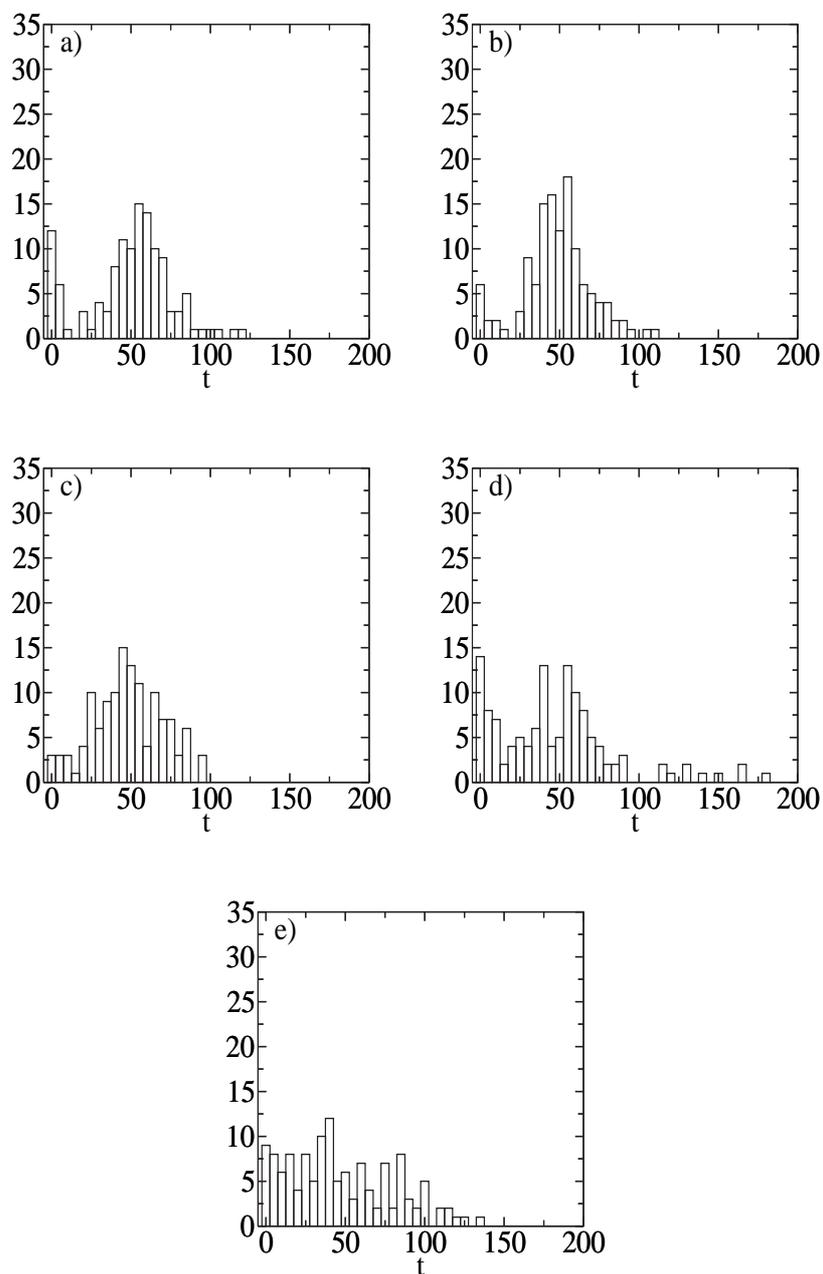


Figura 3.7: Histograma para o tempo de residência. As forças normais são respectivamente $F_z = 2.05, 2.09, 2.13, 2.52, 2.56$.

se espalha para regiões de altos tempos t .

Em um recente trabalho de Resende e Costa [52] usando simulações de dinâmica molecular, eles estudaram a migração de um átomo individual na superfície de um cristal bcc 12 – 6 de Lennard-Jones. Eles argumentaram que uma anomalia ocorria na constante de difusão em $T \approx 0.7$ e que esta poderia ser uma assinatura do processo de pré-fusão (pre-melting process). Em baixas temperaturas uma partícula depositada pode se mover pelos canais da superfície dado que o movimento térmico dos átomos do substrato tem baixa amplitude. Uma vez que a temperatura aumenta alcança-se um estado intermediário. A superfície começa a fundir até que os canais sejam fechados e adátomos são presos na vizinhança dos átomos da superfície. A situação permanece até que o adátomo seja termicamente ativado e uma difusão aleatória (random-walk diffusion) ocorre. Em suma o coeficiente de difusão apresenta um mínimo em uma região intermediária. Sob o ponto de vista de atrito, nos podemos perguntar qual é o efeito deste fenômeno. Para duas superfícies macroscópicas em movimento relativo, nos não podemos esperar que os dois primeiros processos possam ser distinguidos sendo que a área de contato é grande comparada às distâncias interatômicas. Porém, para temperaturas altas, a superfície é lubrificada por átomos desprendidos da superfície e podemos esperar que o coeficiente de atrito diminua. A situação é um pouco diferente para uma pequena ponta em contato com a superfície.

Nos interpretamos isto como um fechamento dos canais, discutidos acima, devido ao movimento térmico das partículas da superfície. Quando a temperatura aumenta as partículas ganham mais energia, que é eventualmente suficiente para retirar a ponta de qualquer vizinhança específica.

3.3.2 Dependência com a Velocidade e Força Normal

Nesta seção realizamos simulações para várias velocidades da ponta, e para cinco diferentes valores de força normal. Em todas as simulações desta seção utilizamos $\theta = 0$, $T = 0.5$. Na figura (3.8) mostro nossos resultados da simulação (pontos) e a previsão teórica (linhas) da força de atrito como função da velocidade para várias normais. Nota que nossa previsão teórica, equação (1.63), tem um bom acordo com os resultados da simulação, somente ajustando valores apropriados para a posição crítica de saltos, q_{zc} (próxima do mínimo do potencial de interação), escolhendo valores para, ν_0 (frequência de transição de saltos) e $G^* \left[\frac{R}{E^*} \right]^{1/3}$ (Ver seção 1.3.2)

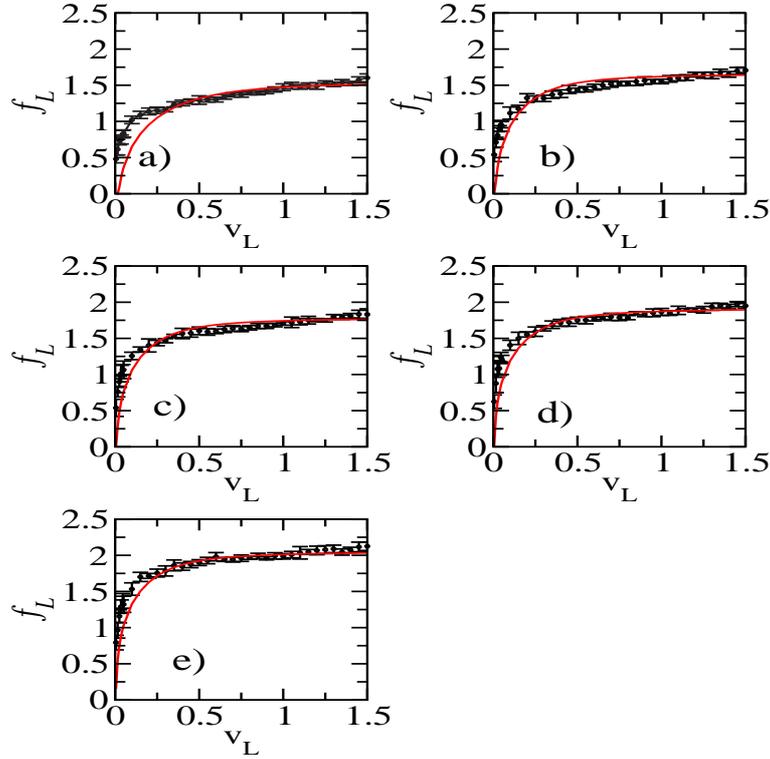


Figura 3.8: Força de atrito como função da velocidade para várias normais. De a) até e) termos respectivamente $\langle f_z \rangle \sim 0.95, 1.54, 2.25, 2.75, 2.50$. Os pontos são os resultados da simulação e a linha são as previsões teóricas.

Na figura (3.9) mostro os resultados da simulação (pontos) e a previsão teórica (linha) para o coeficiente de atrito médio como função da velocidade. Estes resultados também apresentam um bom acordo com a simulação, indicando que nosso modelo apresenta resultados consistentes com os esperados.

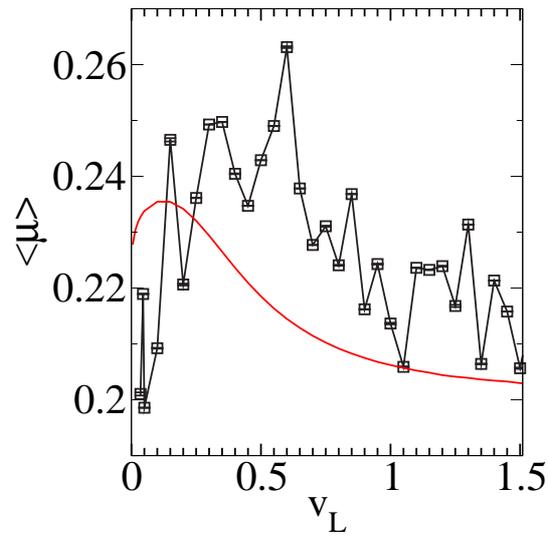


Figura 3.9: Coeficiente de atrito médio como função da velocidade, calculado a partir da figura 3.8. Os pontos são os resultados da simulação e a linha é a previsão teórica.

3.3.3 Dependência com a Temperatura e Velocidade.

Nesta seção realizamos simulações para várias velocidades, e para seis diferentes valores de temperatura, ($T = 0.1, 0.2, 0.3, 0.4, 0.5, 0.6$). Em todas as simulações desta seção utilizamos $\theta = 0$ e $\langle f_z \rangle \sim 0.95$. Na figura (3.10) mostro nossos resultados da simulação (pontos) e a previsão teórica (linhas) da força de atrito como função da velocidade para várias temperaturas. Nota-se que nossa previsão teórica indica um bom acordo com os resultados da simulação.

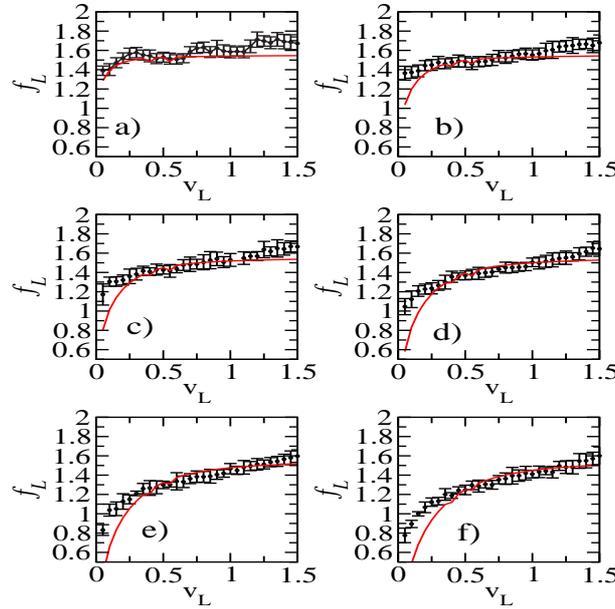


Figura 3.10: Força de atrito como função da velocidade para várias temperaturas, onde resultados da simulação são os pontos e a previsão teórica são as linhas. Os resultados de a) até f) correspondem respectivamente para $T = 0.1, 0.2, 0.3, 0.4, 0.5, 0.6$.

Na figura (3.11) mostro nossa previsão teórica do coeficiente de atrito médio como função da velocidade. Nesta figura, as linhas são apenas guias para os olhos, e os pontos são as previsões teóricas. Os resultados são respectivamente, $(\circ)T = 0.1, (\square)T = 0.2, (\diamond)T = 0.3, (\triangle)T = 0.4, (\nabla)T = 0.5, (*)T = 0.6$. Note que nesta seção não variamos a força normal para cada temperatura, com isso não temos como calcular o coeficiente de atrito, da maneira como definido neste trabalho, por meio de nossas simulações. No entanto, perceba que nossos resultados estão consistente com os apresentados anteriormente, visto que, a medida que a

temperatura aumenta ocorre um diminuição das forças de atrito (Ver figura 3.10) e um aumento do coeficiente de atrito pode ser visualizado na figura (3.11).

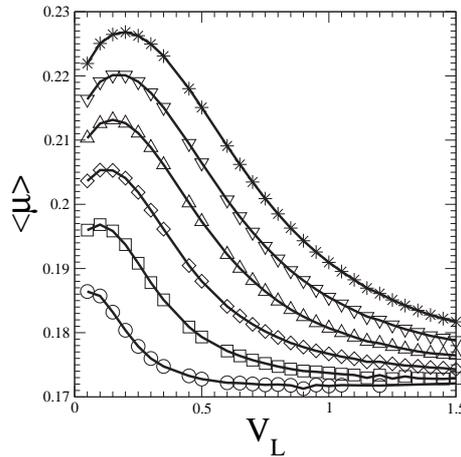


Figura 3.11: coeficiente de atrito médio como função da velocidade para várias temperaturas. Nesta figura, as linhas são apenas guias para os olhos, e os pontos são as previsões teóricas. Os resultados são respectivamente, $(\circ)T = 0.1$, $(\square)T = 0.2$, $(\odot)T = 0.3$, $(\triangle)T = 0.4$, $(\nabla)T = 0.5$, $(*)T = 0.6$.

Note que, nas figuras (3.9) e (3.11), à medida que a velocidade aumenta o coeficiente de atrito atinge um valor máximo e a partir daí começa a diminuir. Esse comportamento pode estar relacionado com o fato de que, acima de uma certa velocidade crítica, à medida que a velocidade aumenta, a ponta executa saltos cada vez mais energéticos, passando pouco tempo em um determinado sítio. Com isso, para uma variação fixa da força normal, a variação da força de atrito irá diminuir à medida que a velocidade aumenta, levando então à diminuição do coeficiente de atrito observado nos resultados.

Em resumo, nosso modelo tri-dimensional para a força de atrito e o coeficiente de atrito, (Ver capítulo 1), obtido a partir deste, mostraram-se de acordo com os resultados das simulações.

Capítulo 4

Atrito em Dispositivos Magnéticos

Nesta seção, irei propor um modelo teórico-computacional onde combinarei técnicas de Monte Carlo[75, 76, 77] e Dinâmica Molecular(MC-MD) para simular e estudar dissipação de energia entre uma ponta e uma superfície magnética que estão em movimento relativo. O entendimento de como calor é dissipado entre as duas partes móveis é de fundamental importância hoje em dia, pois, este tipo de sistema tem várias aplicações tecnológicas importantes.

A disponibilidade de várias técnicas experimentais refinadas, como por exemplo, a microscopia de força magnéticas(MFM), onde uma ponta de AFM é recoberta por material magnético, para se estudar as propriedades de superfícies magnetizadas. Este tipo de técnica nos possibilita investigar efeitos magnéticos nos processos fundamentais que contribuem para o atrito de deslizamento em escala atômica.

Vários autores estudaram a dissipação de energia sobre um substrato ocorrendo principalmente por dois canais de dissipação, denominados de fonônico e eletrônico. Estes autores estudaram também, como o coeficiente de atrito fonônico depende da amplitude da corrugação, obtendo sucesso considerável na resolução deste problema [38, 78, 55, 79, 80]. No entanto, pouco se sabe, qual o efeito no atrito entre superfícies deslizantes caso estas sejam magnéticas. Aplicações de sub-micro ímãs em spintrônica, computação quântica e armazenamento de dados, demandam uma compreensão enorme do comportamento de materiais magnéticos sub-microscópicos. A construção de dispositivos magnéticos, hoje em dia tem trabalhado com distâncias da ordem de nanômetros, entre a cabeça de leitura e o dispositivo de armazenamento. Isso faz o estudo dos fenômenos tribológicos cruciais para com-

preender e produzir dispositivos tecnológicos competitivos [17, 81, 82, 83, 84, 85, 86].

Na verdade, a dissipação do calor em dispositivos magnéticos é um problema muito sério. Por exemplo, em um disco rígido magnético(HDD), quando a cabeça de leitura passa perto da superfície do disco, transfere momento para este. Este momento por sua vez, aumenta localmente a temperatura. Dependendo da taxa de transferência e da capacidade do disco transferir este calor para a sua vizinhança, toda ou parte da informação localmente armazenada no disco pode ser perdida.

Na última década, o progresso na tecnologia de produção de meios magnéticos de gravação e de cabeças de leitura, fez a densidade de gravação dobrar quase a cada dois anos. O tamanho do grão magnético usado nos mais avançados HDD é da ordem de $0.5 \times 0.5 \mu m^2$, sendo que uma cabeça de leitura, que utiliza o efeito da magneto resistência gigante(GMR) para ler a informação armazenada no grão magnético, também deve apresentar dimensões similares à esta. Este tamanho de grão magnético pode ainda ser diminuído usando materiais com fortes anisotropias magnéticas. Entretanto, uma limitação a este tipo de estratégia é o conhecido limite paramagnético, em que a energia de anisotropia se torna comparável às flutuações térmicas, não é difícil de ser alcançado.

Como discutido por N. Garcia et. al. [87, 88], o armazenamento de dados com densidade muito elevada ($1 \text{ tbit}/in^2$, tera-bit por polegada quadrada) exige que o tamanho do grão encolha a alguns nanômetros, com conseqüente diminuição da cabeça de leitura às mesmas dimensões. Outros tipos de limitações conhecidas nestes sistemas são os ruídos, Johnson e Shot, que estão presentes em qualquer dispositivo magneto resistivo(MR) e são respectivamente associados ao ruído térmico das oscilação da rede nuclear e ao fato dos portadores de carga terem tamanhos finitos. Uma outra limitação à aplicação do efeito da magneto resistência para construir sensores é o ruído térmico induzido pelo flutuação da magnetização. Como discutido por N. Smith et. al. [89] e em suas referências, o ruído magnético é um fenômeno fundamental que se manifesta como um ruído branco na flutuação da resistência de cabeças leitoras magneto resistivas. Este efeito por sua vez, pode exceder o ruído Johnson nas próximas gerações destes dispositivos.

De fato, um sensor de leitura real, que é uma válvula de spins possuindo uma estrutura do tipo $PtMn/CoFe/Ru/CoFe/Cu/CoFe/NiFe/Ta$, área física quadrada de $\approx 0.4m \times 0.4\mu m$ e coeficiente de GMR ($\Delta R/R$) $\approx 7\% - 8\%$, apre-

sentou um ruído total medido (Johnson-amplificador-magnético) de $\simeq 1.3nV/\sqrt{Hz}$, indicando que a contribuição do ruído magnético ($\simeq 0.86nV/\sqrt{Hz}$) excedeu o ruído Johnson ($\simeq 0.84nV/\sqrt{Hz}$).

Todo dispositivo que usar o efeito da GMR para ler um grão magnético é muito sensível à configuração de spin da superfície magnética. A formação de estruturas como paredes de domínio magnéticas ou de vórtices no filme aumentará certamente o ruído magnético. Neste caso, a compreensão do mecanismo nanoscópico da dissipação de calor é crucial, sendo que, uma variação na temperatura significa um aumento nas densidades de paredes de domínio magnéticas e de vórtices no material [90, 91, 92].

Os filmes magnéticos que são depositados em substratos não magnéticos são usados na construção de HDD. Os filmes são depositados em altas temperaturas o que faz com que o material magnético cresça com uma certa textura cristalográfica. Em tais filmes, a presença desta rugosidade no substrato tem efeitos significativos na anisotropia magnética no plano. Este efeito é útil em construção de HDD, mas a origem física desta anisotropia é ainda discutida hoje em dia. Os filmes magnéticos em que a interação de troca só é relevante em separações menores que a separações entre camadas, formam uma estrutura magnéticas planar quase bi-dimensional (2d). Em general a magnetização de tais filmes é confinada ao plano devido à anisotropia de forma.

Outro tipo de fenômeno que ocorre nestes sistemas é o aparecimento de vórtices. Um vórtice é uma excitação topológica em que a integral de linha do campo em um caminho fechado em torno do núcleo da excitação resulta em 2π (-2π) (veja a figura 4.1). Com a finalidade de evitar o custo energético elevado de momentos magnéticos não alinhados, os vórtices desenvolvem uma estrutura tridimensional girando para fora do plano as componentes magnéticas do momento no centro do vórtice [93, 94, 95]. Se temos a finalidades de entender os mecanismos que governam os discos com altas capacidades de armazenamento de dados, o estudo de excitações tais como os vórtices magnéticos, tem um enorme interesse sendo que estes nos fornecerão um entendimento fundamental das estruturas magnéticas nanoscópicas do sistema [82, 96, 97, 80].

Motivados a estudar o mecanismo da dissipação de energia quando somente graus de liberdade magnéticos estão presentes, vamos propor um modelo protótipo.

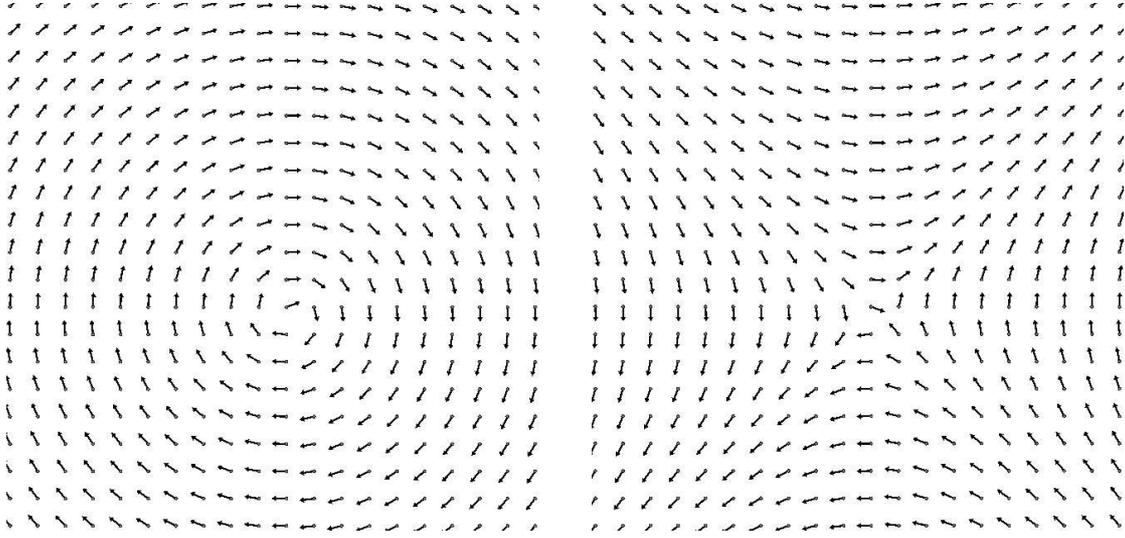


Figura 4.1: Visão esquemática de um vórtice (esquerda) e um anti-vórtice (direita) para spins que tenham o mesmo tamanho.

Uma visão esquemática é mostrada na figura 4.2. Nosso modelo consiste em uma ponta magnética (a cabeça de leitura) que se move perto de uma superfície magnética (a superfície do disco). A ponta é simulada como uma rede quadrada de momentos de dipolo magnéticos e a superfície é representado como uma mono-camada magnética distribuída em um rede quadrada.

A energia deste arranjo é composta de um termo de curto alcance H_{short} (este termo será discutido com mais detalhes abaixo.) mais um termo de longo alcance H_{long} , devido às interações dipolares. Definiremos por K , a razão entre a energia de interação dipolar e a energia de interação de curto alcance. A energia do estado fundamental por spin de um sistema como este, pode ser calculada exatamente para um certo tamanho fixo do sistema. Dado que, no estado fundamental, K é suficientemente pequeno, isso nos assegura que todas os spins estejam paralelamente alinhados. De fato, A. Hucht et. al.[98] mostrou que para $K < 4/30(3) = 0.1476$ todas os spins estão apontando na direção z . Neste trabalho nós vamos supor que as interações de dipolo podem ser desprezadas, pois em baixas temperaturas, estamos no limite de K pequeno, e deste modo, não consideramos as interações dipolares, como uma primeira aproximação. Ou seja, nós estamos trabalhando na região ferromagnetic do problema. Embora estejamos impondo algumas limitações ao modelo, que retiram as interações de dipolo, podemos ver esta aproximação como

um guia para compreender experiências e trabalhos teóricos futuros. Por outro lado, esta simplificação faz com que o tempo de processamento seja reduzido à um limite razoável.

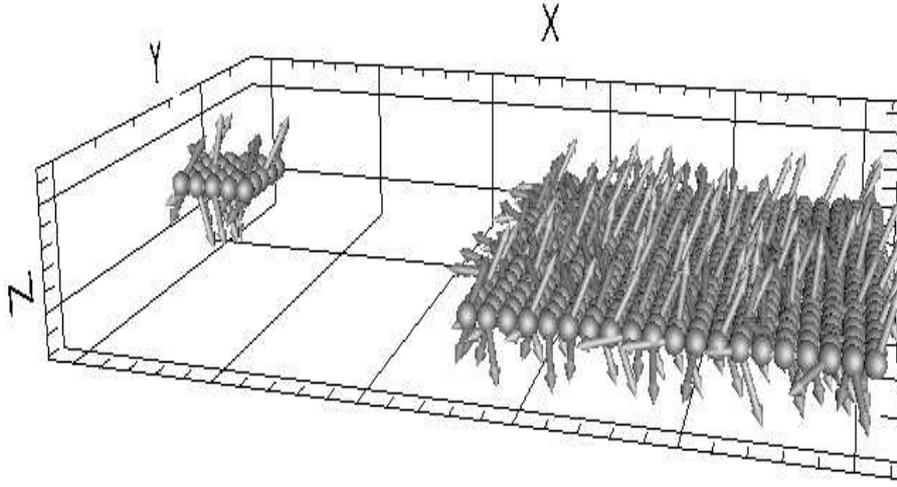


Figura 4.2: Visão esquemática de nosso arranjo computacional. A cabeça é simulada como uma rede 5×5 de partículas rígida cada uma com seu respectivo spin \vec{S} . A superfície é simulada com um arranjo similar ao da cabeça, porém de tamanho 20×20 . A cabeça pode deslizar sobre a superfície com velocidade inicial $v = v_0 \hat{x}$. Usamos condições de contorno periódicas nas direções dos planos e as setas representam os spins.

Com isto em mente, definiremos o seguinte hamiltoniano clássico, para as interações

$$H = \sum_{i=1}^{N1} \frac{\vec{P}_{1i}^2}{2m_{1i}} + \sum_{i=1}^{N2} \frac{\vec{P}_{2i}^2}{2m_{2i}} + U_1 + U_2 + U_{12}. \quad (4.1)$$

Na equação 4.1 os dois primeiros termos se referem à energia cinética armazenada na superfície e na ponta, respectivamente. Assim, seguindo esta convenção, os termos U_1 e U_2 descrevem o potencial de interação interno do substrato e da ponta, sendo definidos por,

$$U_1 = \sum_{i,j} V_1(r_{1ij}) - \sum_{i,j} \frac{1}{2} J_1(r_{1ij}) (S_{1i}^x S_{1j}^x + S_{1i}^y S_{1j}^y + \lambda_1 S_{1i}^z S_{1j}^z) - \sum_{i=1}^{N1} D_1 (S_{1i}^z)^2 + \sum_{i,j} \frac{w_1}{2} \left(\frac{r_{1ij}^2 \vec{S}_{1i} \cdot \vec{S}_{1j} - 3(\vec{r}_{1ij} \cdot \vec{S}_{1i})(\vec{r}_{1ij} \cdot \vec{S}_{1j})}{r_{1ij}^5} \right) \quad (4.2)$$

$$\begin{aligned}
 U_2 &= \sum_{i,j} V_2(r_{2ij}) - \sum_{i,j} \frac{1}{2} J_2(r_{2ij}) (S_{2i}^x S_{2j}^x + S_{2i}^y S_{2j}^y + \lambda_2 S_{2i}^z S_{2j}^z) - \sum_{i=1}^{N_2} D_2 (S_{2i}^z)^2 \\
 &+ \sum_{i,j} \frac{w_2}{2} \left(\frac{r_{2ij}^2 \vec{S}_{2i} \cdot \vec{S}_{2j} - 3(\vec{r}_{2ij} \cdot \vec{S}_{2i})(\vec{r}_{2ij} \cdot \vec{S}_{2j})}{r_{2ij}^5} \right)
 \end{aligned} \tag{4.3}$$

O termo U_{12} na equação 4.1 se refere ao potencial de interação entre a ponta e o substrato que será definido por,

$$\begin{aligned}
 U_{12} &= \sum_{i,j} V_{12}(r_{1i2j}) - \sum_{i,j} J_{12}(r_{1i2j}) (S_{1i}^x S_{2j}^x + S_{1i}^y S_{2j}^y + \lambda_{12} S_{1i}^z S_{2j}^z) \\
 &+ \sum_{i,j} \frac{w_{12}}{2} \left(\frac{r_{1i2j}^2 \vec{S}_{1i} \cdot \vec{S}_{2j} - 3(\vec{r}_{1i2j} \cdot \vec{S}_{1i})(\vec{r}_{1i2j} \cdot \vec{S}_{2j})}{r_{1i2j}^5} \right)
 \end{aligned} \tag{4.4}$$

Os termos V_1 e V_2 nas equações 4.2 e 4.3 representam um possível potencial de interação de pares, tal como o potencial (12-6) de Lennard-Jones e $r_{1ij} \equiv |\vec{r}_{1i} - \vec{r}_{1j}|$, $r_{2ij} \equiv |\vec{r}_{2i} - \vec{r}_{2j}|$ e $r_{1i2j} \equiv |\vec{r}_{1i} - \vec{r}_{2j}|$.

Em um sistema quase bi-dimensional, com interação definida pelas equações 4.2 ou 4.3, apresentam várias estruturas magnéticas que dependem do tamanho e da geometria da amostra. Várias situações são apresentadas e discutidas na referência [99](E em referências deste artigo). Embora as estruturas apresentadas por este tipo de sistema sejam bem entendidas, o diagrama de fase deste modelo está ainda em discussão, dado que podemos combinar de várias maneiras os parâmetros do modelo(J, D, λ, w). No entanto, vamos discutir de maneira qualitativa a fenomenologia do modelo.

Iniciarei esta discussão para o caso $w = 0$ e $D = 0$. Nesta situação temos que o termo de anisotropia de troca λ controla o tipo de vórtice que é mais estável na rede. Existe um valor crítico de anisotropia $\lambda_c \approx 0.7J$ [93, 94, 95], tal que para $\lambda < \lambda_c$ a energia do vórtice será mínima quando os spins do centro do vórtice estiverem no plano(in-plane configuration). Para $\lambda > \lambda_c$ a configuração que minimiza a energia do vórtice é aquela tal que os spins do centro do vórtice irão apresentar uma grande componente fora do plano(out-of-plane configuration). A anisotropia de sítio, D , controla a magnetização fora do plano(out-of-plane magnetization) do modelo[100]. Para o caso de um sistema isotrópico($\lambda = 1$) e $D > 0$ o modelo está na classe de universalidade de Ising [101], apresentando uma transição de fase do tipo ordem

desordem. Se $D < 0$ o modelo está na classe de universalidade xy , e neste caso, o sistema sofre uma transição de fase do tipo Berezinskii-Kosterlitz-Thouless (BKT), que é caracterizada pelo desligamento de pares vórtice-anti-vórtice, sem ordem de longo alcance [81, 102], para D suficientemente pequeno (Em geral $D/J \ll \lambda$), em alguma temperatura crítica T_{BKT} . Se, $D/J = \lambda = 0$, $T_{BKT} \approx 0.7$. Para $D/J \gg \lambda$ o sistema apresenta uma transição de fase de segunda ordem, em T_c , que depende do valor de D .

Para o caso $w \neq 0$, existe uma competição entre o termo dipolar e o termo de anisotropia de sítio que controla a magnetização fora do plano. Se w é pequeno comparado a D , podemos esperar que o sistema tenha um comportamento tal como o de Ising. Se w não é tão pequeno esperamos que ocorra uma transição da configuração de spins fora do plano para o plano [103]. Para w grande o suficiente, a configuração fora do plano se torna instável e a energia dos spins é minimizada desenvolvendo uma configuração anti-ferromagnética no plano.

De posse do hamiltoniano 4.1, usarei as equações clássicas de Hamilton para calcular as equações de movimento para as posições e momentos obtendo assim,

$$\dot{\vec{r}}_{1i} = \frac{\vec{P}_{1i}}{m_{1i}} = \vec{v}_{1i} \quad \dot{\vec{r}}_{2i} = \frac{\vec{P}_{2i}}{m_{2i}} = \vec{v}_{2i} \quad (4.5)$$

$$\begin{aligned} \dot{\vec{P}}_{1i} &= - \sum_j \frac{\vec{r}_{1ij}}{r_{1ij}} \left(\frac{\partial U_1}{\partial r_{1ij}} \right) - \sum_j \frac{\vec{r}_{1i2j}}{r_{1i2j}} \left(\frac{\partial U_{12}}{\partial r_{1i2j}} \right) \\ \dot{\vec{P}}_{2i} &= - \sum_j \frac{\vec{r}_{2ij}}{r_{2ij}} \left(\frac{\partial U_2}{\partial r_{2ij}} \right) + \sum_j \frac{\vec{r}_{1i2j}}{r_{1i2j}} \left(\frac{\partial U_{12}}{\partial r_{1i2j}} \right) \end{aligned} \quad (4.6)$$

Para evoluir o sistema de spins, usaremos as Equações de Landau-Lifshitz-Gilbert (LLG) [104] que são dadas por,

$$\begin{aligned} \dot{\vec{S}}_{1i} &= \vec{S}_{1i} \times [\vec{H}_{eff}^{1i}(t) + \alpha_{1i} \vec{S}_{1i} \times \vec{H}_{eff}^{1i}(t)] \\ \dot{\vec{S}}_{2i} &= \vec{S}_{2i} \times [\vec{H}_{eff}^{2i}(t) + \alpha_{2i} \vec{S}_{2i} \times \vec{H}_{eff}^{2i}(t)] \end{aligned} \quad (4.7)$$

onde,

$$\vec{H}_{eff}^{1i}(t) = - \frac{\partial H}{\partial \vec{S}_{1i}} \quad \vec{H}_{eff}^{2i}(t) = - \frac{\partial H}{\partial \vec{S}_{2i}}. \quad (4.8)$$

O parâmetro $\alpha_{1i,2i}$ nas equações 4.7 são identificados como um parâmetro dissipativo que tende a levar o sistema de spins ao estado fundamental. No entanto, em um trabalho realizado por Bulgac e Kusnezov[62, 63], eles mostraram que este parâmetro pode realizar o acoplamento de um banho térmico ao sistema de spins controlando a temperatura. Na verdade este acoplamento acarreta a necessidade de se evoluir este parâmetro no decurso do tempo. Assim, com base neste trabalho podemos mostrar que as equações que descrevem a evolução temporal destes parâmetro para uma desejada temperatura T são,

$$\begin{aligned} \dot{\alpha}_{1i} &= \gamma[\vec{H}_{eff}^{1i} \cdot \vec{H}_{eff}^{1i} S_{1i}^2 - (\vec{H}_{eff}^{1i} \cdot \vec{S}_{1i})(\vec{H}_{eff}^{1i} \cdot \vec{S}_{1i})] \\ &- k_b T [-(\frac{\partial}{\partial \vec{S}_{1i}} \cdot \vec{H}_{eff}^{1i}) S_{1i}^2 + \vec{S}_{1i} \cdot (\vec{S}_{1i} \cdot \frac{\partial}{\partial \vec{S}_{1i}}) \vec{H}_{eff}^{1i} + 2\vec{H}_{eff}^{1i} \cdot \vec{S}_{1i}] \end{aligned} \quad (4.9)$$

$$\begin{aligned} \dot{\alpha}_{2i} &= \gamma[\vec{H}_{eff}^{2i} \cdot \vec{H}_{eff}^{2i} S_{2i}^2 - (\vec{H}_{eff}^{2i} \cdot \vec{S}_{2i})(\vec{H}_{eff}^{2i} \cdot \vec{S}_{2i})] \\ &- k_b T [-(\frac{\partial}{\partial \vec{S}_{2i}} \cdot \vec{H}_{eff}^{2i}) S_{2i}^2 + \vec{S}_{2i} \cdot (\vec{S}_{2i} \cdot \frac{\partial}{\partial \vec{S}_{2i}}) \vec{H}_{eff}^{2i} + 2\vec{H}_{eff}^{2i} \cdot \vec{S}_{2i}] \end{aligned} \quad (4.10)$$

onde k_b é a constante de Boltzman e γ está associado com a inércia do sistema de spins do banho térmico.

As equações 4.5, 4.6, 4.7, 4.9 e 4.10 devem ser integradas numericamente, dada uma configuração inicial de posições, de momentos e de spins.

4.1 Movimento Relativo entre duas Superfícies Magnéticas

Nosso hamiltoniano(equação 4.1) possui alguns parâmetros de ajuste que definem e controlam as simetrias que nosso sistema irá possuir.

Como nosso primeiro trabalho, vamos considerar o movimento relativo de dois planos no qual as forças que os acoplam são puramente ferro-magnéticas ($V_{12} = 0$) e as interações dipolares serão desconsideradas ($w_1 = w_2 = w_{12} = 0$). Este acoplamento será do tipo Heisenberg isotrópico ($\lambda_{12} = 1$) e J_{12} sendo uma função da distância entre os spins de cada plano, dado por:

$$J_{12} = J_0 \exp(-\alpha_g(r_{1i2j} - r_0)^2), \quad (4.11)$$

que irá nos possibilitar estudar os efeitos do movimento relativo entre as duas superfícies [105, 106]. As constantes de acoplamento de Heisenberg intra-planos serão definidas por $J_1 = J_2 = Const. = J$.

As posições iniciais das superfícies são dispostas como duas redes quadradas de áreas $A_1 = 20a \times 20a$ (Substrato) e $A_2 = 5a \times 5a$ (Cabeça de Leitura), rígidas ($V_1 = V_2 = 0$) e com condições de contorno periódicas nas direções xy . Sem perda de generalidade fizemos $a = 1$ e na figura 4.2 mostro um visão esquemática de nosso sistema onde inicialmente, colocamos a rede A_1 muito afastada da rede A_2 para que $J_{12} = 0$.

Estamos interessado em estudar, a transferência de energia cinética, para os graus de liberdade magnéticos à energia constante. Para isto, definiremos ($\alpha = 0$) e usaremos uma simulação de Monte Carlo(MC) para equilibrar o sistema a uma dada temperatura T . Controlando a energia do sistema, assumimos que depois de 3×10^5 passos de MC nosso sistema tenha atingido o equilíbrio.

Com base nestas definições os termos que compõem nosso hamiltoniano 4.1 são,

$$U_1 = -\frac{J}{2} \sum_{\langle i,j \rangle} (S_{1i}^x S_{1j}^x + S_{1i}^y S_{1j}^y + \lambda_1 S_{1i}^z S_{1j}^z) - \sum_{i=1}^{N1} D_1 (S_{1i}^z)^2 \quad (4.12)$$

$$U_2 = -\frac{J}{2} \sum_{\langle i,j \rangle} (S_{2i}^x S_{2j}^x + S_{2i}^y S_{2j}^y + \lambda_2 S_{2i}^z S_{2j}^z) - \sum_{i=1}^{N2} D_2 (S_{2i}^z)^2 \quad (4.13)$$

$$U_{12} = - \sum_{i,j} J_{12}(r_{1i2j}) (\vec{S}_{1i} \cdot \vec{S}_{2j}). \quad (4.14)$$

O símbolo $\langle i, j \rangle$ diz que as somas são realizadas somente sobre os primeiros vizinhos. Estas três equações nos levam às seguintes equações de movimento,

$$\dot{\vec{r}}_{1i} = \frac{\vec{P}_{1i}}{m_{1i}} = \vec{v}_{1i} \quad \dot{\vec{r}}_{2i} = \frac{\vec{P}_{2i}}{m_{2i}} = \vec{v}_{2i} \quad (4.15)$$

$$\dot{\vec{P}}_{1i} = - \sum_j \frac{\vec{r}_{1i2j}}{r_{1i2j}} (\vec{S}_{1i} \cdot \vec{S}_{2j}) \left(\frac{\partial J_{12}}{\partial r_{1i2j}} \right) \quad ; \quad \dot{\vec{P}}_{2i} = -\dot{\vec{P}}_{1i} \quad (4.16)$$

$$\dot{\vec{S}}_{1i} = \vec{S}_{1i} \times \vec{H}_{eff}^{1i}(t) \quad \dot{\vec{S}}_{2i} = \vec{S}_{2i} \times \vec{H}_{eff}^{2i}(t) \quad (4.17)$$

$$\frac{\partial J_{12}}{\partial r_{1i2j}} = -2J_0\alpha_g(r_{1i2j} - r_0) \exp(-\alpha_g(r_{1i2j} - r_0)^2) \quad (4.18)$$

$$\vec{H}_{eff}^{1i}(t) = J \sum_{j,\langle i,j \rangle} \vec{S}_{1j} + 2D_2 S_{1i}^z \hat{k} + \sum_{j,\langle i,j \rangle} J_{12}(r_{1i2j}) \vec{S}_{2j} \quad (4.19)$$

$$\vec{H}_{eff}^{2i}(t) = J \sum_{j,\langle i,j \rangle} \vec{S}_{2j} + 2D_2 S_{2i}^z \hat{k} + \sum_{j,\langle i,j \rangle} J_{12}(r_{1i2j}) \vec{S}_{1j}. \quad (4.20)$$

Assim, as soluções para as equações 4.15, 4.16 e 4.17 são obtidas evoluindo o estado físico (conjunto de todas as posições, velocidades e spins) em pequenos intervalos de tempo $\delta t = 10^{-3}J^{-1}$ e as equações resultantes são resolvidas usando o método de integração de Runge-Kutta [47, 48, 49, 50].

Dado estas configurações iniciais, observamos a evolução do sistema em repouso durante um pequeno intervalo de tempo τ , para comparações posteriores. Para $t > \tau$ definimos uma velocidade inicial $v = v_0 \hat{x}$ para a superfície A_2 e armazenamos todas as posições, velocidades e componentes de spin do sistema durante a evolução para posteriores análises.

A quantidade importante em nossas simulações é a densidade de vórtices $\varphi_v(t)$ na superfície A_1 . Na realidade, estamos interessados em estudar se existe alguma relação entre esta quantidade e a dissipação de energia nestes sistemas.

Nós calculamos a densidade de vórtices como função da temperatura para vários valores dos parâmetros $\lambda_{1,2}/J$ e $D_{1,2}/J$, por meio de simulação de MC. Como já foi comentado, na próxima sessão relacionaremos a densidade de vórtices com dissipação de energia. Em nossos resultados energia está em unidades de J , temperatura em unidades de J/k_B , tempo em unidades de J^{-1} e velocidade em unidades de a/J^{-1} , onde k_B é a constante de Boltzman.

4.1.1 Resultados das Simulações

O sistema foi simulado para vários valores de temperatura e parâmetros de anisotropia. Em todas elas fixamos $J_0 = 2J$ and $\alpha_g = 1$. No primeiro conjunto de simulações usamos $\lambda_1 = \lambda_2 = 1$ e $D_1 = D_2 = 0.1J, -0.1J$ para obter um sistema que possua respectivamente, simetria fora do plano (Ising-like) e no plano(XY). No segundo

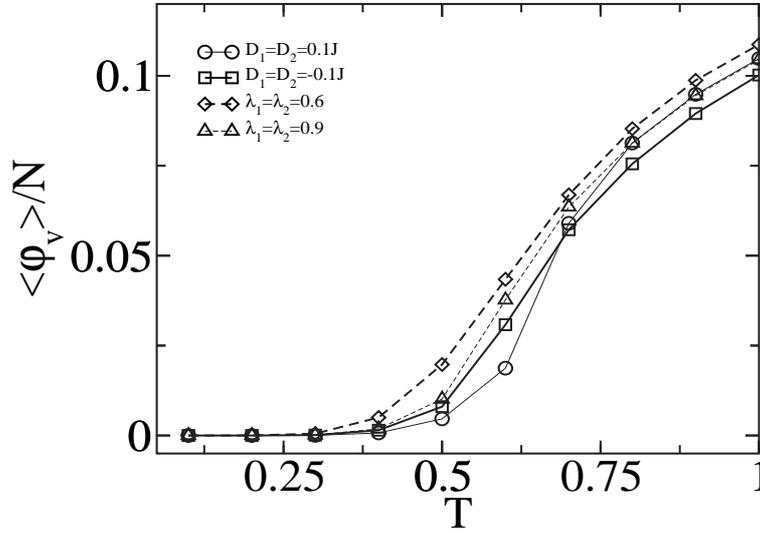


Figura 4.3: Densidade de vórtices como função da temperatura.

conjunto, usamos $D_1 = D_2 = 0$ e $\lambda_1 = \lambda_2 = 0.6, 0.9$ para obter vórtices tais que os spins em seus núcleos estejam no plano e fora do plano, respectivamente.

Antes de iniciarmos a evolução temporal do sistema, temos de conhecer qual o comportamento da densidade de vórtice, φ_v , em função da temperatura. Na figura 4.3 mostro um gráfico de φ_v como função da temperatura para os sistemas simulados que mostra que φ_v aumenta monotonicamente com T . Assim, se existir alguma relação entre vórtices e dissipação de energia é natural pensar que um aumento em φ_v esteja relacionado com um aumento na temperatura T .

Com a cabeça longe da superfície, iniciamos nossa evolução temporal em $t = 0$ e até $t < 200$ a cabeça permanece com velocidade do centro de massa $v_{2cm} = 0$. Esta parte da simulação serve como um guia para a evolução temporal total, sendo que φ_v somente oscila em torno de seu valor médio. Em $t = 200$ definimos $v_{2cm} = v_0$ e com isso, após algum tempo, a cabeça irá interagir com a superfície. Durante a interação, energia cinética é transferida da cabeça para a superfície e esperamos que neste processo φ_v aumente. Veremos a seguir que dependendo das condições iniciais e da simetria do sistema (Ver equação 4.1.) vários fenômenos podem ocorrer.

Nas figuras 4.4 até 4.7 mostramos gráficos da densidade de vórtice como função do tempo, para os parâmetros de simulação comentados acima. Em cada figura, os gráficos de *a*) à *h*), correspondem a temperaturas $T = 0.1, 0.2, 0.3, 0.4, 0.5, 0.6, 0.7, 0.8$.

Para o sistema que possui simetria fora do plano(out-of-plane symmetry) observamos que para baixas temperaturas φ_v aumenta quando a cabeça passa sobre a superfície, encontrando rapidamente um novo valor médio. Para temperaturas altas, φ_v é insensível à cabeça indicando que a transferência de energia se torna mais difícil. Em baixas temperaturas, é fácil excitar um vórtice, sendo que, estes tem baixa energia de excitação devido à componente de spin fora do plano. Em temperatura alta, o sistema já está saturado e a criação de uma nova excitação demanda mais energia.

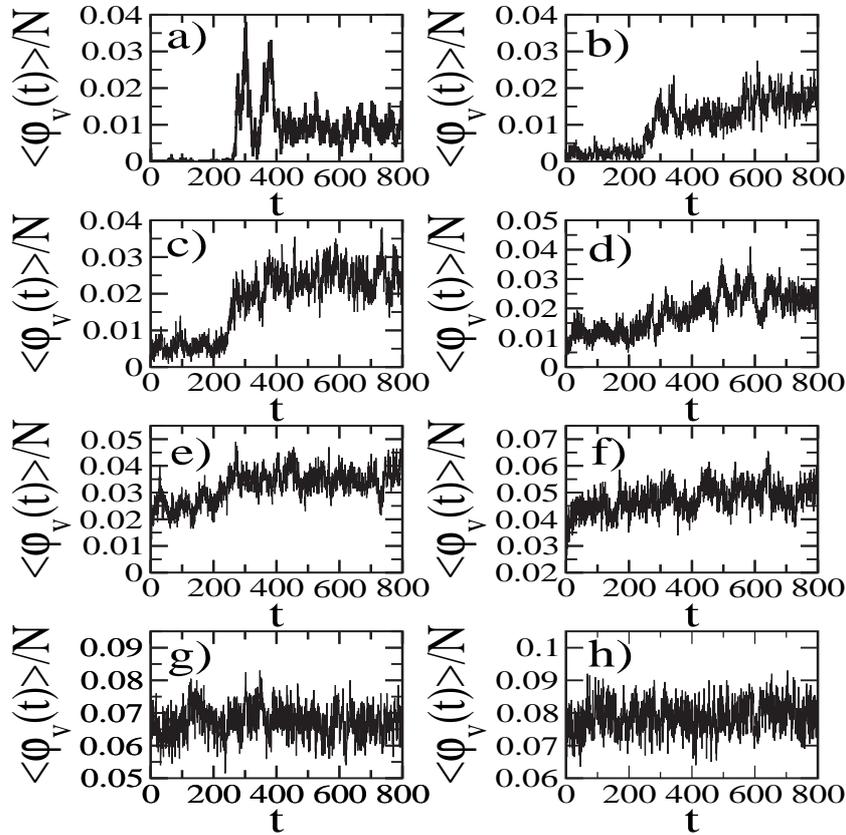


Figura 4.4: Densidade de vórtices como função do tempo para $D_1 = D_2 = 0.1J$ e $\lambda_1 = \lambda_2 = 1$. Os gráficos da esquerda para a direita e de cima para baixo correspondem às temperaturas $T = 0.1, 0.2, 0.3, 0.4, 0.5, 0.6$. O sistema tem simetria fora do plano(out-of-plane symmetry).

Para o sistema com simetria no plano (in-plane symmetry), a situação é oposta. Em baixas temperaturas não há transferência de energia para os modos de vórtice. A criação de um vórtice demanda muita energia, porque as componentes de spin do vórtice estão em sua maioria no plano. A altas temperaturas o sistema pode absorver energia mais facilmente e aumentar a densidade de vórtices. Eventualmente, o sistema satura em uma temperatura suficientemente alta.

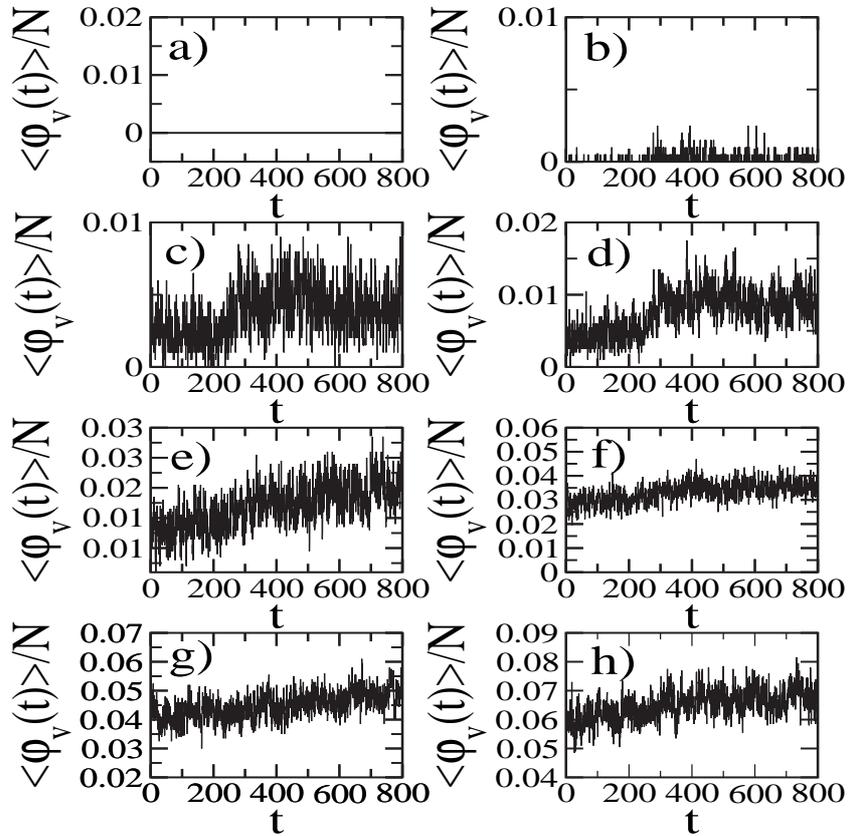


Figura 4.5: Densidade de vórtices como função do tempo para $D_1 = D_2 = -0.1J$ e $\lambda_1 = \lambda_2 = 1$. As temperaturas são as mesmas da figura 4.4. O sistema tem simetria no plano (in-plane symmetry).

Para o caso, em que os vórtices tem simetria no plano (in-plane-symmetry), $\lambda < \lambda_c$, a densidade de vórtices é constante até em temperaturas altas.

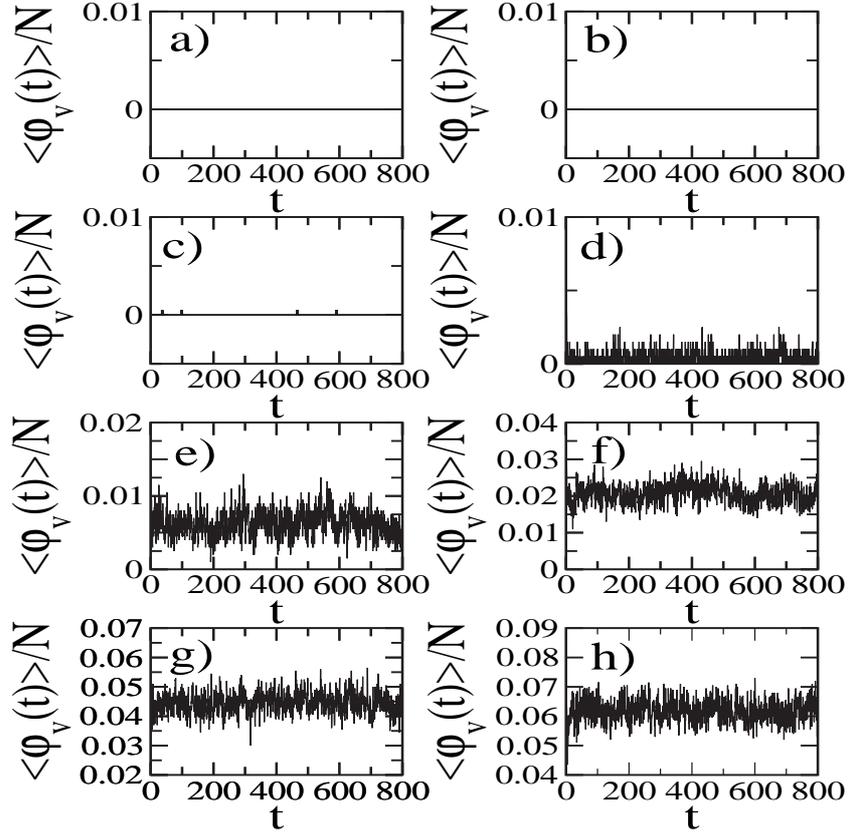


Figura 4.6: Densidade de vórtices como função do tempo para $\lambda_1 = \lambda_2 = 0.6$ e $D_1 = D_2 = 0$. As temperaturas são as mesmas da figura 4.4. Os vórtices tem estrutura plano (in-plane structure).

Para ($\lambda > \lambda_c$), a situação é similar à aquela onde o sistema tem simetria global no plano.

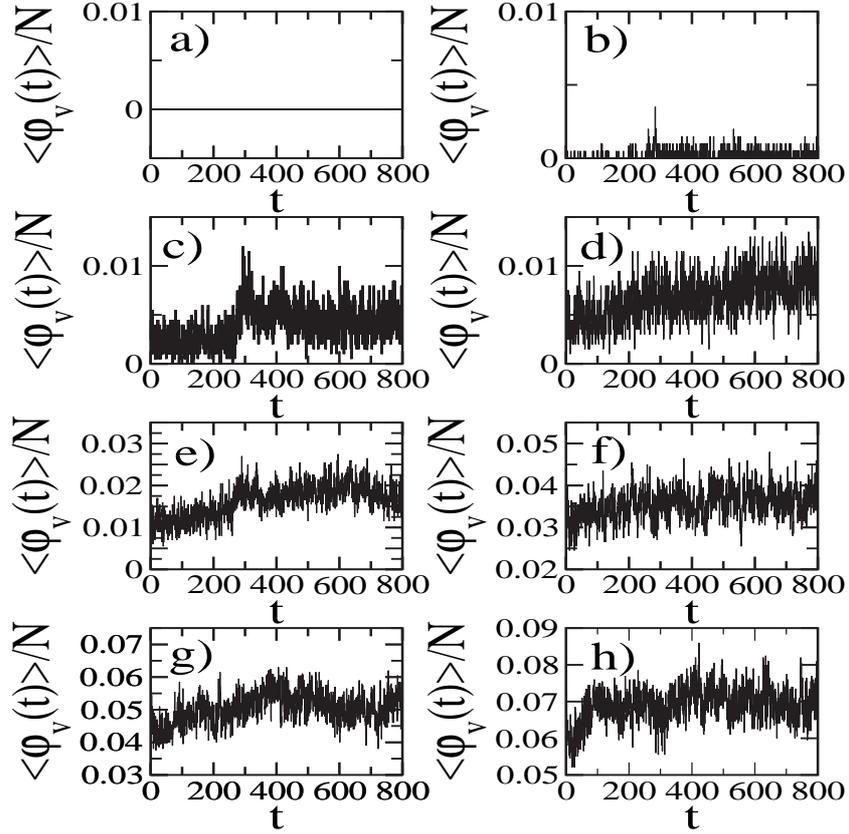


Figura 4.7: Densidade de vórtices como função do tempo para $\lambda_1 = \lambda_2 = 0.9$ e $D_1 = D_2 = 0$. As temperaturas são as mesmas da figura 4.4. Os vórtices tem estrutura fora do planar(out-of-plane structure).

Na figura 4.8 mostro, no mesmo gráfico, a velocidade da cabeça e a densidade de vórtice como função do tempo para algumas situações interessantes. A densidade de vórtice foi multiplicada por uma constante ($f = 2$), com o intuito de melhorar a visualização. Na primeira figura (4.8.a), nos observamos que a energia cinética é transferida para a superfície e a cabeça para, se move para traz e para frente escapando da influência da superfície. Em altas temperaturas a situação é um pouco mais complicada. Dependendo das condições iniciais, a cabeça pode passar pela superfície somente aumentando a densidade de vórtices (4.8.b), ou ela pode ficar presa na região da superfície, como é mostrado na figura (4.8.c). O custo deste aumento na densidade de vórtices é uma diminuição na energia cinética.

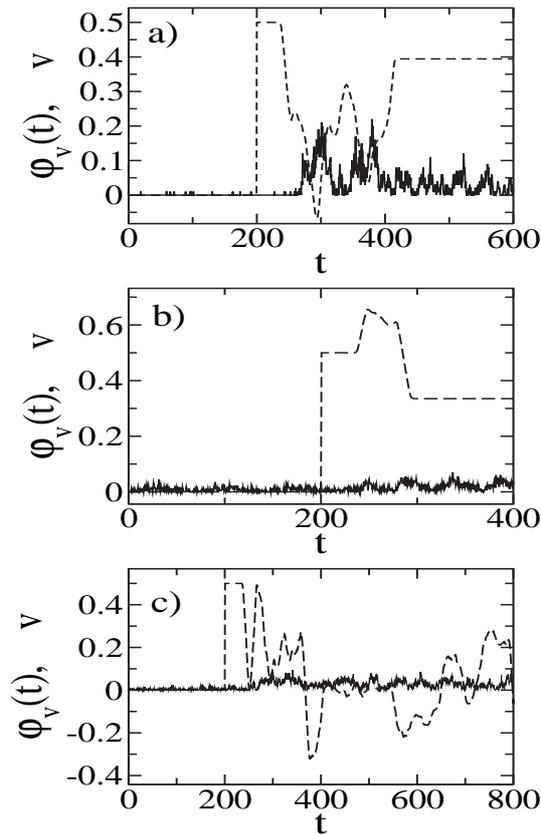


Figura 4.8: Velocidade instantânea e densidade de vórtices como função do tempo para $D_1 = D_2 = 0.1J$ e $\lambda_1 = \lambda_2 = 1$. A linha cheia é a densidade de vórtices e a linha tracejada é a velocidade instantânea da cabeça. A temperatura para a figura a) é $T = 0.1$ e para as figuras b) e c) é $T = 0.2$. A velocidade inicial é $v = 0.5$ em todos os casos.

Na figura 4.9 *a* e *b* mostro a velocidade e a densidade de vórtices como função do tempo para duas velocidades iniciais diferentes (respectivamente $v = 0.6, 0.2$), para a mesma temperatura $T = 0.2$. Para a maior velocidade, a cabeça diminui sua velocidade até quase parar ficando presa. No entanto, sua energia cinética é suficiente para atravessar a região da superfície. Para a velocidade mais baixa, 4.9 *a*, a cabeça colide quase elasticamente com a superfície. Pelo fato de que a perda de energia é desprezível a densidade de vórtices é conservada. Notamos ainda que o aumento na densidade de vórtices não responde instantaneamente à diminuição da energia cinética da cabeça. Isto pode ser devido a um mecanismo intermediário: A energia cinética pode ser usada para excitar ondas de spin na superfície. Pelo fato de que nosso sistema é adiabático, parte da energia armazenada nas ondas de spins é transferida para a excitação de vórtices.

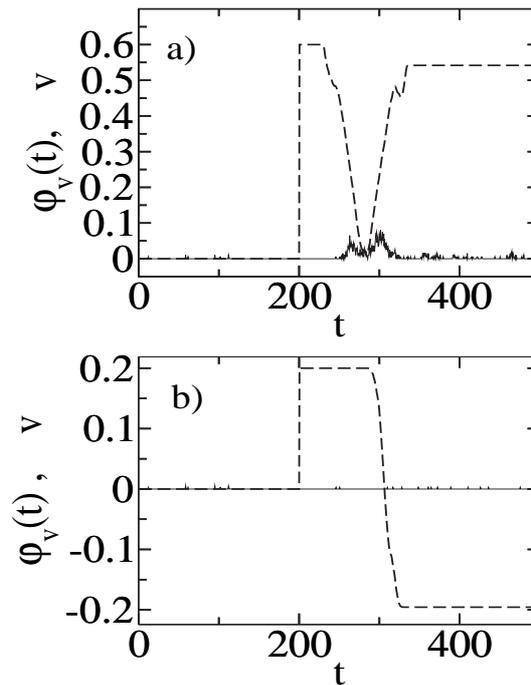


Figura 4.9: Velocidade instantânea e densidade de vórtices como função do tempo para $D_1 = D_2 = 0.1J$ e $\lambda_1 = \lambda_2 = 1$. A linha cheia é a densidade de vórtices e a linha tracejada é a velocidade instantânea da cabeça. A temperatura é $T = 0.2$ em ambos os casos. Nas figuras a) e b) as velocidades iniciais são respectivamente, $v = 0.6, 0.2$.

Na figura 4.10 mostro um gráfico da variação da temperatura como função da velocidade da ponta para várias temperaturas iniciais. Esta figura nos indica dois importantes efeitos que limitam a eficiência de leitura. Para cabeças de leituras que funcionem com nano-contatos o aumento local da temperatura aumenta o ruído associado com a oscilação da rede atômica conhecido como, ruído Johnson, e assim acarretando em um aumento no ruído associado com a rede magnética conhecido como, magnetic noise, dado pelo aumento na densidade de vórtices na rede. É importante notar que o aumento na temperatura pode ser minimizado selecionando apropriadamente a temperatura e a velocidade em que o dispositivo irá operar.

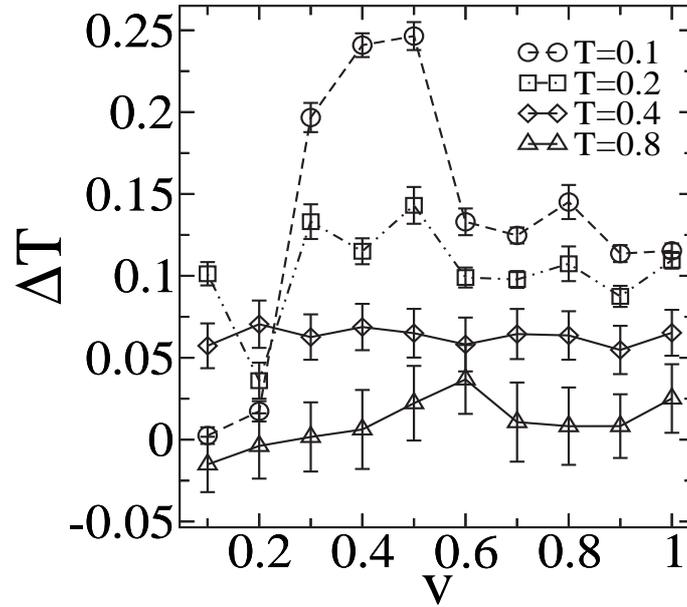


Figura 4.10: Variação da temperatura como função da velocidade para várias temperaturas iniciais e $D_h = D_s = 0.1J$.

Capítulo 5

Conclusões e Perspectivas.

5.1 Conclusões para as simulação de FFM.

Com relação ao modelamento teórico das forças de atrito, desenvolvidas neste trabalho, fizemos uma extensão tri-dimensional para o modelo unidimensional conhecido na literatura, e neste processo expomos a dependência explícita da força de atrito com a força normal. Dada a presença explícita da força normal no modelo, encontramos uma expressão para o coeficiente de atrito, que dentro das limitações do modelo, apresenta um acordo tanto qualitativo, quanto quantitativo com os resultados de nossas simulações. Imaginamos que uma contribuição importante a ser feita neste modelo, seria a inclusão de efeitos magnéticos. Pois, imaginamos que a estrutura magnética da ponta deve de alguma maneira influenciar na força de atrito. De fato observamos que, a criação de pares de vórtices e anti-vórtices na superfície pode funcionar como fonte de dissipação de energia em superfícies magnéticas.

Baseado na técnica da MFM, comentada neste trabalho, podemos escrever que a energia total de interação de uma ponta de MFM com a superfície de maneira é dada por,

$$V_{Tot}(\vec{q}, \vec{r}, \vec{m}) = V(\vec{q}) + \frac{1}{2}(\vec{q} - \vec{r}) \cdot \overset{\leftrightarrow}{k} \cdot (\vec{q} - \vec{r}) - \vec{m} \cdot \vec{B}(\vec{q}) \quad (5.1)$$

onde $\overset{\leftrightarrow}{k}$ é a matriz elasticidade que contém as contribuições elásticas do cantilever e da ponta, \vec{m} é o momento magnético da ponta e $\vec{B}(\vec{q})$, é o campo magnético exercido pela superfície em um dada posição da ponta. Assim, penso que o desenvolvimento de uma expressão analítica que apresente uma dependência explícita da

magnetização da ponta bem como do campo magnético da superfície seria mais uma contribuição importante na área.

Como vimos o comportamento do coeficiente de atrito e do termo cA depende da temperatura para um sistema adesivo, modelado pelo potencial de LJ. O comportamento distinto destes dois termos mostrou que dois fenômenos são importantes nestas análises. O primeiro está relacionado com forças adesivas quando a normal é zero e sendo proporcional à área de contato efetiva entre a massa M e a superfície. O segundo está relacionado com o processo de difusão na superfície e que pode estar relacionado com uma pré-fusão da superfície (surface pre-melting). Os histogramas (figuras 3.6 e 3.7) deixam claro este comportamento para temperaturas altas e forças normais positivas ou negativas. A medida do tempo de residência é equivalente à medida direta do processo de difusão que compete com o movimento da ponta em temperaturas altas. Em outras palavras, com o aumento da temperatura os canais são fechados dificultando o deslizamento da ponta. Em um recente trabalho de *Urbakh et.al*[7] ele faz o seguinte questionamento:

“Os regimes de stick e slip podem ser indicativos de diferentes estados (líquido, sólido, vítreo) de filmes confinados ou interfaces?”

Nossos resultados sugerem, que uma assinatura do processo de pré-fusão da superfície pode estar presente para forças atrativas entre a ponta e a superfície. Indicando assim, que o questionamento feito por *Urbakh et.al* terá uma resposta positiva, ou seja, os processos de stick e slip podem ser indicativos de diferentes fases em interfaces.

5.2 Conclusões para as simulação de Atrito em Dispositivos Magnéticos.

Usamos técnicas de Monte Carlo e Simulações de Dinâmica de Spins para estudar a interação entre duas partes magnéticas móveis: uma cabeça de leitura magnética se deslocando relativo à uma superfície magnética. Nosso interesse foi entender como se comporta os mecanismos de dissipação quando as forças envolvidas são puramente magnéticas. Em nossos resultados apresentados no capítulo 4, obtemos fortes evidências de que vórtices desempenham um papel importante nos mecanismos de dissipação de superfícies magnéticas. Um aumento das excitações de vórtice do

sistema causa o aumento de sua entropia. Este fenômeno pode destruir alguma informação magnética que esteja armazenada na estrutura magnética da superfície. Um resultado interessante é o comportamento da ponta passando sobre a superfície.

Em princípio esperávamos que a velocidade sempre diminuísse, como um efeito das interações com a superfície. No entanto para certas condições iniciais o efeito é oposto. A ponta pode oscilar, ficar presa ou até mesmo ser repelida pela superfície. No caso da colisão quase elástica não foi observado mudança na densidade de vórtices e se a densidade de vórtices aumenta a energia cinética da ponta diminui. No entanto, o aumento da densidade de vórtices não tem uma resposta instantânea à diminuição da energia cinética da ponta. Suspeitamos que existe um mecanismo intermediário envolvendo excitações de ondas de spin intermediando o fenômeno.

Os efeitos observados de atrito em nossas simulações, demonstram que quando forças puramente magnéticas estão envolvidas, o comportam é diferente dos efeitos ordinários de atrito.

Outro efeito importante é o aumento local na temperatura devido ao atrito magnético. Dois efeitos importantes que limitam a eficiência da leitura foram mostrados no capítulo 4. Para as cabeças de leitura de um nano-contato o aumento local na temperatura aumenta o ruído de Johnson acarretando conseqüentemente um aumento no ruído magnético devido ao aumento da densidade do vórtice. Nós acreditamos que para os projetos futuros de dispositivos magneto-resistivos das cabeças de leitura o ruído magnético deve ser considerado ao lado do ruído de Johnson.

5.3 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?

Apêndice A

Apêndice

A.1 Programa

Nosso programa foi desenvolvido utilizando a linguagem de programação Fortran 77 e todas as rotinas foram desenvolvidas por mim. Na versão final que será entregue à pós-graduação, esta seção conterà os códigos fontes desenvolvidos.

A.2 Gráficos da Força de atrito como função do tempo.

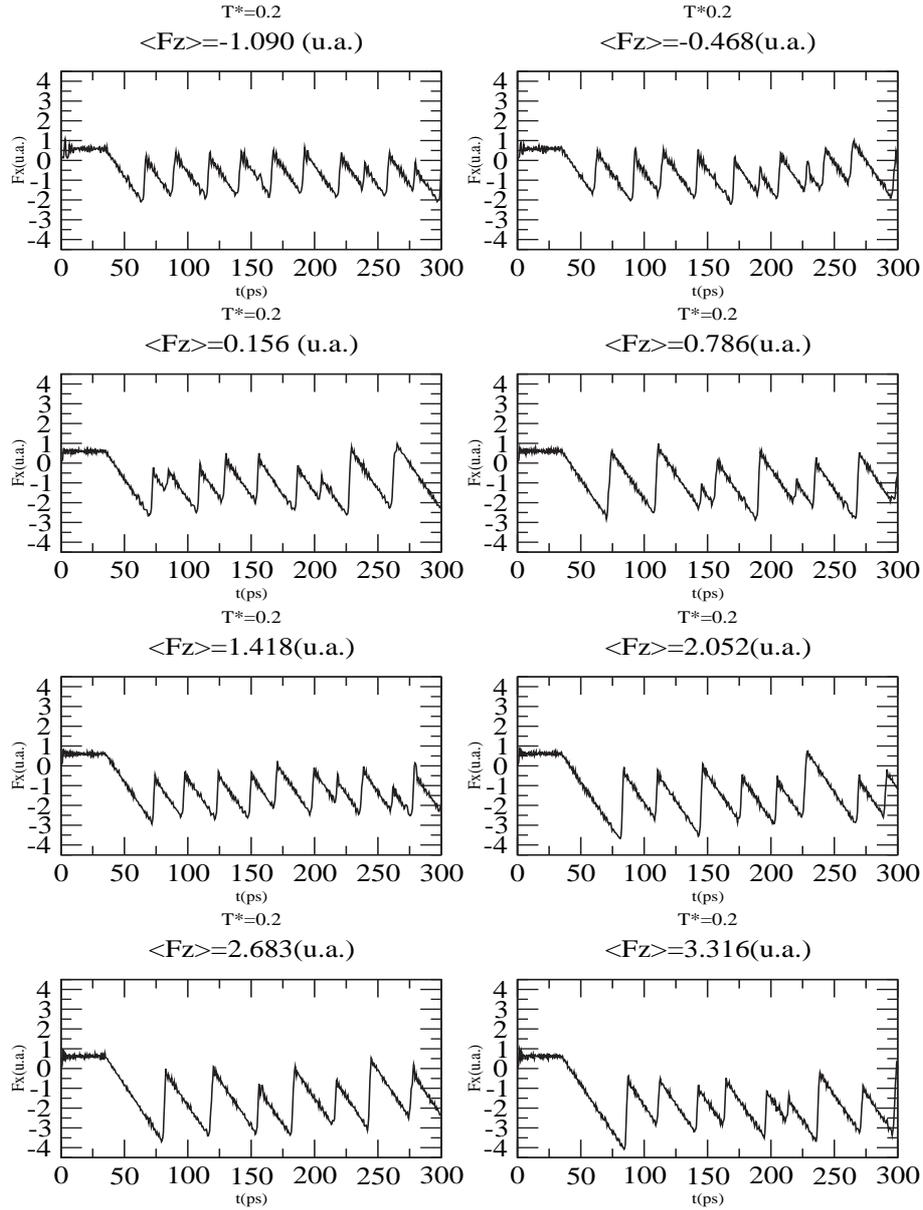


Figura A.1: Força atrito(F_x) como função do tempo para vários valores de força normal($\langle F_z \rangle$).A temperatura é $T = 0.2$.

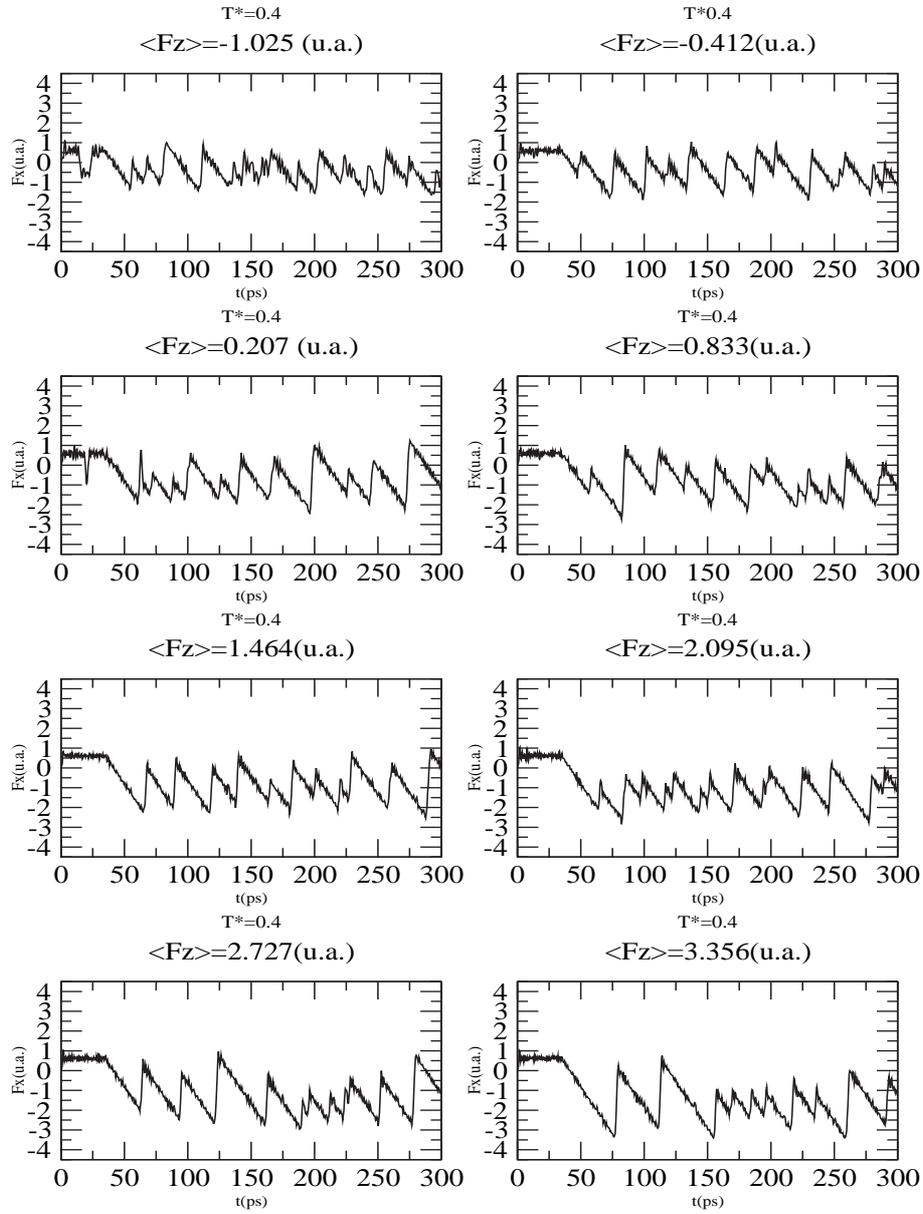


Figura A.2: Força atrito(F_x) como função do tempo para vários valores de força normal($\langle F_z \rangle$). A temperatura é $T = 0.4$.

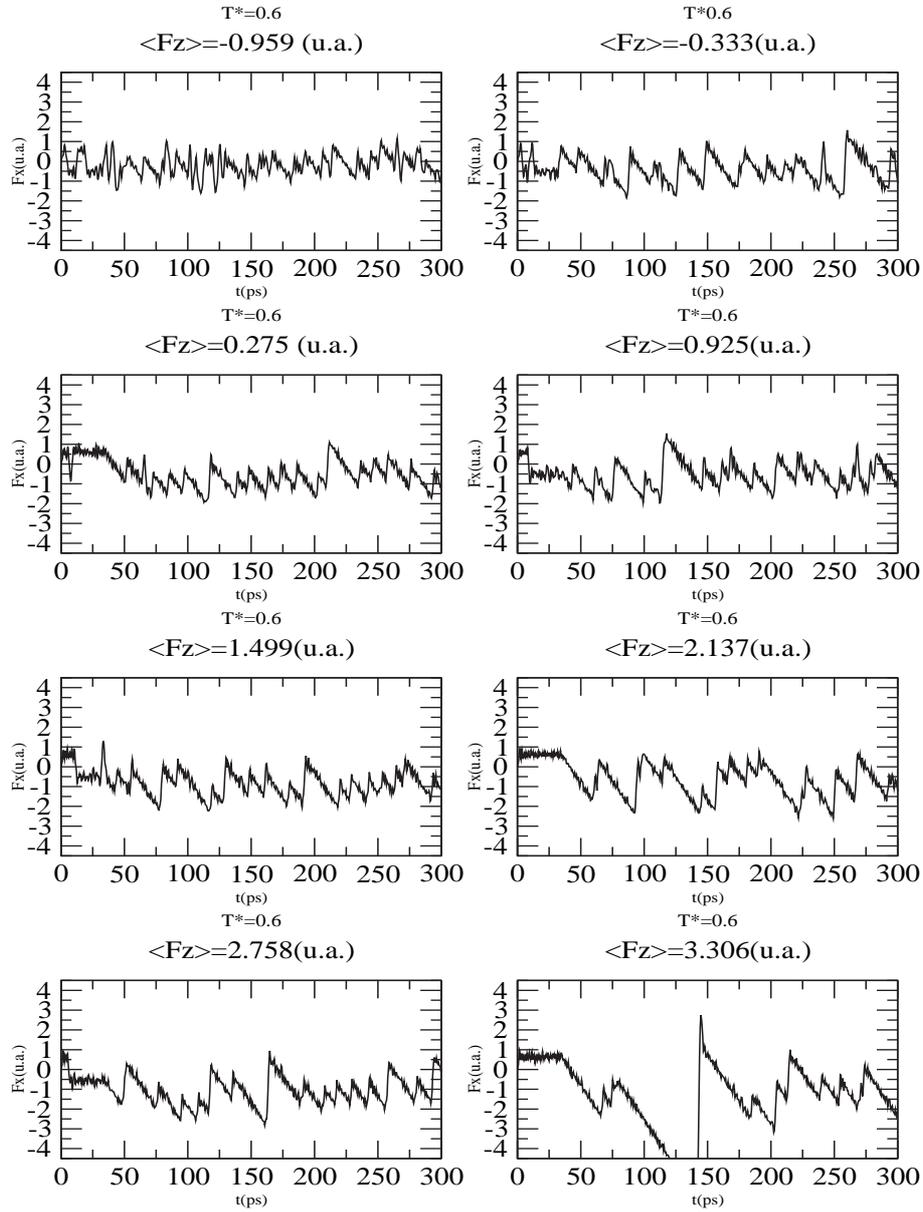


Figura A.3: Força atrito(F_x) como função do tempo para vários valores de força normal($\langle F_z \rangle$). A temperatura é $T = 0.6$.

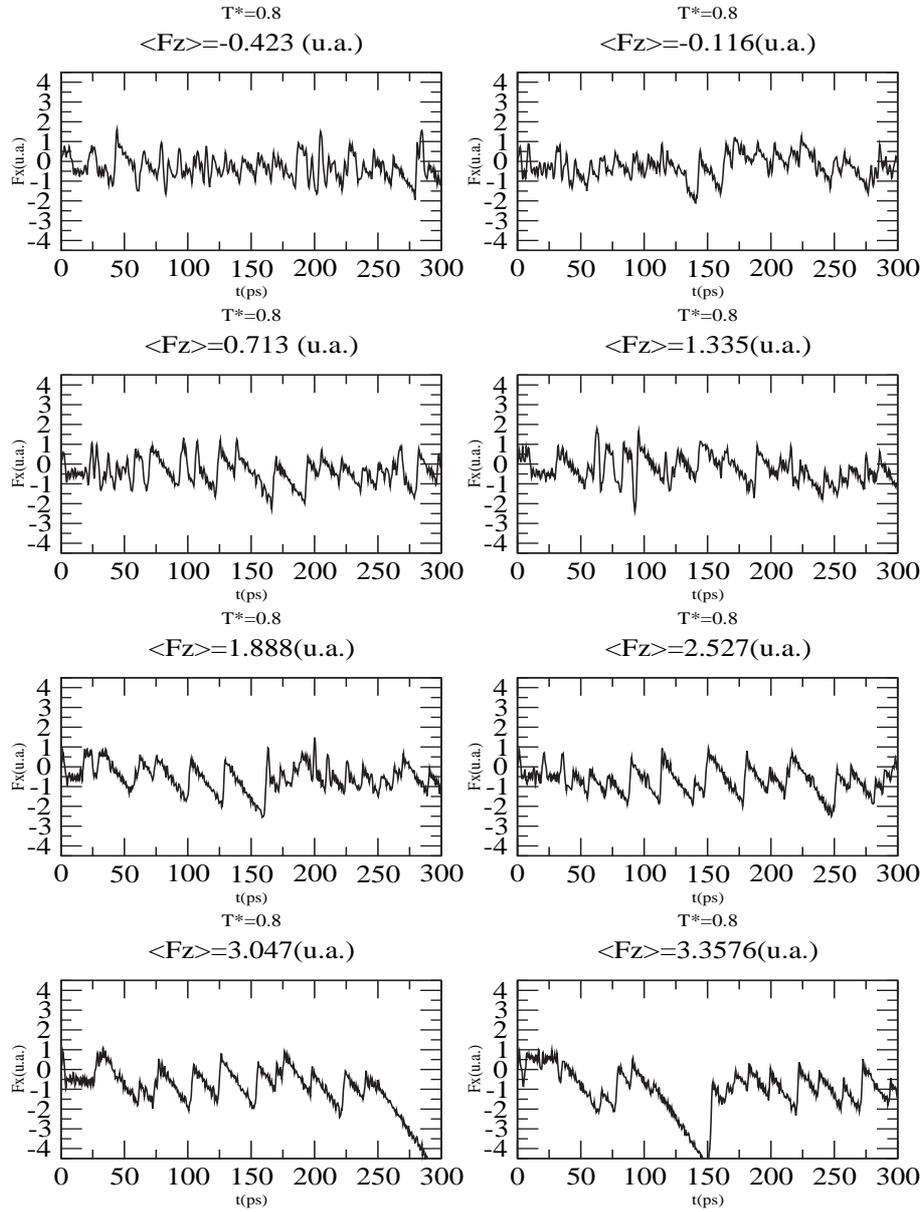


Figura A.4: Força atrito(F_x) como função do tempo para vários valores de força normal($\langle F_z \rangle$). A temperatura é $T = 0.8$.

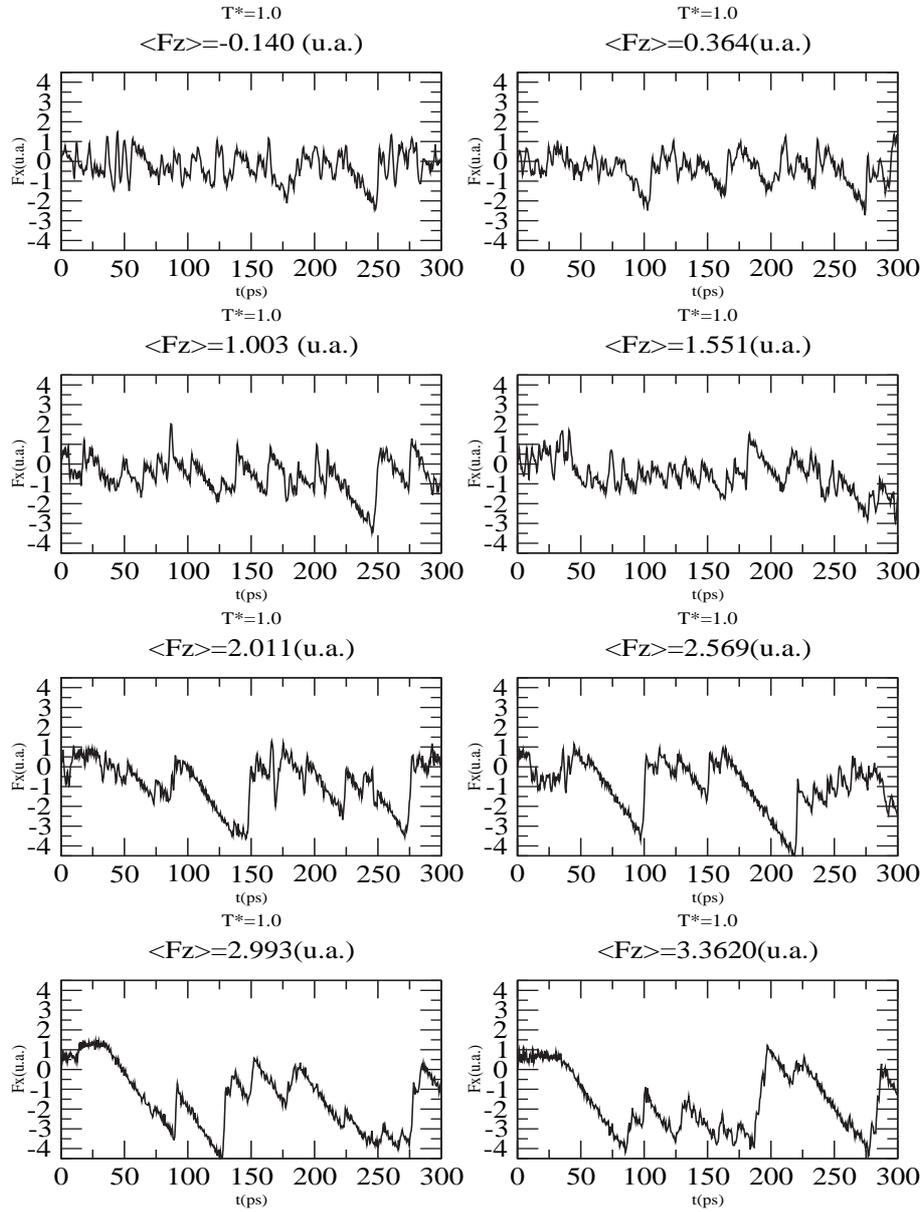


Figura A.5: Força atrito(F_x) como função do tempo para vários valores de força normal($\langle F_z \rangle$). A temperatura é $T = 1.0$.

A.3 Artigos Publicados

On-line.

[1] R.A. Dias, M. Rapini, P.Z. Coura and B.V. Costa, *Temperature Dependent Molecular Dynamic Simulation of Friction*, Brazilian Journal of Physics **36-3A**, 741-745 (2006).

[2] R.A. Dias, M. Rapini and B.V. Costa, *Dynamics of Two Sliding Magnetic Surfaces*, Brazilian Journal of Physics **36-3B**, 1074-1077 (2006).

[3] M. Rapini, R. A. Dias, B. V. Costa, *Monte Carlo Simulations of Ultrathin Magnetic Dots*, Brazilian Journal of Physics **36-3A**, 672-675 (2006).

[4] M. Rapini, R. A. Dias, B. V. Costa, *Phase transition in ultrathin magnetic films with long-range interactions: Monte Carlo simulation of the anisotropic Heisenberg model*, Phys. Rev. B **75**, 014425 (2007).

[5] R. A. Dias and M. Rapini and P. Z. Coura and B. V. Costa, *Magnetic friction due to vortex fluctuation*, Journal of Applied Physics **101**, 063915 (2007).

A.4 Artigos a serem Submetidos

Em desenvolvimento.

[1] R. A. Dias, M. Rapini, P.Z. Coura e B. V. Costa, *Velocity, Temperature and Normal force dependence on friction: An analytic and molecular dynamic study*

[2] R. A. Dias, R. Falcão, *Non-equilibrium molecular dynamic simulation: Breaking the translational symmetry in FFM experiments*

Bibliografia

- [1] K. Dransfeld E. Meyer, R.M. Overney and T. Gyalog. *Nanoscience - Friction and Rheology on the Nanometer Scale*. World Scientific, 1998.
- [2] *NT-MDT - Molecular Devices and Tools for Nanotechnology*. <http://www.ntmdt.ru/SPM-Techniques/Principles/>.
- [3] Bharat Bhushan. *Handbook of Micro/Nano Tribology*. CRC Press., second edition, 1999.
- [4] G.V. Dedkov. Theory of the noncontact friction forces between sliding nanoasperity and a surface. *Wear*, 232:145–150, 1999.
- [5] S. Ciraci and A. Buldum. Atomic-scale study of friction and energy dissipation. *Wear*, 254:911–916, 2003.
- [6] J. N. Israelachvili B. Brushan and U. Landman. Nanotribology: friction, wear and lubrication at the atomic scale. *Nature*, 374:607, 1995.
- [7] D. Gourdon M. Urbakh, J. Klafter and J. Israelachvill. The nonlinear nature of friction. *Nature*, 430:525, 2004.
- [8] J. Krim and A. Widom. Damping of a crystal oscillator by an adsorbed monolayer and its relation to interfacial viscosity. *Phys. Rev. B*, 38:12184, 1988.
- [9] B.N.J. Persson. Theory of friction and boundary lubrication. *Phys. Rev. B*, 48:18140, 1993.

- [10] D. Gourdon M. Ruths J. N. Israelachvili J. Gao, W.D. Luedtke and U. Landman. Frictional forces and amontons law: From the molecular to the macroscopic scale. *J. Phys. Chem. B*, 108:3410–3425, 2004.
- [11] G. Abstreiter W. Wegscheider U. F. Keyser, M. Bichler and R. J. Haug. Fabrication of double quantum dots by combining afm and e-beam lithography. *Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures*, 21:483–486, 2004.
- [12] S. O. Choi Y. S. Kim, K. H. Na and S. H. Yang. Atomic force microscopy-based nano-lithography for nano-patterning: a molecular dynamic study. *Journal of Materials Processing Technology*, 155-156:1847–1854, 2004.
- [13] Cheng-I Weng Te-Hua Fang and Jee-Gong Chang. Molecular dynamics simulation of nano-lithography process using atomic force microscopy. *Surface Science*, 501:138–147, 2002.
- [14] S. Dong X.C. Luo Y.D. Yan, T. Sun and Y.C. Liang. Molecular dynamic simulation of processing using afm pin tool. *Applied Surface Science*, 252:7523–7531, 2006.
- [15] J. F. Archard. Single contacts and multiple encounters. *J. Appl. Phys*, 32:1420, 1961.
- [16] Bharat Bhushan. Nanotribology and nanomechanics. *Wear*, 259:1507–1531, 2005.
- [17] E. Meyer W. Gutmannsbauer, H.J. Hug. Scanning probe microscopy for nanometer inspections and industrial applications. *Microelectronic Engineering*, 32:398–409, 1996.
- [18] P. Reimann and M. Evstigneev. Description of atomic friction as forced brownian motion. *New Journal of Physics*, 7:25, 2005.
- [19] J. Colchero, M. Luna, and A. M. Baro. Lock-in technique for measuring friction on a nanometer scale. *Applied Physics Letters*, 68(20):2896–2898, 1996.
- [20] A. M. Baró J. Colchero and O. Marti. Energy dissipation in scanning force microscopy-friction on an atomic scale. *Tribology Letters*, 2(4):327–343, 1996.

- [21] M. A. Lantz, S. J. O'Shea, A. C. F. Hoole, and M. E. Welland. Lateral stiffness of the tip and tip-sample contact in frictional force microscopy. *Applied Physics Letters*, 70(8):970–972, 1997.
- [22] R. W. Carpick, D. F. Ogletree, and M. Salmeron. Lateral stiffness: A new nanomechanical measurement for the determination of shear strengths with friction force microscopy. *Applied Physics Letters*, 70(12):1548–1550, 1997.
- [23] U. D. Schwarz, W. Allers, G. Gensterblum, and R. Wiesendanger. Low-load friction behavior of epitaxial c_{60} monolayers under hertzian contact. *Phys. Rev. B*, 52(20):14976–14984, Nov 1995.
- [24] A. Fogden and Lee R. White. Contact elasticity in the presence of capillary condensation : I. the nonadhesive hertz problem. *Journal of Colloid and Interface Science*, 138:414–430, 1990.
- [25] Y. Martin and H. K. Wickramasinghe. Magnetic imaging by “force microscopy” with 1000 [a-ring] resolution. *Applied Physics Letters*, 50(20):1455–1457, 1987.
- [26] J. J. Saenz, N. Garcia, P. Grutter, E. Meyer, H. Heinzelmann, R. Wiesendanger, L. Rosenthaler, H. R. Hidber, and H.-J. Guntherodt. Observation of magnetic forces by the atomic force microscope. *Journal of Applied Physics*, 62(10):4293–4295, 1987.
- [27] Franz J. Giessibl. Forces and frequency shifts in atomic-resolution dynamic-force microscopy. *Physical Review B*, 56(24):16010–16015, 1997.
- [28] S. Schultz P. Bryant and D. R. Fredkin. Modeling the behavior of the magnetic force microscopy. *J. Appl. Phys.*, 69(8):5877–5879, 1991.
- [29] U. Dürig. Relation between interaction force and frequency shift in large-amplitude dynamic force microscopy. *Applied Physics Letters*, 75(3):433–435, 1999.
- [30] M. Radmacher T. E. Schäffer and R. Proksch. Magnetic force gradient mapping. *Journal of Applied Physics*, 94(10):6525–6531, 2003.

- [31] T. Gyalog and H. Thomas. Atomic friction. *Z. Phys. B*, 104:669–674, 1997.
- [32] E. Gnecco A. Socoliuc, R. Bennewitz and E. Meyer. Transition from stick-slip to continuous sliding in atomic friction: Entering a new regime of ultralow friction. *Phys. Rev. Lett.*, 92:134301, 2004.
- [33] F. Mancosu V. Peveri V.N. Samoilov I.M. Sivebaek B.N.J. Persson, O. Albohr. On the nature of the static friction, kinetic friction and creep. *Wear*, 254:835, 2003.
- [34] A. Widom M.S. Tomassone, J.B. Sokoloff and J. Krim. Dominance of phonon friction for a xenon film on a silver (111) surface. *Phys. Rev. Lett.*, 79:4798, 1997.
- [35] R. Wiesendanger H. Hölscher, U.D. Schwarz. Modelling of the scan process in lateral force microscopy. *Surface Science*, 375:395–402, 1997.
- [36] W. Steele. The physical interaction of gases with crystalline solids. *Surf. Sci.*, 36:317, 1973.
- [37] B.N.J. Person and A. Nitzan. Linear sliding friction: on the origin of the microscopic friction for xe on silver. *Surface Science*, 367:261–275, 1996.
- [38] M. O. Robbins E. D. Smith and M.k Cieplak. Friction on adsorbed monolayers. *Phys. Rev. B*, 54:8252, 1996.
- [39] F.L. Freire Jr. R. Prioli, A.M.F. Rivas and A.O. Caride. Influence of velocity in nanoscale friction processes. *Appl. Phys. A*, 14:565–569, 2003.
- [40] A. Socoliuc E. Gnecco, R. Bennewitz and E. Meyer. Friction and wear on the atomic scale. *Wear*, 254:859–862, 2003.
- [41] T. Gyalog Ch. Loppacher M. Bammerlin E. Meyer E. Gnecco, R. Bennewitz and H.-J. Güntherodt. Velocity dependence of atomic friction. *Phys. Rev. Lett.*, 84:1172, 2000.
- [42] R. Bennewitz E. Meyer E. Riedo, E. Gnecco and H. Brune. Interaction potential and hopping dynamics governing sliding friction. *Phys. Rev. Lett.*, 91:084502, 2003.

- [43] M. Grant Y. Sang, M. Dubé. Thermal effects on atomic friction. *Phys. Rev. Lett.*, 87:174301, 2001.
- [44] C. Fusco and A. Fasolino. Velocity dependence of atomic force friction: A competitive study of one- and two-dimensional tomlinson model. *Phys. Rev. B*, 71:045413, 2005.
- [45] Sílvio R. A. Salinas. *Introduçãoa Física Estatística*. Editora da USP, 1999.
- [46] T. Thundat S. Jeon and Yehuda Braiman. Effect of normal vibration on friction in the atomic force microscopy experiment. *Appl. Phys. Lett.*, 88:214102, 2006.
- [47] J. M. Thijssen. *Computational Physics*. Cambridge University Press, 2000.
- [48] D. C. Rapaport. *The Art of Molecular Dynamics Simulation*. Cambridge University Press, 2000.
- [49] M.P. Allen and D.J. Tildesley. *Computer Simulation of Liquids*. Oxford Science Publications, 1992.
- [50] H. J. C. Berendsen and W. F. Gunsteren. *Pratical Algorithms for Dynamic Simulations*, pages 43–65.
- [51] Flavio de Jesus Rezende. *Simulação da Dinâmica de Átomos e Aglomerados em Superfícies*. Tese de doutorado- física, UFMG.
- [52] F.J. Resende and B.V. Costa. Molecular-dynamics study of the diffusion coefficient on a crystal surface. *Phys. Rev. B*, 61:12697, 2000.
- [53] F.J. Resende and B.V. Costa. Molecular dynamics study of copper cluster deposition on a (010) surface. *Surf. Sci.*, 481:54, 2001.
- [54] Pablo Zimmermann Coura. *Simulação de crescimento de cristais usando dinamica molecular*. Tese de doutorado- física, UFMG.
- [55] Rodrigo Alves Dias. Dinâmica molecular semi-quântica com aplicações em moléculas diatômicas. Discertação de mestrado - física, UFMG, 2003.

- [56] C. Kittel. *Introduction to Solid State Physics*. Wiley, 3rd edition, 1996.
- [57] M. S. Dresselhaus. *Applications of Group Theory to the Physics of Solids*. SPRING, 2002.
- [58] D. Bemman. Some multistep method for use in molecular dynamic calculations. *J. Comput. Phys.*, 20:130–139, 1976.
- [59] O.N. Mesquita P.Z. Coura and B.V. Costa. Molecular-dynamics simulation of directional growth of binary mixtures. *Phys. Rev. B*, 59:3408, 1999.
- [60] B.V. Costa P.Z. Coura. Molecular dynamics simulation of zone melting. *Int. J. Mod. Phys. C*, 9:857, 1998.
- [61] H. A. Luther B. Carnahan and J. O. Wilkes. *Applied Numerical Methods*. John Wiley and Sons, INC., 1969.
- [62] A. Bulgac and D. Kusnezov. Canonical ensemble averages from pseudomicro-canonical dynamics. *Phys. Rev. A*, 42:5045, 1990.
- [63] S. Nosé. Constant temperature molecular dynamics methods. *Progress of Theoretical Physics Supplement*, 103, 1991.
- [64] Mark O. Robbins Martin H. Müser. Computer simulations of friction. *Lubrication and Wear*, cond-mat/0001056 v1 5 Jan 2000.
- [65] V. Rosato F. Cleri. Tight-binding potentials for transition metals and alloys. *Phys. Rev. B*, 48:22, 1993.
- [66] J. Tersoff. New empirical approach for the structure and energy of covalent systems. *Phys. Rev. B*, 37:6991, 1988.
- [67] J. Tersoff. New empirical model for the structural properties of silicon. *Phys. Rev. Lett.*, 632, 1986.
- [68] D. W. Brenner. Empirical potential for hydrocarbons for use in simulating the chemical vapor deposition of diamond films. *Phys. Rev. B*, 42:9458, 1990.
- [69] T.A. Weber F.H. Stillinger. Computer simulation of local order in condensed phases of silicon. *Phys. Rev. B*, 31:5262, 1985.

- [70] O.N. Mesquita P.Z. Coura and B.V. Costa. Molecular-dynamics simulation of directional growth of binary mixtures. *Phys. Rev. B*, 59:3408, 1999.
- [71] O.N. Mesquita P.Z. Coura and B.V. Costa. Molecular dynamics simulation of zone melting. *Int. J. Mod. Phys. C*, 9(6):857–860, 1998.
- [72] J. Ringlein and M.O. Robbins. Understanding and illustrating the atomic origins of friction. *Am. J. Phys.*, 72:884, 2004.
- [73] T. L. Mogné J. M. Martin, H. Liang and M. Malroux. Low-temperature friction in the xps analytical ultrahigh vacuum tribotester. *Tribology Letters*, 14:25, 2003.
- [74] D. Gourdon and J. N. Israelachvili. Transitions between smooth and complex stick-slip sliding of surfaces. *Phys. Rev. E*, 68:021602, 2003.
- [75] M. Rosenbluth A. Teller E. Teller N. Metropolis, A. Rosenbluth. Equation of state calculations by fast computing machines. *J. Chem. Phys.*, 21:1087, 1953.
- [76] G. T. Barkema M. E. J. Newman. *Monte Carlo Methods in Statistical Physics*. Oxford University Press, 1999.
- [77] K. Binder D. P. Landau. *A Guide to Monte Carlo Simulations in Statistical Physics*. Cambridge University Press, 2000.
- [78] S. Gonçalves A. Liebsch and M. Kiwi. Electronic versus phononic friction of xenon on silver. *Phys. Rev. B*, 60:5034, 1999.
- [79] P.Z. Coura R.A. Dias, M. Rapini and B.V. Costa. Temperature dependent molecular dynamic simulation of friction. *Brazilian Journal of Physics*, 36(3A):741–745, September 2006.
- [80] R. A. Dias, M. Rapini, P. Z. Coura, and B. V. Costa. Magnetic friction due to vortex fluctuation. *Journal of Applied Physics*, 101(6):063915, 2007.
- [81] D.P. Landau and R.W. Gerling. Critical dynamics in the two-dimensional xy-model. *J. Magn. Magn. Mater.*, 843:104–107, 1992.

- [82] A. Scholl A. Bauer A. Doran J. Stöhr S.-B Choe, Y. Acremann and H. A. Padmore. Vortex core-driven magnetization dynamics. *Science*, 304:402, 2004.
- [83] Y. Kawazoe R. Tao H. Li, Y. Jiang. Vortex and magnetoresistance in nanomagnet. *Phys. Lett. A*, 298:410–415, 2002.
- [84] Jin Liu Bo Liu and Tow-Chong Chong. Slider design for sub-3-nm flying height head-disk systems. *J. Mag. Mag. Mater.*, 287:339–345, 2005.
- [85] A. Y. Suh and A. A. Polycarpou. Adhesive contact modeling for sub-5-nm ultralow flying magnetic storage head-disk interfaces including roughness effects. *J. Applied Phys.*, 97:104328, 2005.
- [86] B. Bhushan. Macro- and microtribology of magnetic rigid-disk storage devices. *J. Magn. Magn. Mater.*, 155:318–322, 1996.
- [87] M. Muñoz N. García and Y.-W. Zhao. Magnetoresistance in excess of 200room temperature and 100 oe. *Phys. Rev. Lett.*, 82:2923, 1984.
- [88] G. G. Qian H. Rohrer N. García, M. Muñoz and Y.-W. Zhao. Ballistic magnetoresistance in a magnetic nanometer sized contact: An effective gate for spintronics. *Appl. Phys. Lett.*, 79:4550, 2001.
- [89] N. Smith and P. Arnett. White-noise magnetization fluctuations in magnetoresistive heads. *Appl. Phys. Lett.*, 78:1448, 2001.
- [90] E. Terrenzio B. E. Argyle and J. C. Slonczewski. Magnetic vortex dynamics using the optical cotton-mouton effect. *Phys. Rev. Lett.*, 53:190, 1984.
- [91] D. M. Engebretson J. Berezovsky J. P. Park, P. Eames and P. A. Crowell. Imaging of spin dynamics in closure domain and vortex structures. *Phys. Rev. B*, 67:20403, 2003.
- [92] J. Hohlfeld K. Bär Th. Gerrits, H. A. M. van den Berg and Th. Rasing. Ultrafast precessional magnetization reversal by picosecond magnetic field pulse shaping. *Nature*, 418:509, 2002.
- [93] J.E.R. Costa and B.V. Costa. Static and dynamic simulation in the classical two-dimensional anisotropic heisenberg model. *Phys. Rev. B*, 54:994, 1996.

- [94] B.V. Costa J.E.R. Costa and D.P. Landau. Dynamic behavior of vortices in the classical two-dimensional anisotropic heisenberg model. *Phys. Rev. B*, 57:11510, 1998.
- [95] J.E.R. Costa B.V. Costa and D.P. Landau. Monte carlo and spin dynamics study of the anisotropic heisenberg model in two dimensions. *J. Appl. Phys.*, 81:5746, 1997.
- [96] B. V. Costa M. Rapini, R. A. Dias. Monte carlo simulations of ultrathin magnetic dots. *Brazilian Journal of Physics*, 36(3A):672–675, September 2006.
- [97] M. Rapini R.A. Dias and B.V. Costa. Dynamics of two sliding magnetic surfaces. *Brazilian Journal of Physics*, 36(3B):1074–1077, September 2006.
- [98] A. Moschel A. Hucht and K. D. Usadel. Monte-carlo study of the reorientation transition in heisenberg models with dipole interactions. *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, 148:32–33, 1995.
- [99] A. Ghazali E.Yu. Vedmedenko and J.-C.S. L'evy. Magnetic vortices in ultrathin films. *Phys. Rev. B*, 59:3329, 1999.
- [100] F.G. Mertens M.E. Gouvêa A.S.T. Pires T. Kamppeter, S.A. Leonel and A.S. Kovalev. Topological and dynamical excitations in a classical 2d easy-axis heisenberg model. *Eur. Phys. J. B*, 21:93–102, 2001.
- [101] Lars Onsager. Crystal statistics. i. a two-dimensional model with an order-disorder transition. *Phys. Rev.*, 65(3-4):117–149, Feb 1944.
- [102] K. W. Lee and C. E. Lee. Monte carlo study of the kosterlitz-thouless transition in the heisenberg model with antisymmetric exchange interactions. *Phys. Rev. B*, 72:054439, 2005.
- [103] C. Santamaria and H.T. Diep. Dipolar interactions in magnetic thin films: perpendicular to in-plane ordering transition. *J. Magn. Magn. Mater.*, 212:23, 2000.
- [104] U. Nowak R. Wieser and K. D. Usadel. Domain wall mobility in nanowires: Transverse versus vortex walls. *Phys. Rev. B*, 69:064401, 2004.

- [105] M. A. Ruderman and C. Kittel. Indirect exchange coupling of nuclear magnetic moments by conduction electrons. *Phys. Rev.*, 96:99, 1954.
- [106] M. A. Ruderman and C. Kittel. Application of the anisotropic rkky model on the composition dependence of the néel temperature for $u_2(n_{1-x}pd_x)_2sn$ system. *Jour. Mag. Mag. Mat.*, 175:263–271, 1997.