ELEIR MUNDIM BORTOLETO

COMPORTAMENTO TRIBO-MECÂNICO E DESGASTE ADESIVO DE
MATERIAIS EM NANOESCALA: ANÁLISES POR DINÂMICA MOLECULAR
E MECÂNICA DO CONTÍNUO

São Paulo

2015

ELEIR MUNDIM BORTOLETO

COMPORTAMENTO TRIBO-MECÂNICO E DESGASTE ADESIVO DE
MATERIAIS EM NANOESCALA: ANÁLISES POR DINÂMICA MOLECULAR
E MECÂNICA DO CONTÍNUO

Tese apresentada ao Programa de Pós Graduação em Engenharia Mecânica da Escola Politécnica da Universidade de São Paulo para obtenção do título de doutor em Ciências

São Paulo

2015

ELEIR MUNDIM BORTOLETO

COMPORTAMENTO TRIBO-MECÂNICO E DESGASTE ADESIVO DE
MATERIAIS EM NANOESCALA: ANÁLISES POR DINÂMICA MOLECULAR
E MECÂNICA DO CONTÍNUO

Tese apresentada ao Programa de Pós Graduação em Engenharia Mecânica da Escola Politécnica da Universidade de São Paulo para obtenção do título de doutor em Ciências

Área de concentração:
Engenharia Mecânica

Orientador:
Prof. Dr. Roberto Martins de Souza

São Paulo

2015

Este exemplar foi revisado e corrigido em relação à versão original, sob responsabilidade única do autor e com a anuência de seu orientador.

São Paulo, _____ de _____ de _____

Assinatura do autor: _____

Assinatura do orientador: _____

Catálogo-na-publicação

Bortoleto, Eleir Mundim

Comportamento tribo-mecânico e desgaste adesivo de materiais em nanoescala: análises por dinâmica molecular e mecânica do contínuo / E. M. Bortoleto -- versão corr. -- São Paulo, 2015.
153 p.

Tese (Doutorado) - Escola Politécnica da Universidade de São Paulo.
Departamento de Engenharia Mecânica.

1.Desgastes dos Materiais 2.Mecânica Clássica 3.Dinâmica Molecular
I.Universidade de São Paulo. Escola Politécnica. Departamento de
Engenharia Mecânica II.t.

Dedico às mulheres da minha vida:
minha mãe Izilda,
minhas irmãs Eveliny e Elaine
e minha querida Paulinha.

AGRADECIMENTOS

Ao concluir esta tese, quero expressar meu agradecimento às pessoas que me apoiaram e contribuíram para a realização deste trabalho.

Em primeiro lugar, meu orientador, Prof. Dr. Roberto Martins de Souza, que me deu as oportunidades, me orientou e incentivou de forma dedicada para que eu iniciasse, persistisse e finalizasse esta pesquisa, por quem criei enorme admiração, pelas discussões, sugestões, ensinamentos e pela amizade.

Aos Prof. Dr. Amilton Sinatora e Izabel Machado, pelo interesse neste trabalho, pelas conversas e sugestões que ajudaram a analisar os problemas sob outros ângulos e considerando novos aspectos.

Ao Prof. Dr. Marcio Cuppari, pela disponibilidade em contribuir para as análises de dinâmica molecular, por me colocar a par das novidades do código LAMMPS e por esclarecer várias dúvidas a respeito de um método e de uma ferramenta que eram totalmente novos para mim.

Ao Prof. Dr. Cláudio Schon e, novamente, ao Prof. Dr. Marcio Cuppari, pelas contribuições que deram a esse trabalho durante o exame de qualificação, pelas orientações e sugestões.

Aos companheiros de pesquisas, simulações e experimentos Cristiano Lagatta, Erika Prados, Vanessa Seriacopi, Newton Fukumasu, Luiz Lima, Ana Julia Ter-tuliano, Francisco Profito, Franco, Felipe Carneiro, Marcos Ara, pela companhia nas discussões, reuniões de projeto e pelos ótimos momentos compartilhados, bem como a todos os colegas do Laboratório de Fenômenos de Superfícies, por proporcionarem um excelente ambiente de trabalho e um segundo lar.

À Silene e ao Sidney, pela constante ajuda nos assuntos extra-laboratório.

Aos amigos de sempre e para sempre, mesmo à distância: Pedro Neves, Marco Aurélio Mendes, Meire de Almeida, Renato Lourenço e Alexandre Martins, pelo apoio em tudo e pela companhia sempre agradável e motivadora.

Aos participantes do Projeto "Desafios Tribológicos em Motores flex fuel", de onde surgiram as primeiras ideias para o tema de pesquisa desenvolvido neste trabalho e cujas reuniões técnicas sempre são fonte de debate enriquecedor.

Ao Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico (CNPQ) e à Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior (CAPES) pela bolsa de doutorado.

À minha família, que sempre foi fundamental em minha vida.

À Paulinha, pela companhia, pelo tempo compartilhado, pelo apoio e incentivo constantes, por ouvir com interesse meus problemas a ponto de aprender o que é Tribologia, por entender minhas ausências e em todo o tempo me fazer muito feliz.

Às minhas irmãs Elaine e Eveliny, pelo carinho, preocupação e disposição em ajudar sempre. Por tirarem as pedras do caminho com os ensinamentos ao irmão caçula, pelo apoio incondicional e pela companhia.

Aos meus pais, Izilda e Roberto, fundamentais, fontes de luz para a minha vida, sempre me apoiando e incentivando, que formaram a família à qual fazer parte me faz sempre feliz, que me formaram como pessoa e que me inspiram em todos os sentidos.

Somos, singularmente, portadores de grande energia. É o espírito em nós. O espírito (...) é tão ancestral quanto o cosmos. Espírito é aquela capacidade que os seres, mesmo os mais originários, como os hádrions, os topquarks, os prótons e os átomos têm de se relacionarem, trocarem informações e de criarem redes de inter-retro-conexões, responsáveis pela unidade complexa do todo. É próprio do espírito criar unidades cada vez mais altas e elegantes.

(Leonardo Boff)

RESUMO

As formulações baseadas na mecânica do contínuo, embora precisas até certo ponto, por vezes não podem ser utilizadas, ou não são conceitualmente corretas para o entendimento de fenômenos em escalas reduzidas. Estas limitações podem aparecer no estudo dos fenômenos tribológicos em escala nanométrica, que passam a necessitar de novos métodos experimentais, teóricos e computacionais que permitam explorar estes fenômenos com a resolução necessária. Simulações atomísticas são capazes de descrever fenômenos em pequena escala, porém, o número necessário de átomos modelados - e, portanto, o custo computacional - geralmente torna-se bastante elevado. Por outro lado, os métodos de simulação associados à mecânica do contínuo são mais interessantes em relação ao custo computacional, mas não são precisos na escala atômica. A combinação entre essas duas abordagens pode, então, permitir uma compreensão mais realista dos fenômenos da tribologia. Neste trabalho, discutem-se os conceitos básicos e modelos de atrito em escala atômica e apresentam-se estudos, por meio de simulação numérica, para a análise e compreensão dos mecanismos de atrito e desgaste no contato entre materiais. O problema é abordado em diferentes escalas, e propõe-se uma abordagem conjunta entre a Mecânica do Contínuo e a Dinâmica Molecular. Para tanto, foram executadas simulações numéricas, com complexidade crescente, do contato entre superfícies, partindo-se de um primeiro modelo que simula o efeito de defeitos cristalinos no fenômeno de escorregamento puro, considerando a Dinâmica Molecular. Posteriormente, inseriu-se, nos modelos da mecânica do contínuo, considerações sobre o fenômeno de adesão. A validação dos resultados é feita pela comparação entre as duas abordagens e com a literatura.

Palavras-chave: Atrito. Método Atomístico. Mecânica do Contínuo. Dinâmica Molecular.

ABSTRACT

Formulations based on continuum mechanics are generally accurate in a macroscale level, but sometimes cannot be used, or it is not conceptually correct to use for the understanding of small scale phenomena. These limitations may be observed in the study of tribological phenomena at the nanoscale, which may consequently require new experimental, theoretical and computational methods in order to analyze these phenomena with the required resolution. Atomistic simulations may describe phenomena at small scale, but the required number of atoms to be modeled, i.e. the computational cost, usually becomes very high. Moreover, simulation methods associated with continuum mechanics (such as the Finite Element Method - FEM) are more interesting in relation to computational cost, but they are not accurate for atomic scale studies. The combination of these two approaches can then enable a more realistic understanding of tribological phenomena. This work discusses the basic concepts of friction and models for friction at atomic scale. This work also presents studies, by means of numerical simulation, for the analysis of friction and wear mechanisms in the contact of materials. The problem is approached considering different scales, and basing the analysis both on Continuum Mechanics and Molecular Dynamics (MD). For both methods, numerical simulations with increasing complexity were conducted to reproduce the contact between surfaces, starting from an initial model that simulates the effect of crystalline defects during the MD analysis of pure slip. In a second stage, adhesion phenomenon were implemented through continuum mechanics models. The validation of the models and the coupling between the two approaches were conducted by comparison with literature.

Keywords: Friction. atomistic method. Continuum Mechanics. Molecular Dynamics

LISTA DE ILUSTRAÇÕES

Figura 1 -	(a) Duas esferas pressionadas uma contra outra. (b) Uma esfera pressionada contra um plano. (c) Perfil da força normal de Contato. Adaptada de (WANG; ZHU, 2013)	37
Figura 2 -	Representação adimensional do potencial Leonard-Jones aplicado ao modelo de Bradley.	39
Figura 3 -	Representação conceitual do modelo JKR e Distribuição de tensões (perpendiculares às superfícies) no contato. Adaptado de (JOHNSON; KENDALL; ROBERTS, 1971)	40
Figura 4 -	Representação conceitual do modelo DMT e Distribuição de tensões no contato. Adaptado de (DERJAGUIN; MULLER; TOPOROV, 1975)	42
Figura 5 -	Mapa de modelos de adesão. Adaptado de (JOHNSON; GREENWOOD, 1997)	44
Figura 6 -	(a) Duas superfícies rugosas em contato (b) Contato de uma superfície rugosa equivalente com um plano liso (apenas as asperezas mais altas entram em contato). Adaptado de (GREENWOOD; WILLIAMSON, 1966a).	46
Figura 7 -	O modelo Prandtl-Tomlinson: Uma massa pontual movimentada ao longo de um potencial periódico.	50
Figura 8 -	(a) Caminho de ida. (b) Caminho de volta. (c) Abstração mecânica do modelo de Prandtl. Adaptado de (PRANDTL, 1928)	52
Figura 9 -	Representação esquemática do Modelo de Frenkel-Kontorova.	56
Figura 10 -	Representação esquemática do Modelo de Frenkel-Kontorova-Tomlinson. Adaptado de (WU, 2011).	58

Figura 11 -	Comportamento de materiais ao longo de diferentes escalas espaciais.	59
Figura 12 -	Representação Gráfica do Potencial de Lennard-Jones. .	67
Figura 13 -	Formação das condições de contorno periódicas para simulação em MD em 1, 2 e 3 dimensões. Adaptado de (TOLÉDANO, 2007).	71
Figura 14 -	Dimensões da geometria do sistema.	88
Figura 15 -	Configuração dos grupos de átomos no sistema modelado.	92
Figura 16 -	Variação da temperatura durante a simulação para a condição de 10% de deformação inicial.	93
Figura 17 -	Parâmetro de centrossimetria (CS) da rede cristalina na condição de deformação inicial de 10%.	94
Figura 18 -	Medida da desordem do reticulado cristalino nas condições de 0%, 5%, 10%, 15%, 20%, 25% e 30% de deformação inicial.	95
Figura 19 -	Parâmetro de centrossimetria (CS), para cada uma das 7 condições analisadas após finalizado o deslizamento do indentador.	97
Figura 20 -	Variação da força lateral (atrito) para as condições de 0% e 30% de deformação inicial.	98
Figura 21 -	Variação da força de reação vertical, oposta à penetração do penetrador rígido, durante o movimento vertical e de deslizamento.	99
Figura 22 -	Variação da força de atrito, devido à quantidade de defeitos cristalinos no material.	100
Figura 23 -	Variação da força de penetração máxima devido à quantidade de defeitos cristalinos do material.	100
Figura 24 -	Análise de coordenação mostrando diferentes estruturas cristalinas.	102

Figura 25 -	Percentual de diferentes estruturas cristalinas no sistema.	102
Figura 26 -	Comportamento da força entre partículas (superfícies) em função da sua separação.	105
Figura 27 -	Tamanho do sistema e detalhes da malha de elementos finitos.	107
Figura 28 -	Acoplamento entre software MEF e sub-rotina FORTRAN.	110
Figura 29 -	Os quatro padrões observados para o desgaste adesivo e transferência de material.	112
Figura 30 -	Histerese no contato adesivo. (a) Sem transferência de material. (b) Com transferência de material.	114
Figura 31 -	Desgaste adesivo em função do parâmetro α_{adesao} . . .	115
Figura 32 -	Comparação entre as Análise de MD e MEF para a adesão entre superfícies de alumínio. (A) Toque superficial; (B) Penetração de 1 camada atômica; (C) Penetração de 2 camadas atômicas.	119
Figura 33 -	Comparação entre as Análise de MD e MEF para a adesão entre superfícies de cobre. (A) Toque superficial; (B) Penetração de 1 camada atômica; (C) Penetração de 2 camadas atômicas.	120
Figura 34 -	Comparação entre as Análise de MD (sem óxido) e MEF (com óxido) para a adesão entre superfícies de Ferro. (A) Toque superficial; (B) Penetração de 1 camada atômica; (C) Penetração de 2 camadas atômicas. . .	121
Figura 35 -	Aplicabilidade do parâmetro α_{adesao} para estimativa do desgaste adesivo em alumínio.	121

LISTA DE TABELAS

Tabela 1 -	Características das ligações intermoleculares. Adaptado de (ISRAELACHVILI, 2011).	78
Tabela 2 -	Dimensões do bloco, antes e após a fase de deformação (em células unitárias - a_0).	91
Tabela 3 -	Médias e desvios-padrão das forças de atrito e de penetração.	99
Tabela 4 -	Descrição dos casos analisados nas simulações FEM .	108
Tabela 5 -	Propriedades Mecânicas utilizadas nas simulações MEF	109
Tabela 6 -	Valores da constante de Hamaker para alguns pares de materiais	109
Tabela 7 -	Quantidade de material transferido entre superfícies. .	112
Tabela 8 -	Diferentes padrões observados em resultados de desgaste adesivo.	113
Tabela 9 -	Propriedades do alumínio utilizadas nas simulações por MEF. Fonte: (COMMITTEE, 1990)	118
Tabela 10 -	Expressões para cálculo da força adesiva entre superfície para diferentes geometrias. Adaptado de (ISRAELACHVILI, 2011)	153

LISTA DE ABREVIATURAS E SIGLAS

CFC	Cúbica de Face Centrada
EAM	<i>Embedded Atom Method</i>
FEM	<i>Finite Element Method</i>
HCP	Hexagonal Compacta
LAMMPS	<i>Large-scale Atomic Molecular Massively Parallel Simulator</i>
MD	<i>Molecular Dynamics</i>
MEF	Método dos Elementos Finitos

LISTA DE SÍMBOLOS

a	Raio de contato
a_0	Parâmetro de rede
A_a	Área aparente de contato
A_r	Área real de contato
A_H	Constante de Hamaker
A_{ij}	Constante de Hamaker para o par i e j
γ	Energia de Superfície
δ	Penetração ou Interferência entre Superfícies
ν	Coeficiente de Poisson
ρ_i	Densidade de partículas do tipo i
E	Módulo Elástico
E_e	Módulo Elástico equivalente
F_{ad}	Força de Adesão
F_{el}	Força de Eletrostática
F_{vdW}	Força de van der Waals
F_{cap}	Força de capilaridade
F_H	Força de ligações de hidrogênio
F_{quim}	Força de ligações químicas
G	Módulo de cisalhamento
m_i	Massa da partícula i
P	Força Normal
r	Distância entre duas partículas
R_e	Raio Equivalente
R_i	Raio da partícula i
U	Energia Potencial
z_0	Espaçamento de equilíbrio entre planos atômicos

SUMÁRIO

1 INTRODUÇÃO	19
1.1 A TRIBOLOGIA COMO UMA CIÊNCIA MULTIESCALA	19
1.2 BREVE PANORAMA HISTÓRICO-ECONÔMICO DA TRIBOLOGIA	22
1.3 CONSIDERAÇÕES SOBRE O ATRITO EM ESCALA ATÔMICA	24
1.4 DO CONTÍNUO AO DISCRETO	27
2 OBJETIVOS	31
3 REVISÃO BIBLIOGRÁFICA	33
3.1 MODELOS DE CONTATO	33
3.1.1 Modelos de aspereza unitária	35
3.1.1.1 <i>Teoria de Hertz para o Contato elástico entre sólidos</i>	36
3.1.1.2 <i>O Modelo de Bradley</i>	38
3.1.1.3 <i>O Modelo de Johnson-Kendall-Roberts (JKR)</i>	39
3.1.1.4 <i>O Modelo de Derjaguin-Muller-Toporov (DMT)</i>	41
3.1.1.5 <i>O Modelo de Maugis-Dugdale (MD)</i>	43
3.1.2 Modelos de asperezas múltiplas	44
3.1.2.1 <i>O Modelo de Greenwood and Williamson</i>	45
3.1.2.2 <i>Modelos de asperezas múltiplas com adesão</i>	48
3.1.3 Modelos atomísticos	48
3.1.3.1 <i>O modelo de Prandtl-Tomlinson</i>	49
3.1.3.2 <i>O Modelo de Frenkel-Kontorova</i>	55
3.1.3.3 <i>O Modelo de Frenkel-Kontorova-Tomlinson (FKT)</i>	58
3.2 MODELAGEM EM DIFERENTES ESCALAS DE COMPRIMENTO	59
3.3 DINÂMICA MOLECULAR	61
3.3.1 Considerações sobre o Método	63
3.3.2 Potenciais Interatômicos	65
3.3.2.1 <i>Potencial de Lennard-Jones</i>	66

3.3.2.2	<i>Potencial de Morse</i>	68
3.3.2.3	<i>Potencial de Buckingham</i>	68
3.3.2.4	<i>Potencial EAM</i>	69
3.3.3	Condições de Fronteira	71
3.4	ELEMENTOS FINITOS	72
3.4.1	Modelagem de Adesão por Elementos Finitos	72
3.5	ADESÃO E FORÇAS DE SUPERFÍCIE	76
3.5.1	Origens da Adesão e a constante de Hamaker	76
3.6	COMPORTAMENTO TRIBO-MECÂNICO DOS MATERIAIS E DEFEITOS CRISTALINOS	83
4	METODOLOGIA E PROCEDIMENTO DE CÁLCULO	85
5	ANÁLISES POR DINÂMICA MOLECULAR	87
5.1	DESCRIÇÃO DO MODELO	87
5.2	RESULTADOS	93
6	ANÁLISES POR ELEMENTOS FINITOS	104
6.1	DESCRIÇÃO DO MODELO	106
6.2	RESULTADOS	111
7	ANÁLISES COMPARATIVAS POR MEF E POR MD	117
7.1	DESCRIÇÃO DO MODELO	117
7.2	RESULTADOS	119
8	CONCLUSÕES	122
9	SUGESTÕES PARA TRABALHOS FUTUROS	124
	REFERÊNCIAS	125
	ANEXO A – CÓDIGOS-FONTES: ANÁLISES MD	138
	ANEXO B – CÓDIGOS-FONTES: ANÁLISES MEF	143

APÊNDICE A – DEDUÇÃO DA EQUAÇÃO PARA CÁLCULO DAS FORÇAS DE ADESÃO ENTRE DOIS PLANOS EM CON- TATO	149
APÊNDICE B – EXPRESSÕES PARA CÁLCULO DAS FORÇAS DE VAN DER WAALS ENTRE PARTÍCULAS E SUPERFÍCIES	152

1 INTRODUÇÃO

"If in some cataclysm all scientific knowledge were to be destroyed and only one sentence passed on to the next generation of creatures, what statement would contain the most information in the fewest words? I believe it is the atomic hypothesis that all things are made of atoms - little particles that move around in perpetual motion, attracting each other when they are a little distance apart, but repelling upon being squeezed into one another. In that one sentence, you will see there is an enormous amount of information about the world, if just a little imagination and thinking are applied."

(Richard Feynman)

Neste capítulo de introdução, são apresentados alguns conceitos básicos relacionados à tribologia e sua relação com fenômenos multiescalares, bem como é descrita sua importância com foco na aplicação em processos industriais e da vida cotidiana, além das suas origens e evolução histórica, culminando com o desenvolvimento da nanotribologia e do desenvolvimento de modelos mecânicos, empíricos e estatísticos, analíticos e computacionais, aplicados a sistemas em diferentes escalas espaciais. Uma descrição detalhada de alguns desses conceitos básicos e formas de modelagem matemática são apresentados ao longo do capítulo 3.

1.1 A TRIBOLOGIA COMO UMA CIÊNCIA MULTIESCALA

Mesmo antes do surgimento da primeira teoria atômica de que se tem conhecimento, no século IV a.C., por Demócrito, que conjecturou sobre a existência do átomo, fenômenos físicos em escalas de comprimento diminutas têm sido imaginados e investigados. O mesmo se dava também para fenômenos físicos que ocorrem em escalas de comprimento gigantescas, quando Aristarco

de Samos, no século III a.C., propunha, pela primeira vez, a ideia de um sistema solar heliocêntrico.

Hoje, ainda não é possível estabelecer limites confiáveis sobre nenhum dos extremos do cosmos e, em muitos e diferentes campos da ciência, tentam-se desenvolver métodos confiáveis para correlacionar fenômenos físicos que ocorrem ao longo de várias escalas de comprimento e tempo. Mesmo em nossa vida diária, estamos cercados por uma multiplicidade de materiais e processos relacionados a fenômenos cujo papel essencial, muitas vezes, se estende por muitas e variadas escalas. Descrever, compreender e prever quantitativamente estes fenômenos multiescala e multifísicos é uma tarefa científica fundamental para garantir a evolução do entendimento de inúmeros aspectos de muitos processos e temas, sejam naturais ou criados pela técnica humana, e que estão presentes na sociedade moderna.

A tribologia, cujo conceito engloba a ciência e a tecnologia interdisciplinares da interação entre superfícies em movimento relativo e os temas e práticas associados (BHUSHAN, 2013a; HUTCHINGS, 1992), o que inclui partes da física, química, mecânica dos sólidos, mecânica dos fluidos, transferência de calor, ciência dos materiais, reologia de lubrificantes, confiabilidade e desempenho (BHUSHAN, 2013b), encaixa-se como um desses temas.

As interações superficiais determinam e controlam o funcionamento de praticamente todos os dispositivos mecânicos construídos pelo homem (com exceção, talvez, de dispositivos baseados no eletromagnetismo e na óptica), o que reflete a importância da tribologia em termos de desenvolvimento tecnológico (PERSSON, 1999).

O atrito desempenha papel importante no desempenho e no funcionamento de máquinas e movimentação de sistemas, ou em quaisquer situações em que duas superfícies entram em contato e se movimentam uma em relação à outra, como, por exemplo, para a conformação de uma peça metálica, na rolagem de um pneu sobre uma rodovia ou na de uma roda de trem sobre o trilho de

ferrovia, no movimento da patela de um joelho humano contra sua cartilagem ou no movimento de um anel de um pistão dentro de um cilindro de motor de combustão interna, seja por perdas de eficiência e energia, pelo surgimento de desgaste de peças ou pela formação de resíduos nocivos ao ambiente.

Entretanto, o atrito e os fenômenos correlatos, ainda hoje, não estão completamente compreendidos, de modo que a abordagem destes temas sob uma óptica multiescala pode permitir uma melhor compreensão do assunto e das interdependências com outros processos, uma vez que são as forças entre átomos e moléculas, que atuam em uma escala nanométrica e subnanométrica, as responsáveis pelas propriedades e comportamento dos materiais na escala macroscópica. Em outras palavras, o entendimento completo do universo macroscópico reside na compreensão dos fenômenos atomísticos. Nesse sentido, vários fenômenos na ciência dos materiais, na química ou no contato entre superfícies envolvem processos que necessitam de descrições em várias escalas espaciais e temporais, do átomo ao contínuo, ou seja, o acoplamento de diferentes níveis ou escalas de descrição é necessário, uma vez que cada abordagem individual é insuficiente por si só.

Um dos grandes esforços para permitir essa compreensão tem sido a busca por uma teoria atômica para o atrito, iniciada pelos trabalhos de Prandtl e Tomlinson (PRANDTL, 1928; TOMLINSON, 1929) e que resultaram em significativos avanços (GNECCO; MEYER, 2015) para o entendimento do tema, em particular para a interpretação de dados de microscopia de força atômica (MUSER, 2011). Conjuntamente aos estudos e teorias que tratam sobre o atrito atômico, modelos numéricos que abordam os fenômenos tribológicos tanto por métodos matemáticos que utilizam a mecânica do contínuo quanto por métodos com enfoque atomístico têm sido desenvolvidos, principalmente nas últimas duas décadas (KUDISH; COVITCH, 2010).

Este trabalho se insere nesse contexto, com o objetivo de abordar, por métodos numéricos atomísticos e contínuos, a dinâmica do contato entre superfícies,

avaliando a influência da presença de defeitos na dinâmica das interfaces de materiais cristalinos e a adesão entre superfícies. Empregou-se a dinâmica molecular para simular os efeitos atomísticos e o método dos elementos finitos para representar o comportamento segundo modelos da mecânica do contínuo. Simulações numéricas, quer seja na microescala utilizando as teorias do contínuo, quer seja na nanoescala usando teorias atomísticas, são essenciais em virtude das dificuldades de realização de experimentos em condições extremas, além de poder atuar como uma ferramenta de validação e fornecer variáveis experimentais que experimentos não são capazes de medir.

1.2 BREVE PANORAMA HISTÓRICO-ECONÔMICO DA TRIBOLOGIA

O atrito tem apresentado, ao longo da história humana, um caráter de dualidade, oferecendo benefícios, mas também gerando prejuízos. Os prejuízos resultantes do desconhecimento sobre aspectos relativos à tribologia nos Estados Unidos era, nos anos 1960, equivalente a 6 por cento do PIB daquele país, cerca de 200 bilhões de dólares por ano, estimativa que ainda era válida para a década de 1990 (PERSSON, 1993). Outras estimativas apontam que a adoção de melhorias na atenção ao atrito e desgaste poderiam resultar em economias de até 1,6 por cento do PIB de países em desenvolvimento (KRIM, 1996), e calcula-se que cerca de um terço dos recursos energéticos do mundo, hoje, seja consumido por processos relacionados ao atrito (BHUSHAN, 2001), o que não se restringe unicamente a um problema econômico e seus efeitos diretos (desgaste de peças, consumo de lubrificante, etc.), uma vez que a elevada demanda por lubrificantes tem criado um problema ecológico em virtude do descarte de seus resíduos que são, geralmente, degradantes do meio ambiente (WILFRIED, 1998).

Apenas no que se refere ao consumo de energia de combustíveis por automóveis, Holmberg, Andersson e Erdemir (2012) estimaram as perdas diretas

por atrito, excluindo o atrito de frenagem, em mais de $1/4$ da energia do combustível queimado, de forma que apenas 21,5% da energia do combustível é usada para mover o carro. Assim, 208 bilhões de litros de combustível (gasolina e diesel) foram utilizados em 2009 para superar o atrito em automóveis de passageiros, o que, por si só, indica os efeitos que reduções nas perdas por atrito podem gerar, seja na economia de combustível, seja reduzindo a emissão de gases de escape.

Os estudos realizados para atingir essas reduções tomam por base, muitas vezes, as primeiras descobertas dos grandes pioneiros da tribologia, Leonardo da Vinci, Guillaume Amontons e Charles Augustin Coulomb, responsáveis por iniciar um estudo sistemático sobre o atrito, em nível macroscópico (SINATORA; TANAKA, 2007), que culminaram nas três leis fenomenológicas do atrito, que são de grande importância tecnológica (JINESH, 2006).

O primeiro estudo sistemático sobre o atrito foi feito por Leonardo da Vinci (1452-1519), que mediu a força necessária para deslizar uma massa sobre uma superfície inclinada, variando o ângulo de inclinação e determinando a força para o instante quando o corpo começa a deslizar. Estes estudos permitiram observar que:

- **1. a força de atrito dobrava quando se dobrava o peso aplicado, ou seja, a força de atrito é proporcional à carga aplicada.**
- **2. a força de atrito era independente da largura e do tamanho da superfície. Logo, a força de atrito era independente da área aparente de contato, entre as superfícies que deslizam entre si.**

As contribuições de Leonardo da Vinci para o estudo do atrito foram perdidas e redescobertas muito tempo depois, de modo que, por isto, na literatura tradicional, as “leis” do atrito são atribuídas a Amontons e a Coulomb. Dois séculos depois de da Vinci, o francês Guillaume Amontons (1663-1705) confirmou as

observações feitas por Leonardo e conseguiu diferenciar o atrito estático do atrito cinético.

Assim, a partir das datas de publicação, pode-se atribuir a seguinte cronologia para as contribuições fundamentais sobre o fenômeno de atrito (SINATORA; TANAKA, 2007):

- **Da Vinci (1495):** A força de atrito é proporcional à força normal (1ª lei). O coeficiente de atrito independe da área aparente de contato (2ª lei). O coeficiente de atrito depende dos materiais.
- **Amontons (1699):** Confirmou as duas descobertas de da Vinci de forma independente.
- **Coulomb (1785):** O coeficiente de atrito é independente da velocidade de deslizamento (3ª lei).

Complementando as observações anteriores, Greenwood e Williamson (1966b) mostraram que a área real de contato aumenta quando se aumenta a força aplicada, descoberta que justifica as duas primeiras descobertas de da Vinci. Entretanto, estas “leis” ou observações fundamentais do atrito, baseadas em experimentos macroscópicos, não são completamente entendidas em termos de processos micro e nanoscópicos, de forma que foi apenas nas últimas décadas que se conseguiu compreender um pouco dos processos físicos que originam o atrito, em virtude dos avanços da nanotribologia.

1.3 CONSIDERAÇÕES SOBRE O ATRITO EM ESCALA ATÔMICA

Pode ser intuitivo idealizar os fenômenos envolvidos nos processos que envolvem o contato entre superfícies utilizando-se a abstração em se considerar superfícies lisas e geometricamente perfeitas. Também é intuitivo relacionar o acabamento superficial macroscópico ou a dureza das superfícies em contato

aos efeitos observados após o escorregamento entre dois corpos, quando, por exemplo, pode-se observar uma menor intensidade de desgaste no contato entre superfícies polidas do que entre superfícies irregulares e também em uma peça de maior dureza superficial do que em outra de menor dureza. Entretanto, analisando superfícies em contato, do ponto de vista microscópico, tais abstrações podem levar a conclusões incorretas, uma vez que nenhuma superfície está livre de defeitos ou irregularidades microscópicas.

Os mecanismos e as interações entre os sólidos em contato, durante o movimento relativo, têm um alcance desde a escala atômica até a microescala. É necessário um bom entendimento dos fenômenos de atrito, adesão, desgaste, indentação/deformação e processos de lubrificação para o desenvolvimento de teorias e análises confiáveis. Em muitas interfaces sólido-sólido de relevância tecnológica, o contato ocorre nas asperezas. Como consequência, a importância das pesquisas sobre contato de uma única aspereza, para o estudo de propriedades micro/nanométricas fundamentais e micro/nanotribológicas das superfícies e interfaces, tem se destacado e sido reconhecida nos últimos tempos. Indo além e analisando os fenômenos envolvidos em escala nanométrica, é necessário compreender a dinâmica das interações entre átomos de duas superfícies em contato. Nessa escala atômica, discreta e, portanto, não subjugada às “leis” do universo contínuo e macroscópico, podem-se compreender as origens de inúmeros fenômenos físicos e, inclusive, explicar os comportamentos observados em diversos sistemas mecânicos.

Em outras palavras, o entendimento completo do universo macroscópico reside na compreensão dos fenômenos atomísticos. Nesse sentido, vários fenômenos na ciência dos materiais, na química ou no contato entre superfícies envolvem processos que necessitam de descrições em várias escalas espaciais, do átomo ao contínuo.

Por isso, formulações baseadas na mecânica do contínuo, ainda que precisas até certo ponto, não podem ser utilizadas em determinadas escalas, gerando

difficultades em extrapolar para o mundo microscópico conceitos e modelos desenvolvidos em escala macroscópica. Consequentemente, tentativas de compreensão de fenômenos em escalas microscópicas são prejudicadas.

No que se refere à simulação numérica para o estudo da tribologia, um cenário semelhante é verificado. Sabe-se que o comportamento dos materiais quanto aos fenômenos interfaciais, tais como adesão e atrito, e também suas propriedades mecânicas, são muito diferentes daqueles observados em escala macroscópica. Análises numéricas em escala macroscópica podem não fornecer a totalidade dos subsídios necessários para a investigação de fenômenos tribológicos, uma vez que, em geral, as descrições do contínuo assumem um comportamento para a matéria que é resultado de várias interações, o que permite considerar carregamentos estáticos e/ou permitem apenas o estudo de materiais homogêneos e isotrópicos. O estudo dos fenômenos tribológicos em escala nanométrica necessita de novos métodos experimentais, teóricos e computacionais que permitam explorar estes fenômenos com a resolução necessária.

Uma das ferramentas utilizadas neste tipo de estudo é a dinâmica molecular (Molecular Dynamics - MD), que permitiu um progresso significativo para a compreensão e avanço do conhecimento nesta área.

Enquanto a tribologia aplicada aos problemas macroscópicos lida com ensaios realizados em componentes com massa relativamente alta, sob condições de carga elevada, de forma que o desgaste destes componentes é inevitável e as propriedades macroscópicas ditam o desempenho tribológico, a nanotribologia considera componentes que são extremamente leves ou mesmo frações de corpos e, como resultado, o atrito e o desgaste ocorre na nanoescala, a baixa carga e são altamente dependentes das interações superficiais.

Entretanto, a diferença essencial entre as duas abordagens é, principalmente, a consideração de forças atômicas na determinação do comportamento final do sistema. A consideração dessas forças atômicas nos estudos em nanotribologia

tem revelado comportamentos que podem ser bastante diferentes daqueles observados nos níveis macroscópicos. Por exemplo, embora seja bem conhecido que o atrito macroscópico é, em geral, linearmente proporcional à carga normal e independente da área aparente de contato (HUTCHINGS, 1992), nanotribologistas vêm regularmente descobrindo que o atrito em escala atômica pode diferir significativamente dos comportamentos observados em escala macroscópica (KRIM, 1996).

A nanotribologia tem sido intensamente estudada nos anos recentes, devido ao desenvolvimento da nanotecnologia, especialmente em sistemas micro ou nanoeletromecânicos (MEMS/NEMS). Para estes sistemas, devido ao seu pequeno tamanho e alta relação superfície/volume, o atrito e as forças de adesão podem apresentar fenômenos incomuns, que desempenham um papel importante na determinação de suas propriedades mecânicas (BHUSHAN, 2007). Entretanto, destacam-se, também, os estudos e abordagens da nanotribologia aplicados à investigação das origens do atrito e para o desenvolvimento de um entendimento fundamental dos fenômenos interfaciais em pequena escala.

O atrito e o desgaste de micro/nanocomponentes submetidos a um pequeno carregamento são altamente dependentes das interações superficiais, que ocorrem a apenas algumas camadas atômicas da superfície. Estas estruturas são, geralmente, lubrificadas (ou contaminadas) por finas películas moleculares de filme lubrificante. Os estudos nanotribológicos são também de grande importância para o entendimento fundamental dos fenômenos interfaciais em macroestruturas, fornecendo uma ponte entre a ciência e a engenharia.

1.4 DO CONTÍNUO AO DISCRETO

Tradicionalmente, duas abordagens diferentes têm sido utilizadas para o modelamento de sistemas tribológicos:

- **Abordagens pela aplicação da teoria do contínuo:**

Ao substituir um meio molecular real por um meio contínuo, hipotético, pode-se usar as teorias do contínuo sob a forma de equações diferenciais parciais que descrevem as leis de conservação e relações constitutivas, facilitando o tratamento matemático.

A palavra *contínuo* vem da palavra latina *con-tenere*, que significa ter junto, manter unido, ou seja, contínuo é o que está imediatamente unido a outro ente (MAGNE, 1996). Da mesma origem etimológica aparecem as palavras conter, conteúdo, continente, contente (o que cabe em si, e não aspira alargar-se). A teoria do contínuo tem sido bem sucedida no estudo e representação de sistemas de diversas áreas, como a mecânica dos sólidos e fluídos, geralmente envolvendo poucos parâmetros de materiais; entretanto, torna-se imprecisa na solução de problemas em que detalhes dos processos atomísticos afetam o comportamento macroscópico do sistema/material, ou quando a dimensão do sistema é pequena a ponto de tornar questionáveis as aproximações feitas pela mecânica do contínuo. Isso é encontrado frequentemente em estudos sobre propriedades de materiais e defeitos de dispositivos e sistemas em escala micro ou nanométricas.

- **Abordagens atomísticas:**

Utilizada para se obter a descrição macroscópica de um sistema a partir de uma descrição microscópica incompleta.

Discreto é uma palavra que se origina do latim *discretus*, particípio passado do verbo *discernere* (discernir), que significa discriminar, separar, distinguir, ver claro, é aquilo que exprime objetos distintos, que se revela por sinais separados, que se põe à parte (CUNHA, 1997). Na etimologia, *discernere* vem de *cernere*, que significa passar pelo crivo, decidir (MAGNE, 1996). Daqui, também derivam palavras como segredo, secreto, certo, discrição. Esta abordagem pode, a princípio, modelar precisamente os processos físicos fundamentais, mas acarreta um custo computacional, por vezes, proibitivo.

Já em uma analogia com as ações básicas da matemática, os termos discreto e contínuo podem ser relacionados, respectivamente, às ações de contar e medir. Assim, em geral, tudo o que se refere à aritmética dos números inteiros, de um ponto de vista algorítmico é a Matemática Discreta, enquanto, a corrente que se refere ao contínuo lida com a ideia de função, com a geometria, com derivadas e integrais (BROLEZZI, 1996).

Em relação ao desenrolar histórico deste dualismo contínuo/atomístico, as grandes vertentes da Física no final do século XIX eram a mecânica newtoniana, aplicada a pontos materiais e meios contínuos, o eletromagnetismo de Maxwell, que havia englobado a óptica, e a termodinâmica, que se referia ao calor e a variáveis macroscópicas, como a temperatura ou a pressão de um gás (SALINAS, 2005).

As leis da termodinâmica, uma ciência fenomenológica e bastante generalista, conseguiam reunir e sistematizar, em leis empíricas, o comportamento térmico, a ponto de os energeticistas (opositores da teoria atômica) considerarem a termodinâmica macroscópica e fenomenológica, que prescindia de qualquer modelo microscópico de constituição da matéria, como o modelo correto da ciência. Para esses energeticistas, que preferiam uma imagem continuísta da matéria e dos fenômenos físicos, a teoria cinético-molecular do calor, baseada em entidades invisíveis, não deveria ter espaço na ciência (MAURY, 1992).

A disseminação do pensamento atomístico culminou, no início do século XX, com certo descrédito e suspeita em relação tanto ao programa mecânico-estatístico de Boltzmann quanto aos resultados da teoria cinética dos gases. Estas abordagens foram consideradas, por vezes, como simples artifícios matemáticos, distantes da realidade dos sistemas físicos, apesar das propostas sobre a existência do átomo químico e de Einstein ter adotado, desde cedo, uma visão realista, objetiva, sobre a existência de átomos e moléculas (SALINAS, 2005).

Para que a realidade de átomos e moléculas fosse aceita, foram decisivos o

trabalho sobre as leis que governam o movimento browniano e a sua confirmação experimental (PERRIN, 1913). Assim, a realidade de átomos e moléculas foi imposta com evidências pela aplicação do método científico, por resultados de concordância entre valores obtidos por pesquisadores diferentes, com estimativas independentes, baseadas em técnicas e ideias distintas, e, aos poucos, as resistências ao atomismo foram vencidas (PAIS, 1982).

Sobre esse tipo de abordagem em relação aos fenômenos de contato, segundo Myshkin (2000), nos primeiros estudos de desgaste e atrito, o contato entre sólidos era considerado como sendo mecânico, do ponto de vista do comportamento da tensão-deformação no meio contínuo, ou, do ponto de vista físico, como adesão molecular ou atômica causando o cisalhamento na interface. Posteriormente, outras considerações do ponto de vista físico foram introduzidas. Assim, por exemplo, as propriedades do lubrificante foram consideradas do ponto de vista de sua interação molecular com a superfície sólida e o conceito de camada limítrofe característico de lubrificantes foi desenvolvido por Hardy (1919).

A recente expansão do uso de técnicas e equipamentos como os microscópios de força atômica e de força de superfície e técnicas computacionais para a simulação das interações e propriedades interfaciais permitiu o estudo sistemático de problemas interfaciais, bem como formas de modificação e manipulação de estruturas em escala nanométrica, utilizando tanto a abordagem atomística quanto a contínua, as quais, na maioria das vezes, complementam-se.

2 OBJETIVOS

Grande parte das abordagens científicas enfrenta problemas no que se refere à modelagem numérica. Modelos matemáticos e numéricos são, geralmente, baseados em observações e em algumas hipóteses ou suposições, numa tentativa de compreender qualitativa e quantitativamente alguns aspectos de uma realidade infinitamente variada.

A tese de doutorado aqui apresentada tem por objetivo principal promover uma abordagem conjunta entre a Mecânica do Contínuo e a Dinâmica Molecular para o estudo dos fenômenos de contato e atrito entre superfícies metálicas, analisando o desgaste e seu efeito na rugosidade das superfícies. Dessa forma, utilizando modelos e simulações de dinâmica molecular e o Método dos Elementos Finitos, busca-se reproduzir e compreender os fenômenos tribológicos presentes em escala nanométrica e sua relação com os fenômenos macro e microscópicos.

No que se refere à modelagem matemática, há trabalhos que consideram a mecânica do contínuo por meio de simulações pelo Método dos Elementos Finitos, para estudar o contato e o atrito não lubrificado entre superfícies. No entanto, ainda existem muitos pontos a esclarecer, desde em relação à física que controla as forças que atuam em toda a interface de contato até mesmo a quase ausência de trabalhos que consideram a falha superficial devida ao fenômeno de adesão entre superfícies e o desgaste advindo desse processo. Assim, o cumprimento dos objetivos aqui apresentados visa proporcionar conhecimento e entendimento sobre a física do atrito em condições sem lubrificação e gerar ferramentas numéricas capazes de estimar o desgaste adesivo entre superfícies.

Considerando o exposto acima, os objetivos do presente trabalho são apresentados em mais detalhes:

1. Métodos em Dinâmica Molecular

(a) Avaliar os efeitos da deformação plástica na geração de defeitos na estrutura

cristalina de materiais e nas forças de superfície.

- (b) Simular a indentação e o deslizamento de uma nanopartícula sobre um contra-corpo metálico considerando diferentes níveis de deformação plástica do material do contra-corpo, e comparar com a resposta relativa a um cristal perfeito.
- (c) Avaliar a relação entre a densidade de defeitos na rede cristalina de um material e seu desempenho tribológico.
- (d) Correlacionar os fenômenos de atrito observados na escala atômica ao comportamento dos materiais em escala macroscópica.

2. Métodos Contínuos

- (e) Implementar, via Método dos Elementos Finitos, um modelo que reproduza efeitos atomísticos, em particular a adesão e a falha adesiva dos materiais.
- (f) Desenvolver, pelo uso da modelagem numérica, ferramentas computacionais que permitam a solução de problemas envolvendo desgaste no contato entre asperezas e que possam ainda ser aplicadas a problemas em escala macroscópica.
- (g) Elucidar os fenômenos superficiais que surgem da interação entre as superfícies em contato.
- (h) Desenvolver uma ferramenta que gere respostas qualitativas e quantitativas para a avaliação do desgaste adesivo entre superfícies e que possa ser aplicada a sistemas de diferentes escalas de tamanho.

3 REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

Esta revisão da literatura foi dividida em três partes principais, sendo que, na primeira, são abordados os modelos e teorias do atrito com considerações atômicas, em particular os modelos de Prandtl-Tomlinson e o de Frenkel-Kontorova, bem como suas adaptações e suas possíveis relações com o comportamento macroscópico de sistemas. Em seguida, são apresentados os métodos de dinâmica molecular e também de elementos finitos, considerando-se suas aplicações para o estudo do atrito, suas relações com a Mecânica do Contínuo e as divergências e similaridades entre resultados em escala atômica e escala macroscópica. Por fim, destaca-se o comportamento dos materiais e suas superfícies em problemas de contato, com enfoque para os fenômenos de adesão e suas relações e origens com forças de superfícies.

3.1 MODELOS DE CONTATO

O atrito pode ser compreendido, de forma simplificada, como uma resistência ao movimento relativo de duas superfícies que estão em contato. Entretanto, uma definição em termos energéticos pode relacionar o atrito, um fenômeno dissipativo (não conservativo), a uma perda irreversível de energia mecânica, resultando disso o aparecimento de formas de energia não mecânica no interior do sistema, o que reduz a eficiência da conversão e consumo de recursos energéticos (KLAMECKI, 1980). Assim, à custa da energia mecânica, ocorre um aumento da energia interna do sistema, a qual se dá pelo aumento das velocidades individuais nos movimentos moleculares, produzindo elevações de temperatura. Quando se faz referência a velocidades nos movimentos moleculares e elevações de temperaturas, é a vibração dos átomos nas superfícies em contato que devem ser analisadas. Logo, um modelo para o atrito entre superfícies poderia partir de tais considerações e assim foi feito por Prandtl

(1928), Kontorova e Frenkel (1938) nas primeiras décadas do século XX.

Entretanto, antes de se introduzir conceitos atomísticos para se explicar os fenômenos de atrito, outros modelos foram propostos sem que pudessem explicar cada fenômeno em sua totalidade. Por exemplo, a segunda lei do atrito, enunciada no capítulo de introdução, pode parecer contraditória, uma vez que o atrito é provocado pela interação entre as superfícies, donde se esperaria que a área de contato deva ter grande importância para o fenômeno. A explicação é que o atrito é gerado nos contatos entre as microasperezas das duas superfícies, o que significa que o atrito é dependente da área real de contato, mas não da área aparente de contato entre as superfícies em movimento.

A primeira lei de Amontons (*o atrito é proporcional à carga normal aplicada*) é uma consequência do fato de que, para a maioria das superfícies, a área de contato real, ou seja, o número de microcontatos entre as duas superfícies aumenta de forma linear com o aumento da força normal aplicada. Ainda que essas observações permitam atribuir os efeitos elásticos e plásticos do atrito à microrugosidade das superfícies deslizantes, elas não revelam a totalidade das origens da dissipação de energia no contato entre materiais.

Os progressos posteriores na pesquisa sobre o atrito foram dependentes do desenvolvimento de equipamentos de instrumentação refinados, com sensibilidade para as distâncias e as forças presentes na escala atômica. Com a introdução destas técnicas, há poucas décadas, as pesquisas migraram o foco do contato em multiasperezas para as forças geradas individualmente em asperezas de tamanho micro e submicrométricos. Isto impulsionou a pesquisa sobre atrito, como, por exemplo, no atrito seco entre contatos planos e em aspectos relacionados aos conceitos básicos de lubrificação (JINESH, 2006)

Os estudos de TABOR e WINTERTON (1968) revelaram que o atrito é muito sensível aos detalhes em nível atômico das superfícies em contato e que, para dois objetos que deslizam um sobre o outro, superada a força de atrito estático, os danos às superfícies (desgaste) não estão apenas associados à ruptura e

geração de ligações moleculares entre as duas superfícies).

A explicação qualitativa para as duas primeiras "leis" de atrito de Amonton-Coulomb é dada pelas teorias de Bowden e Tabor (1954), que lançaram as bases para o estudo matemático rigoroso do atrito. Bowden e Tabor perceberam que as leis de Coulomb-Amontons haviam sido desenvolvidas com referência apenas a uma área de contato projetada, enquanto que o contato real ocorre entre superfícies rugosas. Os autores propuseram tratar o atrito como uma consequência da deformação plástica do intertravamento entre asperezas esféricas, o que resulta no fato de que a força de atrito é proporcional à área de contato 'real' total, definida pela deformação das asperezas individuais. Abordaram, também, o atrito em termos de processos puramente elásticos, com foco na deformação de uma aspereza única, de acordo com a teoria do contato de Hertz, e concluíram que, sob uma carga normal aplicada L , a força de atrito é aproximadamente $L^{2/3}$, contradizendo a primeira lei de Coulomb-Amontons (MÜSER, 2002)

Os próximos subcapítulos resumem a teoria que governa o contato mecânico entre duas superfícies, apresentando alguns dos modelos mais influentes para o estudo da tribologia, bem como considerações sobre a mecânica do contato. Serão abordados tanto modelos que consideram uma única aspereza como modelos multiasperezas, mas uma ênfase será dada aos primeiros, considerando-os com e sem adesão, de modo a formar uma compreensão ampla da micro/nanotribologia em termos mecânicos.

3.1.1 Modelos de aspereza unitária

Nesta seção, apresentam-se os modelos de asperezas individuais que preveem o comportamento mecânico dos dois objetos em contato. É importante observar que todos estes modelos assumem o estado estacionário, linear, elástico e comportamento isotrópico do material.

3.1.1.1 Teoria de Hertz para o Contato elástico entre sólidos

A mecânica do contato tornou-se um pré-requisito indispensável para a compreensão de fenômenos tribológicos na macroescala, de modo que é comum a aplicação do modelo de contato elástico de Hertz para determinar as forças a serem aplicadas na realização de ensaios tribológicos.

Em 1881, Heinrich Hertz desenvolveu um modelo (HERTZ, 1881) para compreender os efeitos da aplicação de forças sobre as propriedades ópticas de lentes empilhadas. Considerando um sistema composto por duas esferas pressionadas uma contra a outra com uma força, P , ou pela imposição de uma interferência, δ , entre as superfícies, como representado na Figura 1, Hertz assumiu que a marca do contato entre as duas esferas seria um círculo de raio a . Neste caso, o perfil da força normal dentro da área de contato circular poderia ser descrito por uma parábola. Assim, a relação entre a força normal P e a penetração δ pode ser expressa por:

$$P = \frac{4}{3}ER^{\frac{1}{2}}\delta^{\frac{3}{2}} \quad (1)$$

e a distribuição de pressão ao longo da área de contato por:

$$p(r) = p_0 \left(1 - \left(\frac{r}{a} \right)^2 \right)^{\frac{1}{2}} \quad (2)$$

sendo que, como representado na Figura 1(c), a máxima pressão de contato é dada por:

$$p_0 = \left(\frac{3P}{2\pi a^2} \right) \quad (3)$$

Usando essas expressões, o raio de contato, a , referente a uma penetração, δ , é dado por:

$$a = (R_e \delta)^{\frac{1}{2}} \quad (4)$$

Ou, de forma alternativa, se uma força P é aplicada:

$$a = \left(\frac{3PR_e}{4E_e} \right)^{\frac{1}{3}} \quad (5)$$

onde o raio efetivo, R_e , e o módulo reduzido, E_e , são definidos, respectivamente, como:

$$R_e = \left(\frac{1}{R_1} + \frac{1}{R_2} \right)^{-1} \quad (6)$$

$$E_e = \left(\frac{1 - \nu_1^2}{E_1} + \frac{1 - \nu_2^2}{E_2} \right)^{-1} \quad (7)$$

Na Equação 7, E é o módulo elástico e ν é o coeficiente de Poisson. Os índices numéricos correspondem a cada uma das duas superfícies em contato. Note-se que o raio efetivo e o módulo reduzido fazem com que os esquemas da Figura 1(a) e 1(b) sejam equivalentes.

Figura 1 - (a) Duas esferas pressionadas uma contra outra. (b) Uma esfera pressionada contra um plano. (c) Perfil da força normal de Contato. Adaptada de (WANG; ZHU, 2013)

Ainda que a primeira análise de contato entre dois sólidos realizada por Hertz no fim do século XIX considerasse um modelo puramente elástico e não incluísse as forças de superfície, como a adesão, muitos trabalhos recentes (JOHNSON, 1985), com um enfoque sobre o comportamento de asperezas individuais em contato, têm revisitado a teoria de contato de Hertz com o objetivo de desenvolver o conceito de área real de contato e sua relação com o atrito. Estas relações têm sido amplamente verificadas e confirmadas na escala macroscópica, mas entende-se, cada vez mais, que em escalas de comprimento suficientemente pequeno, forças de adesão tornam-se extremamente importantes em virtude

dos efeitos de escala, de forma que a energia de superfície desempenha um papel significativo no contato.

3.1.1.2 O Modelo de Bradley

Aproximadamente 50 anos depois de Hertz ter resolvido o problema do contato normal (sem adesão) entre corpos elásticos com superfícies ligeiramente curvas, Bradley (1932) apresentou a solução para o contato normal adesivo entre duas superfícies, que permitia calcular a força de atração entre duas esferas rígidas perfeitamente lisas utilizando-se do potencial de Lennard-Jones (LENNARD-JONES, 1924, 1931). De acordo com Lennard-Jones, a força, F , entre dois planos atômicos separados por uma distância z pode ser expressa por:

$$F = \frac{8\Delta\gamma}{3z_0} \left(\left(\frac{z}{z_0} \right)^{-9} - \left(\frac{z}{z_0} \right)^{-3} \right) \quad (8)$$

onde z_0 é o espaçamento de equilíbrio entre planos atômicos e:

$$\Delta\gamma = \gamma_1 + \gamma_2 - \gamma_{12} \quad (9)$$

é o trabalho de adesão com cada γ_i sendo a energia de superfície da superfície i , e o termo γ_{12} a energia da interface formada pelo contato entre as superfícies 1 e 2.

O modelo de Bradley é, basicamente, o potencial de Lennard-Jones aplicado entre superfícies em vez de duas partículas, com considerações sobre energia de superfície do material considerado. Uma representação adimensional desta relação é apresentada na Figura 2.

Para dois materiais idênticos, $\Delta\gamma = 2\gamma$, de modo que a força de adesão entre duas esferas pode ser calculada como:

$$F_{Bradley} = \frac{8\Delta\gamma\pi R_e}{3} \left(\left(\frac{1}{4} \right) \left(\frac{z}{z_0} \right)^{-8} - \left(\frac{z}{z_0} \right)^{-2} \right) \quad (10)$$

onde, o raio equivalente, R_e , é obtido a partir dos raios R_1 e R_1 , de cada esfera,

Figura 2 - Representação adimensional do potencial Leonard-Jones aplicado ao modelo de Bradley.

pela expressão:

$$\frac{1}{R_e} = \frac{1}{R_1} + \frac{1}{R_2} \quad (11)$$

A força necessária para se promover a separação entre as esferas é obtida para a condição $z = z_0$:

$$F_{\text{Separação,Bradley}} = -2\pi\Delta\gamma R_e \quad (12)$$

Em termos práticos, este modelo só é aplicável em situações em que a deformação é desprezível. Já os modelos apresentados a seguir consideram, além da adesão entre superfícies, suas deformações.

3.1.1.3 O Modelo de Johnson-Kendall-Roberts (JKR)

O modelo JKR considera os efeitos das deformações elásticas no contato entre superfícies e trata o efeito de adesão considerando apenas a energia de superfície (JOHNSON; KENDALL; ROBERTS, 1971). Neste modelo, as forças de adesão são consideradas apenas na região de contato e desprezadas

na região de separação, como mostrado na Figura 3. No modelo conceitual, as esferas são pressionadas uma contra a outra por uma carga normal P , o que, na ausência de adesão, resulta em um raio de contato a , uma distribuição da pressão $p(r)$, e uma penetração δ idênticas às obtidas pela teoria de Hertz (WANG; CHUNG, 2013).

Figura 3 - Representação conceitual do modelo JKR e Distribuição de tensões (perpendiculares às superfícies) no contato. Adaptado de (JOHNSON; KENDALL; ROBERTS, 1971)

Assim, a equação de equilíbrio da energia total pode ser resolvida, considerando-se a aplicação de uma força P para efetivação do contato, o que fornece uma nova expressão para o raio de contato, a :

$$a = \left(\frac{R_e}{K} \left(P + 3\pi\Delta\gamma R_e + \left(6\pi\Delta\gamma R_e P + (3\pi\Delta\gamma R_e)^2 \right)^{\frac{1}{2}} \right) \right)^{\frac{1}{3}} \quad (13)$$

sendo $K = 4R_e/3$.

Uma forma alternativa, considerando uma interferência, δ , aplicada entre as superfícies, resulta em:

$$a = \left(\delta R_e + \left(\frac{8\pi a \Delta\gamma R_e^2}{3K} \right)^{\frac{1}{2}} \right)^{\frac{1}{2}} \quad (14)$$

sendo:

$$\delta = \frac{a^2}{R_e} - \left(\frac{8\pi a \Delta\gamma}{3K} \right)^{\frac{1}{2}} \quad (15)$$

donde se pode facilmente identificar o termo relativo à adesão comparando-se as equações 4 e 15.

É importante notar que, enquanto todos os outros modelos de adesão que ainda serão discutidos neste trabalho permitem avaliar a existência de uma

força de atração, o modelo JKR não o faz, permitindo apenas a estimativa da força necessária para a separação das superfícies em contato:

$$F_{\text{Separação, JKR}} = 1.5\pi\Delta\gamma R_e \quad (16)$$

Comparando-se as Equações 12, relativa ao modelo de Bradley, e 16, relativa ao modelo JKR, pode-se observar uma transição no valor da força para separar as esferas (força de *pull-off*) que passa de $2\pi R\Delta\gamma$, para esferas rígidas, para $(3/2)\pi R\Delta\gamma$ para esferas elásticas. Este fato foi explorado numericamente por Muller, Yushchenko e Derjaguin (1980) e Greenwood (1997).

3.1.1.4 O Modelo de Derjaguin-Muller-Toporov (DMT)

Juntamente com o modelo de Johnson, Kendall e Roberts (1971), o modelo de Derjaguin, Muller e Toporov (1975) foi um dos primeiros a incorporar a adesão ao contato hertziano. O modelo DMT assume que tensões trativas de adesão existem fora da região de contato, ou seja, em uma região contígua à área de contato, como ilustrado na Figura 4. Nestas condições, as superfícies passam a apresentar uma separação, enquanto que as tensões dentro da região de contato são idênticas às tensões de Hertz. Assim, a teoria DMT ignora o efeito de adesão dentro da região de contato, sendo geralmente aplicável a pequenas partículas com elevado módulo elástico e de baixo trabalho de adesão, $\Delta\gamma$ (WANG; CHUNG, 2013).

Com essas considerações, o raio de contato para uma força normal aplicada P é:

$$a = \left(\frac{R_e}{K} (P + 2\pi\Delta\gamma R_e) \right)^{\frac{1}{3}} \quad (17)$$

De modo equivalente, para uma penetração imposta, δ , onde:

$$\delta = \frac{Ka^3}{R_e} - 2\pi\Delta\gamma R_e \quad (18)$$

tem-se:

$$a = (R_e\delta)^{\frac{1}{2}} \quad (19)$$

Figura 4 - Representação conceitual do modelo DMT e Distribuição de tensões no contato. Adaptado de (DERJAGUIN; MULLER; TOPOROV, 1975)

Note que a Equação 19 é idêntica à Equação 4, uma vez que o modelo DMT assume um perfil de tensões dentro da área de contato igual ao adotado por Hertz. Adicionalmente, a força para separação é:

$$F_{\text{Separação, DMT}} = 2\pi\Delta\gamma R_e \quad (20)$$

o que equivale a uma força 25% maior do que se considerado o modelo JKR.

As teorias de adesão DMT e JKR foram causa de intensas discussões e debates ao longo da década de 1970, em virtude de uma ser, aparentemente, contrária à outra (WANG; CHUNG, 2013). Tabor (1977) chegou à conclusão de que os modelo JKR e DMT estavam ambos corretos e que são casos especiais do problema geral, ou seja, são os casos-limite de comportamento de um mesmo fenômeno ou de uma mesma teoria. Para corpos absolutamente rígidos, a teoria de Bradley é válida; para pequenas esferas rígidas, o modelo DMT é válido; e para grandes esferas flexíveis, o modelo JKR deve ser empregado. A diferença entre todos estes casos, no entanto, é muito pequena e o modelo JKR descreve a adesão relativamente bem, mesmo no âmbito de condições mais favoráveis ao modelo DMT.

Por esse motivo, o modelo JKR é usado de modo predominante para descrever contatos adesivos.

A fim de determinar de forma mais apropriada a aplicabilidade de cada teoria, Tabor (1977), assumindo que as teorias JKR e DMT são os limites extremos de uma única teoria, propôs a adoção de um parâmetro:

$$\mu = \left(\frac{\Delta\gamma^2 R_e}{E_e^2 z_0^3} \right)^{\frac{1}{3}} \quad (21)$$

tal que, para $\mu < 1$ (sólidos rígidos, raio de curvatura efetivo pequeno, baixa energia de adesão), o modelo DMT é apropriado; para $\mu > 1$, a adoção do modelo JKR é mais apropriada.

3.1.1.5 O Modelo de Maugis-Dugdale (MD)

Maugis (1992) propôs uma melhoria para a ideia de Tabor para valores intermediários do parâmetro μ , representando o comportamento das forças de superfície pela aproximação de zonas coesivas de Dugdale¹ (DUGDALE, 1960). Para tanto, definiu um parâmetro de elasticidade, λ , que é equivalente ao coeficiente de Tabor:

$$\lambda = 2\sigma_0 \left(\frac{R_e}{\Delta\gamma K^2} \right)^{\frac{1}{3}} \quad (22)$$

onde a tensão coesiva σ_0 é igual à máxima tensão teórica prevista pelo potencial de Lennard-Jones:

$$\sigma_0 = \frac{16\Delta\gamma}{9\sqrt{3}z_0} \quad (23)$$

e o trabalho de adesão é dado por:

$$\Delta\gamma = \sigma_0 h_0 \quad (24)$$

onde h_0 é a separação máxima obtida combinando as áreas sob as curvas dos potenciais de Dugdale e Lennard-Jones.

¹O modelo de zonas coesivas de Dugdale é um modelo para cálculo do tamanho da zona plástica.

Na teoria de Maugis-Dugdale, a distribuição da tração da superfície é dividida em duas partes: uma função da pressão de contato de Hertz e a outra obtida a partir da tensão adesiva de Dugdale. Isso leva à seguinte equação para a força adesiva total:

$$F_{\text{Adesão, MD}} = -2\sigma_0 m^2 a^2 \left[\cos^{-1} \left(\frac{1}{m} \right) + \frac{1}{m^2} \sqrt{m^2 - 1} \right] \quad (25)$$

onde m é a relação entre o raio de contato, a , e o raio da zona coesiva, c :

$$m = \frac{c}{a} \quad (26)$$

Este modelo é, usualmente, aceito como o mais completo, uma vez que abrange toda a gama de comportamentos de adesão, de modo que, para $\lambda > 5$, resulta no modelo JKR, e para $\lambda < 0,1$, aplica-se o modelo DMT. A Figura 5 é um mapa de adesão que relaciona, para cada conjunto de propriedades e condições de carregamento normal, diferentes modelos de adesão.

Figura 5 - Mapa de modelos de adesão. Adaptado de (JOHNSON; GREENWOOD, 1997)

3.1.2 Modelos de asperezas múltiplas

Nesta seção, ainda que não seja o foco deste trabalho, serão abordados, de forma breve, alguns dos modelos de multiaspereza que preveem o comportamento mecânico de duas superfícies em contato. Tal como os modelos

de asperezas unitárias, consideram-se o estado estacionário e comportamento linear-elástico e isotrópico do material.

3.1.2.1 O Modelo de Greenwood and Williamson

O modelo de Greenwood e Williamson (1966a) tenta descrever o comportamento mecânico quando duas superfícies rugosas entram em contato, como ilustrado na Figura 6. Este modelo traz as seguintes premissas:

- O contato se dá entre um plano e uma superfície nominalmente plana com um grande número (N) de asperezas
- Todas as asperezas tem forma esférica
- Todas os topos de asperezas têm o mesmo raio (R_e)
- Todos os contatos entre asperezas são considerados contatos de Hertz
- Todas as asperezas estão suficientemente separadas para serem mecanicamente independentes
- As alturas das asperezas variam aleatoriamente, de modo que a probabilidade de fazer contato em qualquer aspereza de altura z é:

$$prob(z > d) = \int_d^{\infty} \phi(z) dz \quad (27)$$

onde $\phi(z)$ é a probabilidade de que uma aspereza em particular ter uma altura entre z e dz acima de algum plano de referência, e d é a distância entre os planos de referência das duas superfícies em contato, como ilustrado na Figura 6. Isto significa que o número esperado de contatos n é:

$$n = N \int_d^{\infty} \phi(z) dz \quad (28)$$

de modo que apenas as asperezas mais altas entram em contato e, assim, suportam toda a carga (os picos de aspereza que estão hachurados com fundo preto).

Figura 6 - (a) Duas superfícies rugosas em contato (b) Contato de uma superfície rugosa equivalente com um plano liso (apenas as asperezas mais altas entram em contato). Adaptado de (GREENWOOD; WILLIAMSON, 1966a).

Em seguida, uma separação normalizada é definida como:

$$h = \frac{d}{\sigma} \quad (29)$$

onde σ é o desvio padrão da função densidade de probabilidade das alturas de pico $\phi(z)$. Se a área de contato aparente ou nominal é A_a , a densidade de asperezas pode ser definida como:

$$\eta = \frac{N}{A_a} \quad (30)$$

Com estas definições e as premissas apresentadas inicialmente, as seguintes relações de carga total, P , número de contatos, n e área real de contato, A_r , podem ser escritas:

$$n = \eta A_a F_0(h) \quad (31)$$

$$A_r = \pi \eta A_a R_e \sigma F_1(h) \quad (32)$$

$$P = \frac{4}{3} \eta A_a E_e R_e^{\frac{1}{2}} \sigma^{\frac{3}{2}} F_{\frac{3}{2}}(h) \quad (33)$$

onde

$$F_n(h) = N \int_h^\infty (z^* - h)^n \phi^*(z^*) dz^* \quad (34)$$

Nesta equação $\phi^*(z^*)$ representa a distribuição de alturas de asperezas normalizada e:

$$z^* = \frac{z - m}{\sigma} \quad (35)$$

onde z é uma altura de aspereza variável em relação a um plano de referência, m é a média da distribuição de alturas, e ϕ é o desvio padrão da distribuição de alturas.

Quando as alturas de asperezas seguem uma distribuição exponencial (o que é uma aproximação precisa para 25% das asperezas mais altas em uma distribuição gaussiana):

$$\phi^*(z^*) = e^{-z^*} \quad (36)$$

e as equações para carga total, P , número de contatos, n e área real de contato, A_r , reduzem-se a:

$$n = \eta A_a e^{-h} \quad (37)$$

$$A_r = \pi \eta A_a R_e \sigma e^{-h} \quad (38)$$

$$P = \pi^{\frac{1}{2}} \eta A_a E_e R_e \sigma \left(\frac{\sigma}{R_e} \right) e^{-h} \quad (39)$$

Este resultado é importante porque mostra uma relação linear direta entre a força de contato e a área real de contato, bem como a força de contato e o número de pontos de contato. Assim, o tamanho médio dos pontos de contato e da pressão de contato são independentes da carga. Além disso, estes resultados sugerem que as leis do atrito de Coulomb são, de fato, precisas.

3.1.2.2 *Modelos de asperezas múltiplas com adesão*

Desde o trabalho pioneiro de Greenwood e Williamson (1966a), diversos autores utilizaram a mesma abordagem estatística para incorporar a adesão ao sistema de multi-asperezas. Por exemplo, Fuller e Tabor (1975) aplicaram a teoria de contato adesivo JKR a um modelo multi-aspereza. Maugis (1996), por sua vez, utilizou a abordagem de Greenwood e Williamson adicionando uma formulação da teoria de contatos adesivos DMT para um modelo multi-aspereza em vez de utilizar a formulação de contato de Hertz. Já Morrow, Lovell e Ning (2003) criaram um modelo multi-aspereza usando contato adesivo de Maugis-Dugdale.

3.1.3 **Modelos atomísticos**

O comportamento dos materiais no que se refere às suas propriedades mecânicas e fenômenos interfaciais, como a adesão e o atrito, é muito diferente do observado em escala macroscópica. O comportamento em escala nanométrica não pode ser compreendido pela extrapolação de propriedades macroscópicas, visto que qualquer superfície sólida observada em escala microscópica apresenta irregularidades, rugosidade, caracterizada por vales e picos. Estas irregularidades são estruturas de dimensões microscópicas ou, até mesmo, nanométricas, chamadas asperezas, que conferem às superfícies sólidas uma morfologia complexa.

No contato entre duas superfícies, a interação entre elas se dá nos pontos onde as asperezas se tocam podendo formar junções. A aplicação de carregamentos, ainda que de baixa intensidade, pode provocar a deformação plástica destas junções e a emissão de discordâncias nas regiões superficiais e sub-superficiais do material com menor tensão de escoamento (RAFII-TABAR, 2000). Pode, ainda, haver a propagação dessas discordâncias para o interior do material, formando

vazios e trincas que levam à falha do material, e finalmente, ao desgaste. Pode-se, de certa forma, dizer que o comportamento destas junções na escala microscópica controla as propriedades do material na escala macroscópica no que tange aos fenômenos de adesão, atrito e desgaste.

Assim, o trabalho necessário para deslocar duas superfícies em contato induz a um conjunto de fenômenos ainda não completamente compreendidos, como deformação elástica, plástica, adesão, geração de calor e transformações de fase (HUTCHINGS, 1992; URBAKH et al., 2004). A compreensão do contato em escala atômica é importante para se esclarecer parte destes fenômenos (CHA; SROLOVITZ; VANDERLICK, 2004).

Existem muitos modelos que descrevem o comportamento físico do atrito. Dentre estes modelos, dois dos mais utilizados são o modelo de Tomlinson e o de Frenkel-Kontorova, que, sendo modelos simples, permitem explicar a física essencial do atrito em escala atômica.

3.1.3.1 *O modelo de Prandtl-Tomlinson*

O primeiro modelo de atrito que pôde ser aplicado como base para muitas investigações dos mecanismos de atrito na escala atômica é o chamado modelo de Tomlinson, que consiste de uma massa pontual conduzida ao longo de um potencial periódico (POPOV; GRAY, 2014). O nome "modelo de Tomlinson" é, no entanto, incorreto do ponto de vista histórico², uma vez que o artigo de Tomlinson (1929) do ano de 1929, não apresenta o modelo conhecido como "modelo de Tomlinson" e, em vez disso, sugere uma contribuição adesiva para o atrito. Foi Ludwig Prandtl que sugeriu este modelo, em 1928, a fim de descrever a deformação plástica em cristais e o atrito não lubrificado. Na

²É difícil saber quem cometeu esse erro histórico e também quem o corrigiu. Acredita-se, porém, que Müser, Urbakh e Robbins (2003) tenham sido os responsáveis por esta retificação, ao proporem que o modelo acima mencionado fosse denominado "Modelo de Prandtl-Tomlinson". Desde então, este nome tornou-se cada vez mais frequentemente usado.

época, os conceitos de forças de atração e repulsão entre os átomos já eram conhecidos, de forma que era coerente admitir que deveria existir uma força repulsiva contrapondo a atração coesiva das moléculas de um sólido em um estado de equilíbrio [MARQUES, 2011]. Assim, Prandtl considerou o processo de deformação plástica, abstraindo-o passo a passo em um modelo em que os átomos de uma das superfícies, representados como osciladores harmônicos independentes acoplados elasticamente ao resto do corpo do material, por molas de constante elástica k , são movidos ao longo de um potencial periódico (PRANDTL, 1928), como mostra a Figura 7.

Figura 7 - O modelo Prandtl-Tomlinson: Uma massa pontual movimentada ao longo de um potencial periódico.

Com o objetivo de manter consonância com trabalhos e pesquisadores de décadas anteriores, trabalhos recentes têm utilizado a designação "modelo de Prandtl-Tomlinson". O presente trabalho também adotará essa prática, embora o modelo poderia, simplesmente e com razão, ser chamado de "modelo de Prandtl".

Considerando apenas o movimento unidimensional de uma massa pontual sendo arrastada em um potencial periódico por meio de uma mola com uma velocidade constante v_0 com amortecimento proporcional a essa velocidade, pode-se descrever tal sistema pela equação:

$$m\ddot{x} = k(v_0t - x) - \eta\dot{x} - N \sin\left(\frac{2\pi x}{a}\right) \quad (40)$$

onde, x é a coordenada do ponto na direção do movimento, m é a sua massa, k a rigidez da mola, η o coeficiente de amortecimento, N a amplitude da força

periódica, e a o período espacial do potencial. No caso de uma mola pouco rígida, o movimento ao longo de um ou vários períodos não altera a força da mola, F , a qual pode ser considerada constante. Neste caso, o modelo pode ser simplificado para a forma:

$$m\ddot{x} = F - \eta\dot{x} - N \sin\left(\frac{2\pi x}{a}\right) \quad (41)$$

Após analisar o modelo unidimensional, Prandtl (1928) generalizou-o para um sistema com muitas partículas independentes acopladas a um bloco rígido, bem como a um conjunto de partículas com diferentes rigidezes de acoplamento, e, em seguida, até mesmo para um conjunto de "sistemas", que a partir de um ponto de vista macroscópico simula uma situação de múltiplos contatos (POPOV; GRAY, 2014).

O modelo de Prandtl descreve muitas propriedades fundamentais do atrito seco (POPOV; GRAY, 2014). Uma das conclusões que pode ser obtida pela análise do modelo é que precisa-se aplicar uma força mínima ao corpo para que um movimento macroscópico possa ser iniciado. Esta força mínima é a força macroscópica de atrito estático. Se o corpo estiver em movimento e essa força aplicada for reduzida, o corpo poderá continuar a se mover, mesmo com uma força menor do que a força de atrito estático, uma vez que já possui uma parte da energia necessária devido à sua inércia. Macroscopicamente, isto significa que o atrito cinético pode ser menor do que o atrito estático, o que é uma característica recorrente do atrito seco. A força de atrito estático no modelo descrito pela Eq. 40 é igual a N .

Além disso, ainda que tenha sido concebido para o entendimento da plasticidade (PRANDTL, 1928), as extensões e variações do modelo de Prandtl-Tomlinson são amplamente utilizadas para a compreensão de processos de diversas naturezas físicas, incluindo discordâncias em cristais (KONTOROVA; FRENKEL, 1938), microscopia de força atômica (MEYER; MEYER, 1998), atrito no estado sólido (MÜSER; URBACH; ROBBINS, 2003), controle do

atrito através de meios químicos e mecânicos, bem como no projeto de nanomecanismos (PORTO; URBACH; KLAFTER, 2000) e manipulação de moléculas.

O sucesso do modelo, de suas variações e generalizações é devido ao fato de que trata-se de um modelo simples que representa duas das propriedades fundamentais mais importantes de um sistema tribológico: descreve a ação de força conservativa periódica com um valor médio igual a zero, em combinação com uma força de dissipação que é proporcional à velocidade. Sem a força conservativa, nenhum atrito estático pode existir; sem amortecimento (dissipação de energia), nenhuma força macroscópica de atrito de deslizamento pode existir. Estas duas propriedades essenciais estão presentes no modelo de Prandtl-Tomlinson, o que o faz ser uma reafirmação e uma maior simplificação da visão de Coulomb sobre o intertravamento de asperezas como a origem do atrito.

Figura 8 - (a)Caminho de ida. (b) Caminho de volta. (c) Abstração mecânica do modelo de Prandtl. Adaptado de (PRANDTL, 1928)

A Figura 8(a) apresenta o equivalente a um modelo experimental para o modelo de Prandtl, o que permite que os processos individuais possam ser

melhor compreendidos. O potencial periódico é representado por uma superfície em forma de onda, sobre a qual um disco pesado rola para trás e para a frente (a inclinação da trajetória do centro de massa do disco representa a força, P_B , que o potencial aplica sobre a partícula). A força elástica é promovida pelas molas F_1 e F_2 , cujas extremidades estão fixadas ao bloco A . Se o bloco A é movimentado contra a superfície B , então, desde que as molas não sejam demasiadamente rígidas, a posição de equilíbrio do disco no topo da superfície em forma de onda é instável e os processos apresentados na Figura 8 (a) e (b) podem ocorrer. Desse modo, pode-se deixar os gráficos na Figura 8 (a) e (b) serem esboçados pelo próprio modelo utilizando o mecanismo do lado direito do modelo, onde uma peça pode deslizar verticalmente carregando um ponteiro Z . A peça deslizante está conectada a um cabo que corre sobre roldanas e cuja extremidade oposta está conectada a disco de peso M . Assim, o movimento vertical da peça deslizante e do ponteiro são iguais à variação do comprimento das molas, ou proporcionais à força da mola, com pequenos desvios.

O movimento horizontal do ponteiro, porém, corresponde ao deslocamento do bloco A , de forma que os valores na Figura 8 (a) e (b) são reproduzidos. Quando o bloco é lentamente deslocado para a direita, o ponteiro desenha a linha da Figura 8 (a); quando o bloco se move para a esquerda, o ponteiro desenha a linha da Figura 8 (b). Com grandes oscilações do bloco A , observam-se os saltos indicados pelas linhas tracejadas em (a) e (b).

Após esta observação do comportamento de um único ponto de massa, (PRANDTL, 1928) estendeu o modelo para a condição com um grande número de pontos de massa. Pode-se, ainda, assumir que as ondas do potencial ocorram em intervalos irregulares, em diferentes posições e com diferentes alturas.

Quanto ao equacionamento matemático deste modelo, pode-se, então, assumir que a força experimentada pela partícula representada pelo disco de peso M é, então, a resultante da interação entre o potencial e a força de reação na

mola:

$$P_A = -kx \quad (42)$$

$$P_B = f_0 \cos \left(\frac{x}{a/2\pi} \right) \quad (43)$$

onde P_A e P_B são, respectivamente, as forças que atuam sobre a partícula em virtude de sua relação com o bloco A e com o potencial periódico B ; f_0 é a amplitude do potencial, a é o intervalo entre os átomos da superfície B , ou o período da função e k , a constante elástica da interação da partícula fora da posição de equilíbrio com o corpo A .

Pode-se, então, obter a expressão para o potencial que rege as forças sobre a partícula A :

$$U(x) = U_A + U_B = f_0 \frac{a}{2\pi} \cos \left(\frac{x}{a/2\pi} \right) + \frac{1}{2}k(x - x_0)^2 \quad (44)$$

onde x_0 é a posição inicial do partícula, que pode ser entendida também como a posição de equilíbrio no reticulado cristalino.

A equação de movimento para o i -ésimo átomo, no caso unidimensional à temperatura zero, pode ser escrita na forma:

$$m\ddot{x}_i = -\gamma\dot{x}_i - f \sin \left(\frac{2\pi}{a}x_i \right) - k(x_i - x_i^0) \quad (45)$$

onde m é a massa da partícula, x_i^0 é sua posição na rede, γ é uma constante de amortecimento fenomenológica que dissipa o calor gerado e o termo $f \sin \left(\frac{2\pi}{a}x_i \right)$ representa o substrato (potencial senoidal fixo), em que f é sua amplitude e a é sua periodicidade ou parâmetro de rede.

Essas equações podem ser explicadas pelas palavras de Tomlinson (1929): *"Como os dois corpos movem-se relativamente um ao outro, há uma mudança contínua nos pares de átomos que sofrem o efeito do carregamento, e a teoria pressupõe que, quando dois átomos entram em contato, ou seja, entram no campo de repulsão um do outro e, então, se separam, ocorre uma perda de energia que se manifesta como atrito."*

Ainda que outros modelos de atrito atômico tenham sido desenvolvidos posteriormente (MATE et al., 1987; ZHONG; TOMANEK, 1990; MCCLELLAND, 1990), o modelo de Prandtl-Tomlinson ainda capta a essência de muitas das teorias mais recentes sobre atrito.

3.1.3.2 *O Modelo de Frenkel-Kontorova*

Uma extensão do modelo de Prandtl-Tomlinson (PRANDTL, 1928) que considera uma série de partículas elasticamente acopladas tanto ao bloco em movimento como uma às outras, em um modelo unidimensional simples, foi proposta por Kontorova e Frenkel (1938). O objetivo desse modelo era descrever a estrutura e a dinâmica de uma rede cristalina na vizinhança de um núcleo de discordância (ou seja, para descrever a deformação plástica em cristais tendo como base considerações sobre discordâncias). Posteriormente, também foi utilizado no estudo de muitos outros temas, como filmes adsorvidos em superfícies e o crescimento epitaxial de filmes (TORRES, 2006).

O modelo de Frenkel-Kontorova pode ser representado por uma cadeia harmônica unidimensional de partículas (átomos) que interagem entre si (conectadas a seus vizinhos mais próximos), como se fossem acopladas por molas que obedecem à lei de Hooke, e interagem com a outra superfície por um potencial periódico, como mostra a Figura 9. Esta abordagem tornou-se, nos últimos anos, um dos modelos fundamentais e universais da física não-linear de nanopartículas (BRAUN; KIVSHAR, 1998), sendo um dos primeiros exemplos na física do estado sólido em que a dinâmica de um defeito bidimensional num corpo contínuo pode ser modelado por uma cadeia unidimensional simples.

Pode-se simplificar o modelo fazendo-se as seguintes considerações (BRAUN; KIVSHAR, 2004):

- As partículas podem se mover apenas ao longo de uma direção;

- A energia da interação entre partículas abrange somente as interações entre os primeiros vizinhos.

Figura 9 - Representação esquemática do Modelo de Frenkel-Kontorova.

Uma das características importantes que podem explicar por que o modelo de Frenkel-Kontorova tem atraído tanta atenção em diferentes ramos da física do estado sólido é o fato de que, em uma aproximação para o contínuo, o modelo se reduz exatamente à equação integrável de Seno-Gordon (KONTOROVA; FRENKEL, 1938). Isso significa que soluções exatas que descrevem tipos diferentes de ondas não-lineares e suas interações podem ser obtidas, ou seja, obtém-se um modelo não-linear fundamental para o qual sabe-se quase tudo sobre a dinâmica das excitações não-lineares, chamadas fonons, kinks (solitons topológicos) e breathers (sólitons dinâmicos) (BRAUN; KIVSHAR, 2004), que são as 3 excitações elementares cuja dinâmica determina o comportamento geral do sistema como um todo.

O modelo mecânico correspondente pode ser obtido a partir da expressão padrão para o Hamiltoniano:

$$\check{H} = K + U \quad (46)$$

onde K e U são, respectivamente, as energias cinética e potencial, que, por sua vez, podem ser definidas sob as formas:

$$K = \frac{m_a}{2} \sum_n \left(\frac{dx_n}{dt} \right)^2 \quad (47)$$

e

$$U = U_{sub} + U_{int} \quad (48)$$

onde m_a é a massa da partícula, x_n é a coordenada n-ésima da cadeia de partículas, e a energia potencial é formada por duas parcelas: U_{ext} que caracteriza a interação da cadeia de partículas com o potencial periódico e U_{int} que considera o acoplamento linear entre os vizinhos mais próximos da cadeia.

$$U_{ext} = \frac{\varepsilon_s}{2} \sum_n \left[1 - \cos \left(\frac{2\pi x_n}{a_s} \right) \right] \quad (49)$$

$$U_{int} = \frac{g}{2} \sum_n (x_{n+1} - x_n - a_0)^2 \quad (50)$$

onde ε_s é a amplitude do potencial, a é o período, g é a constante elástica que caracteriza a ligação entre partículas e a_0 é distância de equilíbrio entre partículas na ausência do potencial.

Um ponto importante do modelo Frenkel-Kontorova é a possibilidade de se poder representar a presença de discordâncias no sistema, o que pode ser entendido como poços do potencial vazios ou duplamente ocupados. Na ausência de discordâncias, sendo j um número inteiro que indica a posição da partícula ao longo da linha de átomos, as posições de equilíbrio das partículas são dadas por:

$$x_j = ja \quad (51)$$

Entretanto, assumindo que cada átomo pode oscilar em torno de sua posição de equilíbrio e representando por u o campo de deslocamentos possíveis, pode-se escrever:

$$x_j = a(j + u_j) \quad (52)$$

Donde, combinando-se às equações 49 e 50, pode-se compor a equação de movimento para o i-ésimo átomo, no caso unidimensional:

$$m \frac{d^2 x_i}{dt^2} = -\eta \frac{dx_i}{dt} - \frac{\lambda a}{2\pi} \sin \left(\frac{2\pi}{a} x_i \right) - k(2x_i - x_{i-1} - x_{i+1}) \quad (53)$$

onde x_i é a posição do átomo na rede, η é uma constante de amortecimento fenomenológica e λ , a amplitude do potencial periódico. A principal diferença entre este modelo e o modelo de Prandtl-Tomlinson (PRANDTL, 1928) é o fato de cada átomo ficar ligado a seus primeiros vizinhos mediante uma interação

harmônica (ver Figura 9), mas pesquisas recentes têm utilizado interações anarmônicas, principalmente repulsões exponenciais entre os átomos (BRAUN, 2000).

3.1.3.3 O Modelo de Frenkel-Kontorova-Tomlinson (FKT)

Weiss e Elmer (1996) apresentaram um modelo em que misturaram a proposta original de Prandtl (1928) com o modelo de Kontorova e Frenkel (1938), reunindo as vantagens de ambos. No modelo de Prandtl-Tomlinson, os átomos vizinhos, em um mesmo corpo, não interagem entre si, o que é uma simplificação importante. Isto não acontece no modelo de Frenkel-Kontorova, mas, neste último, os átomos não ficam acoplados ao resto do corpo que se movimenta. Weiss e Elmer (1996) consideraram, ainda, que a amplitude do potencial que descreve uma das superfícies exerce influência na existência ou não de atrito, tanto estático quanto dinâmico.

Figura 10 - Representação esquemática do Modelo de Frenkel-Kontorova-Tomlinson. Adaptado de (WU, 2011).

A representação esquemática do modelo unidimensional Frenkel-Kontorova-Tomlinson pode ser observada na Figura 10, em que a e b indicam, respectivamente, o parâmetro de rede da superfície representada pelo potencial periódico (substrato) e do sólido superior. O substrato é considerado rígido, e o seu centro de massa é mantido fixo. No corpo superior, que desliza, cada átomo é acoplado ao seu reticulado ideal por meio de uma mola de rigidez k_1 e ao

seu vizinho com uma mola de rigidez k_2 . O modelo de Prandtl-Tomlinson é obtido para $k_2 = 0$, enquanto que o modelo de Frenkel-Kontorova corresponde a $k_1 = 0$ (MÜSER; URBACH; ROBBINS, 2003).

3.2 MODELAGEM EM DIFERENTES ESCALAS DE COMPRIMENTO

Ao se trabalhar com simulações de materiais há, pelo menos, quatro escalas diferentes de comprimento características, como descrito na Figura 11: a escala atômica (10^{-10} m), na qual os elétrons são protagonistas para a dinâmica dos sistemas e os estados quânticos determinam as interações com outros átomos; a escala nano (10^{-9} m), na qual os átomos são os principais entes e seus comportamentos são descritos por potenciais interatômicos, que fornecem/descrevem a natureza quântica do sistema utilizando métodos como a função de densidade eletrônica; a escala mesoscópica (10^{-4} m), onde defeitos da rede cristalina como discordâncias e contornos de grão têm papel importante; e, por fim, a escala macroscópica (10^{-2} m) onde equações e leis constitutivas podem descrever vários fenômenos, uma vez que o sistema é considerado como um meio contínuo.

Figura 11 - Comportamento de materiais ao longo de diferentes escalas espaciais.

Alguns métodos computacionais se destacam para aplicação em uma ou em outra escala em específico, ou ainda podem ser aplicados em sistemas de diversos tamanhos. Assim, a Dinâmica Molecular, em particular, seja por

abordagens clássicas (Süle et al., 2014; MATTSSON et al., 2010) ou simulações do tipo *ab initio* (COHEN; HEINE; PHILLIPS, 1982; GYGI; GALLI, 2005), pode ser aplicada com eficiência em sistemas com dimensões inferiores a (10^{-8} m), enquanto que o Método dos Elementos Finitos (MEF) permite a simulação de sistemas em escala macro (BORTOLETO et al., 2013), mas também pode ser aplicado às escalas micro e mesoscópica (LANGER; JR.; CARTER, 2001).

Para se obterem as propriedades macroscópicas de um sistema físico, a partir das informações conhecidas dos estados microscópicos desse sistema, pode se considerar um sistema físico constituído por um grande número de partículas (átomos ou moléculas). Em princípio, pode-se assumir a possibilidade de resolver esse problema a partir dos conhecimentos físicos a respeito desse sistema, de modo que seja possível, essencialmente, obter uma equação dinâmica para cada partícula, possivelmente baseada na física clássica e que permita descrever a trajetória da partícula de uma forma determinística:

$$F(r) = -\frac{dU}{dr} \quad (54)$$

Pode-se, ainda, utilizando-se a mecânica quântica, introduzir um aspecto probabilístico, de forma que a evolução do sistema seja representada pela evolução da probabilidade de se observar o sistema em seus diversos estados possíveis. Assim, o comportamento macroscópico - em equilíbrio - poderia ser descrito a partir de uma descrição estatística dos estados microscópicos.

Em todo caso, para se resolver o sistema físico e calcular as propriedades desse sistema, é necessário conhecer as forças envolvidas na interação das partículas entre si e com o meio externo. Entretanto, os sistemas físicos consistem, em geral, de grande número de partículas, de modo que não se pode calcular o estado de todas as partículas, pois a quantidade de informações necessárias para armazenar em cada etapa e a quantidade de operações necessárias para se calcular um sistema macroscópico passa a ser inviável. Além disso, não é possível manter a precisão necessária no cálculo de todas as partículas para a descrição das propriedades macroscópicas.

Maxwell buscou descrever os sistemas macroscópicos a partir da descrição microscópica, isto é, da dinâmica das partículas, e enumerou as mesmas duas dificuldades (REIF, 1965). Adicionalmente, sistemas complexos, macroscópicos, formados por um número elevado de partículas³, apresentam comportamentos que dificilmente se conseguiria prever a partir de uma descrição microscópica. Tais sistemas podem apresentar comportamentos bastante diversos com pequenas modificações em suas condições.

A mudança de escala faz com que as propriedades dos sistemas macroscópicos tornem-se difíceis de serem previstas a partir das interações microscópicas, pois, em muitas situações, surgem comportamentos variados ou novas propriedades aparecem, como, por exemplo, materiais supercondutores e transformações de fase (ANDERSON, 1972).

Entretanto, é possível extrair informações relevantes em sistemas de tamanho intermediário, mas acessíveis do ponto de vista computacional. Técnicas de simulação numérica como a dinâmica molecular e a capacidade de armazenamento e de cálculo dos computadores atuais permitem calcular sistemas da ordem de centenas ou milhares de partículas que, embora longe de descrever um sistema macroscópico, podem representar algumas de suas propriedades.

3.3 DINÂMICA MOLECULAR

Este subcapítulo fornece uma visão geral sobre as técnicas de Dinâmica Molecular, do inglês *Molecular Dynamics* (MD), empregadas como ferramenta nesta pesquisa.

Ao longo dos últimos anos, técnicas computacionais têm oferecido novas maneiras de explorar as estruturas e propriedades de materiais de engenharia em um nível atômico (BULATOV; CAI, 2006; TADMOR; MILLER, 2011; ADAMS

³O número de Avogadro, determinado experimentalmente como 6.022×10^{23} , é a medida típica de quantos átomos estão contidos em um objeto macroscópico (BAAQUIE; WILLEBOORDSE, 2009).

et al., 1994), com o objetivo de relacionar a teoria matemática com a observação experimental em vários sistemas e condições complexas (EPIPHANIOU, 2010) e fornecer modelos confiáveis que possam ajudar a interpretação dos dados obtidos a partir de experimentos. Além disso, podem oferecer uma compreensão do sistema que é simulado e tornar possível a investigação das propriedades dos materiais em casos onde experimentos não podem ser realizados.

O interesse em simular a dinâmica de moléculas e átomos remonta ao final do século XIX, quando a estrutura discreta da matéria, finalmente, começou a se tornar amplamente aceita e as teorias da mecânica estatística começavam a aparecer (TADMOR; MILLER, 2011). Entretanto, devido ao grande número de partículas envolvidas nos sistemas e processos de interesse, o cálculo direto das trajetórias das partículas não foi possível naquele momento. Em vez disso, pesquisadores recorriam a análises simplificadas, onde esferas de materiais diferentes eram colocadas em recipientes físicos e agitadas para simular o comportamento de líquidos (SUTHERLAND, 1891).

A invenção do computador, na década de 1940, tornou viável uma abordagem alternativa para simular a dinâmica de moléculas com base no cálculo em vez da observação. O desenvolvimento da Dinâmica Molecular surgiu a partir de trabalhos anteriores sobre o método de Monte Carlo (METROPOLIS; ULAM, 1949), de modo que as primeiras simulações MD foram realizadas no fim da década de 1950, por Alder e Wainwright (1957, 1959), que consideraram centenas de partículas do tipo "*hard-sphere*" (ou seja, as partículas se deslocam livremente através do espaço e só interagem durante a fase de colisão) que interagem através de um potencial em forma de quadrado com condições de contorno periódicas.

Posteriormente, a técnica ainda foi aprimorada por Gibson et al. (1960), que utilizaram potenciais interatômicos contínuos mais realistas para estudar os danos da radiação em cobre, resultado em um significativo aumento do número de artigos que passaram a utilizar técnicas MD (TADMOR; MILLER, 2011). O

método continuou a evoluir, principalmente pelo desenvolvimento de potenciais interatômicos mais sofisticados e pela melhoria das técnicas de integração e métodos para simular diferentes tipos de agrupamentos de átomos e moléculas (RAHMAN, 1964; STILLINGER; RAHMAN, 1974).

3.3.1 Considerações sobre o Método

O método MD é baseado no modelo molecular clássico, que corresponde ao entendimento da Física do final do século XIX (RAPAPORT, 2004). Os sistemas são modelados na escala atômica e a simulação do movimento dos átomos é obtida pela integração da Segunda Lei de Newton. Os átomos são considerados como massas pontuais e as interações entre eles podem ser aproximadas por funções potenciais analíticas, chamadas de potenciais interatômicos. As interações intramoleculares, pelas quais um grupo de átomos é combinado para formar uma molécula, podem ser modeladas com precisão, determinando-se entre quais átomos existem ligações químicas e assumindo que tais ligações não podem se romper ou se combinar durante a simulação. Tais ligações podem se movimentar (esticar, dobrar, torcer, etc.), o que é definido por funções potenciais que são adaptadas a cada combinação de átomos por meio de diferentes parâmetros da função. Em muitos casos, moléculas pequenas, como as de água, podem ser aproximadas por uma estrutura rígida, em que nenhum movimento da ligação é possível.

Da mesma forma, as interações intermoleculares ou interatômicas, atrativas ou repulsivas, como as interações de origem eletrostática, forças de London-Van der Waals, etc. são modeladas por uma função potencial. Assim, um modelo molecular clássico pode permitir uma abordagem para estudar os fenômenos interfaciais.

Em geral, as forças eletrostáticas são as responsáveis pela interação entre átomos, dando origem às forças e ligações metálica, covalente e de Van Der

Waals. O movimento dos núcleos atômicos é, geralmente, mais lento do que o movimento dos elétrons, uma vez que o núcleo é aproximadamente 100 vezes mais pesado que o elétron. Com essa consideração, pode-se concluir que a velocidade do núcleo é pequena se comparada a do elétron, de forma que o sistema de elétrons sempre estará em uma posição de equilíbrio após cada movimento do núcleo, ou seja, os elétrons adaptam-se instantaneamente a qualquer posição dos núcleos, suposição que é conhecida como a aproximação de Born-Oppenheimer. Dessa forma, o núcleo "sente" os elétrons como se tais fossem uma nuvem de carga, enquanto que os elétrons "sentem" os núcleos como se estes estivessem estáticos. Essa é a base para o desacoplamento entre os movimentos eletrônico e nuclear, que permite remover elétrons do modelo, substituindo-os por energias potenciais interatômicas que são função das posições relativas dos átomos.

Desacoplados os movimentos eletrônico e nuclear, o objetivo da dinâmica molecular passa a ser calcular a trajetória dos átomos e, a partir daí, as propriedades do sistema, resolvendo a equação do movimento de Newton:

$$f_i = m_i a_i \quad (55)$$

A força de cada partícula é dada como uma função da energia potencial interatômica, Ψ , que depende das posições dos átomos, ou seja:

$$f_i = -\nabla_{r_i} \Psi \quad (56)$$

Daí, para cada átomo do sistema a seguinte equação descreve a dinâmica do sistema todo:

$$m_i \frac{d^2 r_i}{dt^2} = -\nabla_{r_i} \Psi \quad (57)$$

onde m_i e r_i são, respectivamente, a massa e a posição de um átomo i e t é o tempo.

Esta equação não têm solução exata para um sistema de n partículas, se $n > 2$, de forma que a integração da equação 57 fornece as mudanças na

quantidade de movimento e nas posições dos átomos no tempo. A solução é obtida pela discretização das equações no tempo; uma discretização espacial não é necessária, uma vez que, para as simulações atomísticas, essa discretização espacial já se dá pela definição das distâncias atômicas.

Na seção seguinte, apresenta-se uma breve visão geral sobre os potenciais interatômicos disponíveis, métodos, técnicas e aplicações.

3.3.2 Potenciais Interatômicos

As simulações por dinâmica molecular exigem a definição de uma função de potencial interatômico, ou seja, deve-se fornecer ao modelo uma função das posições dos núcleos que represente a energia potencial do sistema quando os átomos estão localizados numa configuração específica. Geralmente, o potencial é descrito utilizando as posições relativas dos átomos uns em relação aos outros, e não a partir de posições absolutas. A estrutura geral de uma função potencial é:

$$U(r_1, r_2, r_3) = V_1 + V_2 + V_3 \quad (58)$$

onde o primeiro termo, V_1 , representa a energia proveniente de um campo de força externa, tal como a gravitacional ou eletrostática; o segundo termo mostra as interações das partículas aos pares; o terceiro termo indica os componentes das interações a três corpos. Interações entre mais de três corpos são, geralmente, desconsideradas.

Pode-se supor uma forma funcional para a função potencial e, em seguida, escolher os parâmetros para reproduzir um conjunto de dados experimentais, o que dá origem aos chamados potenciais empíricos, como, por exemplo, Lennard-Jones, Morse, Born-Mayer. Outra possibilidade é calcular a função de onda eletrônica para posições atômicas fixas, o que é difícil de se fazer para um sistema com muitos átomos. Diferentes aproximações são utilizadas e potenciais

analíticos semiempíricos são derivados a partir da mecânica quântica. Neste caso, tem-se os potenciais EAM (*Embedded Atom Method*), Baskes, Tersoff, etc. Pode-se, ainda, realizar cálculos da estrutura eletrônica, com base na mecânica quântica, das forças em simulações MD *ab-initio*, utilizando-se, por exemplo, o método de Car-Parrinello com pseudo-potenciais.

Há uma variedade de potenciais amplamente utilizados em simulações de dinâmica molecular; alguns dos principais que serão abordados a seguir.

3.3.2.1 *Potencial de Lennard-Jones*

Como mostrado anteriormente, para os modelos de Prandtl-Tomlinson e Frenkel-Kontorova, utilizaram-se relações elásticas, lineares, para descrever o comportamento das forças de interação entre átomos, o que é, de fato, uma grande simplificação e não descreve de forma precisa o comportamento e a influência de um átomo sobre outro dentro de um mesmo sólido ou reticulado cristalino. O mesmo pode ser dito em relação ao potencial senoidal utilizado para descrever a interação entre os átomos de superfícies diferentes.

O potencial de Lennard-Jones (LENNARD-JONES, 1924, 1931) é um dos modelos matemáticos mais simples que tentam descrever a interação entre um par de átomos ou moléculas neutras. É usado para o cálculo das interações de van der Waals em gases inertes e sistemas moleculares e descreve, de forma próxima do real, a interação entre pares de átomos, com forças que são fortemente repulsivas a distâncias interpartículas muito curtas. Este comportamento e variação de forças são mostrados na Figura 12, na qual é possível observar as grandes inclinações sobre a curva que compõe o potencial de Lennard-Jones (FOSDICK, 1996). Este potencial é, muitas vezes, usado para modelar efeitos gerais em vez de propriedades de um material específico.

A energia de interação no potencial de Lennard-Jones é dada por:

$$U(r_{ij}) = 4\varepsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^6 \right] \quad (59)$$

onde ε é o valor do mínimo de energia do potencial e σ é a separação interpartícula para a condição de mínimo do potencial.

Figura 12 - Representação Gráfica do Potencial de Lennard-Jones.

Note-se que, diferentemente do potencial da energia do modelo de Hooke, o potencial para o modelo de Lennard-Jones vai a zero a grandes distâncias. Isto permite representar a quebra permanente de ligações interatômicas quando os átomos estão separados por grandes distâncias.

A repulsão entre os átomos quando eles estão muito próximos um ao outro é modelada pelo termo $1/r^{12}$. O segundo termo descreve a coesão do sistema, ou seja, representa a parte das forças de atração, mais dominantes para distâncias maiores e originadas por forças de Van der Waals, que são fracas, mas dominam as características de sistemas de camada fechada⁴.

Esse potencial pode representar a atração entre dipolos (por exemplo, átomos de um gás nobre) interagindo por interação dipolo-dipolo criado pelas flutuações da dinâmica eletrônica em cada átomo, mais um potencial de repulsão

⁴Camada de valência completa (ex.: gases nobres).

que impede a ocupação de uma mesma região do espaço por dois átomos. Entretanto, o potencial de Lennard-Jones não é suficiente para descrever as ligações covalente e metálica, nas quais podem surgir ligações localizadas fortes ou onde existe uma nuvem eletrônica, respectivamente.

3.3.2.2 *Potencial de Morse*

É um potencial semelhante ao potencial de Lennard-Jones, mas carrega a característica de ser mais adequado para casos em que a interação de atração se origina da formação de uma ligação química. Foi proposto por Morse (1929) e se tornou um potencial popular para simulação de metais com estrutura Cúbica de Face Centrada (CFC) e Hexagonal Compacta (HCP). Pode ser representado pela equação:

$$U(r_{ij}) = \varepsilon \left[e^{-2\alpha(r_{ij}-r_0)} - 2e^{-\alpha(r_{ij}-r_0)} \right] \quad (60)$$

3.3.2.3 *Potencial de Buckingham*

Desenvolvido por Ogorodnikov e Rogovoi (1995), o potencial de Buckingham é uma aplicação mais geral que o Potencial de Morse. O termo exponencial fornece uma melhor descrição da forte repulsão devido à sobreposição das nuvens de elétrons:

$$U(r_{ij}) = Ae^{\frac{-r_{ij}}{\rho}} - \frac{B}{r_{ij}^6} \quad (61)$$

onde A e B são coeficientes que dependem de propriedades físico-químicas dos elementos considerados e ρ é um parâmetro de comprimento dependente do par iônico.

3.3.2.4 Potencial EAM

O modelamento de regiões com características ligeiramente diferentes das de um corpo contínuo, como superfícies, contornos de grãos, etc., pode trazer problemas relevantes quanto à aplicação de funções de potencial interatômico. Potenciais como o de Lennard-Jones, mesmo com a introdução de um termo adicional dependente da densidade de elétrons não pode fornecer uma descrição totalmente precisa dos sistemas metálicos (OVRUTSKY; PROKHODA; RAS-SHCHUPKYNA, 2013). Uma abordagem alternativa simples, mas bastante realista para a descrição das ligações atômicas em sistemas metálicos é baseada no conceito de densidade local, que é considerada uma variável chave para esse tipo de representação. Isto permite considerar a dependência da magnitude das ligações individuais sobre o meio ambiente local, o que é especialmente importante para a simulação de superfícies e defeitos.

O potencial mais prático para descrever uma estrutura metálica é o *Embedded Atom Method* (EAM) (DAW; BASKES, 1984). A maioria dos potenciais EAM produzem forças que são quase radialmente simétricas aos átomos, o que é próprio à maioria dos metais nobres e aos metais que possuem orbital d mais energético totalmente preenchido. A situação pode se tornar mais complicada para os elementos com orbital d ou f parcialmente ocupados (metais de transição), como o tântalo, urânio e a maioria dos actínídeos (EPIPHANIOU, 2010). Metais com este tipo de configuração atômica geram forças angulares nos átomos, que são importantes para as propriedades estruturais e mecânicas dos metais.

O EAM é um potencial multi-partícula que considera que cada átomo está integrado a uma nuvem de elétrons criado por todos os átomos vizinhos (DAW; BASKES, 1984). A quantidade de energia necessária para inserir um átomo em uma nuvem de elétrons de uma dada densidade é chamada função de encaixe (*embedding function*). Para o potencial EAM, a energia do átomo i

é determinada pela densidade eletrônica local na posição do átomo, onde a função f_j descreve a contribuição de todos os átomos j para a densidade de elétrons na posição do átomo i . A energia potencial de um átomo, i , é:

$$U_i = \tau_\alpha \left(\sum_{i \neq j} \rho_\beta(r_{ij}) \right) + \frac{1}{2} \left(\sum_{i \neq j} \phi_{\alpha\beta}(r_{ij}) \right) \quad (62)$$

onde r_{ij} é a distância entre os átomos i e j , $\phi_{\alpha\beta}$ é uma função potencial interatômico, ρ_β é a contribuição para a densidade de carga elétrica do átomo j de tipo β na posição do átomo i , e τ é uma (*embedding function*) que representa a energia necessária para colocar o átomo i de tipo α para dentro da nuvem de elétrons. ρ_β é dado por:

$$\rho_\beta = \sum_{i \neq j} f_j(r_{ij}) \quad (63)$$

O somatório da função f_j é, portanto, uma medida da densidade local de elétrons, ρ_β . F_α é a energia associada à entrada de uma partícula no ambiente de elétrons descrito por ρ_β . O termo de potencial interatômico $\phi_{\alpha\beta}$ descreve as contribuições eletrostáticas. A forma geral do potencial pode ser considerada uma generalização da ideia básica da Teoria Funcional da Densidade, para a qual, a densidade local de elétrons pode ser usada para calcular a energia (OVRUTSKY; PROKHODA; RASSHCHUPKYNA, 2013).

Essa técnica pode ser usada para calcular a energia de um átomo em uma liga e também em um material puro. Para um sistema de átomos com um único tipo de elemento, três funções escalares devem ser especificadas: a *embedding function*, uma interação interatômica e uma função da contribuição para a nuvem de elétrons. Para uma liga binária, o potencial EAM exige sete funções: três interações interatômicas (AA, AB, BB), duas *embedding function* (uma para cada tipo de átomo) e duas funções da contribuição para a nuvem de elétrons. Em geral, estas funções são fornecidas em formato de tabela e interpoladas por polinômios cúbicos.

Este método pode ser aplicado para o estudo de fratura e defeitos, contornos de grãos e outros sistemas metálicos e processos. Por outro lado, potenciais interatômicos semiempíricos também têm sido utilizados para esse fim.

3.3.3 Condições de Fronteira

No nível microscópico, um sistema jamais estará completamente isolado. O único sistema realmente isolado é o Universo inteiro, ainda que haja controvérsias a esse respeito (DAVIS, 2010). Isso gera um inconveniente em relação a quais condições impor às fronteiras do sistema de átomos. Para contornar esse ponto, em dinâmica molecular, as equações newtonianas do movimento são resolvidas para um sistema de partículas sujeito a condições de contorno periódicas.

Figura 13 - Formação das condições de contorno periódicas para simulação em MD em 1, 2 e 3 dimensões. Adaptado de (TOLÉDANO, 2007).

Basicamente, cola-se a interface da direita com a interface da esquerda, ou seja, a partícula que colide com a parede da direita entra pela parede da esquerda com a mesma velocidade. Essa condição em uma dimensão transforma uma reta em um círculo; para duas direções, tem-se a superfície lateral de um cilindro e, para o espaço tridimensional, um toróide de revolução. A Figura 13 ilustra esse processo.

3.4 ELEMENTOS FINITOS

O Método dos Elementos Finitos (MEF), do inglês, *Finite Element Method* (FEM), é uma técnica numérica para encontrar soluções aproximadas na resolução de um sistema de equações diferenciais parciais, que tem como objetivo a determinação do estado de tensão e de deformação de um sólido de geometria arbitrária sujeito a ações exteriores.

Conceitualmente, o MEF pode ser definido como um processo matemático pelo qual um domínio contínuo, que possui infinitos graus de liberdade, uma vez que possui infinitos pontos geométricos, é substituído por um número finito de subdomínios (elementos finitos) com um número finito de variáveis desconhecidas (graus de liberdade) (ZIENKIEWICZ, 1971), de forma que cada elemento pode ser analisado separadamente e a solução para a estrutura completa é obtida pela imposição de compatibilidade de deslocamentos e pelo equilíbrio de forças ao longo do contorno dos elementos conectados entre si (SOUZA, 2005).

3.4.1 Modelagem de Adesão por Elementos Finitos

Grande parte dos trabalhos que analisaram a adesão entre superfícies pelo modelamento numérico utilizando o Método dos Elementos Finitos considerou o potencial de Lennard-Jones para descrever a interação e analisaram as forças de superfície geradas no contato, geralmente, comparando os resultados numéricos obtidos aos resultados de modelos analíticos disponíveis para geometrias simples. Vem daí a explicação para que o sistema plano-esfera seja o mais analisado dentre os trabalhos que serão citados e comentados neste presente item. Entretanto, vale salientar que nenhum desses trabalhos analisa a adesão entre superfícies considerando a falha do material e a transferência de material entre superfícies. Verifica-se, daí, que trata-se de uma abordagem ainda não explorada e/ou

analisada.

Sauer e Li (2007) propuseram um modelo de mecânica do contato computacional, em escala micro/nano, para se estudar o contato adesivo entre corpos deformáveis, incorporando um potencial de interação interatômica no contexto da mecânica do contínuo não-linear. Em seguida, aplicaram o modelo a partir de uma formulação de elementos finitos utilizando uma abordagem Lagrangiana para analisar o contato esfera-plano com modelos bidimensionais. O modelo de contato computacional proposto foi validado através da comparação com os modelos analíticos de Johnson-Kendall-Roberts e de Maugis-Dugdale, em termos das tensões, deformações e forças de atração geradas no contato.

Kogut e Etsion (2003) calcularam, através de análise por elementos finitos, a contribuição do contato elástoplástico para a força de adesão, considerando microcontatos esféricos, e incorporaram as descobertas em um modelo de multiasperezas capaz de prever a força de adesão entre superfícies rugosas em contato não lubrificado. Tayebi e Polycarpou (2005) ampliaram este modelo para o caso em que uma monocamada ou algumas monocamadas de líquido aderem às superfícies em contato, tornando o modelo aplicável a condições de lubrificação limítrofe e utilizando-o para estudo do contato adesivo em MEMS.

Já Rojek, Telega e Stupkiewicz (2001) utilizaram uma lei alternativa para adesão no estudo da interface osso-implante em próteses de articulação e propuseram um modelo numérico que foi desenvolvido e aplicado para analisar a articulação do joelho após uma artroplastia. Trata-se de um dos poucos trabalhos que, além de calcular as forças de adesão, faz considerações sobre o modelamento do desgaste adesivo no contato entre materiais, a fim de avaliar a influência de debris de desgaste sobre a interface analisada. Sobre o modelo para desgaste adesivo, conjecturaram sobre a aplicação da lei Archard para calcular a concentração de debris de desgaste na interface osso-implante e desenvolveram o equacionamento matemático para isso.

Zhang, Zhang e Wen (2011) utilizaram o método de elementos finitos para

modelar o contato adesivo de corpos elásticos em escala nanométrica, com uma tensão de adesão derivada do potencial de Lennard-Jones, o que permitiu soluções numéricas para uma variedade de geometrias de interface. Comparando os resultados obtidos com os de outras análises que consideram os modelos convencionais de Hertz, JKR, e DMT, os autores puderam verificar a validade do modelo MEF.

Ardito, Corigliano e Frangi (2010) simularam os fenômenos de adesão em diferentes condições ambientais, utilizando o MEF, o potencial de Lennard-Jones e a formulação de Hamaker (1937) para estimarem as forças de van der Waals e de capilaridade em função da energia de superfície. Uma parte significativa do trabalho foi dedicada à geração do modelo FEM de superfícies rugosas artificiais em escala microscópica a fim de analisarem o comportamento do contato das asperezas e a deformação do material, modelado com comportamento elástoplástico. Trabalho semelhante foi realizado por Sauer e Wriggers (2009), que desenvolveram um código próprio, baseado no potencial de Lennard-Jones e que foi validado para casos que dispunham de solução analítica.

Cho e Park (2004) analisaram o contato adesivo entre uma aspereza hemisférica elástica e uma superfície plana rígida, utilizando o programa Abaqus e aplicando uma formulação que utilizava o potencial de Lennard-Jones. Compararam os resultados obtidos com resultados provenientes de modelos MD. Verificaram, no entanto, que existe uma diferença significativa para a pressão de contato entre as duas abordagens, uma vez que o modelo de MEF considerou a força adesiva como uma força de corpo, que aumenta a pressão de contato, enquanto que o modelo MD representa a força adesiva como uma força de superfície, que reduz a pressão de contato.

Cho, Han e Kim (2006) analisaram os nanopelículos encontrados na epiderme das patas das lagartixas, que contribuem para a adesão por meio de forças de van der Waals, forças capilares, etc. Esta estrutura tem inspirado muitos pesquisadores a fabricar estruturas adesivas em nanoescala. No entanto, os

parâmetros mecânicos relacionados à fixação dos nanopelículas ainda não foram revelados qualitativamente. Os parâmetros mecânicos que têm influência sobre a capacidade adesiva desses nano-fios foram investigados por meio de simulação numérica em que consideraram apenas forças de van der Waals. Para a análise numérica, utilizaram o método dos elementos finitos, o programa Abaqus e sub-rotinas FORTRAN e representadas as forças de van der Waals pelo potencial de Lennard-Jones, analisando o efeito do tamanho das partículas sobre a adesão.

3.5 ADESÃO E FORÇAS DE SUPERFÍCIE

Segundo as definições de Landheer e Gee (1991), a adesão é a resistência contra a separação de dois corpos numa direção normal à interface comum; atrito é a resistência contra o movimento dos corpos em contato na direção da interface comum, enquanto o desgaste é a mudança gradual da geometria e a perda de material devido a diferentes processos de contato que podem ocorrer em contatos móveis. E há intensa correlação entre os três, que têm suas origens nos fenômenos de contato que ocorrem nas asperezas de rugosidade dos corpos.

Bowden e Tabor (1954) demonstraram de forma convincente que a adesão, o atrito e o desgaste estão inter-relacionados. Bowden (1957) chama a atenção para a estreita ligação entre a adesão e atrito. O atrito é, essencialmente, a força de cisalhamento e a adesão é a resistência à tração das junções formadas na região de contato. Assim, a adesão é uma das causas do atrito e pode levar ao desgaste dos materiais em contato.

Esta seção tratará sobre as origens da adesão, destacando as forças de superfície como sua causa principal e analisando as formas para caracterização e quantificação desse fenômeno.

3.5.1 Origens da Adesão e a constante de Hamaker

Adesão entre dois corpos está relacionada com energias potenciais em escala atômica.

Se a distância d entre os centros de dois átomos adjacentes é aproximadamente igual ao diâmetro atômico, a energia potencial do sistema está em um estado mínimo ($U_p = U_{pm}$) e o sistema está em situação termodinamicamente ideal. Adicionalmente, uma vibração induzida termicamente em torno das posições de equilíbrio, com energia cinética U_k , se sobrepõe a esta condição energética.

Em uma superfície livre, os átomos se encontram em uma posição menos

estável energeticamente, uma vez que faltam-lhes alguns vizinhos. Isso torna maior a distância atômica média em torno dos átomos da superfície quando comparados aos átomos que se encontram na região interna do material. Por conseguinte, a energia potencial é aumentada para U_{ps} . A diferença entre U_{ps}^* e U_{pm}^* , ambas tomados por unidade de área (indicado pelo símbolo *), é igual à energia específica de superfície (LANDHEER; GEE, 1991).

Já em uma interface, como em um contorno de grão ou entre dois corpos, verifica-se uma situação intermediária: os átomos ao longo da interface têm vizinhos sobre o outro lado da interface, mas não existe um ajuste perfeito como nos átomos mais internos, o que aumenta a energia potencial para U_{pi} , de modo que $U_{pm} < U_{pi} < U_{ps}$.

Em outras palavras, as propriedades dos átomos e/ou moléculas de cada superfície em contato e as características das interações entre as partículas de uma superfície com as partículas da outra determinam o nível de adesão a que um sistema pode estar sujeito. Assim, convém analisar as formas como tais partículas podem interagir, bem como as consequências dessas interações.

Em resumo, estas interações podem ser classificadas em dois grupos: ligações interatômicas (ou primárias) e forças intermoleculares (ou ligações secundárias). As primeiras são responsáveis pela formação de moléculas, enquanto que as forças intermoleculares são aquelas responsáveis por manter moléculas unidas na formação dos diferentes compostos.

Há três aspectos que são de particular importância para qualquer interação: (a) a sua força, (b) a distância sobre a qual ela age, e (c) o meio ambiente através do qual ela age. A força de cada tipo de ligação e as distâncias de ação para as ligações intermoleculares mais comuns são apresentadas na Tabela 1, que fornece uma visão geral dos tipos de forças de superfície.

As ligações interatômicas podem ser classificadas em:

Ligação covalente: O exemplo mais comum para uma ligação covalente é o átomo de hidrogênio. Para formar uma molécula H_2 , os dois átomos

Tabela 1 - Características das ligações intermoleculares. Adaptado de (ISRAELACHVILI, 2011).

Natureza da Ligação	Tipo de Força	Energia (kcal/mol)	Exemplo	Distância
Iônica	Força de Coulomb	180	NaCl	2.8 Å
		240	LiF	2.0 Å
Covalente	Força Electrostática	170	Diamante	-
		283	SiC	
Metálica	Elétron de valência livre (interação em nuvem)	26	Na	4.3 Å
		96	Fe	2.9 Å
		210	W	3.1 Å
Ponte de Hidrogênio	Interação dipolo-dipolo	7	HF	
van der Waals	(i) dipolo-dipolo	2.4	CH ₄	de poucos Å a centenas de Å
	(ii) dipolo-dipolo induzido			
	(iii) forças de dispersão			

H competem igualmente pelos elétrons. A química quântica mostra que a distribuição da função de onda destes elétrons implica na probabilidade igual de se encontrar o elétron tanto em um átomo quanto no outro. Deste modo, os elétrons são compartilhados pelos dois átomos e a energia total é reduzida em virtude dessa "energia compartilhada", o que gera a força de atração. A propriedade característica das ligações covalentes é uma concentração da densidade de carga de elétrons entre os dois núcleos, o que leva a características fortemente direcionais.

Ligação Iônica: A ligação iônica resulta da atração eletrostática entre íons positivos e negativos, que se originaram de átomos livres pela perda ou ganho de elétrons. Esses íons se atraem pela interação de Coulomb que estabiliza o cristal iônico.

Ligação Metálica: O traço característico dos átomos metálicos, que explica as peculiaridades da ligação, é a debilidade com que seus elétrons de valência são mantidos. As ligações metálicas são observadas somente quando os átomos estão condensados em um cristal e elas se originam do mar de elétrons livres

que mantém unidos os núcleos iônicos. Quando duas superfícies metálicas se aproximam uma da outra, as nuvens de elétrons têm a tendência de se espalharem, a fim de minimizar a energia de superfície, o que dá origem a uma forte interação atrativa em forma exponencial decrescente. Além disso, as ligações metálicas são não-direcionais.

Já as forças intermoleculares podem ser classificadas em:

Forças Íon-dipolo: ocorrem entre um íon e uma molécula polar, por exemplo, $NaCl$ em H_2O .

Forças ou ligações dipolo-dipolo (moléculas polares): se uma molécula é polar, ela apresenta uma extremidade mais eletropositiva e outra mais eletronegativa. Diz-se, então, que a molécula representa um dipolo elétrico permanente. Moléculas polares se atraem quando o lado positivo de uma molécula está próximo do lado negativo de outra. Essas forças dipolo-dipolo são efetivas tão somente quando moléculas polares estão muito próximas, sendo elas geralmente mais fracas que as forças íon-dipolo.

Pontes de Hidrogênio: tipo de ligação intermolecular resultante de uma atração dipolo-dipolo muito forte. As pontes de Hidrogênio aparecem entre moléculas que têm pelo menos um átomo de H ligado a um átomo de F, O ou N. Como esses elementos são os de maior eletronegatividade, as ligações $H^{\delta+}F^{\delta-}$, $O^{\delta-}H^{\delta+}$ e $N^{\delta-}H^{\delta+}$ são fortemente polarizadas.

Ligações de van der Waals: ocorre entre moléculas apolares. Apresenta a formação de dipolos induzidos temporariamente. São cerca de dez vezes mais fracas que as forças dipolo-dipolo. As forças de van der Waals incluem três tipos de interações:

- interação de Keesom (ou dependentes da orientação)
- interação de Debye (ou de indução)
- interação de London (ou de dispersão)

Em 1873, van der Waals postulou a existência das forças intermoleculares, que ficaram conhecidas pelo seu nome. Fritz London descreveu a natureza delas e as atribuiu ao movimento dos elétrons dentro das moléculas. As interações das forças de van der Waals são, em geral, a maior contribuição para as forças intermoleculares. É por isso que elas têm um papel muito importante em fenômenos diversos como adesão, tensão superficial e outros (ISRAELACHVILI, 2011).

Além das forças interatômicas e intermoleculares, ainda podem contribuir para a adesão as forças de capilaridade, pela formação de meniscos entre as geometrias em contato em razão da umidade do ambiente. Entretanto, estas não serão abordadas neste trabalho, ainda que estas tenham, muitas vezes, papel importante sobre a adesão entre superfícies. Detalhes sobre este tema podem ser encontrados nos trabalhos de Israelachvili (2011), Butt e Kappl (2009).

A partir das considerações expostas nesta seção, pode-se assumir que, para o caso mais geral, a força de adesão, F_{ad} , é uma combinação das forças eletrostática F_{el} , de van der Waals, F_{vdW} , a força de capilaridade (apenas no ar), F_{cap} , as forças devidas às pontes de hidrogênio, F_H , e forças devido a ligações químicas ou interações ácido-base, F_{quim} (BUTT; GRAF; KAPPL, 2006):

$$F_{ad} = F_{el} + F_{vdW} + F_{cap} + F_H + F_{quim} \quad (64)$$

Dependendo dos tipos de grupos químicos presentes nas terminações das moléculas presentes nas superfícies em contato, pode haver a formação de ligações químicas durante o contato, que podem dominar a força de adesão. Admitindo a ausência desses grupos químicos, bem como a ausência de átomos H e de cargas eletrostáticas e assumindo que o contato se dá em vácuo ou ambiente de baixa umidade relativa e entre superfícies de materiais dissimilares, pode-se assumir que:

$$F_{cap} \approx F_{quim} \approx F_H \approx F_{el} \approx 0 \quad (65)$$

Assim, uma abordagem mais básica permite aproximar as forças de adesão com base nas forças de van der Waals, através das quais qualquer átomo ou molécula é atraída por qualquer outro átomo ou molécula, independentemente da composição do material ou a aparência física.

Bradley (1932) e Hamaker (1937), a partir do conceito da atração entre moléculas pelas interações de London-van der Waals, derivaram a Equação 66 para descrever a atração entre dois corpos esféricos macroscópicos (CORN, 1961):

$$F_{ad} = \frac{\pi^2 q_0^2 \lambda}{12x^2} \left(\frac{d_1 d_2}{d_1 + d_2} \right) \quad (66)$$

onde, F_{ad} é a força de atração, x é a distância de separação, λ é a constante de van der Waals, q_0 é o número de átomos em 1 cm^3 da substância, d_1 e d_2 são os diâmetros das partículas esféricas e $\pi^2 q_0^2 \lambda = 10^{-12}$ como mostrado por Hamaker (1937).

Posteriormente, esta equação foi verificada, comprovada e adaptada para diversos pares de contato (CORN, 1961). Neste aspecto, cabe citar o trabalho de Kordecki e Orr (1960), que, assim como a Equação 66 mostraram que as forças de adesão aumentam com o aumento do tamanho de partícula.

A força de atração de van der Waals entre átomos é proporcional a $1/r^7$, onde r é a distância entre os átomos. O potencial empírico muitas vezes utilizado para representar esta interação é o potencial de Lennard-Jones (LENNARD-JONES, 1924).

As forças de van der Waals são significativas para distâncias de separação entre alguns poucos até algumas centenas de angstroms, especialmente entre os corpos macroscópicos. A interação entre diferentes geometrias, tais como dois planos, uma esfera e um plano, ou dois cilindros, pode ser calculada pela integração das interações de todos os átomos das duas superfícies. Por exemplo,

a força de atração, por unidade de área, entre um plano infinito e uma superfície plana finita é dada por:

$$F_{ad} = \frac{A_H}{6\pi h^3} \quad (67)$$

onde h é a distância entre os planos. A constante interação A_H é chamada constante de Hamaker (HAMAKER, 1937) para o par de materiais, definida como:

$$A_H = \pi^2 C \rho_1 \rho_2 \quad (68)$$

onde C é a força da interação de atração e ρ_i é o número de densidade das moléculas nos sólidos 1 e 2.

Para duas fases macroscópicas, 1 e 2, que interagem através de um meio 3, A pode ser calculada usando a equação de McLachlan (Equação 69) (ISRAELACHVILI, 2011), que relaciona as constantes dielétricas, os índices de refração e a frequência de absorção dos materiais.

Para dois materiais diferentes, a constante de Hamaker pode ser estimada em termos de média geométrica da constante de Hamaker de cada material:

$$A_{12} \approx \sqrt{A_{11}A_{22}} \quad (69)$$

Admitindo-se que, quando duas superfícies ou partículas que se aproximam são colocadas mais próximas do que alguns nanômetros, passam a estar submetidas a forças de atração. A atração permanece até que elas se toquem, quando forças de repulsão podem surgir. Pode-se assumir que, para superfícies reais, ligações químicas não irão se formar facilmente na região de contato real entre as duas superfícies, em virtude da presença de filmes de óxido, asperezas, orientação cristalográfica, etc, de modo que as forças de Van der Waals parecem ser uma boa aproximação para avaliar as forças de adesão.

Assim, para distâncias de separação menores que a distância de equilíbrio entre as partículas, as duas superfícies estão em contato e a mecânica do contato pode descrever o comportamento mecânico. Na situação oposta, o

potencial interatômico entre dois átomos ou moléculas pequenas pode ser simplificado de forma a considerar apenas a parcela de atração, por exemplo, considerando apenas as forças van der Waals. Assim, a interação, por unidade de área, entre duas superfícies planas pode ser escrita na forma da Equação 67.

Os apêndices A e B trazem, respectivamente, a dedução matemática de um caso específico para as expressões de força de adesão utilizando as constantes de Hamaker e uma tabela com expressões para várias geometrias de contato.

Além da Equação 68, é possível estimar as constantes de Hamaker pela aplicação da teoria de Lifshitz (PRIEVE; RUSSEL, 1988), a partir de propriedades como constante dielétrica e índices de refração dos materiais em contato e do meio interfacial, ou ainda pelo uso de expressões matemáticas que relacionam a constante de Hamaker aos valores de energias de superfície dos materiais (ISRAELACHVILI, 2011).

3.6 COMPORTAMENTO TRIBO-MECÂNICO DOS MATERIAIS E DEFEITOS CRISTALINOS

Embora os processos de deformação observados nos fenômenos de atrito devido ao contato metálico estejam bem documentados (BOWDEN; CHILDS, 1968, 1969; RIGNEY; HIRTH, 1979), a maior parte das análises atomísticas de fenômenos tribológicos (ZHANG; TANAKA, 1998; LI; XIA; YANG, 2012-01-01T00:00:00; KOMANDURI; CHANDRASEKARAN; RAFF, 2000) têm sido conduzidas considerando reticulados cristalinos perfeitos, de forma que simulações dos mecanismos de deformação durante o deslizamento entre superfícies com defeitos cristalinos não tem sido consideradas.

O comportamento plástico de cristais metálicos é controlado pelo movimento dos defeitos lineares na estrutura do cristal e por suas interações com os outros defeitos estruturais. Desde que a existência de discordâncias foi deduzida de forma independente por Taylor, Orowan, e Polyani (BORTOLETO; SOUZA;

CUPPARI, 2015), este tem sido um dos temas de profundos estudos, teóricos e experimentais, sobre a natureza física das discordâncias em várias escalas de comprimento. Em relação ao atrito, uma alteração da densidade de defeitos no material afeta as propriedades mecânicas, o que conduzirá a diferentes respostas tribológicas.

Quando o comportamento mecânico global de um componente metálico é considerado, o efeito da densidade de defeitos pode ser analisado por meio de dois pontos de vista diferentes. Taylor (1934) descreveu a deformação plástica em termos de discordâncias, de modo que a deformação plástica se dá pelo movimento de um grande número destes defeitos. A densidade de defeitos aumenta durante a deformação plástica, o que leva a interações tais como a sobreposição dos campos de deformação de discordâncias adjacentes, inibindo a movimentação das discordâncias e aumentando, gradualmente, a resistência do material conforme a deformação progride.

Por outro lado, de acordo com Frenkel (PADILHA, 1995), a resistência teórica de um material sem discordâncias seria extremamente alta, uma vez que a deformação plástica exigiria o rompimento simultâneo de muitas ligações atômicas, levando a forças de ruptura da ordem de dezenas de GPa. De fato, em um monocristal, é possível encontrar valores de resistência semelhantes aos previstos por Frenkel (SUN et al., 2008). Neste caso, a introdução de defeitos na estrutura resultaria em uma diminuição da resistência.

Analisando-se os fenômenos em escala atômica, a energia necessária para quebrar uma única ligação química é muito menor do que a necessária para quebrar todas as ligações de um plano de átomos. Portanto, devido à presença de discordâncias, um material pode plastificar-se em tensões mais baixas do que as tensões de resistência de um cristal perfeito e a energia necessária para mover discordâncias é menor do que a energia necessária para fraturar o material.

4 METODOLOGIA E PROCEDIMENTO DE CÁLCULO

Foram construídos modelos computacionais para a simulação do contato entre superfícies de materiais, tanto pela consideração de métodos atomísticos quanto considerando a mecânica do contínuo. Para os modelos atomísticos, utilizou-se a Dinâmica Molecular e, como geometrias de estudo, planos e blocos de átomos (como representações das asperezas que compõem a rugosidade das superfícies). Para as análises utilizando-se a mecânica do contínuo, utilizou-se o Método dos Elementos Finitos aplicado a modelos bidimensionais do contato entre superfícies.

Avaliaram-se dois problemas específicos: o deslizamento relativo e a aproximação e afastamento entre duas superfícies em contato, ambas na condição sem lubrificação. Para isso, foram executadas simulações numéricas com complexidade crescente, de forma a permitir um melhor entendimento dos fenômenos tribológicos característicos dos sistemas em estudo. Este aumento de complexidade se deu pelo modelamento em três etapas:

- 1 – *Modelagem da indentação e do escorregamento puro considerando a Dinâmica Molecular*
- 2 - *Modelagem da indentação por MD (2a) e pela mecânica do contínuo (2b) considerando adesão entre as superfícies (não tradicional para o método dos elementos finitos)*
- 3 - *Modelagem da indentação de uma aspereza sobre uma superfície plana seguida pela separação entre as duas superfícies considerando a falha/desgaste adesivo (não tradicional para o método dos elementos finitos)*

Em termos gerais, as simulações MD foram realizadas utilizando-se o programa *Large-scale Atomic Molecular Massively Parallel Simulator* (LAMMPS),

de código aberto e desenvolvido pelo Sandia National Laboratories. O comportamento dos materiais utilizados nas simulações foi determinado pelo seu potencial utilizando o *Embedded-Atom Method* (EAM) e as integrações foram realizadas pelo algoritmo de Verlet (PLIMPTON, 1995). A escolha do método EAM para a descrição da interação entre os átomos, em detrimento aos potenciais de interação de pares mais simples, baseia-se no fato de que o EAM fornece resultados mais realistas para o caso de materiais metálicos.

Já as simulações MEF foram, de maneira geral, realizadas utilizando-se o programa Abaqus (HIBBITT; SORENSEN, 2002), acoplado a sub-rotinas em linguagem FORTRAN desenvolvidas neste trabalho para a implementação do cálculo de forças de superfície e estudo do fenômeno de adesão.

A apresentação dos modelos e dos respectivos resultados obtidos será feita em 3 capítulos. Primeiramente, apresentam-se os modelos gerados e os resultados obtidos pela aplicação do método MD; em seguida, apresentam-se os modelos e resultados relativos às análises por MEF e, finalmente, traz-se um capítulo para correlacionar as duas abordagens, discutindo modelos equivalentes que foram analisados pela aplicação dos dois métodos.

5 ANÁLISES POR DINÂMICA MOLECULAR

Pretendeu-se, aqui, estudar as relações entre as variações na estrutura cristalina do material, a adesão e o atrito de deslizamento, por meio de simulações de dinâmica molecular da indentação seguida pelo deslizamento de um bloco de alumínio rígido sobre uma placa de alumínio deformável. Em particular, os modelos numéricos foram construídos para investigar a forma como a resposta tribológica é afetada por deformações prévias no sistema, o que inclui a quantidade de defeitos cristalinos na estrutura.

Duas condições específicas foram aplicadas aos sistemas:

- 1. indentação de um bloco rígido sobre um bloco deformável a uma velocidade constante
- 2. deslizamento horizontal do bloco rígido sobre a superfície deformável, a uma velocidade constante, após a indentação

Os modelos consideraram estruturas tridimensionais analisando materiais submetidos às condições sem deformação inicial e também casos com 5, 10, 15, 20, 25 e 30% de deformação. A influência da densidade de defeitos sobre o comportamento tribológico do sistema foi avaliada e o modelo é descrito a seguir.

5.1 DESCRIÇÃO DO MODELO

O sistema analisado nesta parte do trabalho é constituído por um bloco deformável e um penetrador rígido, como mostrado na Figura 14.

Foram construídos 7 modelos diferentes, a fim de que se tivessem 7 níveis iniciais diferentes na quantidade de defeitos na rede cristalina e também de tensão residual. As diferentes quantidades de defeitos cristalinos foram introduzidas por meio da imposição de 6 diferentes níveis de deformação (5, 10, 15, 20,

Figura 14 - Dimensões da geometria do sistema.

25 e 30%) para a conformação do bloco deformável antes do escorregamento do indentador rígido, somada à condição sem aplicação de deformação inicial e, por isso, sem a presença de defeitos na estrutura cristalina.

Dessa forma, cada modelo se divide em cinco etapas de simulação:

I *Montagem inicial do bloco deformável*

II *Equilíbrio do sistema*

III *Compressão do bloco inferior*

IV *Movimentação do indentador plano superior até a penetração do bloco deformável*

V *Escorregamento horizontal do indentador rígido sobre o bloco*

As interações entre os átomos de alumínio, em todas as simulações, foram descritas pela utilização de um potencial EAM desenvolvido por Mishin et al. (1999). O sistema é composto por aproximadamente 150.000 átomos e o penetrador e o bloco deformável são ambos constituídos de células de estrutura CFC com parâmetro de rede de 4,05 Å.

O bloco de átomos deformáveis foi organizado em três regiões, como mostrado na Figura 14, formadas por planos atômicos paralelos com estrutura CFC e orientação (100). A primeira região contém duas camadas atômicas que permanecem fixas ao longo de toda a simulação; a região intermediária tem uma espessura de 16,2 Å e os átomos que pertencem a esta região têm sua temperatura controlada, durante o processo de indentação e deslizamento, por um termostato do tipo Nosé/Hoover (CAMPRUBI, 2012); a terceira região tem espessura de 64,8 Å e é formada por camadas de átomos que estão livres para se movimentar e nenhum controle de temperatura é aplicado aos átomos desta região. Vale salientar que os átomos pertencentes a região do banho térmico (termostato) também estão livres para se movimentar.

Foram utilizadas condições de contorno de superfície livre na direção z , perpendiculares à superfície da placa, enquanto que condições de contorno periódicas foram impostas nas outras duas direções.

O penetrador é formado por planos atômicos paralelos de estrutura CFC e orientação (111), o que resulta em um cubo de aresta 20,25 Å. As diferentes orientações cristalográficas impostas aos átomos do bloco e do penetrador foram utilizadas a fim de evitar o acoplamento perfeito entre as duas superfícies.

Utilizou-se o programa LAMMPS (PLIMPTON, 1995), que permite a utilização do método Velocity Verlet (OROWAN, 1934) para computar a trajetória de cada partícula. O incremento (passo) de tempo utilizado foi de 0,001 ps. Além disso, o potencial utilizado considera um raio de corte de 6,28 Å, mantido constante ao longo do tempo e para todas as simulações. Átomos separados por uma distância superior ao raio de corte não exercem influência um sobre o outro. Considerou-se a distância de 6,58 Å como a separação máxima entre dois átomos para incluí-los na lista de possíveis pares (vizinhos). Aos pares de átomos adicionados a essa lista foram aplicadas as equações pertinentes ao método.

O bloco deformável foi, inicialmente, equilibrado termicamente a 300 K por

10 ps (equivalente a 10.000 iterações, com um passo de tempo de 0,001 ps) usando um termostato Nose-Hoover (CAMPRUBI, 2012), aplicado a todos os átomos. A etapa de equilíbrio é idêntica para as 7 situações analisadas. Isso atualiza a posição e as velocidade dos átomos a cada iteração, mantendo aproximadamente constantes o volume ocupado e a temperatura do sistema (*ensemble NVT*) (FRENKEL; SMIT, 2001). Para as etapas seguintes da simulação, a região intermediária do bloco deformável funcionava como um termostato. O algoritmo de Nosé-Hoover foi aplicado durante todas as etapas de simulação, o que significa que as velocidades dos átomos foram modificadas durante a integração ao longo do tempo nos estágios de equilíbrio, deformação, indentação e deslizamento para manter a temperatura constante a 300K.

Após a fase de equilíbrio, diferentes níveis de tensão compressiva foram impostas ao corpo deformável, deformando-o em 5%, 10%, 15%, 20%, 25% e 30% da espessura inicial a uma temperatura aproximadamente constante em torno de 300K.

A fim de garantir que as etapas de indentação e deslizamento, nas sete condições avaliadas, fossem realizadas tendo os sistemas as mesmas dimensões com diferentes níveis de deformações (BORTOLETO; SOUZA; CUPPARI, 2015), foi necessário iniciar a deformação a partir de dimensões iniciais diferentes, conforme apresentado na Tabela 2 e ilustrado na Figura 15. Aqui, salvo especificado explicitamente, entende-se por dimensão, o número de células unitárias presentes em cada direção espacial, ou seja, os valores estão diretamente relacionados ao parâmetro de rede cristalina do material, que será denotado por a_0 . A Figura 15 ilustra as dimensões iniciais de cada modelo.

Imediatamente antes da fase de indentação, a distância entre o bloco deformável e o penetrador rígido é 20,25 Å, o equivalente a 5 células unitárias. O penetrador é, então, movimentado $6 a_0$ na direção vertical, em direção à superfície do bloco deformável, resultando na penetração deste último. O bloco rígido é, então, deslocado horizontalmente sobre a superfície da bloco defor-

Tabela 2 - Dimensões do bloco, antes e após a fase de deformação (em células unitárias - a_0).

Caso	Dimensões Iniciais	Deformação Aplicada	Dimensões Finais
	(x,y,z)	(%)	(x,y,z)
1	50x35.0x20 a_0^3	0%	50x35x20 a_0^3
2	50x36.8x19 a_0^3	5%	50x35x20 a_0^3
3	50x38.9x18 a_0^3	10%	50x35x20 a_0^3
4	50x41.2x17 a_0^3	15%	50x35x20 a_0^3
5	50x43.6x16 a_0^3	20%	50x35x20 a_0^3
6	50x46.6x15 a_0^3	25%	50x35x20 a_0^3
7	50x50.0x14 a_0^3	30%	50x35x20 a_0^3

mável. Os fenômenos de escoamento e endurecimento (encruamento) foram quantificados ao longo da compressão, com base numa análise do número de coordenação dos átomos do sistema e de um parâmetro de simetria/assimetria local dos átomos em diferentes momentos da simulação.

A fim de proporcionar uma melhor compreensão dos fenômenos tribológicos, especialmente em termos de magnitudes das forças envolvidas na interação entre as superfícies, a movimentação das partes do sistema sempre foram realizadas a velocidades constantes, tanto durante a penetração quanto durante o deslizamento. Esta configuração é semelhante à configuração descrita por Sakai (2003) para um ensaio de indentação com taxa de penetração constante seguido por um teste de riscamento em profundidade de penetração constante. Esta abordagem tornou possível obter, como resultados da simulação, as forças de penetração e atrito geradas no par de contato analisado. Em todos as 7 situações que foram analisadas, o deslizamento ocorreu a uma velocidade constante de 0,1 Å/ps (10 m/s).

Durante toda a simulação, as variáveis do sistema, tais como temperatura, energia total, energias cinética e potencial, tensões e também as forças de reação resultantes da penetração e do deslizamento do penetrador foram obtidas. A fim de obter uma indicação da presença de defeitos nos cristais, a configuração

Figura 15 - Configuração dos grupos de átomos no sistema modelado.

dos átomos foi analisada utilizando-se o parâmetro de centossimetia (CS) (KELCHNER; PLIMPTON; HAMILTON, 1998) bem como a análise do número de coordenação (CNA) (GUBICZA et al., 2004). O método CNA atribui um tipo de estrutura (CFC, CCC, HCP, etc.) para cada átomo no sistema considerado e é utilizado para verificar se há variações locais na estrutura cristalina. O parâmetro CS é uma medida útil da desordem local do reticulado cristalino em torno de um átomo e pode ser utilizado para caracterizar se o átomo é parte de uma estrutura perfeita ou um defeito local.

Para fins de pós-processamento dos resultados, foi utilizado o programa OVITO (STUKOWSKI, 2010).

5.2 RESULTADOS

Iniciando a apresentação de resultados por aqueles que foram obtidos com as simulações por dinâmica molecular, a Figura 16 apresenta a variação da temperatura do sistema para o caso que considera 10% de deformação inicial. Estes dados permitem analisar o efeito da presença do termostato para o equilíbrio da temperatura do sistema. Note-se que a temperatura se mantém muito próxima de 300 K nos primeiros 110 ps da análise. Neste instante, percebe-se um pequeno salto na curva, provavelmente devido à penetração inicial do bloco rígido para dentro do bloco deformável. O ligeiro aumento na temperatura pode ser atribuído à deformação do material devido à indentação e à conversão de energia cinética do bloco deslizante em calor. O deslizamento horizontal entre os blocos se inicia aos 210 ps do processo e a temperatura se mantém em torno de uma média de 325K. Pode-se observar o mesmo comportamento quando se analisam as condições de 0, 5, 15, 20, 25 e 30% de deformação inicial.

Figura 16 - Variação da temperatura durante a simulação para a condição de 10% de deformação inicial.

A Figura 17 apresenta uma vista lateral do grau de desordem dos átomos no sistema para o instante em que termina a etapa de imposição de deformação plástica ao bloco. A Figura faz referência à condição de 10% de deformação inicial. Os átomos que estão coloridos em tons de azul indicam que há simetria em suas posições atômicas, ou seja, há condições que indicam reticulados perfeitos ou quase perfeitos. Já no entorno das regiões que apresentam coloração em tons mais próximos da cor vermelha, pode-se assumir que há desordem local do reticulado. É ainda possível observar grupos de átomos com maior grau de desordem concentrados ao longo de linhas, o que sinaliza a presença de defeitos de estrutura linear.

Figura 17 - Parâmetro de centrossimetria (CS) da rede cristalina na condição de deformação inicial de 10%.

Os resultados apresentados na Figura 18 são semelhantes aos da Figura 17, mas referem-se a uma outra vista em corte longitudinal do sistema ($y = 17,5 a_0$) e incluem os dados das condições de 0%, 5%, 15%, 20%, 25% e 30% de deformação. Um aumento na taxa de compressão resulta em uma diminuição na fração de átomos de cor azul, indicando um aumento na quantidade de defeitos na estrutura do cristal. Assim, a imposição de diferentes níveis de deformação do material permitiu a geração de estruturas atômicas com diferentes quantidades de defeitos cristalinos, ou seja, maior deformação resultou em mais defeitos no centro do bloco deformável. Nota-se, ainda, que uma desorganização superficial se desenvolve devido ao fato de que os defeitos que se originaram no centro do bloco afloram à superfície, criando o que seria uma "rugosidade".

As fases subsequentes da simulação foram utilizadas para correlacionar a quantidade de defeitos com o comportamento tribológico do sistema.

Figura 18 - Medida da desordem do reticulado cristalino nas condições de 0%, 5%, 10%, 15%, 20%, 25% e 30% de deformação inicial.

Esperava-se, inicialmente, que a presença de uma maior quantidade de defeitos (o que está associado a maiores níveis de pré-tensão) nos sistemas modelados por MD conduziria a uma maior resistência ao desgaste e menor atrito. A maior resistência ao desgaste seria verificada por meio de uma diminuição na quantidade de material que se acumularia em frente ao penetrador, enquanto que o menor atrito seria verificado por uma diminuição no valor da força na direção contrária ao movimento do penetrador. Essa expectativa provinha da observação do comportamento mecânico dos materiais metálicos em nível macroscópico, em que o fenômeno de deformação plástica proporciona aumento na resistência do material.

A Figura 19 mostra a configuração final de todas as sete condições analisadas

neste trabalho, terminado o estágio de deslizamento. Nesta figura, linhas tracejadas foram desenhadas para identificar a posição do penetrador rígido. Embora a quantidade de material aderido à proa do penetrador tenha, aparentemente, diminuído à medida que se aumentou o nível de deformação imposto ao bloco deformável, as sete condições analisadas não apresentaram uma tendência clara em termos da quantidade de átomos que se acumula em torno do penetrador. Em princípio, estes resultados poderiam sugerir que a deformação inicial não afetou significativamente a quantidade de átomos que o penetrador remove do bloco deformável. Entretanto, deve-se reconhecer que a acumulação de material em torno do penetrador pode ser afetada por outros fenômenos, tais como o "*jump to contact*", pelo qual os átomos da superfície do material são atraídos para a superfície do penetrador para diminuir a energia do sistema. Conforme o penetrador se movimenta, átomos do bloco podem aderir, não apenas para a face frontal do penetrador, mas também em suas laterais.

O efeito do nível de deformação inicial, que corresponde ao efeito da quantidade de defeitos na estrutura cristalina, torna-se mais perceptível quando se comparam os resultados em termos das forças que surgem entre os dois blocos. A Figura 20 apresenta, para condições de 0 e 30% de deformação inicial, a evolução da força resultante lateral que age sobre o penetrador e que se opõe ao movimento horizontal entre as duas superfícies em função do tempo. Ou seja, trata-se do somatório das forças laterais que atuam sobre cada átomo do penetrador, e que compõem a força de atrito do sistema. Para todas as condições, o comportamento da força lateral é negativo após 210 ps, que representa o instante quando o deslizamento começa. No entanto, apesar da dispersão em dados, é possível observar que o valor médio da força se torna mais negativo conforme o nível de pré-deformação diminui. A fim de evitar a sobreposição de linhas no gráfico, apenas os resultados para as condições de 0% e 30% de deformação são apresentadas. Os resultados das condições intermediárias são tais que as linhas médias correspondentes se acomodam

Figura 19 - Parâmetro de centrossimetria (CS), para cada uma das 7 condições analisadas após finalizado o deslizamento do indentador.

inteiramente dentro do espaço delimitado pelas duas linhas na Figura 20. A Tabela 3 apresenta os valores médios e desvios-padrão das forças que atuam no penetrador durante a fase de deslizamento.

A Figura 21 ilustra a variação das forças normais que se originam da resistência à penetração do bloco inferior. Um pico positivo pode ser observado próximo ao instante de 210 ps, quando a penetração vertical termina e a fase de deslizamento começa. O pico negativo perto de 170 ps demonstra o fenômeno de "*jump to contact*", o que indica a distância de separação entre átomos para a qual forças atrativas aparecem. Pode-se observar que os maiores valores de força vertical ocorrem quando a profundidade de penetração máxima é atingida, o que acontece próximo do instante de 210 ps.

Ainda em relação à Figura 21, as diferenças entre os valores da força de reação

Figura 20 - Variação da força lateral (atrito) para as condições de 0% e 30% de deformação inicial.

vertical no instante do fenômeno de "*jump to contact*" (170 ps) indicam que a quantidade de defeitos no sistema afeta a adesão entre superfícies, atuando na energia de átomos que estão próximos à superfície. As oscilações dos valores de forças observadas nas curvas das Figuras 20 e 21 são um indicativo da ocorrência do fenômeno de *stick-slip*.

A correlação entre a força lateral (força de "atrito") e os níveis de deformação inicial (e também a densidade de defeitos na estrutura do cristal) é mostrada na Figura 22. Os resultados mostram que um aumento da densidade de defeitos resultou numa redução nos valores da força de atrito. Esta figura indica, ainda, que o número de defeitos no cristal não foi suficientemente elevado para promover restrição significativa ao movimento entre os corpos. Tendências similares são observadas na Figura 23, que apresenta a força máxima de penetração em função dos níveis de deformação inicial.

Tais resultados indicam que o número de defeitos presentes no cristal não foi suficiente para promover uma restrição significativa ao movimento desses defeitos. O tamanho do sistema pode ter contribuído para esse resultado, de

Tabela 3 - Médias e desvios-padrão das forças de atrito e de penetração.

Caso	Deformação Aplicada	Força Lateral (Atrito)	Máxima Força de Penetração	Força Média de Penetração
1	0%	23.80 ± 5.07	88.86	35.12 ± 6.13
2	5%	21.19 ± 5.15	83.52	31.70 ± 7.08
3	10%	20.32 ± 5.70	77.37	34.04 ± 9.35
4	15%	17.37 ± 4.32	75.55	24.68 ± 11.63
5	20%	14.89 ± 6.59	73.56	49.63 ± 7.93
6	25%	14.90 ± 4.55	71.36	43.91 ± 9.63
7	30%	13.19 ± 4.97	59.48	31.83 ± 8.81

Figura 21 - Variação da força de reação vertical, oposta à penetração do penetrador rígido, durante o movimento vertical e de deslizamento.

modo que um sistema com mais átomos poderia resultar em mais defeitos no cristal e, conseqüentemente, em um intertravamento entre os defeitos, caso estes sejam discordâncias do material.

Os resultados nas Figuras 22 e 23 parecem estar de acordo com o fato de que, para uma densidade de discordâncias moderada, o material exibirá uma resistência mecânica menor (MITTAL, 2009; DIETER, 1995). Partindo-se de um ponto de vista físico, os resultados indicam que o modelo sem aplicação de

Figura 22 - Variação da força de atrito, devido à quantidade de defeitos cristalinos no material.

Figura 23 - Variação da força de penetração máxima devido à quantidade de defeitos cristalinos do material.

deformação inicial se aproxima do comportamento de um cristal perfeito, com uma resistência teórica muito alta, ou seja, em uma escala atômica, a presença de defeitos diminui a resistência e promove a deformação plástica, resultando em forças mais baixas necessárias para mover o penetrador em relação ao bloco.

Uma avaliação da estrutura cristalina do sistema foi realizada com base na análise do número de coordenação e em uma análise da vizinhança (STUKOWSKI, 2012) (Figura 24). A presença de átomos com estrutura hexagonal compacta (HCP) sugere a presença de defeitos lineares que são semelhantes a discordâncias parciais. Em algumas regiões, as estruturas que foram formadas pelas simulações apresentam semelhanças com uma estrutura de sub-células (DIETER, 1995). A presença de átomos organizados na estrutura HCP poderia explicar a tendência observada na Figura 22, uma vez que um aumento no número de átomos com configuração HCP poderia facilitar o movimento de discordâncias parciais e, conseqüentemente, resultar em forças mais baixas necessárias para promover a deformação. Além disso, parece haver uma correlação direta entre a quantidade de células CFC (Figura 25) e as forças de atrito e de penetração, para cada nível de deformação mostrado nas Figuras 22 e 23. Em relação ao número de átomos num estado amorfo, uma correlação inversamente proporcional foi observada.

No que diz respeito à relação entre a resistência do cristal e a densidade de defeitos na estrutura, Gubicza et al. (2004) verificaram que a resistência máxima à deformação a alta tensão é determinada pelo módulo de cisalhamento e o valor de saturação da densidade de discordâncias de acordo com a equação de Taylor (TAYLOR, 1934):

$$\tau_{Taylor} = \tau_0 + \alpha M G b \rho^{\frac{1}{2}} \quad (70)$$

onde τ_0 é a tensão de cisalhamento necessária para mover uma única discordância na ausência de outras, α é uma constante que depende da densidade de discordâncias (ρ), G é o módulo de cisalhamento, b é o comprimento do vetor de Burgers e M é o fator de Taylor. Esta é uma equação que descreve o comportamento de cristais reais com defeitos na escala macroscópica e relaciona a resistência ao escoamento à quantidade de discordâncias no material.

Por outro lado, a tensão de cisalhamento necessária para a deformação de um cristal perfeito foi calculada pela primeira vez por J. Frenkel (PADILHA, 1995).

Figura 24 - Análise de coordenação mostrando diferentes estruturas cristalinas.

Figura 25 - Percentual de diferentes estruturas cristalinas no sistema.

A análise de Frenkel conduz a uma tensão teórica máxima de cisalhamento de:

$$\tau = \frac{c}{a} \frac{G}{2\pi} \quad (71)$$

onde G é o módulo de cisalhamento, a e c são as distâncias entre os átomos em cada direção do plano atômico que está sendo considerado.

Assim, a tensão teórica de Frenkel indica a tensão máxima que um material pode suportar e que ocorrerá para a condição sem defeitos cristalinos. Qualquer defeito adicionado ao material levará a um estado menos resistente, o que significa que existe uma relação decrescente entre a resistência do material e a quantidade de defeitos. Por outro lado, a equação de Taylor indica, com uma função monotonicamente crescente, que o aumento dos níveis de resistências é obtido aumentando-se o número de defeitos (discordâncias).

As duas teorias acima podem ser consideradas como complementares, sendo as abordagens de Frenkel e Taylor representativas, sob uma visão da mecânica do contínuo, respectivamente, das baixas e altas densidades de defeitos/discordâncias. Seguindo estas ideias, os resultados obtidos neste estudo estariam próximos da condição de cristal ideal, em que o aumento do número de defeitos na rede cristalina é responsável por uma redução na resistência mecânica do material.

6 ANÁLISES POR ELEMENTOS FINITOS

O contato adesivo não lubrificado em corpos nanométricos, contínuos e homogêneos foi modelado considerando-se o caso em que um penetrador aplica cargas normais em uma superfície plana. Uma análise elásto-plástica pelo Método dos elementos finitos foi utilizada para capturar os fenômenos físicos que promovem a transferência de material entre as superfícies, permitindo a avaliação do efeito do tamanho do sistema e as propriedades do material sobre as forças de adesão. A falha do material, o que leva à transferência de material entre as superfícies, foi estimada utilizando-se o critério de máxima tensão principal para sua nucleação. Isso permitiu a obtenção de informações sobre as condições essenciais para promover o desgaste devido à adesão.

As simulações por MEF foram realizadas utilizando-se o programa Abaqus e sub-rotinas desenvolvidas em linguagem FORTRAN que implementam o cálculo de forças de superfície originadas pela atração ou repulsão entre átomos de cada superfície. As análises foram conduzidas para investigar o problema do contato de um indentador quadrado com comportamento mecânico elástico-linear, que pressiona um bloco deformável elastoplástico. Para este fim, o contato unidirecional adesivo elástico de uma aspereza deformável (quadrada ou retangular), com uma superfície submetida ao estado plano de deformações foi modelado. As forças de adesão, que não são consideradas nas formulações convencionais dos programas para simulação por MEF, foram introduzidas nos sistemas analisados neste trabalho como uma função da separação entre as duas superfícies em contato e foram aplicadas como forças de superfícies.

De acordo com Hamaker (1937) *apud* (ISRAELACHVILI, 2011), as interações de van der Waals entre um par de objetos podem ser obtidas pela soma, aos pares, das energias que atuam entre todas as moléculas ou átomos em um corpo com todos aqueles do outro corpo. Dessa forma, a abordagem de Hamaker foi uma primeira aproximação para as interações de van der Waals, que mais tarde

foi complementada por outras teorias.

Assim, conforme se dá a aproximação entre superfícies, uma força superficial de atração surge, conforme descrito no gráfico da Figura 26. A força, que se origina pela interação entre cada par de átomos foi integrada para todos os átomos de cada superfície e seus efeitos somados aos fenômenos de deformação inerentes do contato entre as superfícies.

Figura 26 - Comportamento da força entre partículas (superfícies) em função da sua separação.

Além de considerar o surgimento de forças adesivas entre as superfícies, as simulações pelo Método dos Elementos Finitos avaliaram as consequências da falha adesiva, com arrancamento de material e consequente avaliação do nível de desgaste provocado, para a condição de contato seco.

6.1 DESCRIÇÃO DO MODELO

Utilizou-se a modelagem quasi-estática pelo método implícito para se determinar as tensões, deformações e deslocamentos do sistema e também para avaliar o processo de falha do material utilizando-se da ferramenta XFEM (eXtended Finite Element Method) disponível no programa Abaqus. A geometria do sistema é apresentada na Figura 27, que indica dimensões compatíveis com o contato de uma aspereza nanométrica que indenta uma superfície plana. Diferente de alguns dos modelos analíticos de adesão, tais como o modelo de DMT, neste trabalho, a interação entre as faces laterais do penetrador e o bloco inferior foi desprezada.

Dois comprimentos diferentes de aresta do penetrador foram considerados nas simulações, como também ilustrado na Figura 27. A malha de elementos finitos foi composta de 1092 nós e 1000 elementos na configuração A, e 982 nós e 900 elementos para a configuração B.

Em termos de condições de contorno, o bloco inferior foi mantido fixo por sua base, e ambas as linhas laterais tiveram seu movimento restrito na direção x . O penetrador foi autorizado a se mover somente na direção y , perpendicular às superfícies em contato. Impôs-se a carga normal por meio de duas profundidades de penetração do penetrador sobre o bloco, 0,1 nm e 0,2 nm, que serão designadas por 1 e 2, respectivamente. Este movimento foi aplicado à linha superior do penetrador. O tamanho de incremento numérico foi restrito para ser sempre inferior a 0,01 nm/incremento, de forma a evitar variações bruscas nas forças de adesão.

Reconhece-se que um modelo que utilizasse as formulações da Dinâmica Molecular seria mais indicado para simulações de sistemas com tamanhos dessa ordem. No entanto, a abordagem por um método que aplique formulações da mecânica do contínuo, ainda que nesta escala, pode ser expandida para sistemas maiores, de uma forma que pode ser mais simples do que em formulações

Figura 27 - Tamanho do sistema e detalhes da malha de elementos finitos.

atomísticas.

De modo a evitar inconsistências, o tamanho de cada elemento foi escolhido para ser maior do que um diâmetro atômico. Os valores de profundidade de penetração e tamanho da região de contato foram escolhidos de modo tal que fossem comparáveis às simulações por dinâmica molecular apresentadas anteriormente.

Os dados mais importantes para o modelo de elementos finitos consistem em (i) geometria interfacial; (ii) as propriedades mecânicas dos materiais em contato, que serão posteriormente descritos em maiores detalhes; e (iii) os parâmetros de adesão (constantes de Hamaker). Os dados de entrada do modelo foram variados de forma paramétrica e sistemática para se obter a variabilidade esperada, com 24 combinações, como descrito na Tabela 10. Na tabela, observa-se que três materiais foram analisados : safira, cobre e aço AISI H13.

As propriedades constitutivas elasto-plásticas dos materiais foram obtidas a partir da literatura existente (HARVEY; METALS, 1982; IWASA; UENO; R.C., 1981; WIEDERHORN, 1969) e são apresentadas na Tabela 5. Foi imposto que apenas os elementos do bloco inferior poderiam falhar e serem transferidos para o penetrador. Assim, nenhuma transferência de material do penetrador ao bloco inferior foi permitida.

Neste trabalho, um único procedimento foi adotado com relação à utilização

Tabela 4 - Descrição dos casos analisados nas simulações FEM

Caso	Indentador	Bloco	Profundidade Penetração	Tamanho do Indentador
1	Safira	H13	1	A
2	Safira	H13	1	B
3	Safira	H13	2	A
4	Safira	H13	2	B
5	Safira	Cobre	1	A
6	Safira	Cobre	1	B
7	Safira	Cobre	2	A
8	Safira	Cobre	2	B
9	H13	H13	1	A
10	H13	H13	1	B
11	H13	H13	2	A
12	H13	H13	2	B
13	H13	Cobre	1	A
14	H13	Cobre	1	B
15	H13	Cobre	2	A
16	H13	Cobre	2	B
17	Cobre	H13	1	A
18	Cobre	H13	1	B
19	Cobre	H13	2	A
20	Cobre	H13	2	B
21	Cobre	Cobre	1	A
22	Cobre	Cobre	1	B
23	Cobre	Cobre	2	A
24	Cobre	Cobre	2	B

Tabela 5 - Propriedades Mecânicas utilizadas nas simulações MEF

	Material		
	Aço H13	Cobre	Safira
Módulo Elástico [GPa]	210	117	345
Tensão de escoamento [MPa]	1650	35	400
Resistência Mecânica [MPa]	1860	270	415
Coeficiente de Poisson	0.30	0.34	0.29
Tenacidade à Fratura [MPa $\sqrt{m}$]	35	15	3.14
Energia de Fratura [J/m^2]	3550	1923	7.3
Densidade [kg/m^3]	7800	8950	3980

do método XFEM, embora se reconheça que melhorias adicionais sejam possíveis na descrição do comportamento do cobre e de outros materiais dúcteis.

A constante Hamaker, A (em Joules), representa a magnitude das forças de van der Waals entre corpos macroscópicos e pode ser aproximadamente definida como uma propriedade do material. Os valores utilizados nas simulações numéricas realizadas neste trabalho são apresentados na Tabela 6 e foram obtidos de Israelachvili (2011). Propriedades de óxido de ferro foram utilizadas para definir os parâmetros de adesão (constantes Hamaker) no contato de superfícies de aço H13, uma vez que as superfícies de ferro e aço são encontradas, geralmente, revestidas com camadas de óxido. Ao mesmo tempo, as propriedades mecânicas do aço H13 foram considerados para o material abaixo da superfície.

Tabela 6 - Valores da constante de Hamaker para alguns pares de materiais

Superfície 1 (indentador)	Superfície 2 (bloco)	Constante de Hamaker (J)	
Safira	Safira	15.6e-20	* ⁵
Safira	Aço H13	18.1e-20	** ⁶
Safira	Cobre	25.0e-20	**
Aço H13	Aço H13	21.0e-20	*** ⁷
Cobre	Cobre	40.0e-20	*
Aço H13	Cobre	29.0e-20	**

Com base nos potenciais de força e nas equações 67 e 69, uma sub-rotina FORTRAN (DLOAD) foi desenvolvida, compilada e conectada ao código de elementos finitos Abaqus para calcular as forças de adesão durante a aproximação e separação entre superfícies, como função da distância de separação entre cada ponto das superfícies e da constante de Hamaker relacionada ao par de materiais em contato.

Figura 28 - Acoplamento entre software MEF e sub-rotina FORTRAN.

A sub-rotina itera para cada incremento de tempo e para cada elemento procurando pelo elemento mais próximo da superfície oposta, atualizando o valor da distância de separação entre superfícies para cada ponto de integração das superfícies.

A separação é então usada para alimentar a Equação 67, que fornece uma força posteriormente aplicada à aresta externa dos elementos de cada superfície.

⁵Fonte: (MASLIYAH; BHATTACHARJEE, 2006)

⁶Obtido com o uso das Equações apresentadas no Apêndice A

⁷Valores para o óxido de ferro. Fonte: (ISRAELACHVILI, 2011)

Os valores para as constantes de Hamaker apresentados na Tabela 6 foram utilizados nesta etapa.

Forças adesivas produzem tensões e deformações que podem localmente superar a resistência do material e levar à sua falha e, conseqüentemente, à transferência de material entre as superfícies em contato. Durante a separação entre as superfícies, o modelo se dedica à análise da falha adesiva. A transferência de material entre as superfícies devido à adesão foi modelada por meio de critérios iniciação e propagação de dano (XFEM), de uma forma que os parâmetros mecânicos que têm influência sobre esses fenômenos pudessem ser investigados. Variações das forças de interação durante a aproximação e separação foram calculadas. Com esta técnica, uma trinca é nucleada com base num critério de iniciação de fratura, que, neste trabalho, foi considerada a tensão máxima principal, e propaga-se de acordo com um critério de evolução do dano com base na taxa de libertação de energia.

Um fluxograma simplificado que descreve o processo de análise iterativa e o acoplamento entre a sub-rotina FORTRAN desenvolvida neste trabalho e o programa de MEF é ilustrado na Figura 28.

6.2 RESULTADOS

O desgaste relacionado aos fenômenos de adesão no contato não lubrificado pôde ser estimado com base na quantidade de material transferido entre o bloco metálico e o indentador elástico. Esta transferência foi avaliada para as 24 simulações da Tabela 10 e, com base nos resultados que foram obtidos (Tabela 7)⁸, foi proposto um mapa de desgaste adesivo (Figura 31), a ser discutido mais adiante.

A morfologia da falha adesiva também foi avaliada. A Figura 29 mostra as quatro configurações (padrões) diferentes de falha adesiva e de transferência

⁸Como se trata de análise bidimensional, os valores são em nm^2 .

Tabela 7 - Quantidade de material transferido entre superfícies.

Material Transferido		Material Transferido		Material Transferido	
Caso		Caso		Caso	
1	0.00	9	0.00	17	0.00
2	0.00	10	0.00	18	0.00
3	0.00	11	0.00	19	0.00
4	0.00	12	0.00	20	0.00
5	1.44	13	0.41	21	0.49
6	0.25	14	0.28	22	0.30
7	3.25	15	6.31	23	3.20
8	1.81	16	0.89	24	0.28

de material que foram observadas como resultado das 24 combinações dos parâmetros de entrada analisados. As configurações de falha observadas em cada caso, estão indicadas na Tabela 8.

Figura 29 - Os quatro padrões observados para o desgaste adesivo e transferência de material.

As quantidades de material transferido a partir de uma superfície para a

outra dependem do módulo elástico do bloco inferior e de outras propriedades mecânicas. Além disso, materiais que apresentam menor dureza resultaram em uma maior transferência de material. O aumento dos valores da constante de Hamaker, bem como o aumento das profundidades de penetração também contribuíram para a falha do material e posterior destacamento de uma faixa superficial transferida para a superfície do indentador.

Tabela 8 - Diferentes padrões observados em resultados de desgaste adesivo.

Condição Final	Casos
Sem desgaste adesivo, Sem falha	01, 02, 03, 04, 10, 11, 12, 17, 18, 19
Sem desgaste adesivo, mas há nucleação da falha	09, 20
Destacamento de uma camada fina	06, 13, 14, 16, 21, 22, 24
Destacamento de uma camada espessa	05, 07, 08, 15, 23

A principal razão para a ocorrência do destacamento de camadas espessas de material do bloco inferior parece ser o aumento da profundidade de penetração, o qual, em associação com o aumento da área de contato, conduz aos valores mais elevados de perda de material.

É possível, ainda, constatar que, para o bloco de aço H13, considerado recoberto por óxido, um aumento simultâneo de carga (profundidade de penetração), tamanho do penetrador e afinidade química não foi capaz de produzir transferência de material. Este resultado pode indicar que os valores mais elevados das propriedades mecânicas como o módulo elástico podem minimizar os efeitos de adesão.

Considerando-se o ciclo de carregamento e descarregamento no contato, uma histerese de adesão pode ser definida se existir uma diferença entre as forças exercidas durante as fases de carregamento e descarregamento. Este fenômeno não é capturado por teorias clássicas de contato, tais como os modelos de Hertz, JKR e de Maugis-Dugdale, sendo atribuída a efeitos dinâmicos, tais como aqueles devidos à viscoelasticidade do material, temperatura ambiente e humidade da superfície, ou ainda atribuído a reações químicas específicas

do material (KESARI et al., 2010). No entanto, muitas vezes, medições quase estáticas do contato também exibem histerese e é possível ter a histerese dependente da profundidade de penetração durante contatos elásticos perfeitos.

Figura 30 - Histerese no contato adesivo. (a) Sem transferência de material. (b) Com transferência de material.

A Figura 30 mostra um exemplo da histerese no comportamento da força de reação observado nos resultados numéricos deste trabalho. Estes resultados são semelhantes aos capturados por simulações de dinâmica molecular (KESARI et al., 2010), mas aqui ocorrem através de uma abordagem numérica baseada na mecânica do contínuo.

Foi possível identificar dois comportamentos diferentes nas curvas de histerese. A primeira (Figura 30a), relacionada às simulações que não resultaram na transferência de material entre as superfícies, mostra um pico de força no descarregamento ligeiramente maior do que o pico relacionado ao estágio de carregamento (aproximação). Por outro lado, para as situações em que se observou a transferência de material entre superfícies, por exemplo, no caso 14 (Figura 30b), o pico de força na separação foi menos aparente ou mesmo ausente e sempre menor do que o pico presente na fase de aproximação.

Uma possível explicação para a observação do fenômeno de histerese neste trabalho é que a falha adesiva pode promover a perda de energia devido à propagação de trincas no material, levando a uma menor energia necessária

para separar um par de corpos em contato. Por outro lado, um aumento da perda de energia devido à falha do material é equivalente a um aumento de rigidez adesiva na interface de contato. Esta observação parece estar de acordo com o trabalho de Zheng e Ya-Pu (2004), em que a histerese de adesão é explicada pela suposição de que diferentes quantidades de trabalho precisam ser realizadas quando duas superfícies são aproximadas até a efetivação do contato e separadas até a eliminação do contato.

Figura 31 - Desgaste adesivo em função do parâmetro α_{adesao} .

As tentativas para organizar os resultados obtidos neste trabalho levaram à definição de um parâmetro para estimar o desgaste adesivo. Este parâmetro é apresentado na Equação 72, onde h_{depth} é a profundidade de penetração, L_{real} é a área real de contato, A_{12} é a constante de Hamaker característica para cada par de materiais, E é o módulo elástico e $\sigma_{ruptura}$ é a resistência do material à falha. Este parâmetro é análogo à equação de Archard, uma vez que se refere a propriedades mecânicas e características do sistema para avaliar o desgaste, mas é dedicado à análise da adesão e, por enquanto, limitada à nanoescala.

$$\alpha_{adesao} = \frac{h_{depth} L_{real} A_{12}}{(E_{bloco}/E_{indentador}) \sigma_{ruptura}} \quad (72)$$

A Figura 31 foi gerada com base nesta expressão, resultando em uma proposta para um mapa de desgaste relativo ao mecanismo de adesão. Na análise da Figura 31, podem-se identificar três regiões diferentes. A primeira, para valores de α_{adesao} entre 0 e 25, pode estar relacionada à ausência de desgaste adesivo; valores entre $25(10^{-29}nm^6)$ e $125(10^{-29}nm^6)$ podem estar associados a uma condição de desgaste adesivo moderado, enquanto que os valores de α_{adesao} superiores a $125(10^{-29}nm^6)$ indicam uma condição do desgaste severo.

7 ANÁLISES COMPARATIVAS POR MEF E POR MD

Uma nova série de simulações foi realizada a fim de permitir a correlação entre o modelamento numérico feito por meio da Dinâmica Molecular e os casos analisados pela Mecânica do Contínuo, via MEF. Foram realizadas simulações por MD e por MEF reproduzindo unicamente a condição da indentação de um penetrador cúbico sobre um bloco metálico deformável, de modo a permitir a comparação entre os resultados obtidos com a utilização da sub-rotina para cálculo das forças de adesão e desgaste adesivo com os resultados obtidos via técnicas de dinâmica molecular. A descrição destes modelos adicionais e dos resultados obtidos são apresentados neste capítulo.

7.1 DESCRIÇÃO DO MODELO

Considerou-se a geometria cujas dimensões já foram descritas pela Figura 27 e, a partir dessa geometria, foram elaborados modelos em MEF e MD. Os modelos MD, tridimensionais, consideraram o contato unidirecional entre um indentador cúbico rígido que se aproxima e penetra um bloco deformável, afastando-se em seguida. Indentador e bloco deformável foram considerados como sendo formados pelo mesmo material, escolha realizada para simplificar a utilização dos potenciais interatômicos, garantindo que a relação entre superfícies pudesse ser adequadamente representada por potenciais conhecidos e estabelecidos na literatura. Assim, utilizaram-se os potenciais EAM para o alumínio (MISHIN et al., 1999), cobre (MENDELEV et al., 2008) e ferro (ZHOU; JOHNSON; WADLEY, 2004). Assim como nas análises por MD anteriores, considerou-se que penetrador e bloco têm orientações cristalográficas diferentes: orientação (100) para o bloco e (111) para o penetrador.

Em relação aos modelos em MEF, adicionou-se, aos 24 casos já apresentados no capítulo anterior, a condição do contato entre duas superfícies de alumí-

nio, situação similar aos casos analisados pelas simulações de MD também apresentadas anteriormente.

As propriedades do alumínio utilizadas nos modelos por Elementos Finitos são apresentadas na Tabela 9 (COMMITTEE, 1990). Utilizou-se como constante de Hamaker o valor de $36.7E-20$ J (ISRAELACHVILI, 2011).

Tabela 9 - Propriedades do alumínio utilizadas nas simulações por MEF. Fonte: (COMMITTEE, 1990)

Propriedades	Valores
Módulo Elástico [GPa]	68
Tensão de Escoamento [MPa]	11
Resistência Mecânica [MPa]	50
Coeficiente de Poisson	0.29
Tenacidade à Fratura [MPa $\sqrt{m}$]	35
Energia de Ruptura [J/m^2]	2882
Densidade [Kg/m^3]	2698

As condições de contorno são as mesmas descritas no capítulo referente às análises por elementos finitos, com a única diferença de que analisaram-se neste ponto, 3 condições de penetração: (i) apenas o "toque" entre superfícies; (ii) profundidade de penetração equivalente a 1 camada atômica; (iii) profundidade de penetração equivalente a 2 camadas atômicas. Nas simulações MD foram analisadas as 3 condições, enquanto que nas análises por MEF analisaram-se as condições (ii) e (iii).

Cabe salientar que, embora seja possível realizar simulações MD bidimensionais, estas têm limitadas as opções para representação das diferentes estruturas cristalinas. Optou-se, portanto, por fazê-las tridimensionais, a fim de que se pudesse representar adequadamente as estruturas CFC.

Para se realizar a comparação entre as análises MEF, bidimensionais, e as análises MD, tridimensionais, optou-se por considerar uma seção transversal média do modelo MD, a qual pode ser comparada com a análise MEF que gera

resultados de transferência de material entre superfícies em nm^2 .

7.2 RESULTADOS

Apresentam-se, em sequência, as Figuras 32, 33 e 34, que trazem, respectivamente, comparativos entre os resultados das análises por MD e seus equivalentes em MEF, para o contato alumínio-alumínio, cobre-cobre e ferro-ferro.

Nota-se que, para o contato entre superfícies de alumínio (Figura 32), nas simulações MD, a quantidade de átomos transferidos entre as superfícies aumenta conforme se aumenta a profundidade de penetração. O modelo equivalente na mecânica do contínuo não permitiu representação equivalente dos resultados, principalmente no que se refere a condição de penetração de 2 camadas atômicas, situação em que se observa a formação de uma trinca que percorre toda a extensão do bloco.

Figura 32 - Comparação entre as Análise de MD e MEF para a adesão entre superfícies de alumínio. (A) Toque superficial; (B) Penetração de 1 camada atômica; (C) Penetração de 2 camadas atômicas.

Já em relação ao par de contato cobre-cobre (Figura 33), nota-se uma correlação entre a quantidade de material aderido ao indentador nas simulações

em MD e MEF. A tendência de se transferir mais material em condições de maior penetração do indentador se mantém nas simulações em MD e, nesse caso, pode-se identificar a mesma tendência nas simulações por MEF.

Já a análise do contato entre 2 superfícies de ferro permitiu verificar que as condições impostas não são comparáveis, uma vez que o modelo MEF considera constantes de Hamaker relativas a óxido de ferro (magnetita) com propriedades mecânicas de aço H13, enquanto que o modelo MD utiliza os potenciais para Fe-puro, o que confere propriedades muito diferentes em cada modelo.

Figura 33 - Comparação entre as Análise de MD e MEF para a adesão entre superfícies de cobre. (A) Toque superficial; (B) Penetração de 1 camada atômica; (C) Penetração de 2 camadas atômicas.

Por fim, verifica-se que o parâmetro α_{adesao} mantém suas características para previsão do desgaste adesivo para as superfícies de alumínio. Para isso, na Figura 35, adicionam-se os pontos equivalentes ao desgaste do par de superfícies de alumínio aos pontos obtidos pelas análises anteriores por MEF. No caso da condição de maior profundidade de penetração para o alumínio, que resultou em uma trinca que percorreu toda a geometria do bloco, que indica uma falha catastrófica do material, verifica-se que o parâmetro α_{adesao} supera a região do gráfico indicativa de desgaste adesivo severo. Nesse caso, ainda

Figura 34 - Comparação entre as Análise de MD (sem óxido) e MEF (com óxido) para a adesão entre superfícies de Ferro. (A) Toque superficial; (B) Penetração de 1 camada atômica; (C) Penetração de 2 camadas atômicas.

que o modelo numérico não tenha sido preciso para identificar a quantidade de material aderido, o parâmetro α_{adesao} ainda foi capaz de identificar a condição do desgaste adesivo.

Figura 35 - Aplicabilidade do parâmetro α_{adesao} para estimativa do desgaste adesivo em alumínio.

8 CONCLUSÕES

As simulações realizadas a partir da metodologia desenvolvida neste trabalho permitiram, para as simulações por MD, as seguintes conclusões:

- Os resultados mostram que a força de adesão entre as camadas de átomos é afetada pela densidade de defeitos no cristal. Entretanto, contrariamente ao observado em escala macroscópica, o aumento da quantidade de defeitos no material provoca uma redução da força de atrito no contato entre superfícies, o que pode ser entendido como uma redução da resistência mecânica do material.
- A densidade de defeitos não afeta de maneira significativa a quantidade de material formado na proa à frente do penetrador.
- Foram observados o fenômeno de jump to contact e stick-slip no contato entre superfícies durante o deslizamento.
- A imposição de diferentes níveis de deformação inicial ao modelo permitiu a obtenção de sistemas com diferentes níveis de defeitos na rede cristalina.
- As teorias de Frenkel e Taylor podem ser entendidas como complementares, de modo que a expressão de Frenkel seja utilizada para baixíssimas densidades de discordâncias, enquanto que a expressão de Taylor seja válida para densidades de discordâncias maiores.
- Os resultados obtidos neste trabalho se aproximaram da condição do cristal ideal, de forma que a introdução de defeitos na rede cristalina apenas diminui a resistência mecânica do material.
- A presença de átomos com estrutura hexagonal compacta (HCP), o que indica a presença de defeitos lineares semelhantes a discordâncias parciais, está relacionada à redução de atrito e das forças de penetração.

As simulações realizadas com base na mecânica do contínuo permitiram as seguintes conclusões:

- A abordagem numérica baseada na mecânica do contínuo foi capaz de produzir resultados coerentes com os obtidos anteriormente por simulações de dinâmica molecular.
- A Histerese de adesão pôde ser reproduzida pela primeira vez com esta abordagem numérica.
- O desgaste devido à adesão é afetado pela afinidade química entre as superfícies, mas também pela carga normal (ou a profundidade de penetração), a área de contato e, significativamente, pelas propriedades mecânicas dos materiais do par de contato.
- Parece haver uma forte correlação entre a quantidade de material transferido entre as superfícies e o parâmetro α_{adesao} proposto. Foi possível identificar três grupos diferentes de resultados, que foram organizados sob a forma de um mapa de desgaste adesivo.

Em relação às análises de comparação entre as abordagens atomística e contínua, conclui-se que:

- Há correlação, ao menos qualitativa, entre as quantidades de material transferido entre superfícies nas duas abordagens, de modo que os modelos de adesão por MEF desenvolvidos neste trabalho conseguiram reproduzir fenômenos que antes necessitavam de abordagens atomísticas.

9 SUGESTÕES PARA TRABALHOS FUTUROS

Como sugestão para trabalhos futuros, uma análise que considere a aplicação do modelo FEM aqui desenvolvido em uma geometria de múltiplas asperezas permitiria avaliar o efeito conjunto entre diferentes níveis de rugosidade superficial e diferentes características mecânicas dos materiais sobre o fenômeno de adesão. Além disso, outra extensão interessante deste trabalho, pode ser a consideração de um meio interfacial no sistema, de forma a avaliar o efeito de diferentes tipos de lubrificante sobre o comportamento da adesão no sistema. Por fim, validar experimentalmente os resultados obtidos numericamente no presente trabalho é outro tema sugerido.

REFERÊNCIAS

- ADAMS, J. B. et al. Atomic-level computer simulation. **Journal of Nuclear Materials**, v. 216, n. 0, p. 265 – 274, 1994. DOI: [http://dx.doi.org/10.1016/0022-3115\(94\)90015-9](http://dx.doi.org/10.1016/0022-3115(94)90015-9).
- ALDER, B. J.; WAINWRIGHT, T. E. Phase transition for a hard sphere system. **The Journal of Chemical Physics**, v. 27, n. 5, p. 1208–1209, 1957. DOI: <http://dx.doi.org/10.1063/1.1743957>.
- ALDER, B. J.; WAINWRIGHT, T. E. Studies in molecular dynamics. i. general method. **The Journal of Chemical Physics**, v. 31, n. 2, p. 459–466, 1959. DOI: <http://dx.doi.org/10.1063/1.1730376>.
- ANDERSON, P. W. More is different. **Science**, v. 177, n. 4047, p. 393–396, 1972. DOI: 10.1126/science.177.4047.393.
- ARDITO, R.; CORIGLIANO, A.; FRANGI, A. Finite element modelling of adhesion phenomena in mems. **2010 11th International Thermal, Mechanical and Multi-Physics Simulation, and Experiments in Microelectronics and Microsystems (EuroSimE)**, 2010. DOI: 10.1109/ESIME.2010.5464550.
- BAAQUIE, B.; WILLEBOORDSE, F. **Exploring Integrated Science**. [S.l.]: CRC Press, 2009.
- BHUSHAN, B. Fundamentals of tribology and bridging the gap between the macro- and micro/nanoscales. **Proceedings of the NATO Advanced Study Institute**. p. 964, 2001.
- BHUSHAN, B. Nanotribology and nanomechanics of mems/nems and biomems/bionems materials and devices. **Microelectron. Eng.**, Oxford, UK, UK, Elsevier Science Ltd., v. 84, n. 3, p. 387–412, mar. 2007. 26 p. DOI: 10.1016/j.mee.2006.10.059.
- BHUSHAN, B. **Introduction to Tribology**. London, Inglaterra: Wiley, 2013. (Tribology in Practice Series).
- BHUSHAN, B. **Principles and Applications of Tribology**. London, Inglaterra: Wiley, 2013.
- BORTOLETO, E. et al. Experimental and numerical analysis of dry contact in the pin on disc test. **Wear**, v. 301, n. 1-2, p. 19–26, 2013.
- BORTOLETO, E. M.; SOUZA, R. M.; CUPPARI, M. G. Atomistic simulation of the sliding of a rigid indenter over aluminum with crystalline defects. **Tribology International**, v. 82, Part

B, n. 0, p. 311 – 318, 2015. DOI: <http://dx.doi.org/10.1016/j.triboint.2014.07.016>. 2013 Joint Event on Tribology in Lyon 40th Leeds-Lyon Symposium on Tribology. Leeds-Lyon at 40: is the past still present? and Tribochemistry 2013, the Satellite Forum of WTC'2013 Torino Exploring tribochemical processes.

BOWDEN, F.; TABOR, D. **The Friction and Lubrication of Solids**. [S.l.]: Clarendon Press, 1954. (International series of monographs on physics, pt. 1).

BOWDEN, F. P. Adhesion and friction : f. p. bowden (cambridge) — endeavour, 16 (1957) 5–18; (16 fig., 13 ref.). **Wear**, v. 1, n. 2, p. 161 –, 1957. DOI: [http://dx.doi.org/10.1016/0043-1648\(57\)90011-X](http://dx.doi.org/10.1016/0043-1648(57)90011-X).

BOWDEN, F. P.; CHILDS, T. H. C. Friction and deformation of metals at extremely low temperatures. **Nature**, v. 219, p. 1333 – 1335, 1968. DOI: <http://dx.doi.org/10.1038/2191333a0>.

BOWDEN, F. P.; CHILDS, T. H. C. The friction and deformation of clean metals at very low temperatures. **Proceedings of the Royal Society of London A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences**, The Royal Society, v. 312, n. 1511, p. 451–466, 1969. DOI: [10.1098/rspa.1969.0170](https://doi.org/10.1098/rspa.1969.0170).

BRADLEY, R. S. The cohesive force between solid surfaces and the surface energy of solids. **The London, Edinburgh, and Dublin Philosophical Magazine and Journal of Science**, Taylor & Francis, v. 13, n. 86, p. 853–862, 1932.

BRAUN, O. **Supersonic and multiple topological excitations in the driven Frenkel-Kontorova model with exponential interaction**. [S.l.]: American Physical Society, 2000. (Physical Review: Statistical Physics, Plasmas, Fluids, and Related Interdisciplinary Topics, v. 62).

BRAUN, O.; KIVSHAR, Y. **Nonlinear Dynamics of the Frenkel-Kontorova Model**. [S.l.]: North-Holland, 1998. (Physics reports).

BRAUN, O.; KIVSHAR, Y. **The Frenkel-Kontorova Model: Concepts, Methods, and Applications**. [S.l.]: Springer, 2004. (Physics and Astronomy Online Library).

BROLEZZI, A. **A Tensão entre o Discreto e o Contínuo na História da Matemática e no Ensino de Matemática**. 1996. Tese (Doutorado) — Faculdade de Educação, Universidade de São Paulo, 1996.

BULATOV, V.; CAI, W. **Computer Simulations of Dislocations**. [S.l.]: OUP Oxford, 2006. (OSMM).

BUTT, H.; GRAF, K.; KAPPL, M. **Physics and Chemistry of Interfaces**. [S.l.]: Wiley, 2006.

BUTT, H.; KAPPL, M. **Surface and Interfacial Forces**. [S.l.]: Wiley, 2009. (Physics textbook).

CAMPRUBI, G. S. **Mechanical properties at nano-level**. 2012. Dissertação (Mestrado) — Universitat Politècnica de Catalunya, 2000.

CHA, P.-R.; SROLOVITZ, D. J.; VANDERLICK, T. K. Molecular dynamics simulation of single asperity contact. **Acta Materialia**, v. 52, n. 13, p. 3983 – 3996, 2004. DOI: <http://dx.doi.org/10.1016/j.actamat.2004.05.014>.

CHO, S.-S.; PARK, S. Finite element modeling of adhesive contact using molecular potential. **Tribology International**, v. 37, n. 9, p. 763 – 769, 2004. DOI: <http://dx.doi.org/10.1016/j.triboint.2004.04.007>.

CHO, Y.-S.; HAN, H.; KIM, W.-D. Numerical analysis of the adhesive forces in nano-scale structure. **Journal of Bionic Engineering**, v. 3, n. 4, p. 209 – 216, 2006. DOI: [http://dx.doi.org/10.1016/S1672-6529\(07\)60004-3](http://dx.doi.org/10.1016/S1672-6529(07)60004-3).

COHEN, M. L.; HEINE, V.; PHILLIPS, J. C. The quantum mechanics of materials. **Scientific American**, v. 246, n. 6, p. 82–102, jun. 1982. DOI: <http://dx.doi.org/10.1038/scientificamerican0682-82>.

COMMITTEE, A. I. H. **Properties and Selection: Nonferrous Alloys and Special-Purpose Materials**. [S.l.]: ASM International, 1990. (Metals handbook).

CORN, M. The adhesion of solid particles to solid surfaces, i. a review. **Journal of the Air Pollution Control Association**, v. 11, n. 11, p. 523–528, 1961. DOI: 10.1080/00022470.1961.10468032.

CUNHA, A. **Dicionário Etimológico Nova Fronteira da Língua Portuguesa**. 2. ed.. ed. Rio de Janeiro: Nova Fronteira, 1997.

DAVIS, T. M. Cosmology: is the universe leaking energy. **j-SCI-AMER**, v. 303, n. 1, p. 38–47, jul 2010. DOI: <http://dx.doi.org/10.1038/scientificamerican0710-38>.

DAW, M. S.; BASKES, M. I. Embedded-atom method: derivation and application to impurities, surfaces, and other defects in metals. **Phys. Rev. B**, American Physical Society, v. 29, p. 6443–6453, Jun 1984. 0 p. DOI: 10.1103/PhysRevB.29.6443.

DERJAGUIN, B. V.; MULLER, V. M.; TOPOROV, Y. P. Effect of contact deformations on the adhesion of particles. **Journal of Colloid and Interface Science**, v. 53, n. 2, p. 314 – 326, 1975. DOI: 10.1016/0021-9797(75)90018-1.

DIETER, G. E.(Ed.). **Mechanical Metallurgy**. [S.l.]: McGraw-Hill, 1995.

DUGDALE, D. Yielding of steel sheets containing slits. **Journal of the Mechanics and Physics of Solids**, v. 8, n. 2, p. 100 – 104, 1960. DOI: [http://dx.doi.org/10.1016/0022-5096\(60\)90013-2](http://dx.doi.org/10.1016/0022-5096(60)90013-2).

EPIPHANIOU, N. **Modelling of Dynamic Friction Across Solid Material Interfaces Using Molecular Dynamics Techniques**. 2010. Tese (Doutorado) — Cranfield University, 2010.

FOSDICK, L. **An Introduction to High-performance Scientific Computing**. [S.l.]: MIT Press, 1996. (Scientific and engineering computation).

FRENKEL, D.; SMIT, B. **Understanding Molecular Simulation: From Algorithms to Applications**. [S.l.]: Elsevier Science, 2001. (Computational science series).

FULLER, K. N. G.; TABOR, D. The effect of surface roughness on the adhesion of elastic solids. **Proceedings of the Royal Society of London A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences**, The Royal Society, v. 345, n. 1642, p. 327–342, 1975. DOI: 10.1098/rspa.1975.0138.

GIBSON, J. B. et al. Dynamics of radiation damage. **Phys. Rev.**, American Physical Society, v. 120, p. 1229–1253, Nov 1960. 0 p. DOI: 10.1103/PhysRev.120.1229.

GNECCO, E.; MEYER, E. **Fundamentals of Friction and Wear on the Nanoscale**. [S.l.]: Springer, 2015. (NanoScience and Technology).

GREENWOOD, J.; WILLIAMSON, J. Contact of Nominally Flat Surfaces. **Royal Society of London Proceedings Series A**, v. 295, p. 300–319, dez. 1966. DOI: 10.1098/rspa.1966.0242.

GREENWOOD, J. A. Adhesion of elastic spheres. **Proceedings of the Royal Society of London A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences**, The Royal Society, v. 453, n. 1961, p. 1277–1297, 1997. DOI: 10.1098/rspa.1997.0070.

GUBICZA, J. et al. Effect of mg addition on microstructure and mechanical properties of aluminum. **Materials Science and Engineering: A**, v. 387–389, n. 0, p. 55 – 59, 2004. DOI: <http://dx.doi.org/10.1016/j.msea.2004.03.076>. 13th International Conference on the Strength of Materials.

GYGI, F.; GALLI, G. Ab initio simulation in extreme conditions. **Materials Today**, v. 8, n. 11, p. 26 – 32, 2005. DOI: [http://dx.doi.org/10.1016/S1369-7021\(05\)71157-3](http://dx.doi.org/10.1016/S1369-7021(05)71157-3).

HAMAKER, H. C. The London-van der Waals attraction between spherical particles. **Physica IV**, v. 4, n. 10, p. 1058–1072, 1937.

HARDY, W. Boundary lubrication. **Phil. Mag.**, v. 38, n. 49, 1919.

HARVEY, P.; METALS, A. S. for. **Engineering properties of steel**. [S.l.]: American Society for Metals, 1982.

HERTZ, H. On contact between elastic bodies. **Gesammelte Werke**, v. 1, 1881.

HIBBITT, K.; SORENSEN. **ABAQUS/CAE User's Manual**. [S.l.]: Hibbitt, Karlsson & Sorensen, Incorporated, 2002.

HOLMBERG, K.; ANDERSSON, P.; ERDEMIR, A. Global energy consumption due to friction in passenger cars. **Tribology International**, v. 47, n. 0, p. 221 – 234, 2012. DOI: <http://dx.doi.org/10.1016/j.triboint.2011.11.022>.

HUTCHINGS, I. **Tribology: Friction and Wear of Engineering Materials**. [S.l.]: Edward Arnold, 1992. (Friction and Wear of Engineering Materials).

ISRAELACHVILI, J. N. **Intermolecular and surface forces: revised third edition**. [S.l.]: Academic press, 2011.

IWASA, M.; UENO, C.; R.C., B. Fracture toughness of quartz and sapphire single crystals at room temperature(<minor special issue>minor special issue on ceramic materials). **Journal of the Society of Materials Science, Japan**, The Society of Materials Science, Japan, v. 30, n. 337, p. 1001–1004, oct 1981. DOI: 10.2472/jsms.30.1001.

JINESH, K. **Atomic-Scale Friction: Thermal effects and capillary condensation**. 2006. Tese (Doutorado) — Leiden University, 2006.

JOHNSON, K.; GREENWOOD, J. An adhesion map for the contact of elastic spheres. **Journal of Colloid and Interface Science**, v. 192, n. 2, p. 326 – 333, 1997. DOI: <http://dx.doi.org/10.1006/jcis.1997.4984>.

JOHNSON, K.; KENDALL, K.; ROBERTS, A. Surface energy and the contact of elastic solids. **Proceedings of the royal society of London. A. mathematical and physical sciences**, The Royal Society, v. 324, n. 1558, p. 301–313, 1971.

JOHNSON, K. L. **Contact Mechanics**. [S.l.]: Cambridge University Press, 1985. Cambridge Books Online.

KELCHNER, C. L.; PLIMPTON, S. J.; HAMILTON, J. C. Dislocation nucleation and defect structure during surface indentation. **Phys. Rev. B**, American Physical Society, v. 58, p. 11085–11088, Nov 1998. 0 p. DOI: 10.1103/PhysRevB.58.11085.

KESARI, H. et al. Role of surface roughness in hysteresis during adhesive elastic contact. **Philosophical Magazine Letters**, v. 90, n. 12, p. 891–902, 2010. DOI: 10.1080/09500839.2010.521204. PMID: 21152108.

KLAMECKI, B. E. A thermodynamic model of friction. **Wear**, v. 63, n. 1, p. 113 – 120, 1980. DOI: [http://dx.doi.org/10.1016/0043-1648\(80\)90078-2](http://dx.doi.org/10.1016/0043-1648(80)90078-2).

KOGUT, L.; ETSION, I. Adhesion in elastic–plastic spherical microcontact. **Journal of Colloid and Interface Science**, v. 261, n. 2, p. 372 – 378, 2003. DOI: [http://dx.doi.org/10.1016/S0021-9797\(03\)00071-7](http://dx.doi.org/10.1016/S0021-9797(03)00071-7).

KOMANDURI, R.; CHANDRASEKARAN, N.; RAFF, L. M. Molecular dynamics simulation of atomic-scale friction. **Phys. Rev. B**, American Physical Society, v. 61, p. 14007–14019, May 2000. 0 p. DOI: 10.1103/PhysRevB.61.14007.

KONTOROVA, T.; FRENKEL, Y. On the theory of plastic deformation and crystal twinning. **Journal of Experimental and Theoretical Physics**, n. 8, p. 89–95, 1938.

KORDECKI, M. C.; ORR, C. Adhesion of solid particles to solid surfaces. **Archives of Environmental Health: An International Journal**, v. 1, n. 1, p. 1–9, 1960. DOI: 10.1080/00039896.1960.10662660. PMID: 14411004.

KRIM, J. Friction at the atomic scale. **j-SCI-AMER**, v. 275, n. 4, p. 74–80, out. 1996. DOI: <http://dx.doi.org/10.1038/scientificamerican1096-74>.

KUDISH, I. I.; COVITCH, M. J. **Modeling and Analytical Methods in Tribology**. [S.l.]: Chapman and Hall, 2010. (Modern Mechanics and Mathematics).

LANDHEER, D.; GEE, A. de. Adhesion, friction, and wear. **MRS Bulletin**, v. 16, p. 36–40, 10 1991. 5 p. DOI: 10.1557/S0883769400055810.

LANGER, S.; JR., E.; CARTER, W. Oof: an image-based finite-element analysis of material microstructures. **Computing in Science and Engineering**, v. 3, n. 3, p. 15–23, 2001. Cited By 131.

LENNARD-JONES, J. E. On the determination of molecular fields. ii. from the equation of state of a gas. **Proceedings of the Royal Society of London A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences**, The Royal Society, v. 106, n. 738, p. 463–477, 1924. DOI: 10.1098/rspa.1924.0082.

LENNARD-JONES, J. E. Cohesion. **Proceedings of the Physical Society**, v. 43, n. 5, p. 461, 1931.

LI, L.; XIA, Z.; YANG, Y. Molecular dynamics simulation of nanoimprinting under a high-frequency vibration perturbation. **Journal of Computational and Theoretical Nanoscience**, v. 9, n. 1, p. 35–40, 2012–01–01T00:00:00. DOI: doi:10.1166/jctn.2012.1993.

MAGNE, A. **Dicionário Etimológico da Língua Latina: Famílias de Palavras e Derivações Vernáculas**. Rio de Janeiro: Fronteira, 1996.

MASLIYAH, J.; BHATTACHARJEE, S. **Electrokinetic and Colloid Transport Phenomena**. [S.I.]: Wiley, 2006.

MATE, C. M. et al. Atomic-scale friction of a tungsten tip on a graphite surface. **Phys. Rev. Lett.**, American Physical Society, v. 59, p. 1942–1945, Oct 1987. 0 p. DOI: 10.1103/PhysRevLett.59.1942.

MATTSSON, T. R. et al. First-principles and classical molecular dynamics simulation of shocked polymers. **Phys. Rev. B**, American Physical Society, v. 81, p. 054103, Feb 2010. 9 p. DOI: 10.1103/PhysRevB.81.054103.

MAUGIS, D. Adhesion of spheres: The JKR-DMT transition using a Dugdale model. **Journal of Colloid and Interface Science**, v. 150, n. 1, p. 243–269, abr. 1992. DOI: 10.1016/0021-9797(92)90285-t.

MAUGIS, D. On the contact and adhesion of rough surfaces. **Journal of Adhesion Science and Technology**, v. 10, n. 2, p. 161–175, 1996. DOI: 10.1163/156856196X00832.

MAURY, J. **Petite histoire de la physique**. Paris: Larousse, 1992. 225–229 p. (Références Larousse).

MCCLELLAND, G. M. Z. Adhesion and friction. **Series in Surface Science**, Springer, v. 17, 1990.

MENDELEV, M. et al. Analysis of semi-empirical interatomic potentials appropriate for simulation of crystalline and liquid al and cu. **Philosophical Magazine**, v. 88, n. 12, p. 1723–1750, 2008. DOI: 10.1080/14786430802206482.

METROPOLIS, N.; ULAM, S. The monte carlo method. **Journal of the American statistical Association**, v. 44, n. 247, p. 335–341, 1949.

MEYER, E.; MEYER, E. **Nanoscience: Friction and Rheology on the Nanometer Scale**. [S.I.]: World Scientific, 1998.

MISHIN, Y. et al. Interatomic potentials for monoatomic metals from experimental data and *ab initio* calculations. **Phys. Rev. B**, American Physical Society, v. 59, p. 3393–3407, Feb 1999. 0 p. DOI: 10.1103/PhysRevB.59.3393.

MITTAL, R. **Strengthening Mechanism of Metals - Physical Metallurgy**. [S.I.]: National Institute of Technology Rourkela, 2009.

MORROW, C.; LOVELL, M.; NING, X. A jkr–dmt transition solution for adhesive rough surface contact. **Journal of Physics D: Applied Physics**, v. 36, n. 5, p. 534, 2003.

MORSE, P. M. Diatomic molecules according to the wave mechanics. ii. vibrational levels. **Phys. Rev.**, American Physical Society, v. 34, p. 57–64, Jul 1929. 0 p. DOI: 10.1103/PhysRev.34.57.

MULLER, V.; YUSHCHENKO, V.; DERJAGUIN, B. On the influence of molecular forces on the deformation of an elastic sphere and its sticking to a rigid plane. **Journal of Colloid and Interface Science**, v. 77, n. 1, p. 91 – 101, 1980. DOI: [http://dx.doi.org/10.1016/0021-9797\(80\)90419-1](http://dx.doi.org/10.1016/0021-9797(80)90419-1).

MÜSER, M. Towards an atomistic understanding of solid friction by computer simulations. **Computer Physics Communications**, v. 146, p. 54–62, jun 2002. DOI: 10.1016/S0010-4655(02)00434-4.

MUSER, M. Velocity dependence of kinetic friction in the Prandtl-Tomlinson model. **Physical Review B**, American Physical Society, 2011.

MÜSER, M. H.; URBACH, M.; ROBBINS, M. O. Statistical mechanics of static and low-velocity kinetic friction. In: **Advances in Chemical Physics. Advances in Chemical Physics**. [S.I.]: John Wiley and Sons, Inc., 2003. p. 187–272. DOI: 10.1002/0471428019.ch5.

MYSHKIN, N. Friction transfer film formation in boundary lubrication. **Wear**, v. 245, n. 1–2, p. 116 – 124, 2000. DOI: [http://dx.doi.org/10.1016/S0043-1648\(00\)00472-5](http://dx.doi.org/10.1016/S0043-1648(00)00472-5).

OGORODNIKOV, V.; ROGOVOI, Y. Buckingham-potential parameters and relations between them for solids. **Powder Metallurgy and Metal Ceramics**, Kluwer Academic Publishers-Plenum Publishers, v. 33, n. 5-6, p. 327–333, 1995. DOI: 10.1007/BF00560208.

OROWAN, E. Zur kristallplastizität. iii. **Zeitschrift für Physik**, Springer-Verlag, v. 89, n. 9-10, p. 634–659, 1934. DOI: 10.1007/BF01341480.

OVRUTSKY, A.; PROKHODA, A.; RASSHCHUPKYNA, S. **Computational Materials Science: Surfaces, Interfaces, Crystallization**. [S.l.]: Elsevier Science, 2013. (Elsevier insights).

PADILHA, A.(Ed.). **Materiais de engenharia**. [S.l.]: Hemus Editora Limitada, 1995.

PAIS, A. **Subtle is the Lord: The Science and the Life of Albert Einstein**. Oxford: Clarendon Press, 1982.

PERRIN, J. B. **Les atomes. (French) [Atoms]**. Paris, France: Félix Alcan, 1913. xvi + 299 p.

PERSSON, B. Theory of friction and boundary lubrication. **Physical Review B**, American Physical Society, v. 48, n. 24, p. 18140–18158, 1993.

PERSSON, B. Surface science reports. **Journal of Intelligent Information System**, v. 33, n. 3, p. 83–119, 1999.

PLIMPTON, S. Fast parallel algorithms for short-range molecular dynamics. **Journal of Computational Physics**, v. 117, n. 1, p. 1 – 19, 1995. DOI: <http://dx.doi.org/10.1006/jcph.1995.1039>.

POPOV, V. L.; GRAY, J. Prandtl-Tomlinson model:a simple model which made history. In: **The History of Theoretical, Material and Computational Mechanics - Mathematics Meets Mechanics and Engineering. The History of Theoretical, Material and Computational Mechanics - Mathematics Meets Mechanics and Engineering**. [S.l.]: Springer Berlin Heidelberg, 2014. (Lecture Notes in Applied Mathematics and Mechanics, v. 1), p. 153–168. DOI: 10.1007/978364239905310.

PORTO, M.; URBACH, M.; KLAFTER, J. Atomic scale engines: cars and wheels. **Physical review letters**, American Physical Society, v. 84, n. 26, p. 6058, 2000.

PRANDTL, L. Ein gedankenmodell für kinetischen theorie der festen koper. **Zeitschrift für Angewandte Mathematik und Mechanik**, v. 8, p. 82, 1928.

PRIEVE, D. C.; RUSSEL, W. B. Simplified predictions of Hamaker constants from Lifshitz theory. **Journal of Colloid and Interface Science**, v. 125, n. 1, p. 1 – 13, 1988. DOI: [http://dx.doi.org/10.1016/0021-9797\(88\)90048-3](http://dx.doi.org/10.1016/0021-9797(88)90048-3).

RAFII-TABAR, H. Modelling the nano-scale phenomena in condensed matter physics via computer-based numerical simulations. **Physics Reports**, v. 325, p. 239–310, mar. 2000. DOI: 10.1016/S0370-1573(99)00087-3.

RAHMAN, A. Correlations in the motion of atoms in liquid argon. **Phys. Rev.**, American Physical Society, v. 136, p. A405–A411, Oct 1964. 0 p. DOI: 10.1103/PhysRev.136.A405.

RAPAPORT, D. **The Art of Molecular Dynamics Simulation**. [S.l.]: Cambridge University Press, 2004. (E-libro).

REIF, F. **Fundamentals of statistical and thermal physics**. [S.l.]: McGraw-Hill, 1965. (McGraw-Hill series in fundamentals of physics).

RIGNEY, D.; HIRTH, J. Plastic deformation and sliding friction of metals. **Wear**, v. 53, n. 2, p. 345 – 370, 1979. DOI: [http://dx.doi.org/10.1016/0043-1648\(79\)90087-5](http://dx.doi.org/10.1016/0043-1648(79)90087-5).

ROJEK, J.; TELEGA, J. J.; STUPKIEWICZ, S. Contact problems with friction, adhesion and wear in orthopaedic biomechanics. part ii - numerical implementation and application to implanted knee joints. **Journal of Theoretical and Applied Mechanics**, v. 39, n. 3, 2001.

SAKAI, M. Chapter 22 - mechanical probe for micro-/nano-characterization. In: **Carbon Alloys**. **Carbon Alloys**. Oxford: Elsevier Science, 2003. p. 351 – 383. DOI: <http://dx.doi.org/10.1016/B978-008044163-4/50022-X>.

SALINAS, S. R. Einstein e a teoria do movimento browniano. **Revista Brasileira de Ensino de Física**, Scielo, v. 27, p. 263 – 269, 06 2005.

SAUER, R. A.; LI, S. An atomic interaction-based continuum model for adhesive contact mechanics. **Finite Elements in Analysis and Design**, v. 43, n. 5, p. 384 – 396, 2007. DOI: <http://dx.doi.org/10.1016/j.finel.2006.11.009>. The Eighteenth Robert J. Melosh Competition.

SAUER, R. A.; WRIGGERS, P. Formulation and analysis of a three-dimensional finite element implementation for adhesive contact at the nanoscale. **Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering**, v. 198, p. 3871–3883, 2009. DOI: 10.1016/j.cma.2009.08.019.

SINATORA, A.; TANAKA, D. As leis do atrito: da vinci, amontons ou coulomb. **Revista Brasileira de Ciências Mecânicas**, v. 12, n. 1, p. 31–34, 2007.

SOUZA, F. V. d. **Modelo multi-escala para análise estrutural de compósitos viscoelásticos suscetíveis ao dano**. 2005. Dissertação (Mestrado) — Universidade Federal do Ceará, 2005.

STILLINGER, F. H.; RAHMAN, A. Improved simulation of liquid water by molecular dynamics. **The Journal of Chemical Physics**, v. 60, n. 4, p. 1545–1557, 1974. DOI: <http://dx.doi.org/10.1063/1.1681229>.

STUKOWSKI, A. Visualization and analysis of atomistic simulation data with ovito - the open visualization tool. **Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering**, v. 18, n. 1, 2010. DOI: 10.1088/0965-0393/18/1/015012.

STUKOWSKI, A. Structure identification methods for atomistic simulations of crystalline materials. **Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering**, v. 20, n. 4, p. 045021, 2012.

Süle, P. et al. Rotation misorientated graphene moire superlattices on Cu(111): classical molecular dynamics simulations and scanning tunneling microscopy studies. **ArXiv e-prints**, jan. 2014.

SUN, L. et al. Plastic deformation of single nanometer-sized crystals. **Phys. Rev. Lett.**, American Physical Society, v. 101, p. 156101, Oct 2008. 4 p. DOI: 10.1103/PhysRevLett.101.156101.

SUTHERLAND, W. Lxiii. a kinetic theory of solids, with an experimental introduction. **Philosophical Magazine Series 5**, v. 32, n. 199, p. 524–553, 1891. DOI: 10.1080/14786449108620220.

TABOR, D. Surface forces and surface interactions. **Journal of Colloid and Interface Science**, v. 58, n. 1, p. 2 – 13, 1977. DOI: [http://dx.doi.org/10.1016/0021-9797\(77\)90366-6](http://dx.doi.org/10.1016/0021-9797(77)90366-6). International Conference on Colloids and Surfaces.

TABOR, D.; WINTERTON, R. H. S. Surface forces: direct measurement of normal and retarded van der waals forces. **Nature**, v. 219, n. 5159, p. 1120–1121, 1968. DOI: <http://dx.doi.org/10.1038/2191120a0>.

TADMOR, E.; MILLER, R. **Modeling Materials: Continuum, Atomistic and Multiscale Techniques**. [S.l.]: Cambridge University Press, 2011.

TAYEBI, N.; POLYCARPOU, A. A. Reducing the effects of adhesion and friction in microelectromechanical systems (memss) through surface roughening: comparison between theory and experiments. **Journal of Applied Physics**, v. 98, n. 7, p. –, 2005. DOI: <http://dx.doi.org/10.1063/1.2058178>.

TAYLOR, G. I. The mechanism of plastic deformation of crystals. part i. theoretical. **Proceedings of the Royal Society of London A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences**, The Royal Society, v. 145, n. 855, p. 362–387, 1934. DOI: 10.1098/rspa.1934.0106.

TOLÉDANO, J. C. **Physique des électrons dans les solides**. [S.l.]: Ecole Polytechnique, 2007.

TOMLINSON, G. Cvi. a molecular theory of friction. **Philosophical Magazine Series 7**, v. 7, n. 46, p. 905–939, 1929. DOI: 10.1080/14786440608564819.

TORRES, E. A. S. **Modelo Unidimensional do Atrito em Escala Atômica: um Estudo por Dinâmica Molecular**. 2006. Tese (Doutorado) — Faculdade de Física, Universidade Federal do Rio Grande do Sul, 2006.

URBAKH, M. et al. The nonlinear nature of friction. **Nature**, v. 430, p. 525–528, jul 2004. DOI: <http://dx.doi.org/10.1038/nature02750>.

WANG, Q.; CHUNG, Y. **Encyclopedia of Tribology**. [S.l.]: Springer US, 2013. (Encyclopedia of Tribology).

WANG, Q.; ZHU, D. Hertz theory: contact of spherical surfaces. In: **Encyclopedia of Tribology**. **Encyclopedia of Tribology**. [S.l.]: Springer US, 2013. p. 1654–1662.

WEISS, M.; ELMER, F.-J. Dry friction in the Frenkel-Kontorova-Tomlinson model: static properties. **Phys. Rev. B**, American Physical Society, v. 53, p. 7539–7549, Mar 1996. DOI: 10.1103/PhysRevB.53.7539.

WIEDERHORN, S. M. Fracture of sapphire. **Journal of the American Ceramic Society**, Blackwell Publishing Ltd, v. 52, n. 9, p. 485–491, 1969. DOI: 10.1111/j.1151-2916.1969.tb09199.x.

WILFRIED, J. Lubricants and the environment. **Tribology International**, v. 31, n. 1-3, p. 35–47, 1998.

WU, J. **Construction of Pt-Au EAM Potential and Molecular Dynamics Simulation of Friction and Nanoindentation**. 2011. Dissertação (Mestrado) — Purdue University, 2011.

ZHANG, L.; TANAKA, H. Atomic scale deformation in silicon monocrystals induced by two-body and three-body contact sliding. **Tribology International**, v. 31, n. 8, p. 425 – 433, 1998. DOI: [http://dx.doi.org/10.1016/S0301-679X\(98\)00064-4](http://dx.doi.org/10.1016/S0301-679X(98)00064-4).

ZHANG, X.; ZHANG, X.; WEN, S. Finite Element Modeling of the Nano-scale Adhesive Contact and the Geometry-based Pull-off Force. **Tribology Letters**, v. 41, p. 65–72, 2011. DOI: 10.1007/s11249-010-9686-1.

ZHENG, W.; YA-PU, Z. Adhesion elastic contact and hysteresis effect. **Chinese Physics**, v. 13, n. 8, p. 1320, 2004.

ZHONG, W.; TOMANEK, D. First-principles theory of atomic-scale friction. **Phys. Rev. Lett.**, American Physical Society, v. 64, n. 25, p. 3054–3057, Jun 1990. DOI: 10.1103/PhysRevLett.64.3054.

ZHOU, X. W.; JOHNSON, R. A.; WADLEY, H. N. G. Misfit-energy-increasing dislocations in vapor-deposited coFe/nife multilayers. **Phys. Rev. B**, American Physical Society, v. 69, p. 144113, Apr 2004. 10 p. DOI: 10.1103/PhysRevB.69.144113.

ZIENKIEWICZ, O. **The finite element method in engineering science**. [S.l.]: McGraw-Hill, 1971.

ANEXO A – CÓDIGOS-FONTES: ANÁLISES MD

Arquivo de entrada para as simulações MD (*LAMMPS*)

- Exemplo para condição de 40% de deformação.

```

1 #3d rigid indenter penetration/sliding over Aluminum block
  #Sliding Velocity: 10/s
3
  log    log.TriboLyon_40_10ms_correcao
5
  units      metal
7 boundary   p p s

9 atom_style  atomic
  lattice     fcc 4.05
11 region     box block 0.0 50.0 -29.15 29.15 0.0 30.0
  create_box  6 box
13
  pair_style   eam/alloy
15 pair_coeff  * * Al99.eam.alloy Al Al Al Al Al Al

17 neighbor   0.3 bin
  neigh_modify delay 5
19
  #Create region of inferior block with fcc lattice
21 region     lo-fixed block INF INF INF INF 0.0 1.0
  region     lo-thermostat block INF INF INF INF 1.0 3.0
23 region     lo-mobile block INF INF INF INF 0.0 12.
  region     above-lo block INF INF INF INF 0.0 12. side out
25
  create_atoms 1 region lo-mobile
27
  #Create region of superior indenter
29 lattice     fcc 4.05 origin 0.0 0.5 0.0 orient x 1 1 0 orient y -1 1 0
  region     indenter block 0 5 -2.5 2.5 25 30
31
  create_atoms 1 region indenter
33
  # Create different regions and define types (colors on output)
35 group      lo region lo-mobile

```

```

group          lo type 3
37 group        lo-fixed region lo-fixed
group          thermostat region lo-thermostat
39
group          boundary region lo-fixed
41 group        mobile subtract all boundary

43 group        bloco region lo-mobile
group          indenter region indenter
45
set            group lo-fixed type 4
47 set          group thermostat type 5
set            group indenter type 6
49
# temp controllers
51
compute        new3d mobile temp
53 compute      new2d mobile temp/partial 0 1 1
#compute      1    mobile stress/atom
55
#####
57 # EQUILIBRATE

59 velocity     mobile create 300.0 5812775 temp new3d
fix            1 bloco nvt temp 300 300 1
61 fix          2 lo-fixed setforce 0.0 0.0 0.0

63 #fix         7 hi-fixed rigid single
fix            3 indenter setforce 0.0 0.0 0.0
65
compute disp all displace/atom
67 compute pot all pe/atom          # Computes potential energy per atom
compute ke all ke/atom
69 compute sv all stress/atom virial # Computes virial stress per atom
compute s1 all stress/atom # Computes stress per atom
71 compute vv all property/atom xs ys zs vx vy vz
compute csym all centro/atom fcc
73
# Store final cell length for strain calculations
75 variable tmp equal "lx"
variable L0 equal ${tmp}
77 print "Initial Length, L0: ${L0}"

```



```

79 variable misv atom "0.707106781 * sqrt( (c_s1[1] - c_s1[2])^2 + (c_s1[2]
- c_s1[3])^2 + (c_s1[1] - c_s1[3])^2 + 6*(c_s1[4]^2 + c_s1[5]^2 +
c_s1[6]^2))" # Computes the von Mises stress for each atom
variable mises atom "0.707106781 * sqrt( (c_sv[1] - c_sv[2])^2 + (c_sv[2]
- c_sv[3])^2 + (c_sv[1] - c_sv[3])^2 + 6*(c_sv[4]^2 + c_sv[5]^2 +
c_sv[6]^2))" # Computes the von Mises stress for each atom
81
# Dump properties for each atom to file dump.indent
83 dump      1 all custom 2000 dump.TriboLyon_40_10ms_correcao id type xs ys
zs c_csym c_pot c_disp[1] c_disp[2] c_disp[3]

85 #compute ff all property/atom fx fy fz vx vy vz ix iy iz mux
dump      2 all custom 2000 dump.TriboLyon_40_10ms_veloc_correcao id
type x y z xu yu zu fx fy fz vx vy vz c_ke
87 dump      3 all custom 2000 dump.TriboLyon_40_10ms_stress_correcao id
type x y z v_mises v_misv c_sv[1] c_sv[2] c_sv[3] c_sv[4] c_sv[5] c_sv[6]
c_s1[1] c_s1[2] c_s1[3] c_s1[4] c_s1[5] c_s1[6]

89 compute f1 indenter reduce sum fx
compute f2 indenter reduce sum fy
91 compute f3 indenter reduce sum fz

93 compute ba indenter com

95 variable fA equal "c_f1"
variable fB equal "c_f2"
97 variable fC equal "c_f3"

99 fix      print indenter print 10 "Reaction Force: ${fA} ${fB} ${fC}"
file ForceReaction_dump.TriboLyon_40_10ms_correcao.txt screen no

101 thermo      200
thermo_modify    temp new3d
103
timestep      0.001
105 run      10000

107 #####
# DEFORMATION
109 # Store final cell length for strain calculations
variable tmp equal "ly"
111 variable L0 equal ${tmp}
print "Initial Length, L0: ${L0}"

```

```

113 |
114 | unfix          1
115 | fix    1 bloco nvt temp 300 300 1
116 | variable srate equal 4.0e9
117 | variable srate1 equal "-v_srate / 1.0e12"
118 | fix    5 bloco deform 1 y erate ${srate1}
119 | #fix          5 bloco deform 1 y final -2.5 2.5
120 |
121 | # Output strain and stress info to file
122 | # for units metal, pressure is in [bars] = 100 [kPa] = 1/10000 [GPa]
123 | # p2, p3, p4 are in GPa
124 | variable strain equal "(ly - v_L0)/v_L0"
125 | variable p1 equal "v_strain"
126 | variable p2 equal "-pxx/10000"
127 | variable p3 equal "-pyy/10000"
128 | variable p4 equal "-pzz/10000"
129 | fix def1 all print 100 "${p1} ${p2} ${p3} ${p4}" file
130 | Strain_dump.TriboLyon_40_10ms_correcao.txt screen no
131 |
132 | # Display thermo
133 | thermo 200
134 | thermo_style custom step v_strain temp v_p2 v_p3 v_p4 ke pe press
135 | timestep 0.001
136 | #run 20000
137 | run 100000
138 | #0% deformation condition does not need compression stage
139 | #####
140 | # INDENTATION
141 | thermo 200
142 | thermo_modify temp new3d
143 | unfix 3
144 | unfix 5
145 | fix 4 indenter move linear 0.0 0.0 -0.06
146 | timestep 0.001
147 | run 100000
148 | #####
149 | # SLIDING
150 | thermo 200
151 | thermo_modify temp new3d
152 | unfix 4
153 | fix 4 indenter move linear 0.1 0.0 0.0
154 | timestep 0.001
155 | run 300000

```

```
155 #####  
    # SEPARATION  
157 thermo      200  
    thermo_modify    temp new3d  
159 unfix      4  
    fix      4 indenter move linear 0.0 0.0 0.06  
161 timestep    0.001  
    run      100000  
163 #####  
    # SIMULATION DONE  
165 print "All done"
```

ANEXO B – CÓDIGOS-FONTES: ANÁLISES MEF

Sub-rotina para cálculo das forças de adesão e falha do material em modelos MEF em *FORTRAN*

```

SUBROUTINE USDFLD( FIELD , STATEV , PNEWDT , DIRECT , T , CELENT ,
2  1 TIME , DTIME , CMNAME , ORNAME , NFIELD , NSTATV , NOEL , NPT , LAYER ,
  2 KSPT , KSTEP , KINC , NDI , NSHR , COORD , JMAC , JMATYP , MATLAYO , LACCFLA )
4 C
  INCLUDE 'ABA_PARAM.INC'
6 C
  CHARACTER*80 CMNAME , ORNAME
  CHARACTER*3  FLGRAY(15)
  DIMENSION FIELD( NFIELD ) , STATEV( NSTATV ) , DIRECT( 3 , 3 ) ,
10  1 T( 3 , 3 ) , TIME( 2 )
  DIMENSION ARRAY( 15 ) , JARRAY( 15 ) , JMAC( * ) , JMATYP( * ) , COORD( * )
12 C
  integer dmax
14  parameter ( dmax = 240 )
  integer n
16  real nos_gaps_X( dmax ) , nos_gaps_Y( dmax ) , condi_contact( dmax )
  real Fa( dmax )
18  COMMON / Control / h , Force , contact_flag , separacao , n
  COMMON / matrix / nos_gaps_X , nos_gaps_Y , condi_contact , Fa
20 C
  C user coding to define FIELD and , if necessary , STATEV and PNEWDT
22 C "GETVRM" routine for variable extration
  C ( para extrair distancia entre superficies ( COPEN ) )
24 C Value of current separation between surfaces for each node:
  C CALL GETVRM( 'CDISP' , ARRAY , JARRAY , FLGRAY , JRCD , JMAC , JMATYP ,
26 C 1 MATLAYO , LACCFLA )
  C
28  if ( n .NE. KINC ) then
    do i = 1 , 240
30      condi_contact( i ) = 0
      Fa( i ) = 0
32    end do
    n = KINC
34  endif
  if ( NOEL .gt. 0 .AND. NOEL .le. 240 ) then
36    STATEV( 1 ) = Fa( NOEL )
    STATEV( 2 ) = condi_contact( NOEL )

```

```

38      endif
39      C
40      RETURN
41      END
42      C
43      C
44      SUBROUTINE DLOAD(F,KSTEP,KINC,TIME,NOEL,NPT,LAYER,KSPT,
45      1 COORDS,JLTYP,SNAME)
46      C
47      INCLUDE 'ABA_PARAM.INC'
48      C
49      DIMENSION TIME(2), COORDS (3)
50      CHARACTER*80 SNAME
51      C
52      integer dmax
53      parameter (dmax=240)
54      integer n
55      real nos_gaps_X(dmax), nos_gaps_Y(dmax), condi_contact(dmax)
56      real Fa(dmax)
57      real xe, xd
58      COMMON / Control / h, Force, contact_flag, separacao, n
59      COMMON / matrix / nos_gaps_X, nos_gaps_Y, condi_contact, Fa
60      C
61      if (n .NE. KINC) then
62          do i = 1, 240
63              condi_contact(i) = 0
64          end do
65          n = KINC
66      endif
67      C
68      if (NOEL .le. 240) then
69          nos_gaps_X(NOEL) = COORDS(1)
70          nos_gaps_Y(NOEL) = COORDS(2)
71      endif
72      C
73      noel_min_ind = 1
74      noel_max_ind = 10
75      noel_min_slab = 101
76      noel_max_slab = 140
77      nono_min_ind = 1
78      nono_max_ind = 61
79      nono_min_slab = 1283
80      nono_max_slab = 1483

```

```

C
82      R_c = 0.25
      R = 0.125
84      A = -2.90E-10
C
86 C Valores das constantes de Hamaker para cada par de contato
C      A = -1.81E-10      ———  SH
88 C      A = -2.50E-10      ———  SC
C      A = -2.10E-10      ———  HH
90 C      A = -4.00E-10      ———  CC
C      A = -2.90E-10      ———  HC
92 C
C
94      pi = 3.141592653589
C      h = separacao
96      x = COORDS(1)
      y = COORDS(2)
98 C
C Diametro ou largura do indentador
100      L = 2.5
C Velocidade ou distancia horizontal total a ser percorrida pelo indentador
102      Vi = 1
      xd = -Vi*TIME(1)
104      xd = 1.25
      xe = -1.25
106 C
      F = 0
108      if (SNAME .eq. 'SURF_SLAB') then
          near = noel_min_ind
110          hip_select = 99000
          do j = noel_min_ind, noel_max_ind
112              hip_new = (COORDS(1) - nos_gaps_X(j))**2 +
*                      (COORDS(2) - nos_gaps_Y(j))**2
114              if (hip_new .le. hip_select) then
                  hip_select = hip_new
116                  near = j
              endif
118          end do
          h = ABS(COORDS(2) - nos_gaps_Y(near))
120          condi_contact(near) = 1
          if (KSTEP .eq. 1) then
122 C              PRINT *, 'ENTROU No KSTEP', h
                  if ( h .lt. R_c .AND. x .le. xd

```

```

124      *                                .AND. x .ge. xe) then
           h_x = h+2*R
126      F = A/(6*pi*(h_x)**3)
C        PRINT *, 'ENTROU NA FORCA1'
128      end if
      end if
130 c    if (KSTEP .eq. 2) then
c        xd = L/2+Vi*TIME(1)
132 c        xe = -L/2 + Vi*TIME(1)
c        if ( h .lt. R_c .AND. x .le. xd
134 c      *                                .AND. x .ge. xe) then
c        h_x = h+2*R
136 c        F = A/(6*pi*(h_x)**3)
c        PRINT *, 'ENTROU NA FORCA2'
138 c        end if
c      end if
140      if (KSTEP .eq. 2) then
          if ( h .lt. R_c .AND. x .le. xd
142      *                                .AND. x .ge. xe) then
           h_x = h+2*R
144      F = A/(6*pi*(h_x)**3)
          end if
146      end if
      else if (SNAME .eq. 'SURF_INDENTER') then
148      near = noel_min_slab
          hip_select = 99000
150      do j = noel_min_slab, noel_max_slab
          hip_new = (COORDS(1) - nos_gaps_X(j))**2 +
152      *      (COORDS(2) - nos_gaps_Y(j))**2
          if (hip_new .le. hip_select) then
154      hip_select = hip_new
          near = j
156      endif
          end do
158      h = ABS(COORDS(2) - nos_gaps_Y(near))
          condi_contact(near) = 1
160      if ( h .lt. R_c) then
          h_x = h+2*R
162      F = A/(6*pi*(h_x)**3)
      end if
164      else
          F = 0
166      endif

```

```

168         if (KINC .le. 1 .AND. KSTEP .le. 1) then
169             F = 0
170         end if
171 C
172 C     PRINT *, 'Gap D =', h, 'VdW=', F, KINC, KSTEP, NOEL, SNAME, xd, xe
173 C
174 C     if (NOEL .eq. 1) then
175 C         teste_lala = COORDS(2)
176 C         PRINT *, 'NO UM1 DLOAD', teste_lala, KINC, KSTEP
177 C     endif
178 C
179 C     do i = 1, 30
180 C         PRINT *, 'GAP_teste', nos_gaps_X(i), nos_gaps_Y(i), near,
181 C         *         condi_contact(i), F, KINC, KSTEP
182 C         PRINT *, NOEL, i, condi_contact(i), near, KINC, KSTEP
183 C     end do
184 C     PRINT *, '_____ '
185 C     Fa(NOEL) = F
186 C     RETURN
187 C     END
188 C
189 C
190 C User subroutine UDAMINI
191 C
192 C     subroutine udmgini(findex, nfindex, fnormal, ndi, nshr, ntens, props,
193 C     1 nprops, statev, nstatev, stress, strain, straine, lxfem, time, dtime,
194 C     2 temp, dtemp, predef, dpred, nfield, coords, noel, npt, layer, kspt, kstep,
195 C     3 kinc, kdircyc, kcyclelcf, timecyc, sse, spd, scd, svd, smd, jmac, jmatyp,
196 C     4 matlayo, laccfla, celent, drot, ori)
197 C
198 C     include 'ABA_PARAM.INC'
199 C
200 C     parameter(zero=0.0d0, one=1.0d0)
201 C     dimension findex(nfindex), fnormal(ndi, nfindex), coords(*),
202 C     1 stress(ntens), strain(ntens), straine(ntens), props(nprops),
203 C     2 statev(nstatev), predef(nfield), dpred(nfield), time(2), jmac(*),
204 C     3 jmatyp(*), drot(3,3), ori(3,3)
205 C
206 C     dimension ps(3), an(3,3), wt(6)
207 C     ps(1)=zero
208 C     ps(2)=zero
209 C     ps(3)=zero

```



```

210 C ROTATE THE STRESS TO GLOBAL SYSTEM IF THERE IS ORIENTATION
    C
212     CALL ROTSIG(STRESS,ORI,WT,1,NDI,NSHR)
    c
214 C Maximum principal stress criterion
    C
216     call sprind(wt,ps,an,1,ndi,nshr)
        sig1 = ps(1)
218     kmax=1
        do k1 = 2, ndi
220         if(ps(k1).gt.sig1) then
            sig1 = ps(k1)
222             kmax = k1
        end if
224     end do
        if (KSTEP .le. 1) then
226             sig2 = 0
        else
228             sig2 = sig1
        end if
230 C
        findex(1) = sig2/props(1)
232     do k1 = 1, ndi
        fnormal(k1,1) = an(kmax,k1)
234     end do
    C
236 C     PRINT *, 'C', NOEL, KINC, sig2, findex(1)
    C
238     return
    end

```

APÊNDICE A – DEDUÇÃO DA EQUAÇÃO PARA CÁLCULO DAS FORÇAS DE ADESÃO ENTRE DOIS PLANOS EM CONTATO

A energia potencial da interação entre uma molécula A e uma molécula B pode ser expressa por:

$$U_{AB}(D) = -\frac{C_{AB}}{D^6} \quad (\text{A.1})$$

onde, C_{AB} é um coeficiente característico da interação entre as moléculas A e B , que resume as contribuições de todos os três tipos de interações de van der Waals e D é a distância entre as moléculas. O sinal negativo surge por se tratar de uma força atrativa.

Para se determinar a interação entre dois sólidos macroscópicos, é necessário calcular a energia de van der Waals entre uma molécula A e um corpo infinitamente estendido com uma superfície plana feita de moléculas B . Assim, pode-se somar a energia das interações de van der Waals entre a molécula A e todas as moléculas do sólido B . Isto é feito através de uma integração da densidade molecular ρ_B ao longo de todo o volume do sólido:

$$U_{mol/plano} = -C_{AB} \int \int \int \frac{\rho_B}{D^6} dV \quad (\text{A.2})$$

$$= -C_{AB}\rho_B \int_0^\infty \int_0^\infty \frac{2\pi r dr dx}{((D+x)^2 + r^2)^3} \quad (\text{A.3})$$

Utilizando coordenadas cilíndricas e assumindo que a densidade das moléculas no sólido B é constante. Com $2r dr = d(r)^2$, tem-se:

$$W_{mol/plano} = -\pi\rho_B C_{AB} \cdot \int_0^\infty \int_0^\infty \frac{d(r)^2}{((D+x)^2 + r^2)^3} dx \quad (\text{A.4})$$

$$U_{mol/plano} = -\pi\rho_B C_{AB} \cdot \int_0^\infty \left[-\frac{1}{2((D+x)^2 + r^2)^2} \right] dx \quad (\text{A.5})$$

$$U_{mol/plano} = -\frac{\pi\rho_B C_{AB}}{2} \cdot \int_0^\infty \frac{1}{(D+x)^4} dx \quad (A.6)$$

$$U_{mol/plano} = -\frac{\pi\rho_B C_{AB}}{2} \cdot \left[-\frac{1}{3(D+x)^3} \right] \quad (A.7)$$

$$U_{mol/plano} = -\frac{\pi\rho_B C_{AB}}{6D^3} \quad (A.8)$$

Aqui verifica-se uma propriedade importante das forças de van der Waals: A energia de uma molécula e um corpo macroscópico diminui de forma menos acentuada do que a energia entre duas moléculas. No lugar da dependência D^{-6} , a energia diminui proporcionalmente a D^{-3} .

Por fim, calcula-se a energia de van der Waals entre dois sólidos infinitos, que estão separados por uma abertura paralela de espessura D . Portanto, usamos a Equação A.8, que é integrada sobre todas as moléculas do sólido A:

$$U = -\frac{\pi C_{AB} \rho_B}{6} \int \int \int \frac{\rho_A}{(D+x)^3} dV \quad (A.9)$$

$$= \frac{-\pi C_{AB} \rho_B}{6} \int_0^\infty \int_{-\infty}^\infty \int_{-\infty}^\infty \frac{\rho_A dz dy dx}{(D+x)^3} \quad (A.10)$$

Aqui, y e z são as coordenadas paralelas à separação. A integral é infinita porque os sólidos são infinitamente extensos. Por isso, tem-se que dividir pela área. A energia de van der Waals por unidade de área é:

$$u = \frac{U}{A} = -\frac{\pi\rho_A \rho_B C_{AB}}{6} \int_0^\infty \frac{dx}{(D+x)^3} \quad (A.11)$$

$$u = -\frac{\pi\rho_A \rho_B C_{AB}}{6} - \frac{1}{2(D+x)^2} \quad (A.12)$$

$$u = -\frac{\pi\rho_A \rho_B C_{AB}}{12D^2} \quad (A.13)$$

Com a definição da chamada constante de Hamaker:

$$A_H = \pi^2 C_{AB} \rho_A \rho_B \quad (\text{A.14})$$

Tem-se que:

$$w = -\frac{A_H}{12\pi D^2} \quad (\text{A.15})$$

Finalmente, a força por unidade de área é igual a derivada negativa da função de w pela distância:

$$f = -\frac{A_H}{6\pi D^3} \quad (\text{A.16})$$

Que foi a equação utilizada nas sub-rotina FORTRAN para calcular as forças de adesão entre superfícies.

APÊNDICE B – EXPRESSÕES PARA CÁLCULO DAS FORÇAS DE VAN DER WAALS ENTRE PARTÍCULAS E SUPERFÍCIES

Relação de Expressões para cálculo das Forças de Van der Waals entre partículas e Superfícies com diferentes geometrias:

Tabela 10 - Expressões para cálculo da força adesiva entre superfície para diferentes geometrias.

Adaptado de (ISRAELACHVILI, 2011)

Geometria de corpos com superfícies separadas por uma distância D ($D \ll R$)		Interação de Van der Waals	
		Energia, W	Força, $F = -dW/dD$
Dois átomos ou moléculas pequenas	DOIS ÁTOMOS ou PEQUENAS MOLÉCULAS	$-C/r^6$	$-6C/r^7$
Duas superfícies planas (por unidade de área)	DUAS SUPERFÍCIES PLANAS	$W_{\text{plano}} = -A/12\pi D^2$	$-A/6\pi D^3$
Duas esferas ou macromoléculas de raios R_1 e R_2	DUAS ESFERAS	$\frac{-A}{6D} \left(\frac{R_1 R_2}{R_1 + R_2} \right)$	$\frac{-A}{6D^2} \left(\frac{R_1 R_2}{R_1 + R_2} \right)$ Também, $F = 2\pi \left(\frac{R_1 R_2}{R_1 + R_2} \right) W_{\text{plano}}$
Esferas ou macromoléculas de raios R próximas a uma superfície plana	ESFERA SOBRE PLANO	$-AR/6D$	$-AR/6D^2$ e $F = 2\pi R W_{\text{plano}}$
Dois cilindros paralelos de raios R_1 e R_2 (por unidade de comprimento)	DOIS CILINDROS PARALELOS	$\frac{-A}{12\sqrt{2}D^{3/2}} \left(\frac{R_1 R_2}{R_1 + R_2} \right)^{1/2}$	$\frac{-A}{8\sqrt{2}D^{5/2}} \left(\frac{R_1 R_2}{R_1 + R_2} \right)^{1/2}$
Cilindro de raio R próximo a uma superfície plana (por unidade de comprimento)	CILINDRO SOBRE PLANO	$\frac{-A\sqrt{R}}{12\sqrt{2}D^{3/2}}$	$\frac{-A\sqrt{R}}{8\sqrt{2}D^{5/2}}$
Dois cilindros ou filamentos de raios R_1 e R_2 perpendiculares	CILINDROS PERPENDICULARES	$\frac{-A\sqrt{R_1 R_2}}{6D}$	e $\frac{-A\sqrt{R_1 R_2}}{6D^2}$ $F = 2\pi\sqrt{R_1 R_2} W_{\text{plano}}$