
MODELAGEM E ANÁLISE DA DINÂMICA DE
MICROVIGAS EM DISPOSITIVOS DE MICROSCOPIA
DE FORÇA ATÔMICA

Kleber dos Santos Rodrigues

Tese apresentada à Escola de Engenharia
de São Carlos, da Universidade de São
Paulo, como parte dos requisitos para ob-
tenção do título de Doutor em Engenharia
Mecânica.

Área de Concentração: Dinâmica de Má-
quinas e Sistemas.

ESTE EXEMPLAR TRATA-
SE DA VERSÃO CORRI-
GIDA. A VERSÃO ORIGI-
NAL ENCONTRA- SE DIS-
PONÍVEL JUNTO AO DE-
PARTAMENTO DE ENGE-
NHARIA MECÂNICA DA
EESC-USP.

Orientador:

Prof. Dr. Marcelo Areias Trindade

São Carlos

2017



Class.	TESE
Cutt.	9976
Tombo	T060/18
Sysno	2881769

31100210872

23.04.18

AUTORIZO A REPRODUÇÃO TOTAL OU PARCIAL DESTE TRABALHO, POR QUALQUER MEIO CONVENCIONAL OU ELETRÔNICO, PARA FINS DE ESTUDO E PESQUISA, DESDE QUE CITADA A FONTE.

Ficha catalográfica elaborada pela Biblioteca Prof. Dr. Sérgio Rodrigues Fontes da EESC/USP com os dados inseridos pelo(a) autor(a).

DR696m
m

dos Santos Rodrigues, Kleber
MODELAGEM E ANÁLISE DA DINÂMICA DE MICROVIGAS EM
DISPOSITIVOS DE MICROSCOPIA DE FORÇA ATÔMICA / Kleber
dos Santos Rodrigues; orientador Marcelo Areias
Trindade. São Carlos, 2017.

Tese (Doutorado) - Programa de Pós-Graduação em
Engenharia Mecânica e Área de Concentração em Dinâmica
das Máquinas e Sistemas -- Escola de Engenharia de São
Carlos da Universidade de São Paulo, 2017.

1. Método de elementos finitos. 2. microscopia de
força atômica. 3. microviga. 4. viga Euler Bernoulli.
5. atuador piezoeletrico. I. Título.

Eduardo Graziosi Silva - CRB - 8/8907



FOLHA DE JULGAMENTO

Candidato: Licenciado **KLEBER DOS SANTOS RODRIGUES**.

Título da tese: "Modelagem e análise da dinâmica de microvigas em dispositivos de microscopia de força atômica".

Data da defesa: 15/03/2017.

Comissão Julgadora:

Resultado:

Prof. Associado **Marcelo Areias Trindade**
(Orientador)
(Escola de Engenharia de São Carlos/EESC)

APROVADO

Prof. Dr. **Helio Aparecido Navarro**
(Escola de Engenharia de São Carlos/EESC)

Aprovado

Prof. Dr. **Alberto Luiz Serpa**
(Universidade Estadual de Campinas/UNICAMP)

Aprovado

Prof. Dr. **Átila Madureira Bueno**
(Universidade Estadual Paulista "Júlio de Mesquita Filho"/UNESP - Sorocaba)

Aprovado

Dr. **Marcelo Assumpção Pereira da Silva**
(Centro Universitário Central Paulista/UNICEP)

Aprovado

Coordenador do Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica:
Prof. Associado **Gherhardt Ribatski**

Presidente da Comissão de Pós-Graduação:
Prof. Associado **Luís Fernando Costa Alberto**

EESC/USP

Serviço de Pós-Graduação

Protocolado em 17/04/2018



Este trabalho é dedicado à todos que direta ou indiretamente contribuíram para a sua realização.

Agradecimentos

Agradeço à CAPES pelo suporte financeiro, à Universidade de São Paulo, câmpus de São Carlos, pela estrutura e apoio estrutural e intelectual. Ao professor Marcelo Areias Trindade, pela orientação, confiança, suporte e paciência. Aos amigos, Ricardo Nozaki, Ricardo Álvarez, Jelder Velásquez, Augusto Shigueoka e Willians Godoy, pelo companheirismo, apoio e ajudas computacionais. Aos amigos distantes (Carlão, Hassan e Itamar) que também estão trilhando seus caminhos nesta interessante jornada. Às meninas da pós, Ana Paula e Iara, pelo companheirismo e pelos vários e vários litros de café. Enfim, a todos que contribuíram de alguma forma para que este trabalho fosse realizado.

Agradecimento essencial à minha família, à minha mãe, Magdalena, que sempre me apoiou e ajudou, mesmo nos momentos mais conturbados da minha vida. À minha irmã Margarette, que desde sempre esteve ao meu lado, sendo amiga e companheira. Agradecer ao meu querido pai, Antônio (*in memoriam*), que em sua simplicidade sempre me ajudou e apoiou. À minha esposa Viviane, que a cada dia me mostra como é bom viver e aproveitar cada momento, por mais instantâneo que seja.

"O que nos causa problemas, não é o que não sabemos, mas aquilo que temos certeza que é verdade."

Mark Twain

Resumo

RODRIGUES, K.S. Modelagem e análise da dinâmica de microvigas em dispositivos de microscopia de força atômica. 2017, Tese (Doutorado) - Escola de Engenharia de São Carlos, Universidade de São Paulo, São Carlos-SP, Brasil.

Nas últimas décadas, o Microscópio de Força Atômica (AFM) tornou-se tema de inúmeras publicações científicas da área específica, gerando um grande número de modelos matemáticos com intuito de representar seu funcionamento. Uma sonda (ponteira) situada na extremidade livre de uma haste flexível (microviga de $\sim 140\mu\text{m}$) com dimensões de ordem micrométrica é responsável por medir, ponto a ponto, informações sobre a superfície das amostras, tais como topologia, rugosidade, rigidez, entre outros. Em geral, os trabalhos publicados apresentam representações simplificadas do sistema microviga-ponteira-amostra (modelos com 1 ou 2 graus de liberdade), que não levam em conta aspectos importantes da dinâmica do sistema. Este trabalho propõe o uso do Método de Elementos Finitos (MEF) com abordagem variacional para representar o sistema. Para tanto, usam-se as hipóteses cinemáticas de vigas Bernoulli-Euler para representar a microviga, na sua extremidade livre, consideram-se uma ponteira com massa e inércia, bem como as forças de interação inerentes ao sistema, na extremidade engastada, algumas configurações são consideradas: base deslizante com força imposta; base deslizante com deslocamento prescrito; base móvel com deslocamento relativo e base PZT com acoplamento piezelétrico. Para efeitos de simplificação, realiza-se a redução modal dos modelos obtidos através do método de truncamento, desta maneira, torna-se possível estudar o sistema quanto à variação dos modos de vibração considerados. A partir da obtenção de dados experimentais de uma microviga real, se torna possível calcular o fator de amortecimento que será usado nos modelos obtidos. Com os parâmetros geométricos e estruturais de uma microviga real, e a partir da redução realizada, faz-se a validação dos modelos obtidos. Após a validação, dois modelos são escolhidos, e daí realizam-se simulações numéricas com intuito de entender a dinâmica do sistema variando o número de modos e as distâncias iniciais entre ponteira e superfície da amostra. Dessas análises, observa-se que para um número pequeno de modos, existem grandes dificuldades de se obter resultados numéricos satisfatórios, isso ocorre pois, à medida que a distância entre ponteira e amostra diminui, aumentam as não linearidades do sistema. A seguir, as forças de interação são analisadas e por fim, inicia-se o processo de obtenção de imagens da topologia de uma superfície a partir de dados experimentais. De uma forma geral, os modelos se mostram flexíveis e de fácil implementação computacional, tornando-se uma ótima opção para representar o funcionamento do AFM, permitindo o uso de várias configurações, tanto geométricas quanto materiais.

Palavras-chave: Método de elementos finitos, microscopia de força atômica, microviga, viga Euler Bernoulli, atuador piezelétrico.

Abstract

RODRIGUES, K. S. R. Modeling and dynamical analysis of microcantilever beams of atomic force microscopy devices. 2016, Doctoral Thesis - São Carlos School of Engineering, University of São Paulo, São Carlos-SP, Brazil.

In recent decades, the Atomic Force Microscope (AFM) has become the subject of a several number of scientific publications in the specific area, generating a large number of mathematical models in order to represent its operation. A probe (tip) located at the free end of a microcantilever ($\sim 140\mu m$) with micrometric order dimensions is responsible for measuring point-to-point information about the surface of samples such as topology, roughness, rigidity, among others. In general, the published works are represented by the microcantilever-tip-sample system (models with 1 or 2 degrees of freedom), which do not take into account important aspects of the system dynamics. This work proposes the use of the Finite Element Method (FEM) with variational approach to represent the system. Bernoulli-Euler kinematic hypotheses for beams are used to represent the microcantilever. At its free end, it is considered a probe tip with mass and rotary inertia, as well as the interaction forces inherent to the system, at the clamped end, some configurations are considered: sliding base with imposed force; sliding base with prescribed displacement; base with relative displacement and PZT base with piezoelectric coupling. For the purposes of simplification, a modal reduction of the models obtained through the truncation method is performed, thus, it becomes possible to study the system regarding the variation of vibration modes. From experimental data of a real microcantilever, it was possible to calculate the damping factor that would be used in the obtained models. With the geometric and structural parameters of a real microcantilever and with the performed reduction, the obtained models are validated. After a validation, two models are chosen, from which numerical simulations are performed in order to understand the dynamics of the system by varying the number of modes and as initial distances between the tip and the sample surface. From these analyses, it is observed that for a small number of modes there are several difficulties in obtaining satisfactory numerical results (errors occur in the simulations), this occurs because while the tip-sample distance decreases, the non-linearities of the system increases. As follows, the interaction forces are analyzed and finally, a methodology is proposed for obtaining topological images of a surface from experimental data. In general, the models are flexible and with easy computational implementation, making it a satisfactory alternative to represent the operation of the AFM, allowing the use of several variants, both geometric and material.

Keywords: Finite element method, atomic force microscopy, AFM cantilever beam, Euler Bernoulli beam, piezoelectric actuator.

Sumário

Lista de Figuras	xiii
Lista de Tabelas	xix
1 Introdução	1
1.1 Introdução	1
1.2 Revisão Bibliográfica	2
1.2.1 Funcionamento do AFM	2
1.2.2 Modos de operação do AFM	4
1.2.3 Aplicação de materiais piezelétricos em AFM	8
1.2.4 Sistema de controle do AFM	10
1.3 Conceitos básicos	11
1.3.1 Forças de interação entre ponteira e amostra	11
1.3.2 Aquisição de imagens nos modos dinâmicos via AFM	13
1.3.3 Comportamento Irregular	15
1.3.4 Obras publicadas na área	16
1.4 Objetivos	17
1.5 Organização do trabalho	17
2 Modelo matemático	19
2.1 Modelo de elementos finitos para o sistema com base deslizante-livre	19
2.1.1 Discretização dos deslocamentos e tensões via elementos finitos	20
2.1.2 Formulação variacional	22
2.1.3 Variação da energia cinética	22

2.1.4	Varição da energia potencial	22
2.1.5	Equação do movimento considerando a ponteira da microviga .	23
2.1.6	Condições de contorno	24
2.2	Modelo de elementos finitos para o sistema com deslocamento relativo	25
2.2.1	Discretização dos deslocamentos e deformações via elementos finitos	25
2.2.2	Formulação variacional	26
2.2.3	Varição da energia cinética	26
2.2.4	Varição da energia potencial	27
2.2.5	Equação do movimento da microviga considerando a ponteira .	27
2.2.6	Condições de contorno	28
2.3	Modelo de elementos finitos para o sistema acoplado	28
2.3.1	Condições de contorno	29
2.3.2	Modelagem do atuador piezelétrico	29
2.3.3	Equação do movimento para o sistema acoplado	31
2.4	Modelagem da ponteira da microviga	31
2.4.1	Massa da ponteira	32
2.4.2	Segundo momento de inércia da ponteira	32
2.5	Modelos de interação	33
3	Análises preliminares dos modelos obtidos	35
3.1	Redução da ordem dos modelos: Método de truncamento	35
3.2	Aquisição dos valores paramétricos e da curva de frequência do sistema	36
3.3	Obtenção do fator de amortecimento	40
3.4	Validação dos modelos obtidos	41
3.4.1	Validação do modelo com base deslizante-livre e força imposta .	41
3.4.2	Validação do modelo deslizante-livre e deslocamento prescrito .	42
3.4.3	Validação do modelos com base móvel (deslocamento relativo) .	43
3.4.4	Validação do modelo acoplado (atuador piezelétrico na base) . .	44
3.5	Escolha dos modelos matemáticos	44

4	Simulações numéricas e resultados	47
4.1	Variação dos modos de vibrar nos modelos de ordem reduzida	47
4.1.1	Modelo acoplado com atuador PZT	47
4.1.2	Modelo com deslocamento relativo	49
4.2	Variação da distância inicial entre ponteira e amostra	51
4.2.1	Modelo com acoplamento piezelétrico	51
4.2.2	Modelo com deslocamento relativo	63
4.3	Análise das forças de interação	76
4.4	Obtenção da topologia de superfícies usando os modelos obtidos	78
4.4.1	Apresentação dos dados experimentais	78
4.4.2	Processo de obtenção da topologia de uma superfície	80
5	Conclusões e trabalhos futuros	83
5.1	Conclusões	83
5.2	Trabalhos Futuros	85
5.3	Lista de Publicações Derivadas da Tese	85
	Referências Bibliográficas	87

Lista de Figuras

1.1	Esquema de AFM.	3
1.2	Forças de Interação (Adaptado de Jalili e Laxminarayana (2004)).	4
1.3	Imagem representando a topologia de uma amostra de silício polida obtida por AFM no modo contato (SALVADORI, 2014).	6
1.4	Imagem representando a topologia de uma esfera polimérica obtida por AFM no modo não contato.	7
1.5	Imagem representando a topologia de uma amostra obtida por AFM no modo intermitente (Imagem obtida no Laboratório de Microscopia Eletrônica (IFSC-USP)).	8
1.6	Esquema de elemento piezolétrico ((LOPES Jr et al., 2016)).	9
1.7	Dispositivo piezolétrico sob ação de potencial elétrico ((EATON; WEST, 2010)).	9
1.8	À esquerda: tipo de scanner que move a amostra, à direita: tipo de scanner que movimentam a microviga ((EATON; WEST, 2010)).	10
1.9	Esquema controle <i>PID</i> (EATON; WEST, 2010).	10
1.10	Esquema de interações intermoleculares (SALVADORI, 2013).	13
1.11	Diferentes perfis de superfícies com mesmo valor médio de rugosidade ((FERRI et al., 2012)).	14
1.12	Comparação entre R_a e R_q ((FERRI et al., 2012)).	15
2.1	Esquema de representação da microviga.	20
2.2	Elemento finito de viga de Bernoulli-Euler.	21
2.3	Esquema do modelo considerando deslocamento relativo à base móvel.	26

2.4	AFM scheme	29
2.5	Esquema de cone com base circular	32
2.6	Segundo momento de inércia da ponteira	32
2.7	Esquema de ponteira/microviga	33
3.1	Vista de cima da microviga	37
3.2	Vista de lado da ponteira/microviga	37
3.3	Vista frontal da ponteira	38
3.4	Modelo de aparelho (AFM) usado para obter os dados da microviga (SALVADORI, 2014)	39
3.5	Tela do AFM após <i>tuning</i>	40
3.6	Método da Largura de Banda	40
3.7	Comparação entre modelo de força imposta com dados experimentais	42
3.8	Comparação entre modelo com deslocamento prescrito e dados experimentais	43
3.9	Comparação entre modelo com deslocamento relativo e dados experimentais	43
3.10	Comparação entre modelo acoplado e dados experimentais	44
4.1	Resposta em frequência da ponteira sob excitação do atuador PZT para diferentes distâncias entre ponteira e amostra e considerando modelo reduzido com menos de 4 modos de vibrar. Da esquerda para a direita:($d = (90;88;84;63)nm$)	48
4.2	Resposta em frequência da ponteira sob excitação do atuador PZT para diferentes distâncias entre ponteira e amostra e considerando modelo reduzido com menos de 4 modos de vibrar. Da esquerda para a direita:($d = (92;90,5;45;20)nm$).	50
4.3	Resposta em frequência do sistema livre da presença das forças de interação ($d \gg 100nm$)	51
4.4	Forças de interação para distância inicial $d = 100nm$	52

4.5	Resposta do deslocamento da ponteira considerando $d = 100nm$	53
4.6	Forças de interação para distância inicial $d = 90nm$	53
4.7	Resposta do deslocamento da ponteira considerando $d = 90nm$	53
4.8	Forças de interação para distância inicial $d = 80nm$	54
4.9	Resposta do deslocamento da ponteira considerando $d = 80nm$	54
4.10	Forças de interação para distância inicial $d = 70nm$	55
4.11	Resposta do deslocamento da ponteira considerando $d = 70nm$	55
4.12	Forças de interação para distância inicial $d = 60nm$	56
4.13	Resposta do deslocamento da ponteira considerando $d = 60nm$	56
4.14	Forças de interação para distância inicial $d = 50nm$	57
4.15	Resposta do deslocamento da ponteira considerando $d = 50nm$	57
4.16	Potencial de Lennard Jones para $d = 40nm$	58
4.17	Resposta do deslocamento da ponteira considerando $d = 40nm$	58
4.18	Forças de interação para distância inicial $d = 30nm$	59
4.19	Resposta do deslocamento da ponteira considerando $d = 30nm$	59
4.20	Forças de interação para distância inicial $d = 20nm$	60
4.21	Resposta do deslocamento da ponteira considerando $d = 20nm$	60
4.22	Forças de interação para distância inicial $d = 0,4nm$	61
4.23	Resposta do deslocamento da ponteira considerando $d = 0,4nm$	61
4.24	Resposta em frequência do deslocamento da ponteira para diferentes distâncias entre ponteira e amostra.	62
4.25	Modificação da resposta no tempo do deslocamento da ponteira com a variação da distância entre ponteira e superfície da amostra.	62
4.26	R_q dos deslocamentos apresentados na figura 4.25	63
4.27	Resposta em frequência do sistema livre da presença das forças de in- teração ($d \gg 100nm$)	64
4.28	Forças de interação para distância inicial $d = 100nm$	64
4.29	Resposta do deslocamento da ponteira considerando $d = 100nm$	65
4.30	Forças de interação para distância inicial $d = 90nm$	65

4.31	Resposta do deslocamento da ponteira considerando $d = 90nm$	66
4.32	Forças de interação para distância inicial $d = 80nm$	66
4.33	Resposta do deslocamento da ponteira considerando $d = 80nm$	67
4.34	Forças de interação para distância inicial $d = 70nm$	67
4.35	Resposta do deslocamento da ponteira considerando $d = 70nm$	68
4.36	Forças de interação para distância inicial $d = 60nm$	68
4.37	Resposta do deslocamento da ponteira considerando $d = 60nm$	69
4.38	Forças de interação para distância inicial $d = 50nm$	69
4.39	Resposta do deslocamento da ponteira considerando $d = 50nm$	70
4.40	Forças de interação para distância inicial $d = 40nm$	70
4.41	Resposta do deslocamento da ponteira considerando $d = 40nm$	71
4.42	Forças de interação para distância inicial $d = 30nm$	71
4.43	Resposta do deslocamento da ponteira considerando $d = 30nm$	72
4.44	Forças de interação para distância inicial $d = 20nm$	72
4.45	Resposta do deslocamento da ponteira considerando $d = 20nm$	73
4.46	Forças de interação para distância inicial $d = 0,4nm$	73
4.47	Resposta do deslocamento da ponteira considerando $d = 0.4nm$	74
4.48	Resposta em frequência do deslocamento da ponteira para diferentes distâncias entre ponteira e amostra.	74
4.49	Modificação da resposta no tempo do deslocamento da ponteira com a variação da distância entre ponteira e superfície da amostra.	75
4.50	R_q dos deslocamentos apresentados na figura 4.25.	76
4.51	Forças de interação em função da distância ponteira-amostra usando o modelo acoplado.	77
4.52	Forças de interação em função da distância ponteira-amostra usando o modelo com deslocamento relativo.	78
4.53	Superfície de diamante obtida via AFM.	79
4.54	Superfície de diamante obtida com dados da figura 4.53.	79
4.55	Representação do sistema com a presença de um pico e com deflexão.	80

4.56 Imagem da topologia da superfície a ser reproduzida.	81
4.57 Imagem da topologia da superfície obtida com o modelo acoplado. . . .	82
4.58 Comparação entre superfície real e superfície obtida com modelo de base móvel.	82

Lista de Tabelas

3.1	Parâmetros da microviga para validação dos modelos.	38
3.2	Comparação entre os picos obtidos numericamente e o experimental (kHz).	44

Capítulo 1

Introdução

1.1 Introdução

A compreensão dos fenômenos que ocorrem na superfície dos materiais é a base para um grande número de aplicações tecnológicas atuantes na nossa vida cotidiana, desde interação entre próteses e ossos na medicina, até a catálise de reações químicas em automóveis na indústria, entre outros. Segundo (TECNOLÓGICA, 2015), a troca de elétrons entre átomos vizinhos é o princípio básico dos fenômenos da interação entre uma superfície e o meio externo, e daí, surge a necessidade de saber que átomos compõem a superfície dos sólidos, como se distribuem e quais são as ligações químicas entre eles.

Até a década de 1980, os microscópios ópticos existentes não possibilitavam a caracterização de superfícies em níveis atômicos, até que Gerd Binnig e Heinrich Rohrer (BINNIG; ROHRER, 1983), dois pesquisadores a serviço da IBM em Rüschlikon, na Suíça, inventaram um aparelho capaz de, não somente produzir imagens em escala atômica, mas medir e manipular átomos individuais, possibilidade proposta por Richard Feynman, nos anos 1960 (GALEMBECK et al., 2013). O aparelho, denominado Microscópio de Tunelamento (Scanning Tunneling Microscope, STM), desencadeou o desenvolvimento de uma família de técnicas de microscopia chamada de Microscopia de Varredura por Sonda (SPM, Scanning Probe Microscopy). Esta família caracteriza-se por usar uma sonda que varre a superfície da amostra, e ponto a ponto, registra algum tipo de interação entre esta sonda e a amostra, sendo capaz de obter imagens 3D com ampliação da ordem Giga métrica 10^9 .

Dependendo do tipo de interação, a microscopia toma um nome específico, por exemplo, se o objetivo for a caracterização de propriedades mecânicas da amostra, a técnica será denominada Microscopia de Modulação de Força (MMF). A invenção do Microscópio de Tunelamento abriu novos horizontes na área de microscopia e nanotecnologia, rendendo a seus inventores (BINNIG; ROHRER, 1983) um prêmio Nobel de Física no ano de 1986. Algumas das modalidades de Microscopia de Varredura (SPM) desenvolvidas são:

- AFM, Atomic Force Microscope;
- EFM, Electrostatic Force Microscope;
- ESTM, Electromechanical Scanning Tunneling Microscope;
- FMM, Force Modulation Microscope;
- KPFM, Kelvin Probe Force Microscope;
- SCM, Scanning Capacitance Microscopy;
- MFM, Magnetic Force Microscope, entre outras.

Dentre as técnicas citadas, destaca-se a de Microscopia de Força Atômica, que nas últimas décadas ganhou destaque tornando-se uma das mais poderosas ferramentas desta família. O aparelho usado nesta técnica é o Microscópio de Força Atômica (AFM), que pode possibilitar o desenvolvimento de máquinas e dispositivos eletrônicos como transistores, além da manipulação de nanotubos de carbono, a imagem do DNA e atuação em nano-eletrônica, entre outros (RUTZEL et al., 2003). Um dos mais importantes aspectos do AFM é a possibilidade de caracterizar a superfície das amostras em condições ambiente, sem a necessidade de realizar grandes preparos.

Dada a importância do AFM, tanto na análise, quanto na manipulação de amostras de ordem nanométrica, muitos trabalhos vêm sendo publicados com intuito de entender e melhorar seu funcionamento, segundo Jalili e Laxminarayana (2004), a modelagem e compreensão dos aspectos de funcionamento são essenciais para seu desenvolvimento.

1.2 Revisão Bibliográfica

Nas próximas seções, uma revisão da bibliografia específica desta área de pesquisa é realizada, com o intuito de situá-la na sua área específica da ciência. Os temas a serem desenvolvidos são: *i*) funcionamento do AFM; *ii*) conceitos básicos utilizados no trabalho; *iii*) obras publicadas com intuito de entender e melhorar seu funcionamento.

1.2.1 Funcionamento do AFM

Nesta técnica (Microscopia de Força Atômica), o aparelho utilizado é o Microscópio de Força Atômica (AFM) e sua configuração básica pode ser representada pelo esquema da figura (1.1).

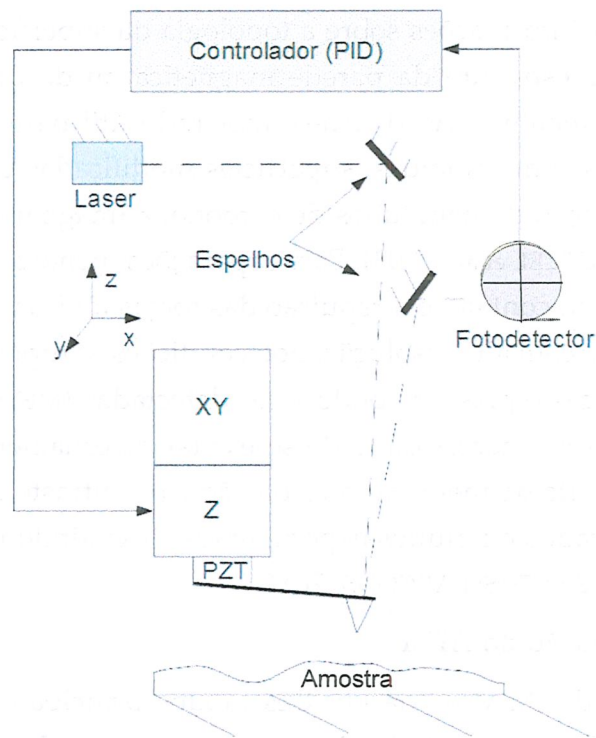


Figura 1.1: Esquema de AFM.

O AFM tem em sua configuração básica uma haste flexível (microviga) de ordem micrométrica ($\sim 140nm$). Em suas extremidades engastada e livre encontram-se, respectivamente, um posicionador piezelétrico e uma sonda (probe) com uma ponteira muito fina (tip). O posicionador, composto por atuadores piezelétricos (normalmente feito de material cerâmico piezelétrico, PZT, titanato zirconato de chumbo) é responsável pelo deslocamento da microviga nas direções x , y e z , enquanto outro atuador PZT é responsável pela excitação da microviga (dependendo do modo de operação). Devido à variação da tensão aplicada e ao uso dos posicionadores piezelétricos, esses deslocamentos têm precisão da ordem de décimos de nanômetros. Na outra extremidade, a ponteira serve como ponta de prova, e ponto a ponto, mede as interações desejadas. Desta maneira, a microviga sofre deflexões que são detectadas por um laser e enviadas a um fotodetector de quatro quadrantes, daí a interação do par ponteira-superfície é medida. Esse valor é comparado com um valor constante previamente definido (*set point*) e o erro entre ambos é calculado por um sistema de controle do tipo PID (Proporcional-Integral-Derivativo). Esse valor (o erro) é gravado como um pixel desse ponto, recebendo uma cor referente ao seu comprimento, daí, o sistema de controle reposiciona a ponteira no valor do *set point* para medir a interação no ponto seguinte.

Dependendo do modo de operação e da distância entre ponteira e superfície, as forças de interação podem variar entre 10^{-12} e $10^{-6}N$, além disso, uma variedade de forças (Van der Waals, Magnéticas, Coulombianas, Capilares, entre outras) podem

ser sentidas e fornecer informações sobre a topologia da superfície, sobre a distribuição de cargas, sobre a estrutura da parede magnética ou da distribuição de filmes líquidos. Mais recentemente, o AFM tem-se mostrado útil para medir as forças que atuam entre entidades como colóides, superfícies modificadas e moléculas, também se incluem a manipulação de nanotubos de carbono, a imagem do DNA e a atuação em nano-eletrônica (RUTZEL et al., 2003). Para separações menores, da ordem de Angstroms, a ponteira está em contato, e a repulsão das forças iônicas permite o traçado da topologia da superfície com alta resolução. Sob condições apropriadas, forças de atrito ou deformações elásticas e plásticas podem ser detectadas (MEYER, 1992). Em outros tipos de análise, nota-se a necessidade de se excitar externamente altas frequências da microviga, com intuito de melhorar a resolução e o contraste das imagens obtidas, aprimorando os resultados de muitos experimentos e extraindo informações complementares da amostra (SANTOS; BARCONS, 2014).

1.2.2 Modos de operação do AFM

O funcionamento do AFM se dá em três modos principais de operação: Modo Contato, Modo Não Contato e Modo Contato Intermitente. Na figura 1.2, o gráfico mostra a atuação das forças atrativas e repulsivas durante a variação da distância vertical entre ponteira e amostra (JALILI; LAXMINARAYANA, 2004).

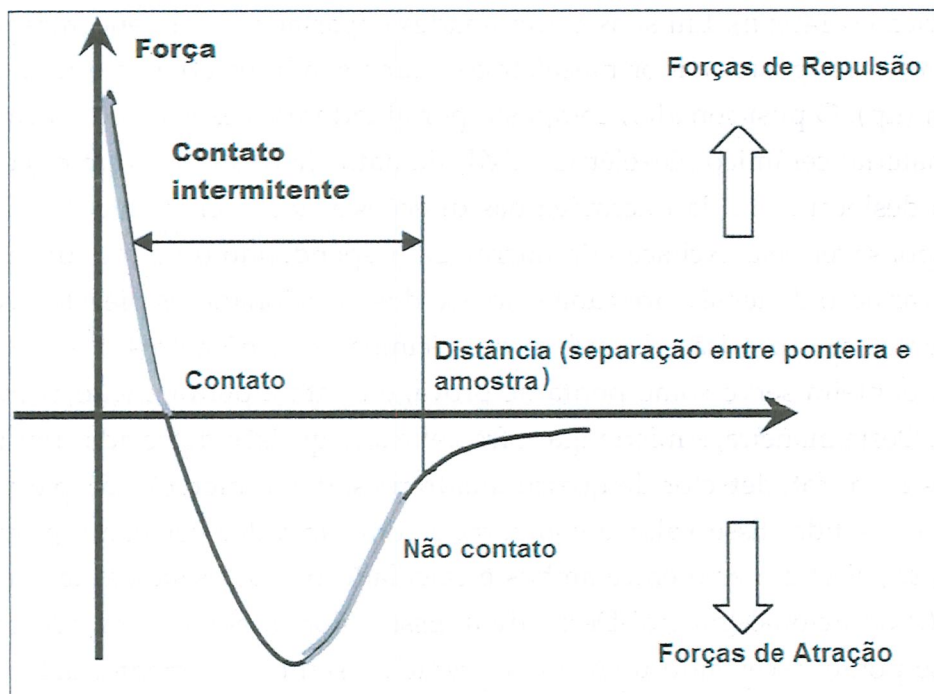


Figura 1.2: Forças de Interação (Adaptado de Jalili e Laxminarayana (2004)).

Acima do eixo horizontal, observa-se a atuação das forças de repulsão (modo contato e contato intermitente) e, abaixo do eixo, observa-se a presença das forças de atração (modo não contato e contato intermitente).

a) Modo contato:

O modo contato, ou modo dc, pode ser considerado o mais básico de operação do AFM (HERRMANN et al., 1997). Nele a ponteira permanece a uma distância mínima da amostra e as forças intermoleculares atuantes são de natureza repulsiva. A força realizada pela ponteira pode ser calculada multiplicando-se a deflexão da microviga pela sua constante de mola,

$$F = -kz \quad (1.1)$$

onde k e z representam a constante de mola e o deslocamento vertical da ponteira, respectivamente (FERRI et al., 2012). No modo contato, dois modos de atuação podem ocorrer, o modo de altura constante ou de força constante:

- **Modo de altura constante:** nesse modo não há deslocamento na direção z , e a deflexão produzida pela interação entre ponteira e amostra é usada para estimar a topologia da superfície. Uma das desvantagens desse método é que grandes mudanças de relevo da superfície podem não ser identificadas e danos podem ocorrer tanto na microviga quanto na superfície da amostra;
- **Modo de força constante:** nesse modo (mais comumente usado) a força normal que atua entre a ponteira e a amostra é mantida constante através de um circuito fechado de realimentação, um elemento de posicionamento PZT é utilizado para posicionar a microviga e aplicar a força necessária sobre a amostra. A ponteira é colocada em contato com a superfície para que a deflexão desejada seja alcançada. Ao deslocar-se lateralmente, a microviga tem, ponto a ponto, suas deflexões gravadas pelo sistema óptico do aparelho. O valor medido é comparado a um valor de referência situado num amplificador de realimentação DC, o erro resultante é utilizado para acionar o elemento de posicionamento PZT que aplica a voltagem necessária. A posição em z da microviga é alterada de forma a restaurar a deflexão desejada e manter a força constante. A tensão aplicada através do amplificador de realimentação DC para o elemento de posicionamento PZT é uma medida da topologia da superfície. O valor medido é expresso como uma função da posição lateral da ponteira na amostra e é usado para gerar a topologia da superfície.

A figura a seguir é a imagem representando a topologia de uma amostra de silício polida, obtida pela técnica de contato, cedida pelo LFF-IFUSP (Laboratório de Filmes Finos - Instituto de Física da Universidade de São Paulo).

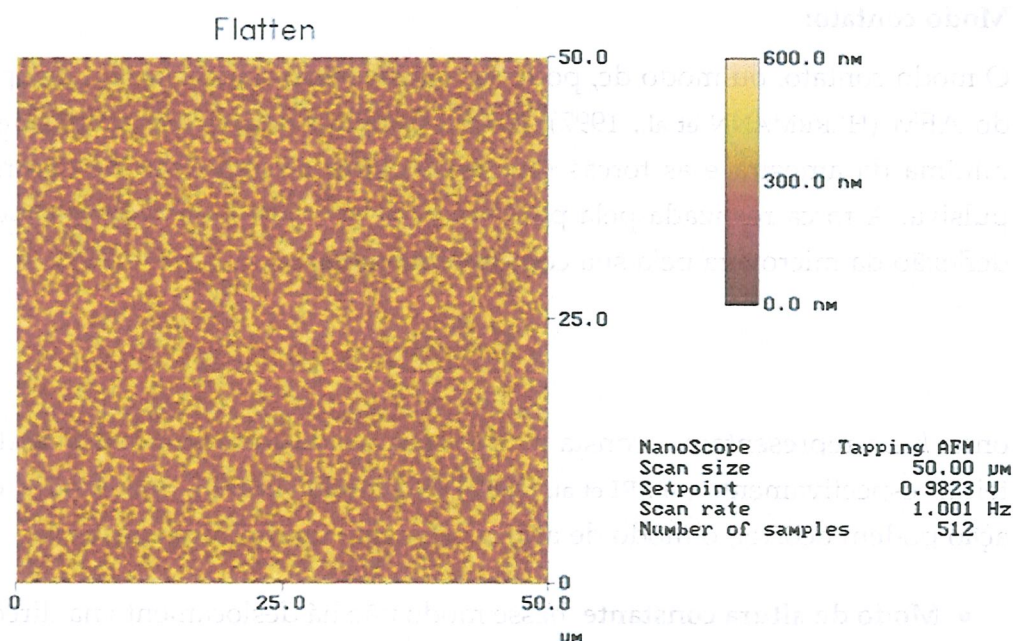


Figura 1.3: Imagem representando a topologia de uma amostra de silício polida obtida por AFM no modo contato (SALVADORI, 2014).

As principais desvantagens do modo contato são as forças de adesão e cisalhamento lateral, que tendem a danificar a amostra.

b) Modo não contato:

O modo não contato, ou modo ac, pode ser considerado o oposto do modo contato, pois a ponteira da microviga não toca a superfície da amostra. A ponteira é mantida a distâncias que variam de unidades à dezenas de nanômetros, dessa forma, as forças de van der Waals são detectadas e a imagem da topologia da superfície é construída. Para que haja a detecção das forças atuantes, é necessário que a microviga oscile, o que comumente ocorre com frequência próxima à de sua ressonância possibilitando medir as mudanças na amplitude, fase e frequência ((SALVADORI, 2013)).

Para que seja possível excitar a microviga numa frequência próxima à de ressonância, é preciso realizar um procedimento capaz de estimar os valores das frequências de ressonância da microviga, este procedimento é chamado de *tuning* e é realizado pelo próprio AFM. O modo não contato apresenta vantagens sobre o modo contato, pois permite a análise de uma gama maior de amostras, já que não toca na superfície da amostra, impedindo que a mesma seja danificada. Por não sofrer ação de forças repulsivas, é possível analisar superfícies macias e/ou elásticas, nesse caso a força total entre a ponteira e a amostra no regime não-contato é muito baixa, na ordem de $10^{-12}N$.

Quando a espessura da camada contaminante sobre a superfície da amostra é

maior que a região onde atuam as forças de van der Waals, a ponteira pode ficar presa nessa camada ou pairando a uma distância onde a detecção das forças é ineficiente. Nesses casos, o uso desse método se torna inadequado (JALILI; LAXMINARAYANA, 2004). A figura 1.4 trata de uma esfera polimérica área de varredura quadrada com $36\mu\text{m}^2$ (SALVADORI, 2013).

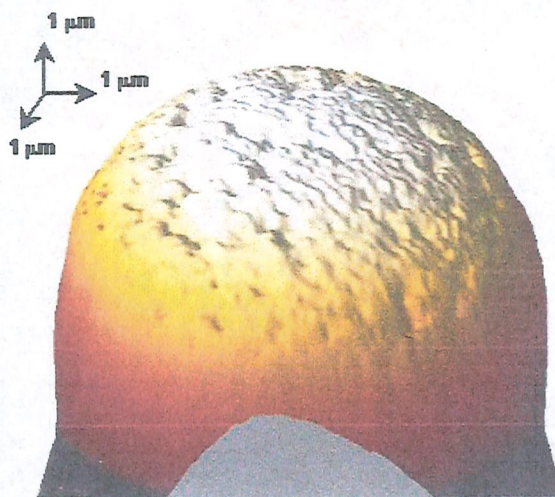


Figura 1.4: Imagem representado a topologia de uma esfera polimérica obtida por AFM no modo não contato.

c) Modo de contato intermitente

No modo de contato intermitente, também conhecido como *tapping mode* ou *quasi contact mode* (HERRMANN et al., 1997), a microviga é excitada pelo atuador piezelétrico com frequências que variam de 100 a 600kHz, operando com amplitudes de oscilação que variam de 20 a 100nm e tocando a superfície da amostra de 50000 a 500000 vezes. Antes de começar o escaneamento, é necessário realizar o *tuning* da microviga e definir um *set point*, que neste caso pode ser a amplitude de oscilação da ponteira.

Durante o experimento, vales podem representar oscilações maiores que a do *set point*, assim como picos determinam amplitudes menores. A partir destas medições, um sistema de controle realiza correções ponto a ponto em z, e, ao final do escaneamento, obtém-se uma imagem da topologia da superfície da amostra. A definição do *set-point* tem um papel importante na interação ponteira-amostra, pois valores maiores implicam em interações mais fracas com tempo de correção maior. Para valores de *set-point* menores, ocorre uma maior dissipação de energia, exigindo menor tempo para que o sistema realize a correção da altura z em cada ponto (SALVADORI, 2013).

A figura 1.5 mostra uma imagem obtida experimentalmente no Laboratório de

Microscopia Eletrônica (IFSC-USP). A imagem é de uma amostra preparada por eletrodeposição de cobre, usando uma matriz de nanoesferas polimerais.

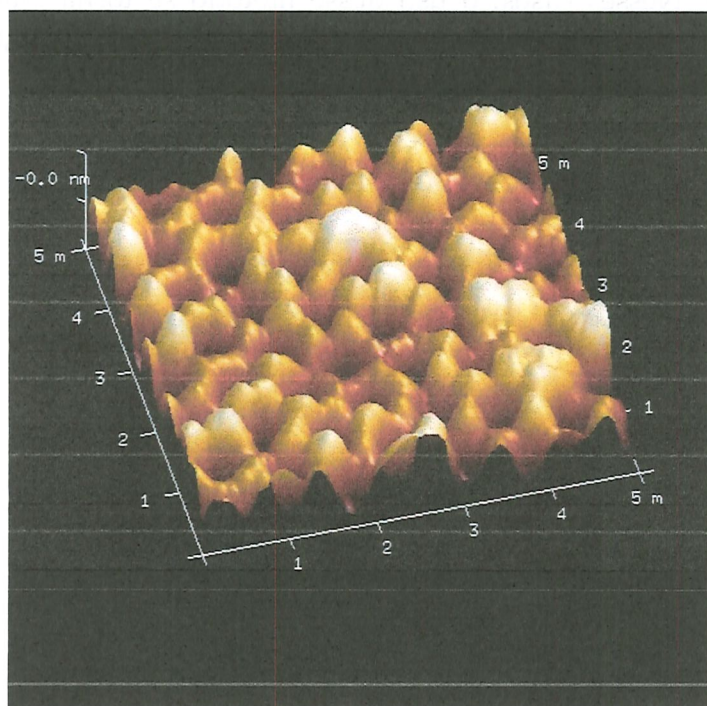


Figura 1.5: Imagem representando a topologia de uma amostra obtida por AFM no modo intermitente (Imagem obtida no Laboratório de Microscopia Eletrônica (IFSC-USP)).

Alguns aparelhos permitem explorar a detecção de fase, e devido à sensibilidade da técnica, é possível extrair novas informações da imagem como a diferença entre módulos de elasticidade das fases presentes (HERRMANN et al., 1997).

1.2.3 Aplicação de materiais piezelétricos em AFM

Descoberta em 1880 por Jacques e Pierre Curie, a piezeletricidade é uma característica inerente de certos materiais, tanto naturais, quanto sintéticos. Da literatura específica, sabe-se que para esses materiais, a aplicação de um esforço mecânico gera um potencial elétrico (efeito direto), assim como a aplicação de um potencial elétrico gera uma deformação do material (efeito inverso). Nos dias atuais, os materiais piezelétricos são utilizados nas mais diversas áreas, tanto científicas, quanto em áreas como medicina, acústica, engenharia, etc. Como exemplo, podemos citar:

- Medicina: medidor de pressão (efeito direto) e aparelhos de ultrassom (efeito inverso);
- Acústica: microfones (efeito direto), alto falantes (efeito inverso);
- Engenharia: atuadores (efeito direto), sensores (efeito inverso).

Uma infinidade de exemplos podem ser apresentados, já que a utilização de materiais com propriedades piezelétricas se tornou bastante extensa nos últimos anos. A seguir, um esquema apresenta um modelo de elemento piezelétrico aplicado à uma certa estrutura.

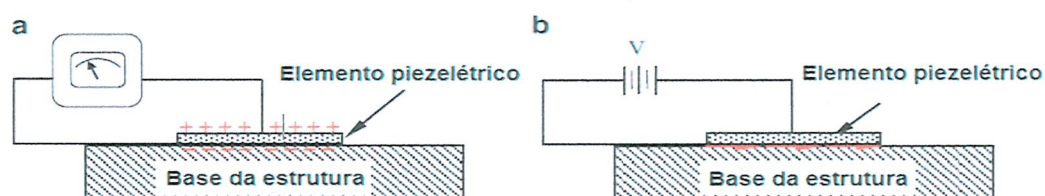


Figura 1.6: Esquema de elemento piezelétrico ((LOPES Jr et al., 2016)).

Quando um potencial é aplicado em dois lados opostos de um dispositivo piezelétrico, sua geometria é alterada e a magnitude dessa mudança depende da intensidade deste potencial. Em geral, a expansão é da ordem de décimos de nanômetros ($0,1nm$) para cada Volt aplicado (EATON; WEST, 2010), com esse nível de precisão, os dispositivos piezelétricos se tornam indispensáveis em Microscopia de Força Atômica, e graças à possibilidade de usar geometrias mais complexas, se torna possível escanear superfícies em diversas direções.

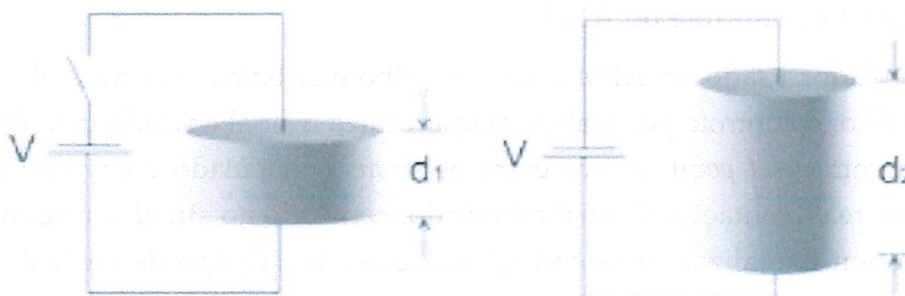


Figura 1.7: Dispositivo piezelétrico sob ação de potencial elétrico ((EATON; WEST, 2010)).

Antes da invenção do AFM, o perfilômetro Stylus era o aparelho usado para caracterizar superfícies de tamanhos menores, mas o aparelho apresentava grandes limitações quanto à ordem de grandeza das superfícies analisadas. Uma das razões do AFM ser mais eficiente para a tarefa de caracterizar superfícies de amostras muito pequenas é o fato dele ser mais sensível que o perfilômetro, graças ao sistema de controle por realimentação, que mantém constante a interação a ser medida. Dessa maneira, pode-se comparar a interação obtida, e estimar a altura do ponto observado. Como dito anteriormente, os deslocamentos nas direções x , y e z do aparelho são realizadas por *scanners*, usualmente construídos de materiais piezelétricos de chumbo titanato

de bário amorfo ($PdBaTiO_3$) ou titanato zirconato de chumbo ($Pb[Zr_xTi_{1-x}]O_3$), mais conhecido como *PZT*. Os *scanners* podem operar de dois modos distintos, realizando o movimento da amostra, ou o movimento da microviga.

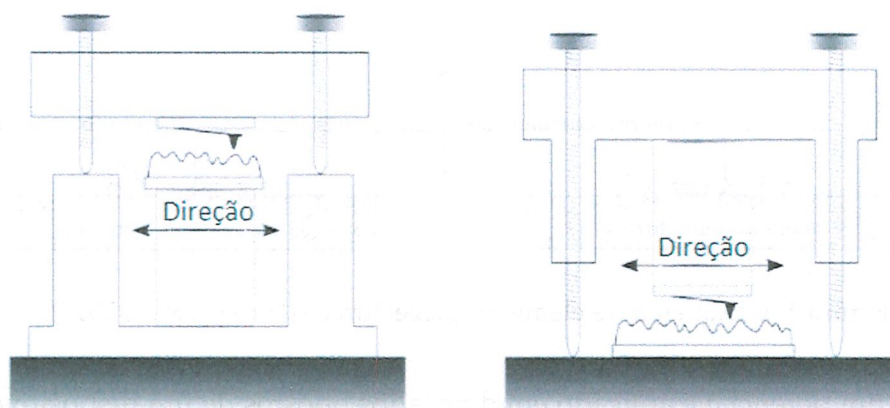


Figura 1.8: À esquerda: tipo de scanner que move a amostra, à direita: tipo de scanner que movimenta a microviga ((EATON; WEST, 2010)).

Todo material piezelétrico tem uma frequência de ressonância, ao operar abaixo dessa frequência, pode haver uma mudança de fase de até 90° . Acima desse valor, a mudança de fase pode chegar a 180° . Em grandes frequências, o *PZT* pode limitar a taxa de varredura do sistema.

1.2.4 Sistema de controle do AFM

O controlador usado no AFM é um aparelho eletrônico externo à ele. Em geral, nesse aparelho, o controle por realimentação utiliza o sinal enviado pelo fotodetector e compara com o *set point*, o erro entre os sinais é calculado e enviado através do controle por realimentação. O sinal adquirido é enviado ao atuador responsável pelo movimento em *z*, realizando as correções necessárias. O tipo de controle por realimentação usado no AFM é o proporcional-integral-derivativo (*PID*). Segundo Eaton e West (2010), a equação governante para o controle *PID* é

$$Z_v = P \times Z_{err} + I \times \int Z_{err} dt + D \times \frac{dZ_{err}}{dt}, \quad (1.2)$$

em que Z_{err} é o sinal de entrada e Z_v é o sinal de saída do controlador.

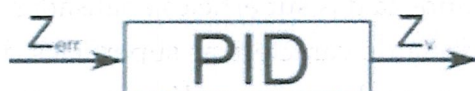


Figura 1.9: Esquema controle *PID* (EATON; WEST, 2010).

Ao selecionar apropriadamente os termos *P*, *I* e *D* da equação 1.2, a ponteira escaneia a superfície da amostra mantendo Z_{err} mínimo, à medida que ponto a ponto,

este sinal é digitalizado. O termo integral I facilita o movimento da ponteira sobre grandes superfícies e os termos P e D permitem o escaneamento em regiões menores.

1.3 Conceitos básicos

Para o desenvolvimento do trabalho, é importante pontuar alguns conceitos necessários para o seu desenvolvimento.

1.3.1 Forças de interação entre ponteira e amostra

As distâncias entre ponteira e superfície da amostra são de ordem nanométrica, dessa forma, as forças intermoleculares atuantes nesta região têm um papel importante no funcionamento do sistema. A tentativa de classificação dessas forças é bem extensa e pode ser feita da seguinte maneira:

- a) Forças de origem puramente eletrostáticas (forças coulombianas entre cargas, dipolos permanentes ou quadrupolos);
- b) Forças de polarização (provenientes dos momentos dipolares induzidos nos átomos e nas moléculas por campos elétricos de cargas vizinhas e/ou dipolos permanentes);
- c) Forças de natureza mecânica quântica, que dão lugar às ligações covalentes e às interações repulsivas de intercâmbio (devidas ao princípio de exclusão de Pauli), que são as que equilibram as forças atrativas a distâncias muito curtas.

Esta classificação não é rígida e nela não se incluem, por exemplo, as forças magnéticas, pois se comparadas com as anteriores elas são muito fracas dentro de sua região de interação. A seguir, mostraremos dois modelos usados para representar as forças intermoleculares existentes entre ponteira e amostra.

a) Forças de Van der Waals:

A força de Van der Waals é a soma de todas as forças atrativas ou repulsivas, que não sejam forças devidas a ligações covalentes entre moléculas ou forças devido à interação eletrostática de íons. Existem três interações distintas:

- força entre dois dipolos permanentes (Força de Keesom);
- força entre um dipolo permanente e um polo induzido (Força de Debye);
- força entre dois dipolos instantaneamente induzidos (Força de dispersão London).

Ao aproximar a ponteira da amostra, a atuação das forças de Van der Waals passa a ter uma contribuição no movimento oscilatório do sistema, gerando

uma perturbação, cujo efeito é uma modificação da constante elástica efetiva da microviga, correspondente ao gradiente na direção vertical da força de interação. Como consequência, alterações nas frequências de ressonância são sentidas quando as forças de Van der Waals estão atuando.

Supondo que a superfície da amostra seja um corpo esférico com raio infinitamente maior que o raio da ponteira, e que a distância entre a ponteira e a superfície da amostra é menor do que o raio da ponteira, a expressão desenvolvida por Hamaker pode ser escrita como

$$f_t = -\frac{HR}{6d^2} \quad (1.3)$$

onde H é a constante de Hamaker, R é o raio da ponteira e d é a distância entre a ponteira e a superfície da amostra. A constante de Hamaker pode ser escrita como $H = \pi^2 C \rho_1 \rho_2$, onde ρ_1 e ρ_2 são o número de moléculas por volume de área em cada corpo. C é o coeficiente de interação partícula-partícula do potencial intermolecular (RUTZEL et al., 2003).

b) Potencial de Lennard Jones (potencial LJ):

Proposta por Sir John Edward Lennard-Jones, no ano de 1924, o potencial de Lennard Jones (potencial LJ) descreve a energia potencial da interação entre duas moléculas ou átomos. A equação leva em consideração a diferença entre as forças de atração (dipolo-dipolo, dipolo-dipolo induzido, e interações de London) e as forças de repulsão.

Assumindo uma grande distância entre os dois, pode-se afirmar que o potencial entre eles é zero. Ao aproximarem-se, forças de atração serão sentidas, até um ponto de equilíbrio entre eles. Com uma distância mínima, forças de repulsão se tornarão mais fortes que as de atração, separando os dois corpos.

A forma de representação do potencial de Lennard Jones foi primeiramente proposta por John Lennard-Jones no ano de 1924. Considerando uma ponteira de raio R e uma função d que representa a distância entre a ponteira e a superfície da amostra, a função de energia do potencial LJ $P_{LJ}d$ e a correspondente força de interação $F_{LJ}d$ podem ser escritas respectivamente como (ISRAELACHVILI, 1991; RUTZEL et al., 2003):

$$P_{LJ}(r) = \frac{H_1 R}{1260d^7} - \frac{H_2 R}{6d} \quad (1.4)$$

e

$$F_{LJ}d = \frac{\partial P_{LJ}}{\partial d} = \frac{H_1 R}{180d^8} - \frac{H_2 R}{6d^2}. \quad (1.5)$$

onde H_1 e H_2 são as constantes de Hamaker para os potenciais atrativos e repulsivos. Eles podem ser escritos como $H_1 = \pi^2 C_1 \rho_1 \rho_2$ e $H_2 = \pi^2 C_2 \rho_1 \rho_2$, onde ρ_1 e ρ_2 são o número de átomos por unidade de volume nos corpos e C_1 e C_2 são os coeficientes de interação partícula-partícula do potencial intermolecular (RUTZEL et al., 2003). Para uma ponteira conhecida, a constante de Hamaker pode variar dependendo das propriedades materiais da superfície da amostra (ISRAELACHVILI, 1991). A figura 1.10 é uma representação de como os átomos do sistema ponteira-amostra interagem, quanto maior a distância, menor a interação (SALVADORI, 2013).

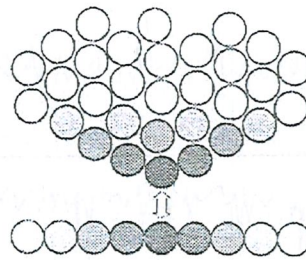


Figura 1.10: Esquema de interações intermoleculares (SALVADORI, 2013).

1.3.2 Aquisição de imagens nos modos dinâmicos via AFM

Nas últimas décadas, a nanotecnologia se tornou uma área de grande interesse, tanto na área industrial, quanto na área acadêmica. Um material é considerado nanométrico quando uma de suas dimensões varia de 1 a 100nm . A caracterização de sua superfície é essencial para analisar se o resultado buscado foi alcançado, já que nesta ordem de grandeza, novos materiais são obtidos essencialmente de processos químicos.

Como citado anteriormente, uma das ferramentas essenciais para o trabalho nesta área é o Microscópio de Força Atômica. Nos modos dinâmicos de funcionamento, (modo não contato e modo contato intermitente), a ponteira oscila em altas velocidades, e ponto a ponto descreve o relevo da superfície da amostra. Para cada ponto, ela pode vibrar de 50000 a 500000 mil vezes e, segundo Ferri et al. (2012), duas medidas estatísticas são mais comuns para estimar a amplitude de oscilação (altura) que será comparada com o *set point*: a rugosidade média (R_a) e a raiz do valor quadrático médio das oscilações medidas (R_q).

- a) Rugosidade média (R_a): Muito utilizado para análise de superfícies em processos industriais, especialmente quando a rugosidade for da ordem de μm , o R_a é definido como a média aritmética dos valores absolutos das alturas do perfil de superfície $Z(x)$, escrito como

$$R_a = \frac{1}{L} \int_0^L Z(x) dx, \quad (1.6)$$

onde $Z(x)$ é a função que descreve o perfil da superfície da amostra analisada em termos da altura (z) e posição x , sobre o comprimento L do perfil avaliado.

Uma das vantagens do uso do R_a é o fato de ser facilmente implementado, inclusive em aparelhos mais simples que o AFM, como o perfilômetro *Styllus*, uma desvantagem é que a rugosidade média pode ser a mesma para superfícies com perfis totalmente diferentes, como mostra a figura 1.11.

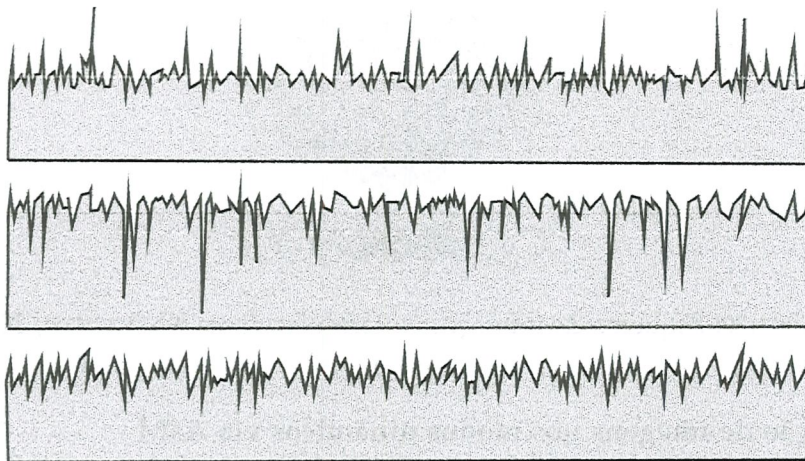


Figura 1.11: Diferentes perfis de superfícies com mesmo valor médio de rugosidade ((FERRI et al., 2012).

- b) Rugosidade quadrática média (R_q): A rugosidade R_q de uma superfície é semelhante à rugosidade média R_a , sendo definida a partir da média dos valores absolutos quadrados do perfil de rugosidade, podendo ser definida como

$$R_q = \sqrt{\frac{1}{L} \int_0^L |Z^2(x)| dx} \quad (1.7)$$

Em microscopia de varredura, o R_q depende da área de superfície varrida, isto é, do tamanho da digitalização. Devido à quadratura da amplitude no seu cálculo, R_q é mais sensível quanto a picos e vales do que o método da rugosidade média, uma comparação entre os métodos pode ser avaliada na figura 1.12.

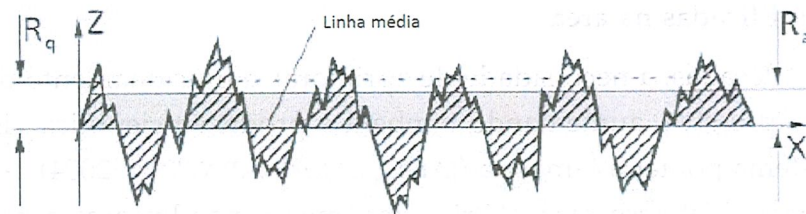


Figura 1.12: Comparação entre R_a e R_q ((FERRI et al., 2012).

1.3.3 Comportamento Irregular

Diferentes tipos de atuadores podem ser usados, estes PZT's devem ser sensíveis e estáveis para manter a estabilidade do escaneamento, dentre eles, destacam-se:

- Forma de tubo: operam com altas frequências de ressonância e têm um desenho mais rígido;
- Forma de tripóide: possuem maior alcance de escaneamento, mas são menos estáveis.

As altas frequências de vibração são necessárias para aumentar a velocidade do escaneamento sem o risco de movimentos oscilatórios irregulares.

Alguns fatores que podem ser responsáveis por instabilidades em um AFM são:

- a) *Cross-talk* ou acoplamento do movimento dos atuadores: deve ser o menor possível, pois nas direções x , y e z está sempre presente e pode se tornar significativo ao escanear grandes áreas, introduzindo distorções nas imagens (ZANETTE, 2012).
- b) Histerese piezométrica: é um fenômeno que pode ser observado ao plotar-se um gráfico de deslocamento dielétrico D_p (proporcional à polarização), em função do campo elétrico E_p . Seu efeito é causar distorções muito significativas nas imagens, principalmente quando grandes áreas são escaneadas.
- c) Não linearidades: são inerentes ao sistema ponteira-amostra e podem levar a microviga a ter movimento irregular (SHUIQING; RAMAN, 2006), como consequência, o sinal produzido pelo aparelho fica prejudicado e pode ocorrer a produção de imagens ruins, ou imagens que não reproduzem a topologia da superfície (DANKOWICZ, 2006). As não linearidades podem surgir quando se aumenta a tensão aplicada ao PZT para se varrer maiores áreas. Nesse caso, ser linear é manter a mesma relação contração-dilatação em função da tensão.
- d) *Creep*: é uma deformação na superfície que pode introduzir distorções nas imagens. Após uma mudança rápida de tensão, o material piezométrico deforma-se, mas um lento reordenamento de domínios ferroelétricos fazem com que a cerâmica continue se deformando, mesmo após o fim do estímulo.

1.3.4 Obras publicadas na área

Nas últimas décadas, a necessidade de aprimorar o funcionamento do AFM cresceu de forma expressiva, aumentando também a produção científica visando a modelagem do sistema ponteira/amostra (JALILI; LAXMINARAYANA, 2004). A presença de alguns fenômenos (histerese piezoelétrica, fenômenos não-lineares como a presença de múltiplos atratores e bifurcações, entre outros) afeta o desempenho, e mais importante, prejudica o sinal produzido pelo microscópio. A consequência de tais fenômenos é a produção de imagens ruins e a ocorrência de possíveis danos à amostra e/ou à microviga. Por isso, entender a dinâmica do sistema ponteira-amostra com intuito de aprimorar seu funcionamento tornou-se um importante desafio científico (DANKOWICZ, 2006).

Em muitos trabalhos publicados com intuito de representar e entender a dinâmica do sistema base-microviga-ponteira-amostra, é comum o uso de modelos com 1 ou 2 graus de liberdade. Estes modelos representam a ponteira como uma massa, conectada a uma mola e a um amortecedor (sistema do tipo massa-mola-amortecedor). Em trabalhos como Aimé et al. (1999), Balthazar et al. (2012), Santos e Barcons (2014), Lozano e Garcia (2008), Sebastian et al. (2001), Yamasue e Hikihara (2006), Ruppert e Moheimani (2016), Dankowicz (2006) e Nozaki et al. (2013), esta abordagem é utilizada, tanto para estudar não linearidades do movimento oscilatório da microviga, quanto para propor leis de controle para melhorar seu funcionamento. Em geral, as interações entre ponteira e amostra são representadas usando a teoria de Van der Waals para o modo não contato, potencial de Lennard Jones e a teoria de DMT (Derjaguin-Muller-Topporov) para o modo de contato intermitente), já que os últimos levam em conta as forças de repulsão inerentes ao sistema.

No trabalho de Sebastian et al. (2001), as forças de interação são modeladas usando uma combinação de molas e amortecedores, com intuito de representar as forças atrativas e repulsivas inerentes da interação entre ponteira e amostra.

Com o intuito de aumentar o campo de análises e a fidelidade dos modelos matemáticos obtidos, alguns autores optam por usar modelos de viga para representar a microviga, em geral, usam-se abordagens mais conhecidas como viga de Bernoulli-Euler e Timoshenko. Autores como Rutzel et al. (2003), Claeysen (2010), Hsu et al. (2007), Rodrigues et al. (2014), Kahrobaiyan et al. (2011) usam as equações das vigas citadas, analisando suas soluções analíticas, bem como sua dinâmica através de simulações numéricas. A desvantagem do uso dessa abordagem é que, para cada condição de contorno ou especificidade geométrica, um novo modelo deve ser obtido, muitas vezes, tendo que se fazer uma minuciosa análise para recomeçar a modelagem. Na maioria dos casos, esses modelos contínuos são reduzidos a modelos com poucos graus de liberdade através de métodos analíticos. Outra desvantagem está no fato de que, na maioria dos casos, os modelos não são paramétricos.

Segundo (SHUIQING; RAMAN, 2006), o foco de grande parte desses trabalhos é a aquisição de modelos matemáticos que representem da melhor maneira o comportamento da microviga e suas interações com a superfície da amostra, mas de acordo com Fang et al. (2002), essas abordagens não levam em conta as interações das forças intermoleculares na estrutura da microviga, desprezando efeitos importantes e limitando as análises.

1.4 Objetivos

O objetivo geral deste trabalho é desenvolver um modelo matemático que seja versátil e de fácil implementação, que permita o uso de diferentes configurações materiais e geométricas e que possibilite análises através de simulações numéricas para melhor compreender o comportamento dinâmico do AFM e, assim, poder propor soluções que possibilitem melhorar o seu desempenho.

Os requerimentos iniciais desejados para o modelo a ser desenvolvido devem conter os seguintes pontos:

- Levar em consideração a ponteira na extremidade livre e um atuador PZT na extremidade engastada.
- Poder ser validado e/ou ajustado experimentalmente;
- Poder ser reduzido para diminuir o custo computacional das análises, devendo-se para tanto analisar o efeito da quantidade de modos de vibrar considerada;
- Possibilitar, através de análises, a obtenção de superfícies a partir de dados numéricos e experimentais.

1.5 Organização do trabalho

Este trabalho está dividido em cinco capítulos contendo:

Capítulo 1: Neste capítulo faz-se uma breve introdução ao assunto a que se refere a tese, em seguida, realiza-se uma revisão bibliográfica com intuito de mostrar como funciona o Microscópio de Força Atômica, suas características e modos de operação, em seguida, são apresentados alguns conceitos que serão posteriormente usados na modelagem e análise do sistema. Realiza-se uma revisão de alguns trabalhos da área específica, com o intuito de contextualizar esta tese na área de interesse. Por fim, apresentam-se os objetivos da tese, bem como a mesma está organizada.

Capítulo 2: O capítulo 2 trata da modelagem matemática do sistema, para tanto, usa-se o Método de Elementos Finitos com abordagem variacional, sendo que a microviga é modelada como uma viga Bernoulli-Euler cuja extremidade livre contém

uma ponteira e as forças de interação inerentes ao sistema. Para a extremidade engastada, supõem-se quatro tipos de condição de contorno: base deslizante-livre com força imposta, base deslizante-livre com deslocamento prescrito, base móvel com deslocamento relativo e base PZT acoplada à microviga. Na sequência, a ponteira é modelada como um cone de base circular e mostra-se como é feito o acoplamento da ponteira na microviga. Por fim, apresenta-se qual é o modelo de forças de interação que será considerado no trabalho.

Capítulo 3: Neste capítulo são realizadas alguns procedimentos essenciais para a continuidade do trabalho. Primeiramente, será realizada a mudança da base nodal para a base modal, procedimento que possibilitará análises com o modelo reduzido, tais como variação do número de modo de vibrar considerados. Na sequência, serão estimados os parâmetros que serão utilizados durante as simulações numéricas, estes parâmetros foram adquiridos a partir de dados de uma microviga real, obtidos junto ao Laboratório de Filmes Finos do Instituto de Física da Universidade de São Paulo (IF-USP), e a partir de estimativas via simulações numéricas. Estimados os parâmetros, serão realizadas validações do modelo adquiridos a partir da comparação das respostas em frequência dos modelos matemáticos, com a resposta em frequência de uma microviga real. Por fim, em posse da curva de resposta em frequência da microviga real, será estimado o fator de amortecimento que será adotado na sequência do trabalho.

Capítulo 4: Com os modelos reduzidos escolhidos e de posse dos parâmetros, o capítulo 4 é destinado à realização das simulações numéricas com intuito de analisar a dinâmica dos modelos escolhidos. Inicialmente, os modelos reduzidos são analisados quanto à variação do número dos modos adotados, e a partir dessas simulações, o número de modos de vibrar é escolhido. Usando a quantidade de modos escolhidos, variam-se as distâncias iniciais entre ponteira e amostra, afim de entender os efeitos das interações intermoleculares no sistema. Uma análise das forças de interação é realizada visando verificar suas principais características. Para finalizar o capítulo, apresentam-se os procedimentos necessários para se obter o perfil topológico de uma superfície com dados de uma superfície real, além de realizar-se esta obtenção, comparando a imagem obtida com a experimental.

Capítulo 5: As conclusões e os possíveis trabalhos futuros a serem realizados situam-se nesta seção, bem como os trabalhos publicados derivados desta tese.

Capítulo 2

Modelo matemático

Nesta seção apresentam-se os modelos matemáticos desenvolvidos durante o trabalho. Em todos os modelos, usa-se o método de elementos finitos (MEF), em que considera-se a microviga como uma viga Euler Bernoulli, assumindo todas as suas hipóteses cinemáticas, além disso, leva-se em conta a ponteira, considerando sua massa e inércia de rotação. O primeiro modelo desenvolvido assume que a extremidade engastada da microviga é deslizante-livre, com dois tipos de excitação: uma com força imposta e outra com deslocamento prescrito. No segundo modelo, assume-se que a extremidade engastada tem movimento na direção z , dessa forma, o sistema conta com deslocamento relativo. Por fim, o último modelo desenvolvido assume que na extremidade engastada há um atuador piezelétrico (PZT), obtendo-se um modelo acoplado. Na extremidade livre, além da ponteira, consideram-se também as forças de interação, onde o potencial de Lennard Jones é adotado como modelo para representá-las.

2.1 Modelo de elementos finitos para o sistema com base deslizante-livre

Como dito anteriormente, esse foi o primeiro modelo concebido durante o trabalho. Para seu desenvolvimento, considera-se uma viga Euler Bernoulli homogênea e uniforme, com comprimento L_s , largura b_s , espessura h_s e feita de material com módulo de Young E_s , coeficiente de Poisson ν_s e densidade de massa ρ_s .



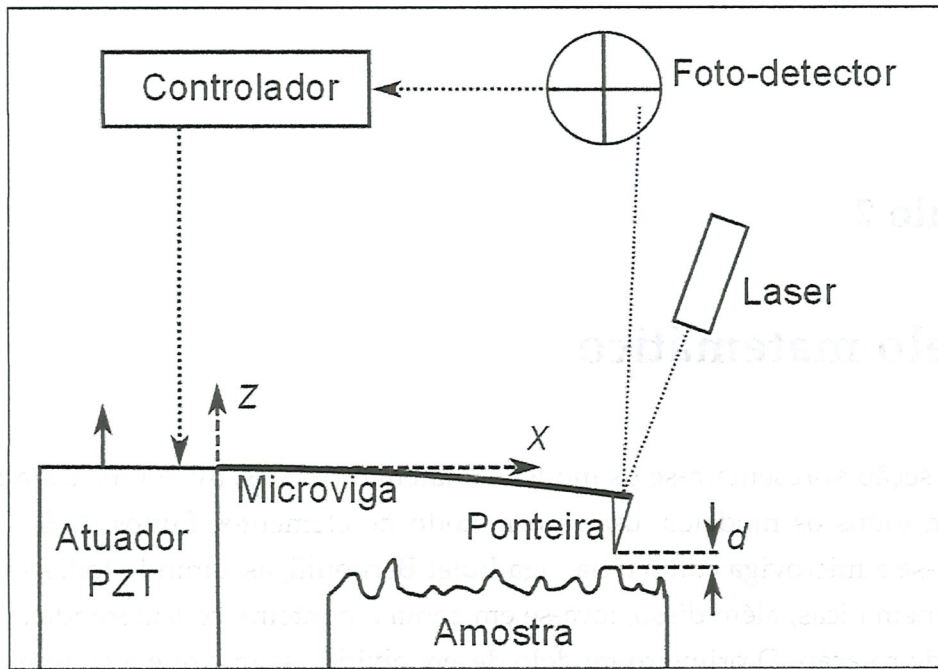


Figura 2.1: Esquema de representação da microviga.

Como mostrado na Figura 2.1, uma massa (ponteira) m_t com momento de inércia I_t é considerada na extremidade livre da microviga. Nessa região, atuam as forças de interação (f_t) entre ponteira e amostra, sendo que a distância inicial entre elas é denotada por d .

2.1.1 Discretização dos deslocamentos e tensões via elementos finitos

Para o modelo da microviga, considera-se a hipótese cinemática do modelo de Euler-Bernoulli. Nela, supõe-se que o movimento é tal que as seções transversais da viga permanecem planas, indeformadas e ortogonais ao eixo longitudinal x da viga. Dessa forma, o campo de deslocamentos pode ser descrito como

$$\bar{u}(x,y,z,t) = -zw'(x,t), \quad \bar{v}(x,y,z,t) = 0, \quad \bar{w}(x,y,z,t) = w(x,t), \quad (2.1)$$

onde w é o deslocamento transversal na direção z e $w' = \partial w / \partial x$ é o deslocamento angular (rotação) da seção transversal.

Como dito anteriormente, a única tensão não nula é a tensão longitudinal normal, representada por ε_x , ela pode ser escrita a partir da conhecida relação tensão-deslocamento,

$$\varepsilon_x = -zw''. \quad (2.2)$$

Para a discretização da deflexão transversal $w(x,t)$ ao longo do elemento de comprimento L_s , assumem-se as funções de forma cúbicas de Hermite. Como mostra a figura 2.2, dois nós com dois graus de liberdade cada são considerados e denotados

por deflexão w_i e ângulo de rotação w'_i ($i = 1, 2$).

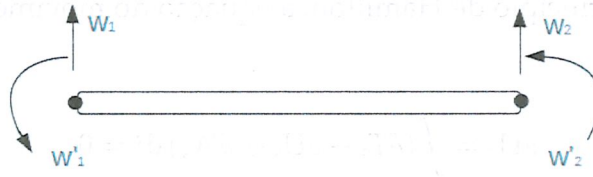


Figura 2.2: Elemento finito de viga de Bernoulli-Euler.

O vetor coluna que representa os graus de liberdade (GDL) elementares \mathbf{u}_e é definido como

$$\mathbf{u}_e = \begin{bmatrix} w_1 \\ w'_1 \\ w_2 \\ w'_2 \end{bmatrix}, \quad (2.3)$$

e os deslocamentos transversais da microviga podem ser escritos em termos dos GDL como

$$w(x,t) = \mathbf{N}(x)\mathbf{u}_e(t), \quad (2.4)$$

onde as funções de forma são definidas como

$$\begin{aligned} \mathbf{N}(x) &= [N_1(x) \quad N_2(x) \quad N_3(x) \quad N_4(x)], \\ N_1(x) &= \frac{1}{2} - \frac{3}{2L_e}x + \frac{2}{L_e^3}x^3, \\ N_2(x) &= \frac{L_e}{8} - \frac{1}{4}x + \frac{1}{2L_e}x^2 + \frac{1}{L_e^2}x^3, \\ N_3(x) &= \frac{1}{2} - \frac{3}{2L_e}x - \frac{2}{L_e^3}x^3, \\ N_4(x) &= -\frac{L_e}{8} - \frac{1}{4}x + \frac{1}{2L_e}x^2 + \frac{1}{L_e^2}x^3. \end{aligned} \quad (2.5)$$

Usando (2.2), a tensão normal pode ser discretizada e escrita em termos dos GDL como

$$\varepsilon_x = -z\mathbf{B}\mathbf{u}_e, \text{ com } \mathbf{B} = \mathbf{N}''. \quad (2.6)$$

Vale ressaltar que os deslocamentos e tensões definidos nesta seção serão usados em todos os modelos que serão posteriormente desenvolvidos.

2.1.2 Formulação variacional

Considerando o princípio de Hamilton, a equação do movimento do sistema pode ser escrita como

$$\delta\Pi_s = \int (\delta T_s - \delta U_s + \delta W_s) dt = 0, \quad (2.7)$$

em que δT_s e δU_s são as variações virtuais das energias cinética e potencial, e δW_s é o trabalho virtual realizado pela aplicação das forças mecânicas.

2.1.3 Variação da energia cinética

Através da formulação variacional da energia cinética, obteremos a matriz de massa para o sistema. Com os deslocamentos definidos em (2.1), a variação virtual da energia cinética é descrita como

$$\int \delta T_s dt = - \int \int_{\Omega} \delta w \rho_s \ddot{w} d\Omega dt. \quad (2.8)$$

Desde que w e ρ_s não dependam da posição na seção transversal yz , a integral em x pode ser reescrita como

$$\int \delta T_{se} dt = - \int \int_0^{L_{se}} \delta w \rho_s A_s \ddot{w} dx dt. \quad (2.9)$$

onde $A_s = b_s h_s$ é a área de seção transversal da viga. Substituindo o deslocamento transversal w por sua forma discretizada (2.4), segue que

$$\int \delta T_{se} dt = - \int \delta \mathbf{u}_e^t \mathbf{M}_{se} \ddot{\mathbf{u}}_e dt, \quad (2.10)$$

onde \mathbf{M}_{se} é a matriz de massa elementar, definida por

$$\mathbf{M}_{se} = \int_0^{L_{se}} \rho_s A_s \mathbf{N}^t \mathbf{N} dx. \quad (2.11)$$

2.1.4 Variação da energia potencial

A variação virtual de energia potencial pode ser escrita em termos das deformações de um volume elementar de viga como

$$\delta U_s = \int_{\Omega} \delta \varepsilon_x \sigma_x d\Omega, \quad (2.12)$$

em que σ_x é a tensão normal longitudinal, que, considerando um material elástico linear com módulo de Young E_s , pode ser escrita como

$$\sigma_x = E_s \varepsilon_x. \quad (2.13)$$

Substituindo (2.13) em (2.12), resulta em

$$\delta U_s = \int_{\Omega} \delta \varepsilon_x E_s \varepsilon_x d\Omega, \quad (2.14)$$

que pode ser escrita em termos do vetor GDL \mathbf{u}_e . Usando (2.6) e integrando sobre a área da seção transversal tem-se

$$\delta U_{se} = \delta \mathbf{u}_e^t \mathbf{K}_{se} \mathbf{u}_e, \quad (2.15)$$

onde \mathbf{K}_{se} é a matriz de rigidez elementar, definida como

$$\mathbf{K}_{se} = \int_0^{L_{se}} E_s I_s \mathbf{B}^t \mathbf{B} dx. \quad (2.16)$$

O segundo momento de área I_s da seção transversal da viga é

$$I_s = \int_{A_s} z^2 dA_s. \quad (2.17)$$

Ressalta-se que, em (2.11) e (2.16), as propriedades materiais e geométricas, ρ_s , E_s , A_s e I_s podem variar, sendo escritas em função de x .

2.1.5 Equação do movimento considerando a ponteira da microviga

Além das quantidades variacionais da microviga, considera-se sua ponteira como uma massa concentrada localizada no nó de sua extremidade. Tanto massa m_t , como momento de inércia I_t são considerados. Os nós referentes à ponteira são incluídos adicionando-se dois termos de energia cinética, correspondentes à energia cinética translacional $w_t(t)$, escrita em termos das deflexões da ponteira e da energia cinética rotacional $w'_t(t)$. Somando-se as contribuições elementares ao funcional $\delta \Pi_s$ e incluindo as variações de energia cinética relacionadas com a ponteira, o princípio estendido de Hamilton é reescrito como

$$\delta \Pi_s = \int (\delta T_s - \delta U_s + \delta W_s + \delta T_t) dt = 0, \quad (2.18)$$

onde

$$\int \delta T_t dt = - \int (\delta w_t m_t \ddot{w}_t + \delta w'_t I_t \ddot{w}'_t) dt. \quad (2.19)$$

Nota-se que tanto deflexão quanto rotação da seção transversal da ponteira, w_t e w'_t estão inclusos no vetor global de GDL \mathbf{u} ,

$$w_t = \mathbf{L}_m \mathbf{u}, \quad w'_t = \mathbf{L}_i \mathbf{u}. \quad (2.20)$$

com

$$\mathbf{L}_m = \begin{bmatrix} 0 & \cdots & 0 & 1 & 0 \end{bmatrix}, \mathbf{L}_i = \begin{bmatrix} 0 & \cdots & 0 & 1 \end{bmatrix}. \quad (2.21)$$

Substituindo (2.20) em (2.19), tem-se que

$$\int \delta T_t dt = - \int \delta \mathbf{u}^t \mathbf{M}_t \ddot{\mathbf{u}} dt, \quad \text{com} \quad \mathbf{M}_t = \mathbf{L}_m^t m_t \mathbf{L}_m + \mathbf{L}_i^t I_t \mathbf{L}_i. \quad (2.22)$$

Dessa maneira, a equação do movimento para o sistema pode ser escrita como

$$\mathbf{M} \ddot{\mathbf{u}} + \mathbf{D} \dot{\mathbf{u}} + \mathbf{K} \mathbf{u} = \mathbf{F}, \quad (2.23)$$

em que $\mathbf{M} = \mathbf{M}_s + \mathbf{M}_t$. A matriz de amortecimento \mathbf{D} será definida a posteriori, a partir de dados experimentais. Vale ressaltar que o vetor \mathbf{F} é descrito como $\mathbf{F} = \mathbf{F}_b + \mathbf{F}_t$, onde \mathbf{F}_b é o vetor responsável pela força de excitação na extremidade engastada e \mathbf{F}_t é o vetor responsável pelas forças de interação, vale ressaltar que ambos serão definidos a posteriori.

2.1.6 Condições de contorno

Em $x = L_s$, considera-se a microviga com extremidade livre, com forças de interação que serão modeladas posteriormente. Na extremidade engastada ($x = 0$), define-se uma base deslizante apenas com movimento transversal, portanto, o ângulo de rotação da seção transversal neste ponto é nulo, isto é, $w'(0, t) = 0$. Duas diferentes abordagens são utilizadas para representar o movimento transversal da base deslizante em $x = 0$, uma com força imposta $f_b(t)$ e outra com deslocamento prescrito $w(0, t) = w_b(t)$

No caso do modelo com força imposta à base da microviga, define-se o vetor força imposta como $\mathbf{F}_b(t) = \mathbf{L}_b f_b(t)$, onde $\mathbf{L}_b = [1 \ 0 \ \cdots \ 0]$ é um vetor booleano que associa a amplitude da força $f_b(t)$ com o nó correspondente ao deslocamento transversal da base da microviga. Dessa maneira, este vetor é considerado como uma força mecânica aplicada ao vetor da equação (2.23). Considera-se uma força de excitação sinusoidal conhecida, escrita como $f_b(t) = \tilde{f}_b \sin(\omega t)$, que terá sua amplitude (\tilde{f}_b) e frequência de excitação (ω) definidas posteriormente.

Por outro lado, no modelo com deslocamento prescrito, o GDL do elemento finito correspondente ao deslocamento transversal da base é separado dos demais. Dessa forma, a equação do movimento (2.23) é reescrita como

$$\begin{bmatrix} \delta w_b & \delta \mathbf{u}_r^t \end{bmatrix} \left\{ \begin{bmatrix} \mathbf{M}_{pp} & \mathbf{M}_{pr} \\ \mathbf{M}_{pr}^t & \mathbf{M}_{rr} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \ddot{w}_b \\ \ddot{\mathbf{u}}_r \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} \mathbf{D}_{pp} & \mathbf{D}_{pr} \\ \mathbf{D}_{pr}^t & \mathbf{D}_{rr} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \dot{w}_b \\ \dot{\mathbf{u}}_r \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} \mathbf{K}_{pp} & \mathbf{K}_{pr} \\ \mathbf{K}_{pr}^t & \mathbf{K}_{rr} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} w_b \\ \mathbf{u}_r \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} f_p \\ \mathbf{F}_r \end{bmatrix} \right\} = 0, \quad (2.24)$$

onde w_b é o deslocamento prescrito da base da microviga e \mathbf{u}_r é o vetor dos desco-

nhecidos GDLs remanescentes. Então, já que w_b é prescrito, segue que $\delta w_b = 0$, desta forma, a primeira linha de (2.24) é automaticamente satisfeita e os termos envolvendo w_b são incluídos como uma força equivalente aplicada ao sistema, tal que

$$\mathbf{M}_{rr}\ddot{\mathbf{u}}_r + \mathbf{D}_{rr}\dot{\mathbf{u}}_r + \mathbf{K}_{rr}\mathbf{u}_r = \mathbf{F}_t + \mathbf{F}_b, \quad (2.25)$$

onde o vetor de força equivalente \mathbf{F}_b associado ao deslocamento prescrito da base pode ser escrito como

$$\mathbf{F}_b = \mathbf{M}_{pr}^t \ddot{w}_b + \mathbf{D}_{pr}^t \dot{w}_b + \mathbf{K}_{pr}^t w_b \quad (2.26)$$

Se um deslocamento transversal sinusoidal $w_b = \tilde{w}_b \sin(\omega t)$ for considerado, o vetor de força referente à base com deslocamento prescrito \mathbf{F}_b correspondente é

$$\mathbf{F}_b = \mathbf{L}_b \tilde{w}_b [(-\omega^2 \mathbf{M}_{pr}^t + \mathbf{K}_{pr}^t) \sin(\omega t) + \omega \mathbf{D}_{pr}^t \cos(\omega t)]. \quad (2.27)$$

2.2 Modelo de elementos finitos para o sistema com deslocamento relativo

No modelo com deslocamento relativo, assume-se que extremidade engastada da microviga tem deslocamento na direção z , isto é, o sistema tem base móvel. Vale salientar que as hipóteses cinemáticas para este modelo são as mesmas utilizadas no modelo anterior.

2.2.1 Discretização dos deslocamentos e deformações via elementos finitos

A figura 2.3 apresenta um esquema do modelo considerando deslocamento relativo à base móvel.

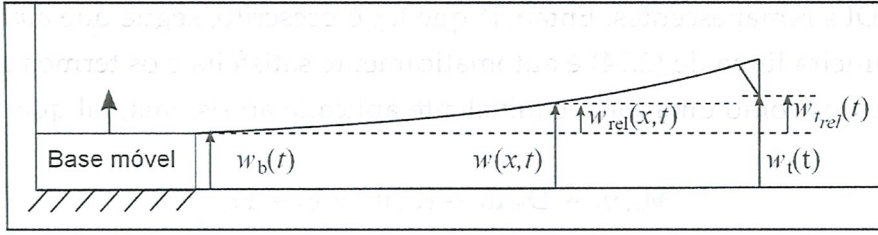


Figura 2.3: Esquema do modelo considerando deslocamento relativo à base móvel.

De acordo com o esquema da figura 2.3, utilizando-se os deslocamentos e deformações da seção 2.1.1, assumindo-se que $w_b(t)$ é o deslocamento na direção z da base e que $w_{rel}(x, t)$ é a deflexão transversal relativa da microviga, pode-se escrever a deflexão transversal total da seguinte maneira,

$$w(x, t) = w_b(t) + w_{rel}(x, t). \quad (2.28)$$

A deflexão transversal relativa pode ser reescrita em função dos GDL definidos em 2.4, como

$$w_{rel}(x, t) = \mathbf{N}(x) \mathbf{u}_e(t). \quad (2.29)$$

2.2.2 Formulação variacional

Para o modelo em questão, reescrevemos a contribuição ao funcional $\delta\Pi$ de cada elemento de viga da seguinte maneira

$$\delta\Pi_{se} = \int (\delta T_{se} - \delta U_{se} + \delta W_{se}) dt. \quad (2.30)$$

2.2.3 Variação da energia cinética

Com os deslocamentos definidos em (2.1), a variação virtual da energia cinética é descrita como

$$\int \delta T_{se} dt = - \int \int_{\Omega} \delta w \rho_s \ddot{w} d\Omega dt. \quad (2.31)$$

Usando (2.28) e assumindo que w e ρ_s não dependam da posição transversal yz , a integral em x da equação (2.31) pode ser reescrita como

$$\int \delta T_{se} dt = - \int \int_0^{L_{se}} \rho_s A_s \delta(w_b + w_{rel})(\ddot{w}_b + \ddot{w}_{rel}) dx dt. \quad (2.32)$$

Rearranjando (2.32), tem-se que

$$\int \delta T_{se} dt = - \int \int_0^{L_{se}} \{ (\delta w_b \rho_s A_s \ddot{w}_b + \delta w_b \rho_s A_s \ddot{w}_{rel} + \delta w_{rel} \rho_s A_s \ddot{w}_b + \delta w_{rel} \rho_s A_s \ddot{w}_{rel}) dx \} dt. \quad (2.33)$$

Como w_b é conhecido, então $\delta w_b = 0$, dessa maneira,

$$\int \delta T_{se} dt = - \int \int_0^{L_{se}} \{ \rho_s A_s (\delta w_{rel} \ddot{w}_{rel} + \delta w_{rel} \ddot{w}_b) dx \} dt. \quad (2.34)$$

Usando a forma discretizada (2.29), e fazendo $\delta w = \delta \mathbf{u}_e^t \mathbf{N}^t$, a equação 2.34 fica:

$$\int \delta T_{se} dt = - \int \int_0^{L_{se}} \{ \rho_s A_s (\delta \mathbf{u}_e^t \mathbf{N}^t \mathbf{N}^t \ddot{\mathbf{u}}_e^t + \delta \mathbf{u}_e^t \mathbf{N}^t \ddot{w}_b) dx \} dt \quad (2.35)$$

Desta maneira, a equação (2.35) pode ser reescrita como

$$\int \delta T_{se} dt = - \int \delta \mathbf{u}_e^T [\mathbf{M}_{se} \ddot{\mathbf{u}}_e + \mathbf{M}_b \ddot{w}_b] dt, \quad (2.36)$$

onde

$$\mathbf{M}_{se} = \int_0^{L_e} \rho_s A_s \mathbf{N}^t \mathbf{N} dx, \quad (2.37)$$

corresponde à matriz de massa elementar do sistema, e

$$\mathbf{M}_b = \int_0^{L_e} \rho_s A_s \mathbf{N}^t dx, \quad (2.38)$$

é um vetor de contribuição inercial referente à base móvel.

2.2.4 Variação da energia potencial

Para cada elemento de viga, escreveremos a expressão da energia potencial a partir da equação (2.15), dessa forma

$$\delta U_{se} = \delta \mathbf{u}_e^t \mathbf{K}_{se} \mathbf{u}_e, \quad (2.39)$$

onde \mathbf{K}_{se} é a matriz de rigidez elementar, definida como

$$\mathbf{K}_{se} = \int_0^{L_e} E_s I_s \mathbf{B}^t \mathbf{B} dx. \quad (2.40)$$

2.2.5 Equação do movimento da microviga considerando a ponteira

Incluindo-se as variações de energia cinética relacionadas à ponteira, e somando-se as contribuições ao funcional $\delta \Pi_s$, tem-se que a equação (2.30) pode ser reescrita da seguinte maneira,

$$\delta \Pi_s = \int (\delta T_s - \delta U_s + \delta W_s + \delta T_t) dt = 0, \quad (2.41)$$

onde

$$\int \delta T_t dt = - \int (\delta w_t m_t \ddot{w}_t + \delta w_t' I_t \ddot{w}_t') dt. \quad (2.42)$$

O deslocamento transversal w_t da ponteira pode ser escrito em função do deslocamento transversal w_b da base, então

$$w_t(t) = w_b(t) + w_{t,rel}(t), \quad (2.43)$$

em que $w_{t,rel}$ é o deslocamento transversal relativo da ponteira. Usando a equação (2.43), pode-se reescrever a equação 2.19 em função dos seus GDL, tal que

$$w_t = \mathbf{L}_m \mathbf{u} + w_b, \quad \delta w_t = \delta \mathbf{u}^t \mathbf{L}_m^t, \quad w'_t = \mathbf{L}_i \mathbf{u}, \quad \text{e} \quad \delta w'_t = \delta \mathbf{u}^t \mathbf{L}_i^t, \quad (2.44)$$

onde

$$\int \delta T_t dt = - \int \delta \mathbf{u}^t (\mathbf{M}_t \ddot{\mathbf{u}} + \mathbf{M}_{tb} \ddot{w}_b) dt, \quad (2.45)$$

com

$$\mathbf{M}_t = \mathbf{L}_m^t m_t \mathbf{L}_m + \mathbf{L}_i^t I_t \mathbf{L}_i \quad \text{e} \quad \mathbf{M}_{tb} = \mathbf{L}_m^t m_t. \quad (2.46)$$

A equação geral do movimento para o modelo com deslocamento relativo pode ser escrita como

$$\delta \mathbf{u}^t [\mathbf{M}_T \ddot{\mathbf{u}} + \mathbf{K}_s \mathbf{u} - \mathbf{F}] = 0, \quad (2.47)$$

em que $\mathbf{M}_T = \mathbf{M}_s + \mathbf{M}_t$ e $\mathbf{F} = \mathbf{F}_b + \mathbf{F}_t$, onde $\mathbf{F}_b = (\mathbf{M}_b + \mathbf{M}_{tb}) \ddot{w}_b$ e \mathbf{F}_t será modelado a posteriori.

2.2.6 Condições de contorno

Para esse modelo, na extremidade engastada ($x = 0$), assume-se como condições de contorno, que tanto deslocamento ($w(0, t)$) quanto rotação ($w'(0, t)$) são nulas, assume-se também que o sistema tem base móvel na direção z (sistema com deslocamento relativo), na extremidade livre ($x = L_s$) assume-se uma ponteira com massa m_t e momento de inércia I_t , assume-se também a presença de forças intermoleculares que serão posteriormente especificadas.

2.3 Modelo de elementos finitos para o sistema acoplado

Nesta seção será apresentado o modelo considerando um atuador piezoelétrico na extremidade engastada da microviga.

2.3.1 Condições de contorno

Em $x = L_s$, considera-se a microviga com extremidade livre, com forças de interação que serão modeladas posteriormente. Em $x = 0$, define-se uma base deslizante apenas com movimento transversal, portanto, o ângulo de rotação da seção transversal neste ponto é nulo, isto é, $w'(0, t) = 0$. O acoplamento do atuador com a microviga é realizado no primeiro GDL do elemento finito correspondente ao deslocamento transversal da base, dessa maneira $w(0, t) = w_b(t) = u_p(t)$, em que u_p é o deslocamento longitudinal da pastilha.

2.3.2 Modelagem do atuador piezelétrico

Para modelar o atuador piezelétrico da extremidade engastada, considera-se apenas sua deformação unidimensional longitudinal na direção z . Como mostra o esquema da figura 2.4.

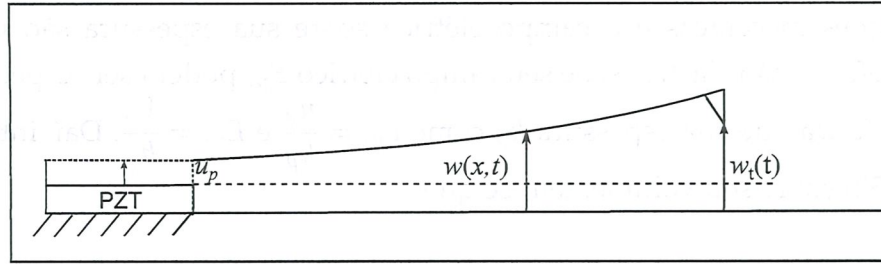


Figura 2.4: AFM scheme

Desta maneira, a pastilha tem uma extremidade engastada e seu deslocamento longitudinal é responsável pela excitação da microviga. Para um PZT constituído de material ortotrópico e utilizando a formulação de entalpia elétrica, pode-se escrever as equações constitutivas do atuador em função das deformações elásticas ε_{p_3} e deslocamento elétrico D_{p_3} , dessa maneira, para obter o trabalho virtual realizado pelas forças internas eletromecânicas, considera-se a energia elétrica de Gibbs, em que

$$H(\varepsilon_{p_3}, D_{p_3}) = \frac{1}{2} \varepsilon_{p_3} c_{p_{33}}^E \varepsilon_{p_3} - \varepsilon_{p_3} e_{p_{33}} E_{p_3} - \frac{1}{2} E_{p_3} \varepsilon_{p_{33}}^e E_{p_3}. \quad (2.48)$$

$$\delta H(\varepsilon_{p_3}, D_{p_3}) = \delta \varepsilon_{p_3} \sigma_{p_3} - \delta E_{p_3} D_{p_3} \rightarrow \begin{cases} \sigma_{p_3} = c_{p_{33}}^E \varepsilon_{p_3} - e_{p_{33}} E_{p_3} \\ D_{p_3} = e_{p_{33}} \varepsilon_{p_3} + \varepsilon_{p_{33}}^e E_{p_3} \end{cases} \quad (2.49)$$

Onde σ_{p_3} é a tensão mecânica normal (longitudinal, na direção z), D_{p_3} é o deslocamento elétrico longitudinal e E_{p_3} é o campo elétrico longitudinal (na direção z). $c_{p_{33}}^E$ é o coeficiente de rigidez elástica para campo elétrico constante, $e_{p_{33}}$ é a constante piezoelétrica e $\varepsilon_{p_{33}}^e$ é o coeficiente de permissividade dielétrica do material para deformações normais (longitudinais), ε_{p_3} , constantes. A contribuição do atuador pie-

zelétrico ao funcional $\delta\Pi$ pode ser escrita da seguinte maneira

$$\delta\Pi_p = \int (\delta T_p - \delta U_p + \delta W_p) dt. \quad (2.50)$$

A variação da energia (potencial) interna do atuador pode ser escrita em termos de ε_{p3} e E_{p3} da seguinte maneira,

$$\delta U_p = \int (\delta \varepsilon_{p3} \sigma_{p3} - \delta E_{p3} D_{p3}) d\Omega. \quad (2.51)$$

Utilizando a equação 2.49, então 2.51 pode ser reescrita como

$$\delta U_p = \int (\delta \varepsilon_{p3} c_{p33}^E \varepsilon_{p3} - \delta \varepsilon_{p3} e_{p33} E_{p3} - \delta E_{p3} e_{p33} \varepsilon_{p3} - \delta E_{p3} \varepsilon_{p33}^e E_{p3}) d\Omega. \quad (2.52)$$

Assumindo que a espessura do atuador é muito menor que seu diâmetro, e que as deformações mecânicas e o campo elétrico sobre sua espessura são uniformes, então sua deformação elástica ε_{p3} e seu campo elétrico E_{p3} podem ser respectivamente escritos em função de sua espessura h_p como $\varepsilon_{p3} = \frac{u_p}{h_p}$ e $E_{p3} = \frac{V_p}{h_p}$. Daí, integrando a equação (2.52) sobre seu volume, tem-se que

$$\delta U_p = \delta u_p k_{pm} u_p - \delta u_p k_{pp} V_p - \delta V_p k_{pp} u_p - \delta V_p k_{pe} V_p \quad (2.53)$$

onde $k_{pm} = c_{p33}^E \frac{A_p}{h_p}$, $k_{pp} = e_{p33} \frac{A_p}{h_p}$ e $k_{pe} = \varepsilon_{p33}^e \frac{A_p}{h_p}$ são os coeficientes elástico, pieze-létrico e dielétrico equivalentes do atuador.

Já que o PZT será usado no modo atuador, tem-se que a tensão V_p é conhecida, consequentemente, $\delta V_p = 0$, então, a energia potencial fica

$$\delta U_p = \delta u_p k_{pm} u_p - \delta u_p k_{pp} V_p. \quad (2.54)$$

A variação virtual da energia cinética do atuador PZT é escrita assumindo que os deslocamentos longitudinais totais na direção z podem ser descritos como

$$\bar{u}_p(z) = z \frac{u_p}{h_p}, \quad 0 \leq z \leq h_p \quad (2.55)$$

dessa maneira, a variação virtual da energia cinética pode ser escrita como

$$\int \delta T_p dt = - \int \int \delta \bar{u}_p \rho_p \ddot{\bar{u}}_p d\Omega dt, \quad (2.56)$$

Substituindo (2.55) em (2.56), e integrando por toda a espessura h_p tem-se que

$$\int \delta T_p dt = - \int \delta u_p \rho_p A_p \frac{h_p^3}{3} \frac{1}{h_p^2} \ddot{u}_p dt. \quad (2.57)$$

Finalmente, tem-se que

$$\int \delta T_p dt = - \int \delta u_p \frac{m_p}{3} \ddot{u}_p dt \quad (2.58)$$

em que

$$m_p = \rho_p A_p h_p \quad (2.59)$$

é a massa do atuador PZT.

2.3.3 Equação do movimento para o sistema acoplado

Baseado nas variações virtuais de energias cinética e potencial e do trabalho virtual exercido pelas forças externas tanto da microviga, quanto do atuador PZT, pode-se escrever o princípio de Hamilton para o sistema acoplado da seguinte maneira,

$$\int (\delta T_s + \delta T_p - \delta U_s - \delta U_p + \delta W) dt = 0 \quad (2.60)$$

onde δT_s e δU_s são, respectivamente, as variações de energia cinética e potencial da microviga. A variação das forças externas aplicadas ao sistema δW são representadas pela soma das forças de excitação da base $\mathbf{F}_b = \mathbf{L}_b^t k_{pp} V_p$ e de interação entre ponteira e superfície da amostra $\mathbf{F}_t = \mathbf{L}_w^t f_t$, sendo que

$$\int \delta T_s dt = \int \delta \mathbf{u}^t \mathbf{M}_T \ddot{\mathbf{u}} dt, \quad \delta U_s = \delta \mathbf{u}^t \mathbf{K}_s \mathbf{u} \quad \text{e} \quad \delta W = \delta \mathbf{u}^t (\mathbf{F}_b + \mathbf{F}_t). \quad (2.61)$$

Os termos δT_p e δU_p relativos ao atuador PZT estão descritos pelas equações (2.58) e (2.54).

Ao considerarmos $w(0, t) = u_p(t) = \mathbf{L}_b \mathbf{u}$ e $w'(0, t) = 0$, a equação do movimento para o sistema acoplado pode ser escrita como

$$(\mathbf{M}_T + \mathbf{M}_p) \ddot{\mathbf{u}} + (\mathbf{K}_s + \mathbf{K}_p) \mathbf{u} = \mathbf{F}_b + \mathbf{F}_t, \quad (2.62)$$

em que

$$\mathbf{M}_p = \mathbf{L}_b^t \frac{m_p}{3} \mathbf{L}_b, \quad \mathbf{K}_p = \mathbf{L}_b^t k_{pm} \mathbf{L}_b, \quad \text{e} \quad \mathbf{F}_b = \mathbf{L}_b^t k_{pp} V_p. \quad (2.63)$$

2.4 Modelagem da ponteira da microviga

Esta seção trata de apresentar a abordagem usada para a obtenção da massa (m_t) e segundo momento de inércia (I_t) da ponteira, para isto, a mesma será modelada como um cone de base circular, acoplado ao ao último nó da extremidade livre da microviga.

2.4.1 Massa da ponteira

Abaixo, a figura 2.5 apresenta o esquema do cone a ser modelado para representar a ponteira da microviga.

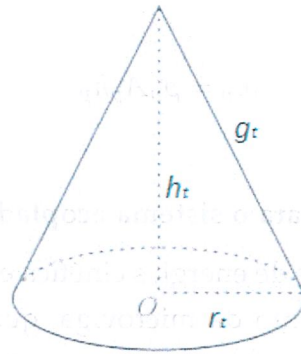


Figura 2.5: Esquema de cone com base circular

Considerando r_t como o raio da base e h_t como altura do cone, o volume pode ser escrito como

$$\Omega_t = \frac{\pi r_t^2 h_t}{3}. \tag{2.64}$$

Conhecendo a densidade ρ_s do conjunto ponteira/microviga, pode-se definir a massa m_p da ponteira como

$$m_t = \rho_s \Omega_t \tag{2.65}$$

2.4.2 Segundo momento de inércia da ponteira

O segundo momento de área (I_t) da ponteira será calculado considerando o centro de gravidade no ponto de acoplamento entre microviga e ponteira. Dessa maneira, leva-se o centro de gravidade da ponteira da posição G_t para a posição G'_t , como mostra a figura 2.6.

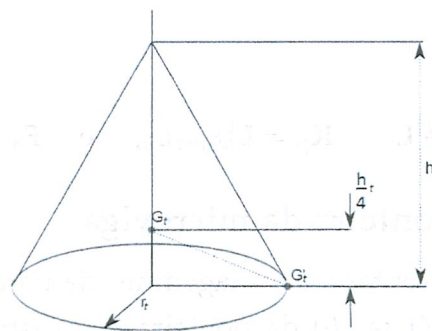


Figura 2.6: Segundo momento de inércia da ponteira

Dessa maneira, segue que:

$$I_t = m_t \left(\frac{3}{80} (4r_t^2 + h_t^2) + \left(\frac{h_t^2}{4} + r_t^2 \right) \right) \quad (2.66)$$

O acoplamento entre microviga e ponteira se dá entre o último GDL da microviga e um ponto da borda da base da ponteira, possibilitando que a mesma possua deslocamento vertical w bem como rotação w' , como mostrado na figura 2.7. Ao considerar a ponteira como um sólido, suas características geométricas permanecem constantes, independente do número de elementos finitos da microviga que sejam considerados para as análises.

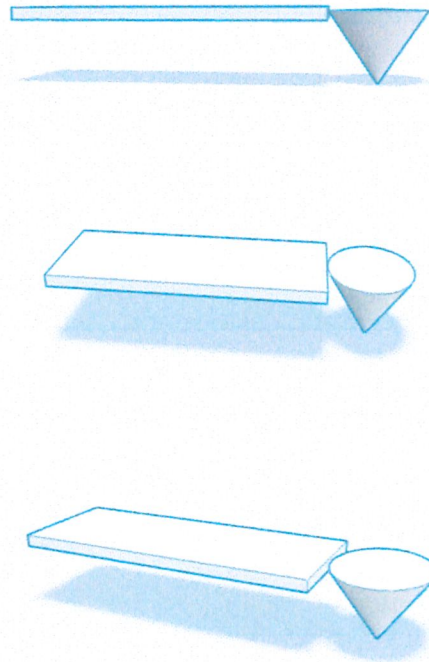


Figura 2.7: Esquema de ponteira/microviga

2.5 Modelos de interação

Na extremidade livre da microviga ($x = L_s$), tem-se, dependendo da distância d , a presença das forças de interação, que neste caso, serão modeladas usando o Potencial de Lennard Jones, que como vimos anteriormente, pode ser escrita como

$$f_t = \frac{\partial P_{LJ}}{\partial d_{wt}} = \frac{H_1 r_{tt}}{180(d_{wt})^8} - \frac{H_2 r_{tt}}{6(d_{wt})^2}, \quad (2.67)$$

em que $d_{wt} = d + w_t$, sendo d a distância inicial entre ponteira e amostra, r_{tt} o raio da ponta da ponteira e w_t o deslocamento total da ponteira. Os outros parâmetros foram

previamente apresentados na seção 1.3.1 e terão seus valores definidos no decorrer do trabalho.

Capítulo 3

Análises preliminares dos modelos obtidos

Neste capítulo, são apresentados procedimentos necessários para as análises numéricas que serão posteriormente realizadas. O primeiro deles é a redução de ordem do sistema através do método de truncamento. A partir da mudança da base nodal para a base modal, torna-se possível estudar a dinâmica da microviga mediante a variação do número de modos de vibrar considerados. Na sequência, estimam-se os parâmetros geométricos e materiais necessários à realização das simulações numéricas. Em posse destes dados, estima-se o fator de amortecimento que será utilizado nos modelos escolhidos, por fim, com o intuito de se escolher os modelos mais adequados, realiza-se uma comparação entre as curvas de resposta em frequência obtidas numericamente e experimentalmente

3.1 Redução da ordem dos modelos: Método de truncamento

Nesta seção, apresenta-se a diminuição de ordem do sistema dinâmico usando o método de truncamento, que consiste em truncar o sistema dinâmico estudado em algum ponto de interesse (SCHILDERS, 2008). Desta maneira, será possível reduzir o custo computacional durante as simulações numéricas, o método também permitirá a análise do sistema de ordem reduzida a partir da variação do número de modos de vibração considerados. Sendo assim, representaremos o sistema dinâmico estudado de forma mais genérica, a partir de sua forma discretizada, sem levar em conta suas especificidades e considerando a atuação de forças externas, assumindo a presença de uma matriz de amortecimento proporcional. A equação geral do movimento em função do vetor nodal \mathbf{u} será dada por

$$\mathbf{M}\ddot{\mathbf{u}} + \mathbf{D}\dot{\mathbf{u}} + \mathbf{K}\mathbf{u} = \mathbf{F}. \quad (3.1)$$

em que \mathbf{M} e \mathbf{K} são respectivamente as matrizes de massa e rigidez do sistema, \mathbf{D} é uma matriz de amortecimento proporcional que será definida nas próximas seções e \mathbf{F} é o vetor de forças, contendo as forças de excitação da base e interação da ponta. Para a mudança de base, assume-se que \mathbf{q} é o vetor de coordenadas modais e que Φ é a matriz $n \times n$ de autovetores do sistema, assim, a projeção de \mathbf{u} para as coordenadas

modais pode ser escrita como (SCHILDERS, 2008)

$$\mathbf{u} = \Phi \mathbf{q}. \quad (3.2)$$

Dessa forma, substituindo (3.2) em (3.1) e multiplicando todos os termos por Φ^t , obtém-se o sistema na base modal

$$\ddot{\mathbf{q}} + \Lambda \dot{\mathbf{q}} + \Omega^2 \mathbf{q} = \mathbf{F}_{mod}. \quad (3.3)$$

onde

$$\Lambda = \Phi^t \mathbf{D} \Phi \quad (3.4)$$

é a matriz modal diagonal de amortecimento proporcional formada por $2\zeta_n \omega_n$. Em que ζ_n e ω_n são respectivamente, os n valores dos fatores de amortecimentos e frequências naturais do sistema.

Segue também que

$$\Omega^2 = \Phi^t \mathbf{K} \Phi \quad (3.5)$$

é a matriz diagonal dos autovalores ω_n^2 , e

$$\mathbf{F}_{mod} = \Phi^t \mathbf{F} \quad (3.6)$$

é o vetor de forças externas aplicadas ao sistema.

3.2 Aquisição dos valores paramétricos e da curva de frequência do sistema

A partir da caracterização de uma microviga real em forma de haste e feita de silício (Si), foi possível obter seus parâmetros geométricos e sua resposta em frequência. Os parâmetros geométricos foram estimados com o auxílio de imagens obtidas por um Microscópio Eletrônico de Varredura (MEV), do Laboratório de Filmes Finos (LFF) do Instituto de Física da USP, já a resposta em frequência e o fator Q desta microviga, foram obtidos por um Microscópio de Força Atômica, também do LFF. O comprimento L_s apresentado na figura 3.1 não leva em consideração a ponteira real da microviga, que, por motivos de simplificação, terá seus parâmetros estimados numericamente.

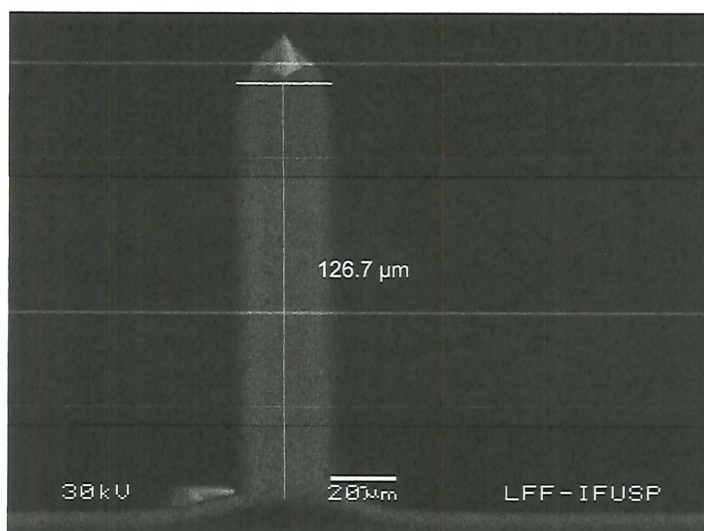


Figura 3.1: Vista de cima da microviga

Além do comprimento, a partir da figura 3.1, é possível estimar a largura b_s da microviga.

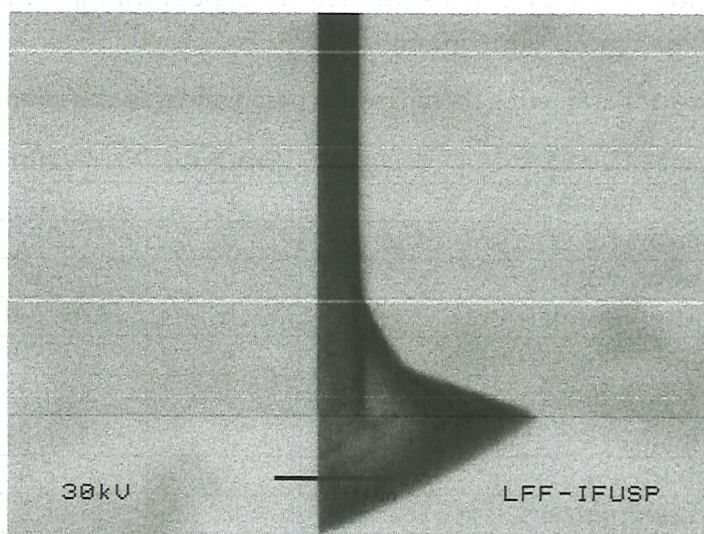


Figura 3.2: Vista de lado da ponteira/microviga

Da mesma maneira, com as figuras 3.2 e 3.3, foi possível estimar os valores da espessura h_s da microviga e da altura h_t da ponteira, respectivamente. O raio r_t da base da ponteira foi estimado numericamente, para possibilitar o ajuste durante a validação.

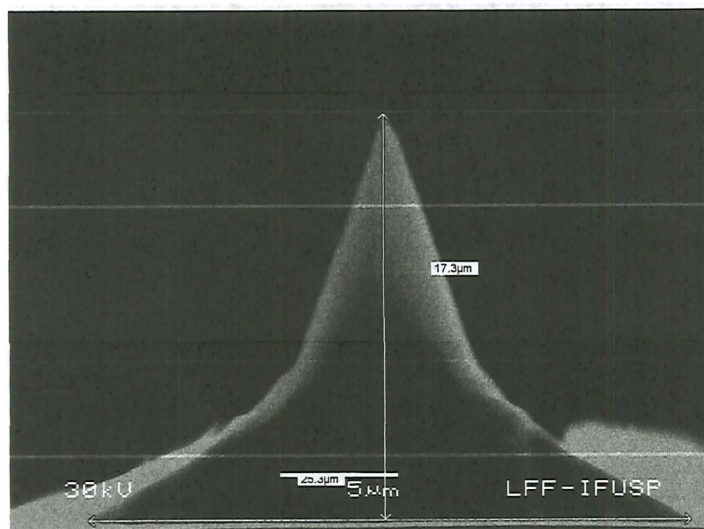


Figura 3.3: Vista frontal da ponteira

Além dos parâmetros geométricos da microviga, a tabela 3.1 apresenta os parâmetros materiais do atuador PZT utilizado no modelo acoplado, esses valores foram obtidos considerando um PZT-5H, os valores da espessura h_p e raio r_p do atuador também foram estimados numericamente.

Tabela 3.1: Parâmetros da microviga para validação dos modelos.

Parâmetro	Símbolo	Valor	Unid.
Comprimento da microviga	L_s	127	μm
Largura da microviga	b_s	33	μm
Espessura da microviga	h_s	3.37	μm
Módulo de Young da microviga	E_s	176×10^9	N/m^2
Densidade da microviga	ρ_s	2300	Kg/m^3
Segundo momento de área da microviga	I_s	105,25	μm^4
Área da microviga	A_s	111,21	μm^2
Altura da ponteira	h_t	17,4	μm
Raio da base da ponteira	r_t	11,6	μm
Raio da ponta da ponteira	r_{tt}	150	nm
Massa da ponteira	m_t	3×10^{-10}	Kg
Inércia de rotação da ponteira	I_t	$23,4 \times 10^{-22}$	Kgm^2
Espessura do atuador PZT	h_p	2	mm
Raio do atuador PZT	R_p	1,5	cm
Constante piezoelétrica	e_{p33}	23,3	C/m^2
Coefficiente de rigidez elástica do atuador	c_{p33}^E	$48,309 \times 10^9$	N/m^2
Densidade do atuador PZT	ρ_p	7500	kg/m^3

Para encontrar a frequência de ressonância da microviga, usou-se um procedimento chamado *tuning*, em que o aparelho varre uma faixa de frequências de excitação com intuito de encontrar a frequência que produz as maiores amplitudes de oscilação. Para microvigas usadas no modo intermitente, os valores das frequências

de ressonância geralmente não atingem valores maiores do que 500kHz , dessa forma, para a microviga em questão, o *tuning* foi realizado com um intervalo entre 100 e 500kHz . O aparelho usado foi um Microscópio de Força Atômica modelo Nanoscope IIIa Digital Instruments, semelhante ao mostrado na figura 3.4.

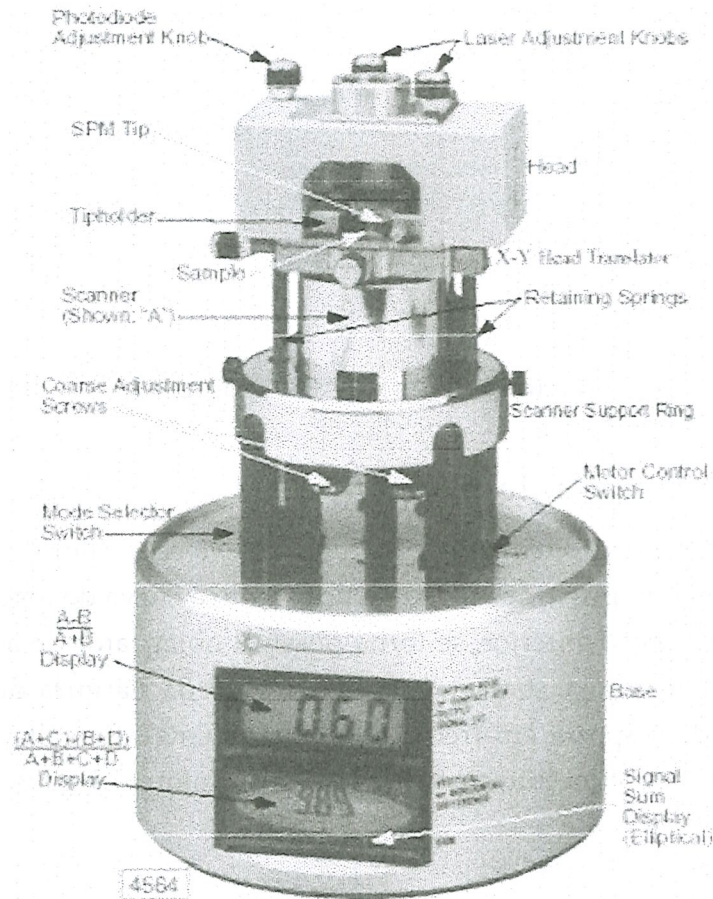


Figura 3.4: Modelo de aparelho (AFM) usado para obter os dados da microviga (SALVADORI, 2014)

A figura 3.5 apresenta a curva de resposta em frequência e a fase da microviga.

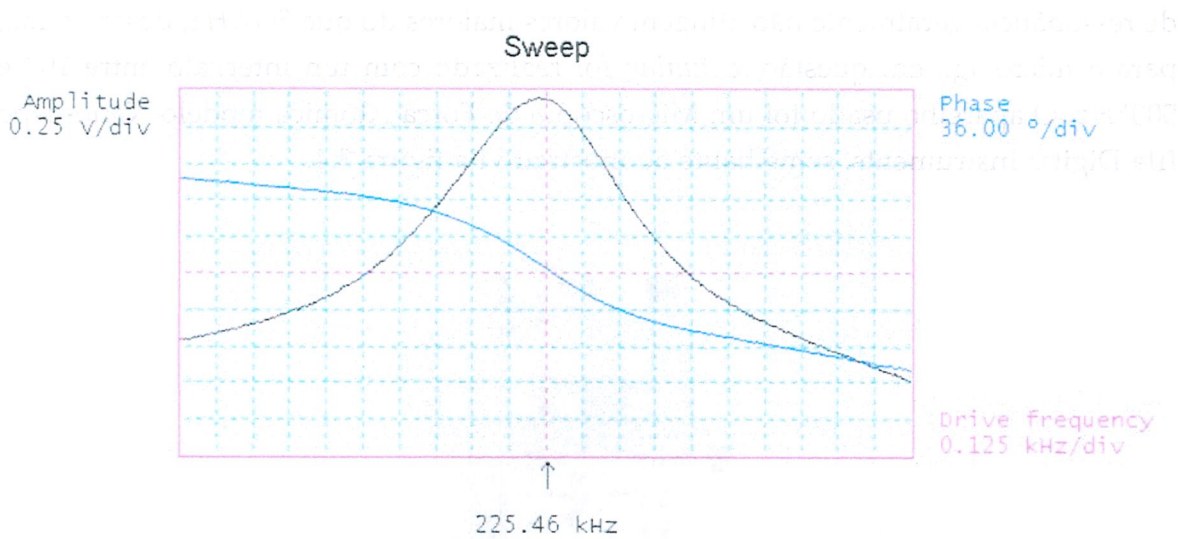


Figura 3.5: Tela do AFM após *tuning*

3.3 Obtenção do fator de amortecimento

Com um procedimento chamado *sensitivity*, obteve-se o valor do fator Q de qualidade da microviga. Em posse deste dado e utilizando a curva de resposta em frequência apresentada na seção anterior, se torna possível obter fator de amortecimento (ζ) da microviga real. Para isso, será utilizado o Método da Largura de Banda (método $-3dB$) na curva de resposta em frequência experimental. Ressalta-se que o fator Q também será utilizado com intuito de comparar os valores obtidos com os dois procedimentos.

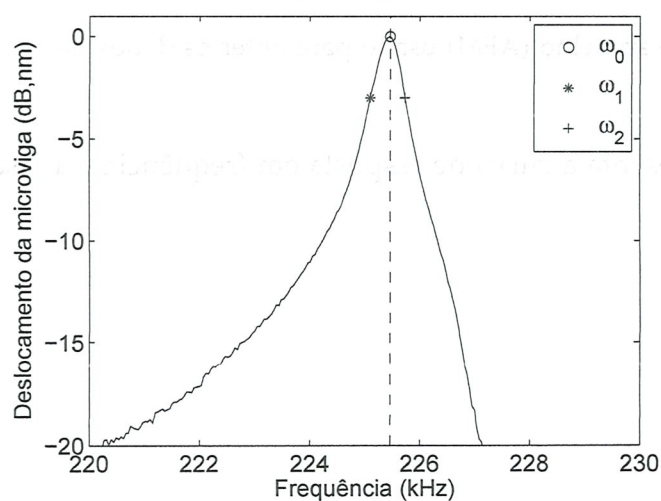


Figura 3.6: Método da Largura de Banda

A partir da figura 3.6, estima-se que, $\omega_0 = 225.46\text{kHz}$ (frequência de ressonância da microviga), e que a $-3dB$, tem-se $\omega_1 = 225.10\text{kHz}$ e $\omega_2 = 225.73\text{kHz}$, assim, segue

que ((MAIA; SILVA, 1997)),

$$\zeta = \frac{\omega_2 - \omega_1}{2\omega_0}, \quad (3.7)$$

o que resulta em $\zeta = 0.0014$, ou 0.14%.

Por outro lado, usando o fator de qualidade $Q = 358$ obtido pelo procedimento *sensitivity* , tem-se que o fator de amortecimento ζ pode ser calculado da seguinte maneira ((MAIA; SILVA, 1997)),

$$\zeta = \frac{1}{2Q}, \quad (3.8)$$

que resulta em $\zeta = 0.0014$ ou $\zeta = 0.14\%$.

Assim, o valor encontrado será usado nas seções seguintes, para a validação dos modelos obtidos e simulações numéricas com intuito de estudar a dinâmica do sistema.

3.4 Validação dos modelos obtidos

Afim de validar os modelos matemáticos apresentados no capítulo 2, simulações numéricas usando o software MATLAB serão apresentadas nesta seção. Para tanto, serão usados os parâmetros da tabela 3.1, além do fator de amortecimento estimado na seção anterior. Para cada modelo constante do capítulo 2, realizar-se-á uma comparação entre as curvas de resposta em frequência calculadas numericamente (utilizando o software MATLAB) e experimentalmente. Vale ressaltar que para realizar as simulações, foram considerados 30 elementos finitos, cujo número de graus de liberdade pode variar, dependendo das condições de contorno adotadas.

3.4.1 Validação do modelo com base deslizante-livre e força imposta

A primeira comparação é realizada entre o modelo com base deslizante e força imposta, a figura 3.7 mostra a comparação entre as respostas em frequência numérica e experimental.

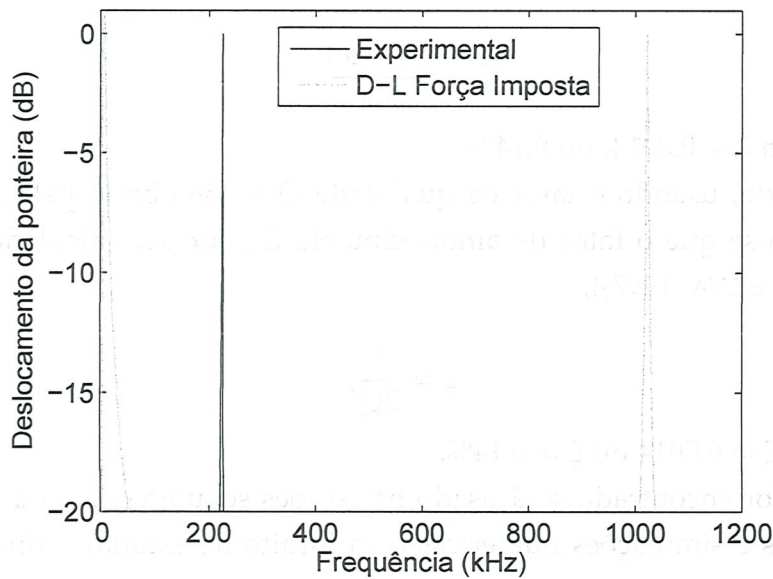


Figura 3.7: Comparação entre modelo de força imposta com dados experimentais

Devido às condições de contorno (base deslizante) o modelo apresenta um modo de vibração de corpo rígido (primeira frequência natural $\omega_0 = 0$), como consequência, tem-se que a comparação deve ser realizada usando-se o valor da segunda frequência natural, o que nos traz uma grande diferença entre a resposta numérica e experimental, descartando o uso deste modelo.

3.4.2 Validação do modelo deslizante-livre e deslocamento prescrito

Na concepção de sua modelagem, quando se prescreve o deslocamento da base, ocorre que a variação $\delta w(0, t) = 0$, fato que muda a condição de contorno da microviga, transformando o modelo em um modelo de viga tipo cantilever. Esse modelo tem comportamento diferente do modelo com força imposta, não apresentando o modo de corpo livre.

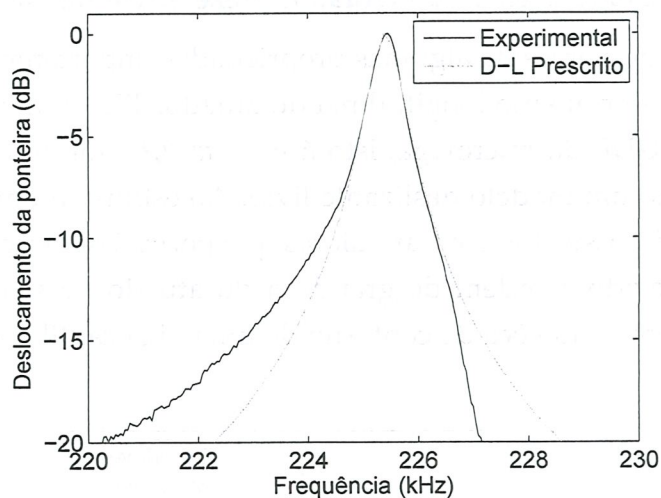


Figura 3.8: Comparação entre modelo com deslocamento prescrito e dados experimentais

Como pode-se notar, pela figura 3.8 os picos tem valores próximos, mostrando um resultado satisfatório.

3.4.3 Validação do modelos com base móvel (deslocamento relativo)

Neste modelo, assume-se uma base móvel w_b com deslocamento na direção z . Dessa maneira, o deslocamento total da ponteira é descrito por $w_t = w_{t_{rel}} + w_b$.

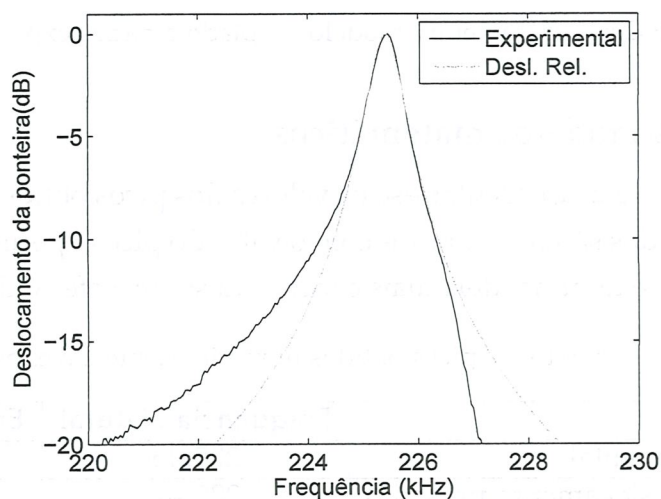


Figura 3.9: Comparação entre modelo com deslocamento relativo e dados experimentais

Na concepção deste modelo, a condição de contorno de partida é de uma viga cantilever, observa-se que os picos quase coincidem, estando com valores bem próximos.

3.4.4 Validação do modelo acoplado (atuador piezelétrico na base)

O modelo acoplado apresenta algumas propriedades importantes. Primeiramente, para considerar o deslocamento longitudinal do atuador PZT como sendo o deslocamento do primeiro GDL da microviga, isto é $u_p = w(0, t)$, foi necessário usar como condição de contorno um modelo deslizante livre. Ao estimar numericamente os parâmetros do PZT, foi possível encontrar valores que permitissem um ajuste bem apurado das curvas. Devido à ordem de grandeza do atuador, o sistema comporta-se como um sistema com condições de contorno de uma viga cantilever.

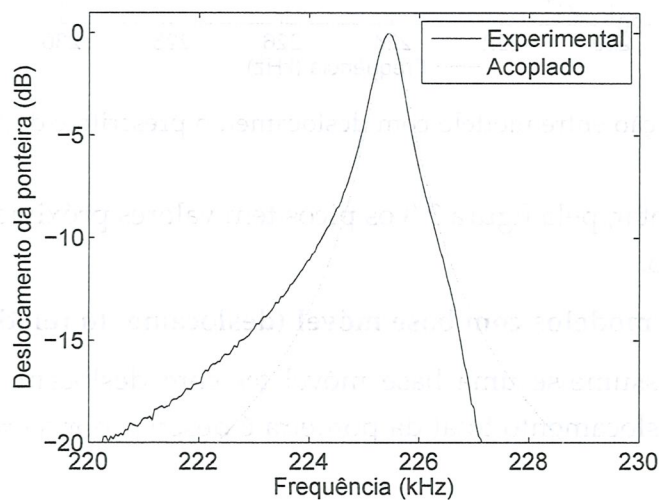


Figura 3.10: Comparação entre modelo acoplado e dados experimentais

3.5 Escolha dos modelos matemáticos

A seguir, na tabela 3.2, apresentam-se os valores dos picos obtidos a partir das curvas de frequência, todos são comparados com o valor do pico experimental. Calcula-se o erro relativo, para se ter uma ideia mais conclusiva sobre a efetividade dos modelos.

Tabela 3.2: Comparação entre os picos obtidos numericamente e o experimental (kHz).

Modelo	Frequência Natural	Erro Relativo
<i>tuning</i> - Experimental	225,46	
Modelo com deslocamento prescrito	225,42	0,017%
Modelo de força imposta	1.022,24	353,4%
Modelo com deslocamento prescrito	225,42	0,017%
Modelo acoplado	225,465	0,002%

Inicialmente, podemos descartar o uso do modelo com base deslizante e força imposta, já que a curva apresenta um valor de frequência bem diferente do valor obtido experimentalmente. Dadas as características do modelo, certas dificuldades surgiram ao se implementar e manipular computacionalmente o modelo com base deslizante e

deslocamento prescrito, problemas para ajustar o amortecimento, bem como alto custo computacional. Assim, mesmo este modelo apresentando uma resposta em frequência com valor de pico de ressonância bem próximo ao valor experimental, ele foi descartado. O modelo com deslocamento relativo foi escolhido porque se mostrou de fácil implementação, com baixo custo computacional e com erro pequeno, quando compara-se o valor da frequência de ressonância com o valor experimental. Por fim, o modelo com acoplamento piezoeletrico também foi escolhido, pois, além de ser de fácil implementação e ter baixo custo computacional, apresentou ótimos resultados quando comparado com os dados experimentais. Vale ressaltar que este modelo é o que melhor representa o sistema base-microviga-ponteira, sendo o que fica mais próximo do real funcionamento do AFM.

Capítulo 4

Simulações numéricas e resultados

Neste capítulo, simulações numéricas com os modelos reduzidos são realizadas com intuito de entender sua dinâmica quanto à variação dos modos de vibração considerados e quanto à variação da distância entre ponteira e amostra. Após a realização destas análises, pretende-se estudar o comportamento das forças de interação e por fim, usar os modelos para, a partir da medição ponto a ponto das distâncias ponteira-amostra, obter superfícies a partir de dados reais, realizando assim, comparações para mostrar a efetividade dos modelos cumprindo tais tarefas.

4.1 Variação dos modos de vibrar nos modelos de ordem reduzida

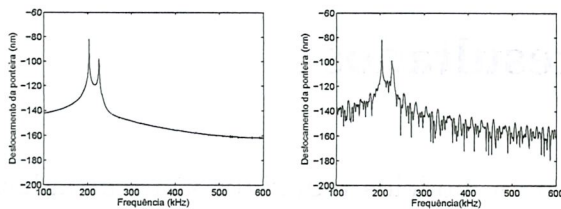
Nesta seção, uma análise com intuito de captar a dinâmica dos modelos obtidos é realizada. Para este fim, realiza-se uma análise do efeito da variação do número de modos de vibração considerados nos modelos de ordem reduzida, na adequada representação da dinâmica do sistema para diferentes condições de distância entre ponteira e amostra.

4.1.1 Modelo acoplado com atuador PZT

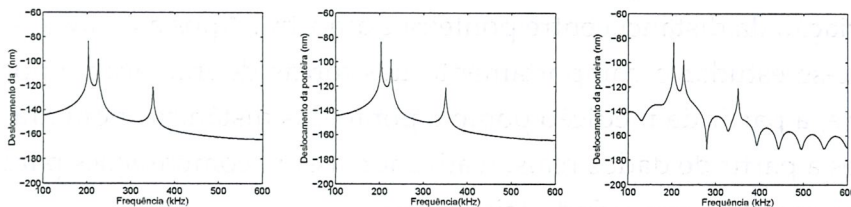
Para o modelo acoplado, a função de resposta em frequência do deslocamento da ponteira é avaliada, considerando diferentes distâncias (d), assim como o aumento do número de modos de vibração. Na figura 4.1, observam-se (horizontalmente) as respostas em frequência da ponteira com diferentes distâncias iniciais ($d = (90;88;84;63)nm$), além disso, observa-se também o comportamento do sistema à medida que aumentam o número de modos de vibração considerados no modelo de ordem reduzida (verticalmente). Dentro do intervalo de frequência usado, (100 a 600kHz), observam-se três picos de maior amplitude de vibração da ponteira, o primeiro, referente à frequência de excitação, os outros dois, referentes às frequências de ressonância do sistema composto por microviga e atuador PZT. Como esperado, observa-se que, considerando o modelo reduzido com apenas um modo de vibrar, não é possível observar o terceiro pico. Além disso, quanto menor a distância entre ponteira e amostra, mais importantes se tornam as interações intermoleculares nesta região. Devido à natureza não linear destas interações, ocorrem perturbações, tanto

nas curvas de respostas, quanto nos deslocamentos ao longo da extensão da microviga, e por esta última razão, o modelo de ordem reduzida com apenas o primeiro modo de vibrar não é capaz de representar a deformação local da microviga. Assim, mesmo com grandes distâncias iniciais ($d = 88nm$) a simulação computacional não converge (não é capaz de realizar as simulações) para a entrada considerada.

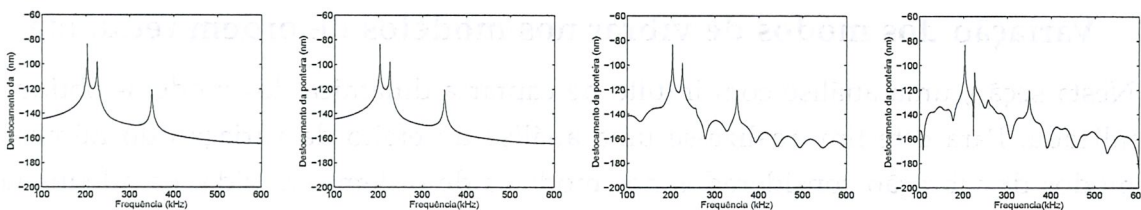
Modo 1



Modos 1 – 2



Modos 1 – 3



Modos 1 – 4

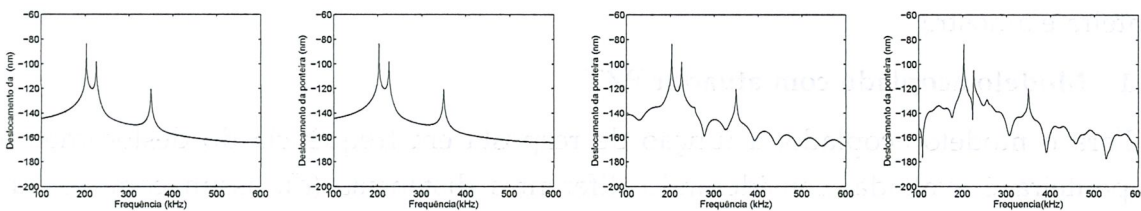


Figura 4.1: Resposta em frequência da ponteira sob excitação do atuador PZT para diferentes distâncias entre ponteira e amostra e considerando modelo reduzido com menos de 4 modos de vibrar. Da esquerda para a direita: ($d = (90;88;84;63)nm$)

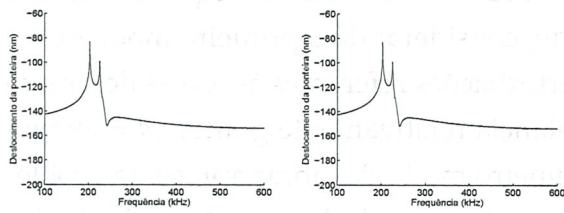
Observa-se também, que o fenômeno anteriormente descrito acontece para os outros modelos de ordem reduzida. Com dois modos de vibrar, o modelo para de convergir com distâncias menores que $84nm$, enquanto o modelo com três modos, não converge com distâncias menores que $63nm$. O modelo reduzido com quatro modos apresenta melhores resultados, convergindo para distâncias iniciais ponteira-amostra bem pequenas, da ordem de décimos de nanômetros, o que sugere que um modelo de ordem reduzida considerando quatro primeiros modos de vibrar é satisfatório e deve ser utilizado nas próximas análises.

4.1.2 Modelo com deslocamento relativo

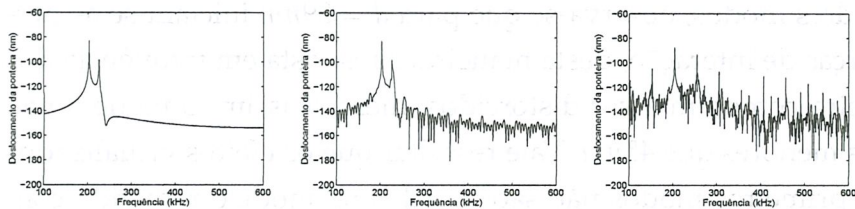
O modelo com deslocamento relativo será analisado de forma equivalente ao modelo acoplado. O sistema de ordem reduzida, com deslocamento relativo, será avaliado quanto à variação da distância ponteira-amostra ($d = (92; 90,5; 45; 20)nm$) e quanto a variação do número de modos de vibrar considerados. Na figura 4.2, apresentam-se os resultados obtidos sob estas circunstâncias. No intervalo de frequências utilizado ($100 - 600kHz$), notam-se dois picos de maior amplitude de oscilação da ponteira, o primeiro referente à frequência de excitação e o segundo referente à frequência de ressonância da microviga. Para o modelo reduzido, considerando o primeiro modo de vibrar, percebe-se que aparentemente não há perturbações referentes às forças de interação e os dois picos são notados. Com uma distância relativamente grande ($d = 89nm$), o sistema reduzido considerando apenas o primeiro modo de vibrar apresenta problemas de convergência, não sendo possível representar seus deslocamentos a distâncias menores que esta. Com dois modos, observa-se que para $d = 89nm$ iniciam-se as perturbações relativas as forças de interação, desta maneira, a resposta em frequência dos deslocamentos da ponteira começam a ser distorcidos, mesmo assim, o modelo não converge para distâncias menores que $45nm$. Vale ressaltar que os efeitos visualizados no modelo com os dois primeiros modos não são notados no modelo reduzido considerando apenas o primeiro modo de vibrar, evidenciando as limitações do modelo com apenas um modo de vibrar.

No modelo reduzido, considerando os três primeiros modos, não há problemas de convergência. Para uma análise isolada do modelo com deslocamento relativo, poderiam ser consideradas apenas as três primeiros modos do modelo reduzido. Mas, para que se possa fazer uma análise comparativa com o modelo acoplado, serão considerados os quatro primeiros, já que, o sistema considerando os quatro primeiros modos apresenta resultados similares ao modelo com três modos.

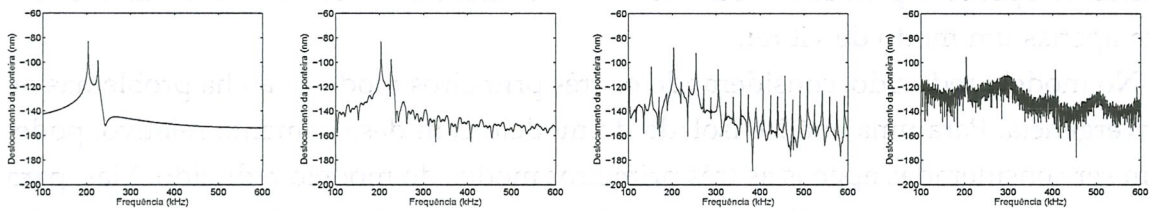
Modo 1



Modos 1 – 2



Modos 1 – 3



Modos 1 – 4

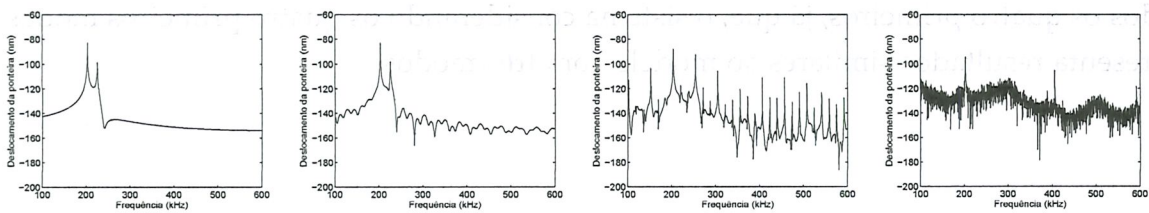


Figura 4.2: Resposta em frequência da ponteira sob excitação do atuador PZT para diferentes distâncias entre ponteira e amostra e considerando modelo reduzido com menos de 4 modos de vibrar. Da esquerda para a direita: ($d = (92; 90,5; 45; 20) \text{ nm}$).

4.2 Variação da distância inicial entre ponteira e amostra

Nesta seção, o conjunto de simulações apresentado visa mostrar a resposta do sistema a partir da variação entre a distância entre ponteira e amostra para os dois modelos escolhidos (modelo com acoplamento piezométrico e com deslocamento relativo). Para as análises, usa-se um gráfico que representa a variação das forças de atração e repulsão, bem como a resposta dos deslocamentos no tempo e as repostas em frequências da ponteira da microviga.

4.2.1 Modelo com acoplamento piezométrico

No modelo acoplado, a excitação da base é definida pela expressão $V_p = \tilde{V}_p \text{sen}(\omega t)$, em que $\tilde{V}_p = 8,8V$ é a tensão de excitação do PZT, e $\omega = 202,62\text{kHz}$ é a frequência de excitação. Com o valor adotado para \tilde{V}_p , tem-se que a oscilação w_t da ponteira varia de $-81,88$ a $87,45\text{nm}$, e que, de acordo com a figura 4.3, a resposta em frequência apresenta no intervalo adotado ($100 - 600\text{kHz}$) três picos bem definidos, o primeiro, referente à frequência de excitação e os outros referentes às frequências de ressonância do sistema composto pelo atuador piezométrico e a microviga.

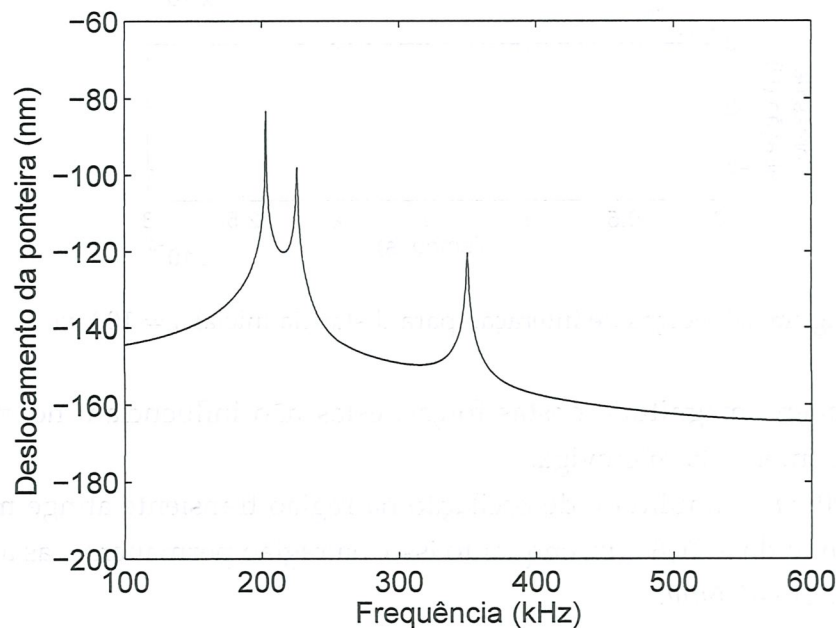


Figura 4.3: Resposta em frequência do sistema livre da presença das forças de interação ($d \gg 100\text{nm}$)

A seguir, são apresentados os resultados das simulações considerando a variação da distância inicial ($d = (100;90;80;70;60;50;40;30;20;0,4)\text{nm}$). O intuito dessas simulações é analisar as alterações no comportamento dinâmico do sistema devido à atuação das forças de interação, bem como entender em que ponto as forças se tornam mais significativas na dinâmica do movimento oscilatório da ponteira. Para tais

análises, optou-se pela análise do histórico de deslocamentos, da função resposta em frequência e da apresentação dos picos de força para cada oscilação da ponteira.

Dada a significativa diferença entre as ordens de grandeza das forças de atração e repulsão, as escalas dos eixos de força dos resultados não serão mantidas. O intuito dessas simulações não é analisar a intensidade das forças de interação, mas quando as mesmas estão presentes, para, dessa forma, estabelecer uma relação entre atuação das forças de interação e o comportamento dinâmico do sistema.

Devido às distâncias consideradas, observa-se que tanto nas figuras 4.4 e 4.6 notam-se apenas pequenas quantidades de forças de atração, os quadros referentes às forças de repulsão não apresentam alterações, já que nesta distância, forças de repulsão não são notadas.

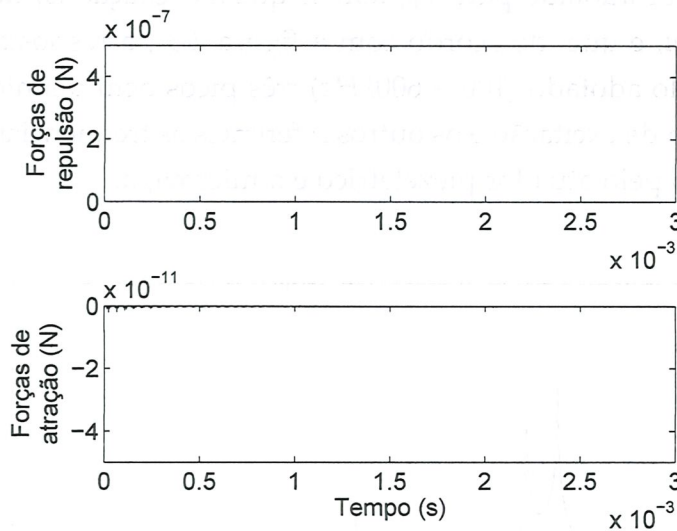


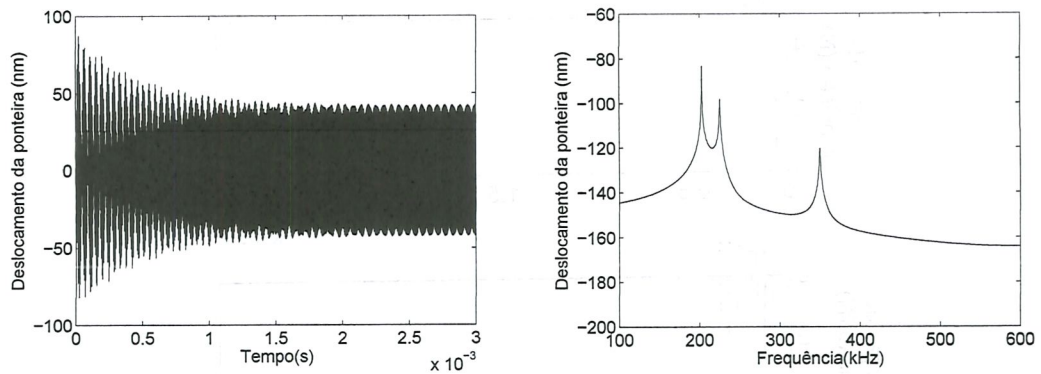
Figura 4.4: Forças de interação para distância inicial $d = 100nm$.

Dada a pequena magnitude destas forças, estas não influenciam no movimento oscilatório da ponteira da microviga.

Para $d = 100nm$, a amplitude de oscilação na região transiente atinge máximo de $87,45nm$ e mínimo de $-81,88nm$, enquanto isso, na região permanente, as amplitudes oscilam de -41 até $42,6nm$.

Como dito anteriormente, para $d = 90nm$, a resposta em frequência (fig. 4.7(b)) do sistema não apresenta alterações, portanto, não sofre com a ação das forças de interação (fig. 4.3).

Para $d = 80nm$, tem-se que a presença das forças de atração se tornam mais evidentes, figura 4.8, nota-se também a presença das forças de repulsão, fenômenos que promovem alterações significativas ao movimento oscilatório do sistema.



(a) Resposta no tempo do deslocamento da ponteira. (b) Resposta em frequência do deslocamento da ponteira.

Figura 4.5: Resposta do deslocamento da ponteira considerando $d = 100nm$.

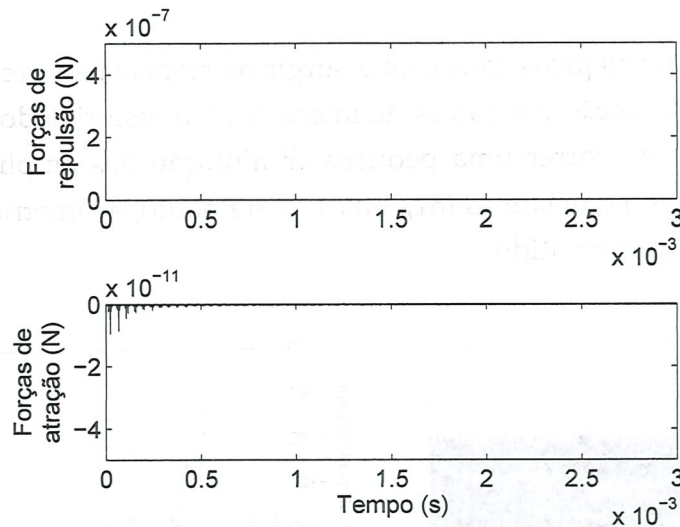
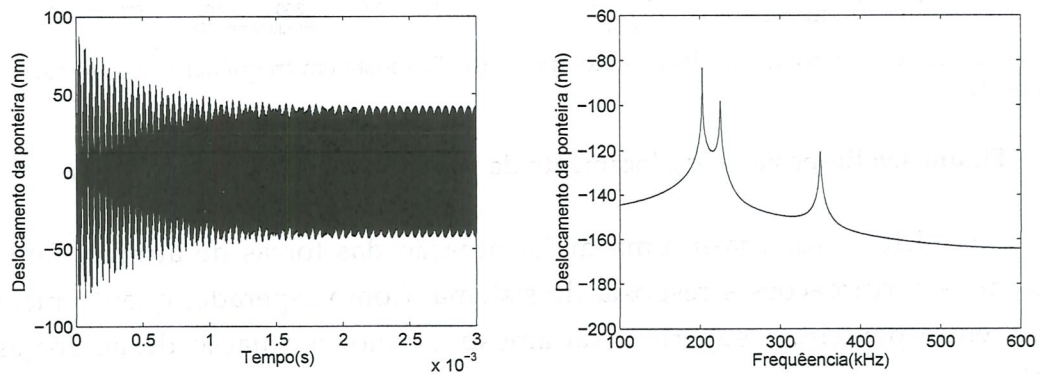


Figura 4.6: Forças de interação para distância inicial $d = 90nm$.



(a) Resposta no tempo do deslocamento da ponteira. (b) Resposta em frequência do deslocamento da ponteira.

Figura 4.7: Resposta do deslocamento da ponteira considerando $d = 90nm$.

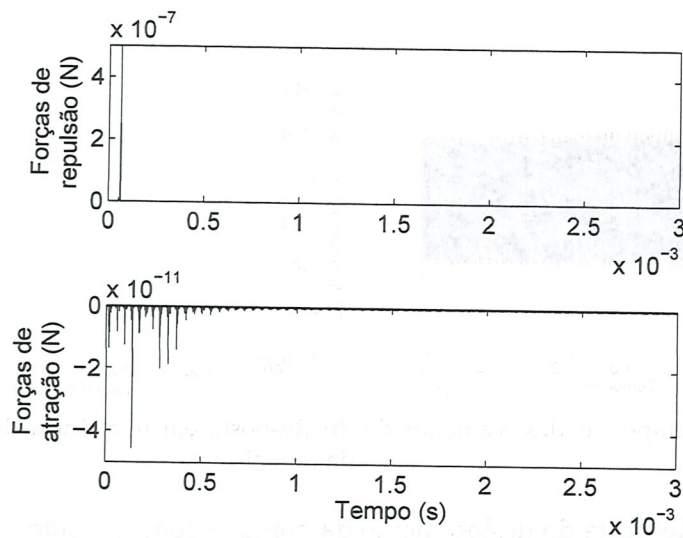
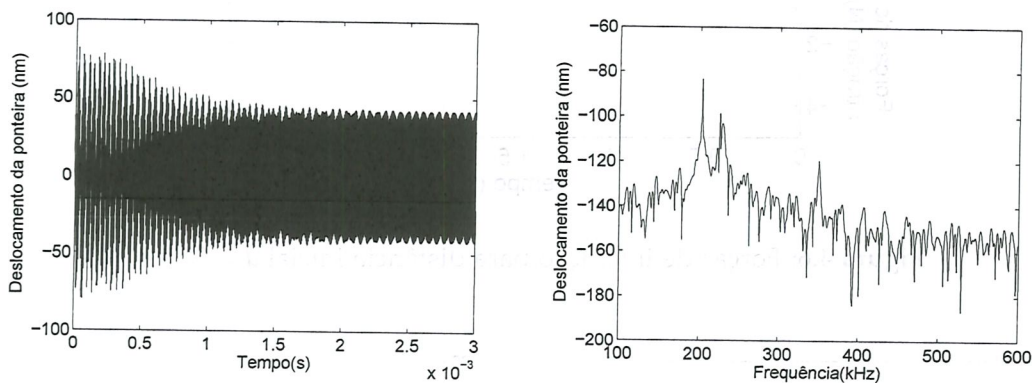


Figura 4.8: Forças de interação para distância inicial $d = 80nm$.

Com $d = 80nm$, novos picos começam a surgir na resposta em frequência, evidenciando a presença e atuação das forças de interação. No histórico dos deslocamentos da ponteira, começa a ocorrer uma pequena diminuição nas amplitudes de oscilação mínimas ($-79,4nm$) e máximas ($81,71nm$), neste ponto, a simetria do movimento oscilatório da ponteira é mantido.



(a) Resposta no tempo do deslocamento da ponteira.

(b) Resposta em frequência do sistema.

Figura 4.9: Resposta do deslocamento da ponteira considerando $d = 80nm$.

Na figura 4.10, evidencia-se uma maior atuação das forças de atração, fato que provoca mais perturbações à resposta do sistema. Como esperado, quanto menor a distância entre ponteira e superfície da amostra, maior a atuação destas forças de interação.

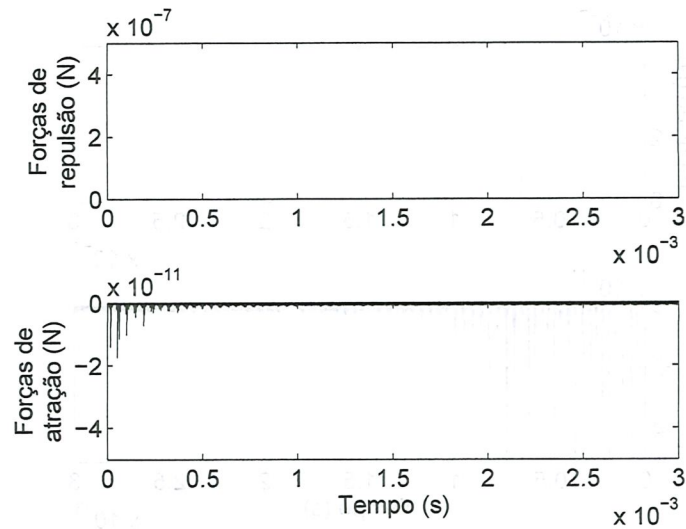
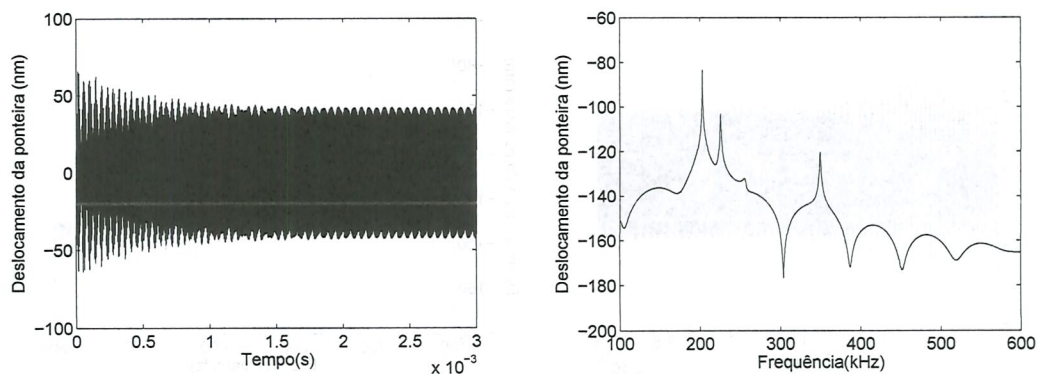


Figura 4.10: Forças de interação para distância inicial $d = 70nm$.

Na resposta em frequência da figura 4.11, observam-se irregularidades e o surgimento de novos picos enquanto isso, no histórico de deslocamentos da ponteira, tem-se uma região transiente com mínimo de $-64nm$ e máximo de $66,2nm$.



(a) Resposta no tempo do deslocamento da ponteira.

(b) Resposta em frequência do sistema.

Figura 4.11: Resposta do deslocamento da ponteira considerando $d = 70nm$.

Com $d = 60nm$, a região transiente é pouco visível e a presença das forças de atração é mais evidentes.

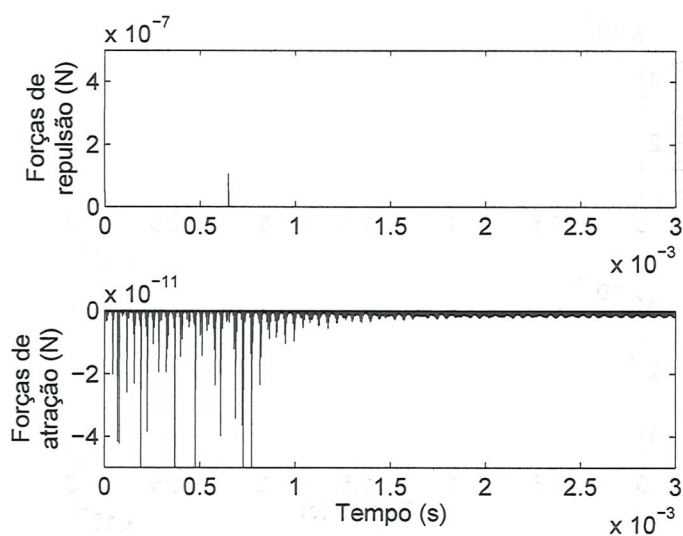
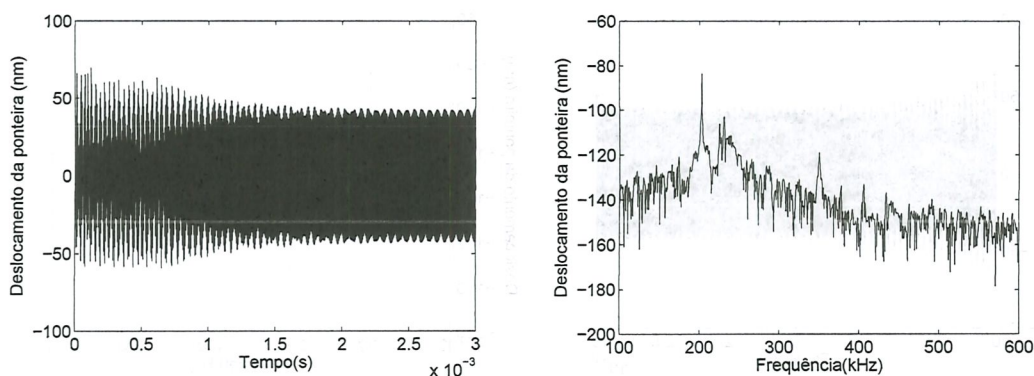


Figura 4.12: Forças de interação para distância inicial $d = 60nm$.

O segundo pico já não é tão evidente, nesse ponto, a maior e menor amplitudes são $69,69nm$ e $-59,2nm$ respectivamente, nota-se também que a simetria da região permanente começa a diminuir.



(a) Resposta no tempo do deslocamento da ponteira. (b) Resposta em frequência do sistema.

Figura 4.13: Resposta do deslocamento da ponteira considerando $d = 60nm$.

Para $d = 50nm$, tanto forças de atração quanto de repulsão atuam no sistema.

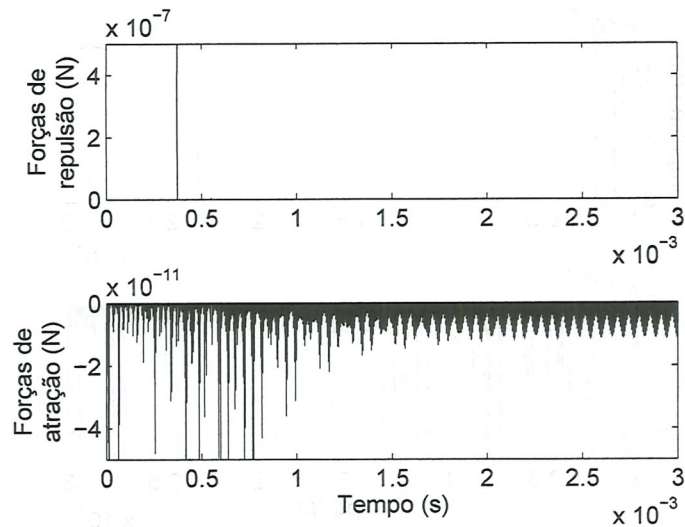
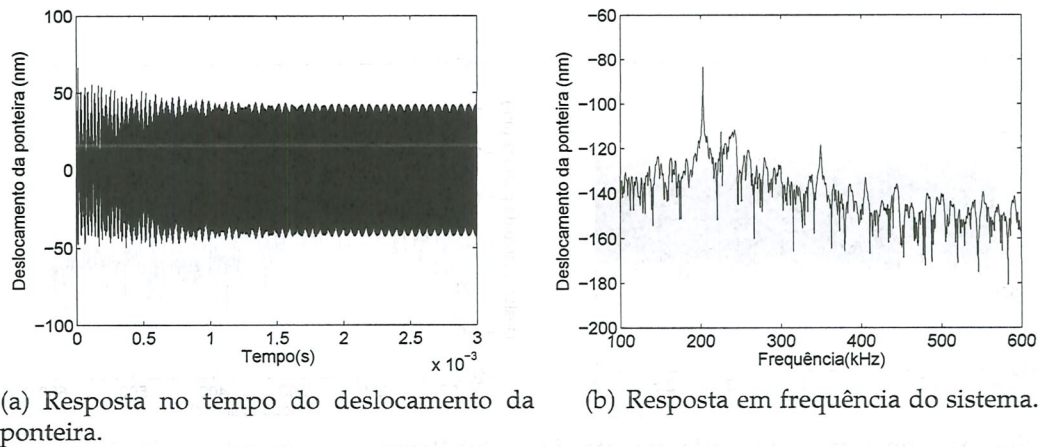


Figura 4.14: Forças de interação para distância inicial $d = 50nm$.

Não há mais região transiente no histórico de deslocamentos da ponteira, este apresenta oscilações máximas e mínimas com amplitudes de $66,2nm$ e $-49,5nm$. Na resposta em frequência, o sistema já não apresenta semelhanças com o sistema apresentado na figura 4.3, distorções e novos picos surgem, mostrando que a atuação das forças de interação alterou as características estruturais do sistema.



(a) Resposta no tempo do deslocamento da ponteira.

(b) Resposta em frequência do sistema.

Figura 4.15: Resposta do deslocamento da ponteira considerando $d = 50nm$.

Para $d = 40nm$, as amplitudes máximas e mínimas são 51 e $-39,6nm$. Percebe-se que a distância inicial limita as amplitudes de oscilações mínimas.

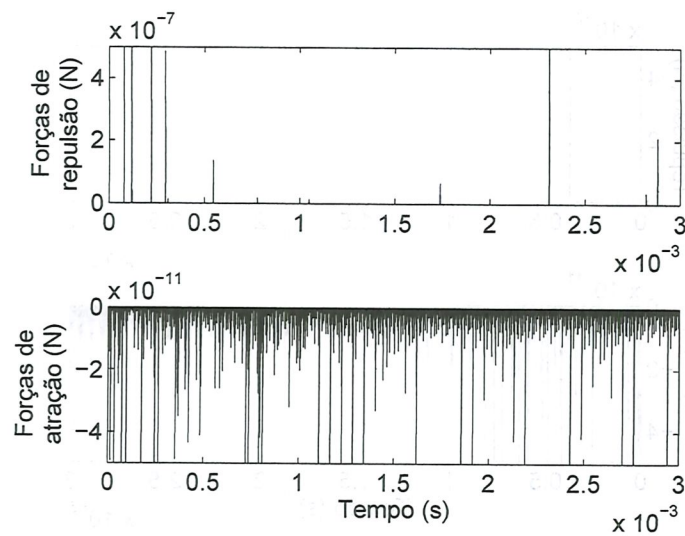
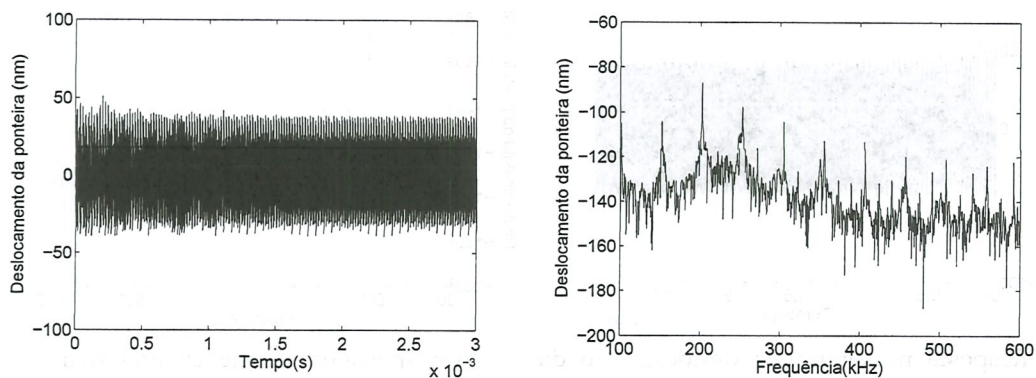


Figura 4.16: Potencial de Lennard Jones para $d = 40nm$.

Neste ponto ocorre o surgimento de vários picos com diferentes frequências, o que evidencia o quão importante é a interferência das forças de interação no movimento oscilatório da ponteira. Devido à inerente natureza não linear dessas forças, para $d = 40nm$ o sistema se comporta como um sistema não linear, apresentando distorções e uma resposta com vários picos em várias frequências diferentes da frequência de forçamento (NAYFEH; PAI, 2008; SAVI, 2006).



(a) Resposta no tempo do deslocamento da ponteira.

(b) Resposta em frequência do sistema.

Figura 4.17: Resposta do deslocamento da ponteira considerando $d = 40nm$.

Na figura 4.19a, observa-se que a ponteira oscila com amplitudes que variam de -29 a $44nm$.

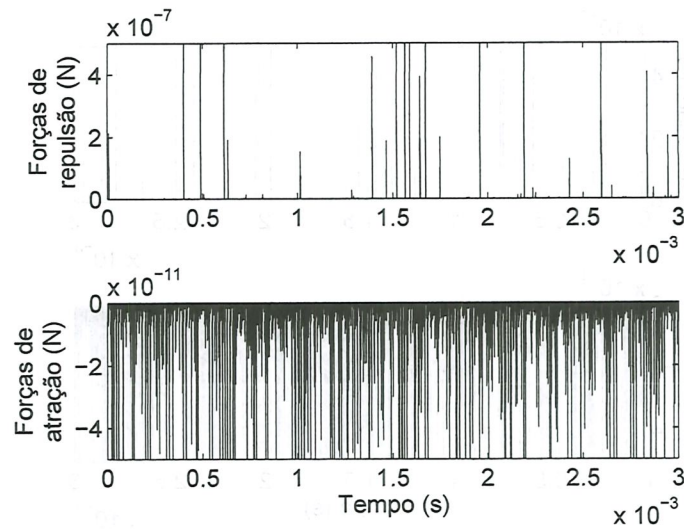
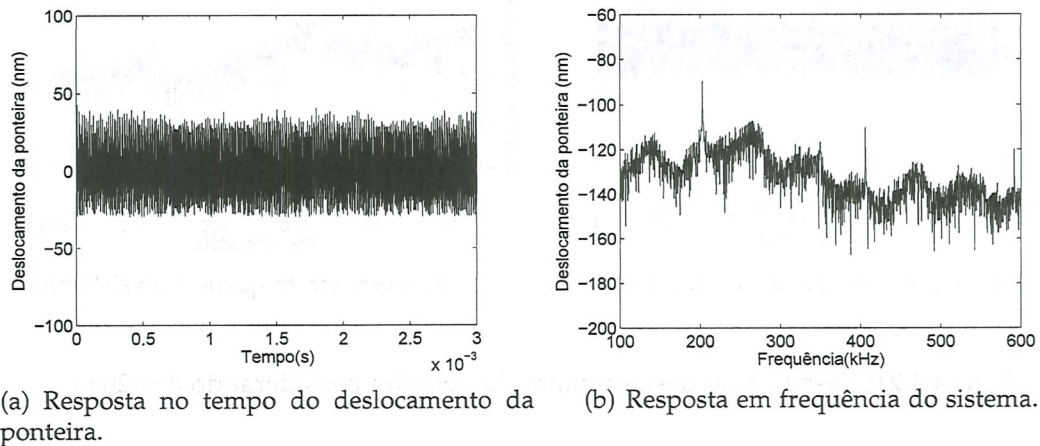


Figura 4.18: Forças de interação para distância inicial $d = 30nm$.

Na figura 4.19b, surgem picos múltiplos do pico referente à frequência de excitação, além de distorções (irregularidades) já citadas anteriormente.



(a) Resposta no tempo do deslocamento da ponteira.

(b) Resposta em frequência do sistema.

Figura 4.19: Resposta do deslocamento da ponteira considerando $d = 30nm$.

Percebe-se que os deslocamentos não estão limitados apenas na parte de baixo (superfície da amostra), mas também na parte de cima. Esse fenômeno mostra que a amplitude de oscilação da ponteira fica limitada pelas forças de atração, e as mudanças na rigidez do par atuador-microviga são visíveis, já que, na resposta em frequência, um dos picos referentes à ela (rigidez) não é mais visível.

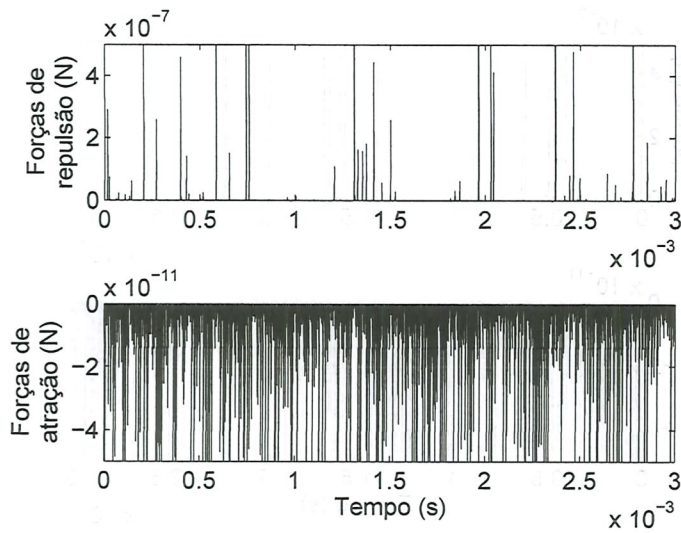
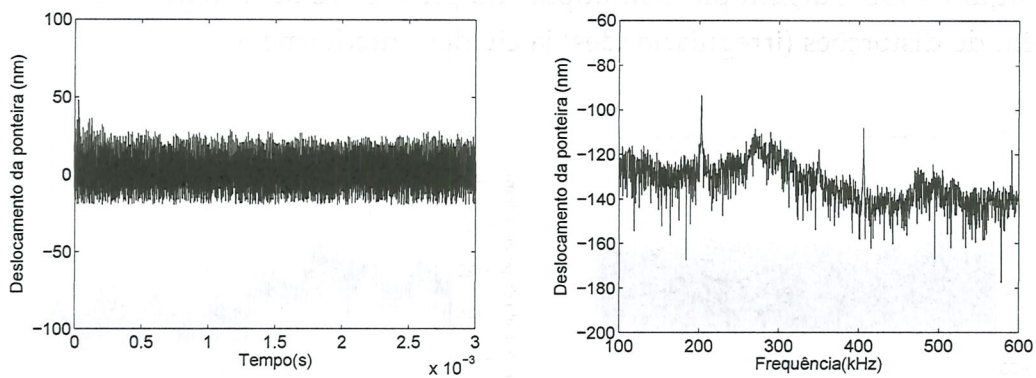


Figura 4.20: Forças de interação para distância inicial $d = 20nm$.



(a) Resposta no tempo do deslocamento da ponteira.

(b) Resposta em frequência do sistema.

Figura 4.21: Resposta do deslocamento da ponteira considerando $d = 20nm$.

Para uma distância inicial de décimos de nanômetros $d = 0,4nm$, forças de atração e repulsão agem com grande intensidade e o movimento oscilatório da ponteira apresenta-se distorcido pela ação das forças intermoleculares.

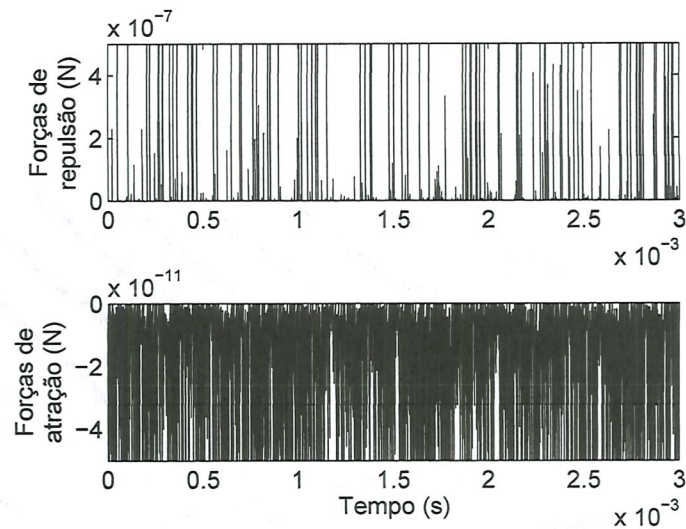
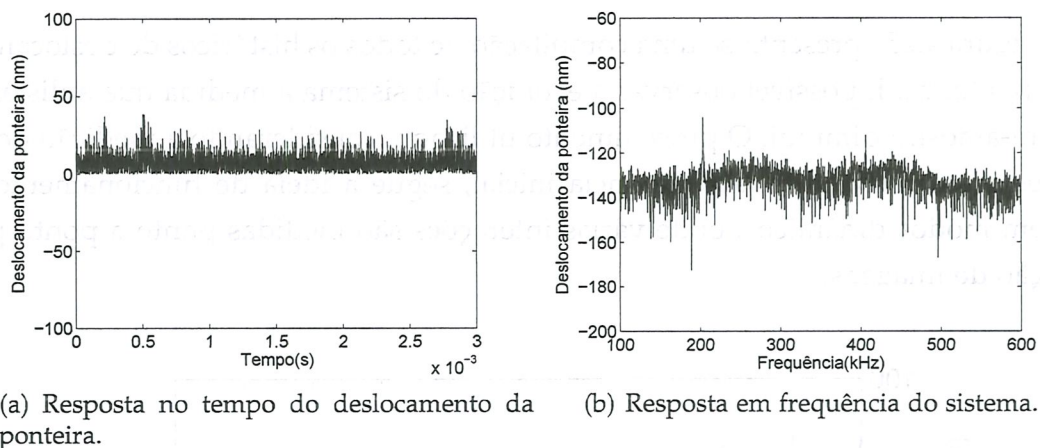


Figura 4.22: Forças de interação para distância inicial $d = 0,4nm$.



(a) Resposta no tempo do deslocamento da ponteira.

(b) Resposta em frequência do sistema.

Figura 4.23: Resposta do deslocamento da ponteira considerando $d = 0,4nm$.

Uma visão geral dos resultados apresentados anteriormente pode ser vista na figura 4.24, onde observa-se que o único pico presente em todas as respostas em frequência é o referente à frequência de excitação. Pode-se observar também a evolução das distorções que ocorrem durante o aumento das forças de interação (diminuição da distância inicial), com regiões onde vários picos surgem, até a região onde apenas três picos são aparentes. Esses resultados confirmam o quanto as forças de interação interferem no movimento oscilatório da ponteira, atuando também na dinâmica da microviga.

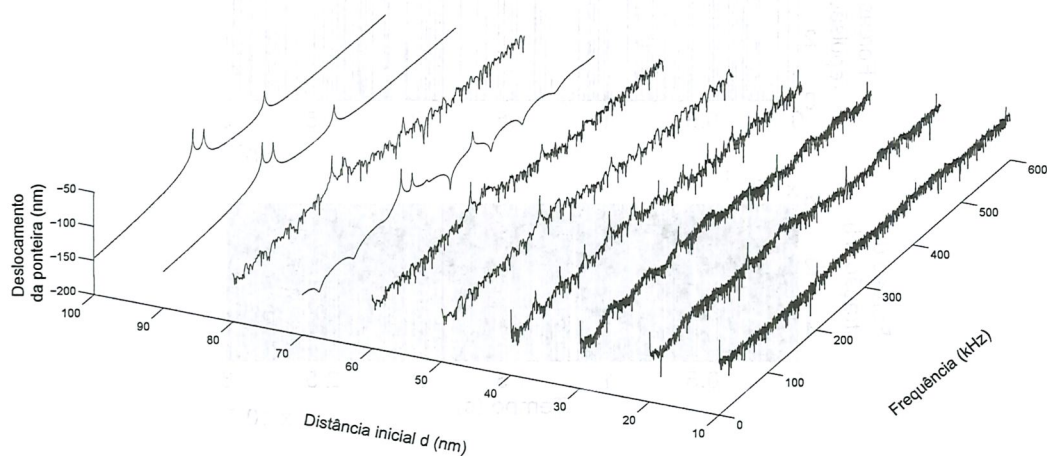


Figura 4.24: Resposta em frequência do deslocamento da ponteira para diferentes distâncias entre ponteira e amostra.

Na figura 4.25 apresenta-se uma compilação de todos os históricos de deslocamentos da ponteira. É possível observar a evolução do sistema à medida que a distância ponteira-amostra diminui. O procedimento utilizado, considerando a medição de vários deslocamentos para cada distância inicial, segue a ideia de funcionamento do AFM em modos dinâmicos, onde várias interações são medidas ponto a ponto para aquisição de imagens.

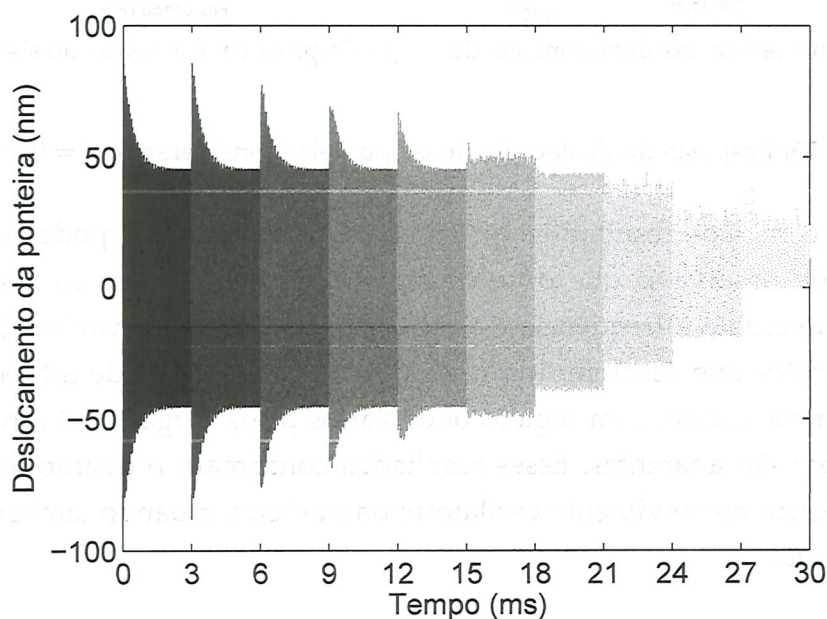


Figura 4.25: Modificação da resposta no tempo do deslocamento da ponteira com a variação da distância entre ponteira e superfície da amostra.

Para calcular o pixel de um determinado ponto da superfície da amostra, o AFM calcula o R_q (Rms) dos deslocamentos (ou interações) da ponteira neste ponto. Usando este conceito, é possível estimar um perfil topológico da figura 4.25, considerando cada distância inicial observada como sendo uma altura referente a uma superfície teórica.

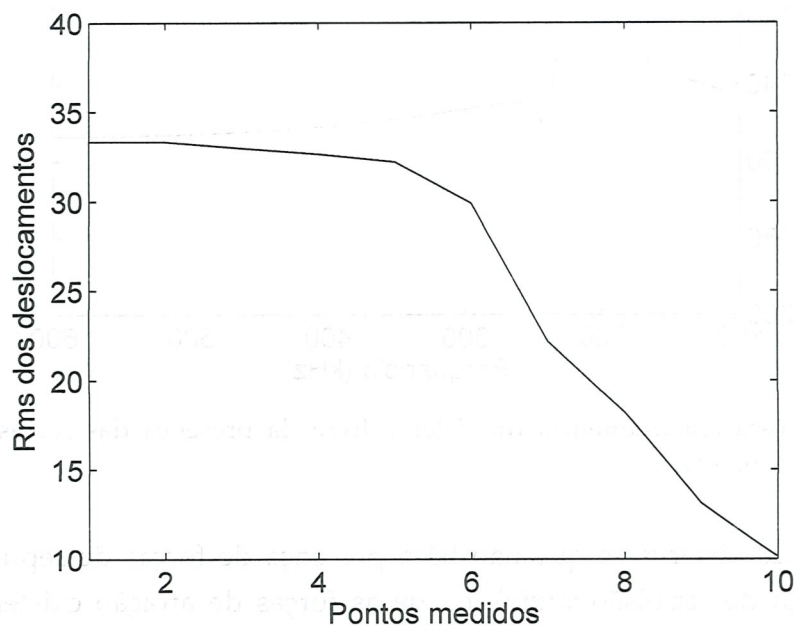


Figura 4.26: R_q dos deslocamentos apresentados na figura 4.25

O resultado do cálculo do R_q dos deslocamentos durante a variação da distância inicial d pode ser observado na figura 4.26.

4.2.2 Modelo com deslocamento relativo

No modelo com deslocamento relativo, $w_b = \tilde{w}_b \text{sen}(\omega t)$ é a função do deslocamento prescrito da base na direção z , em que $\tilde{w}_b = 6nm$ é a amplitude do deslocamento prescrito da base e $\omega = 202,8kHz$ é a frequência de excitação da mesma. Sem a presença das forças de interação (distâncias onde não há relevante presença de tais forças), a amplitude total w_t de oscilação da ponteira varia de $-91,2nm$ à $88,7nm$. Na função resposta em frequência do sistema sem presença de forças de interação (fig. 4.27), observam-se dois picos predominantes, um referente à frequência de excitação (o primeiro pico) e outro referente à frequência de ressonância da microviga (segundo pico).

As análises que serão apresentadas nesta seção, seguem a mesma sequência usada na seção anterior, em que, os efeitos das forças de interação no movimento oscilatório da ponteira da microviga, são estudados a partir da variação das distâncias iniciais consideradas. Para realizar estas análises, foram usados os deslocamentos e as respostas em frequência do sistema considerando $d = (100;90;80;70;60;50;40;30;20;0,4)nm$.

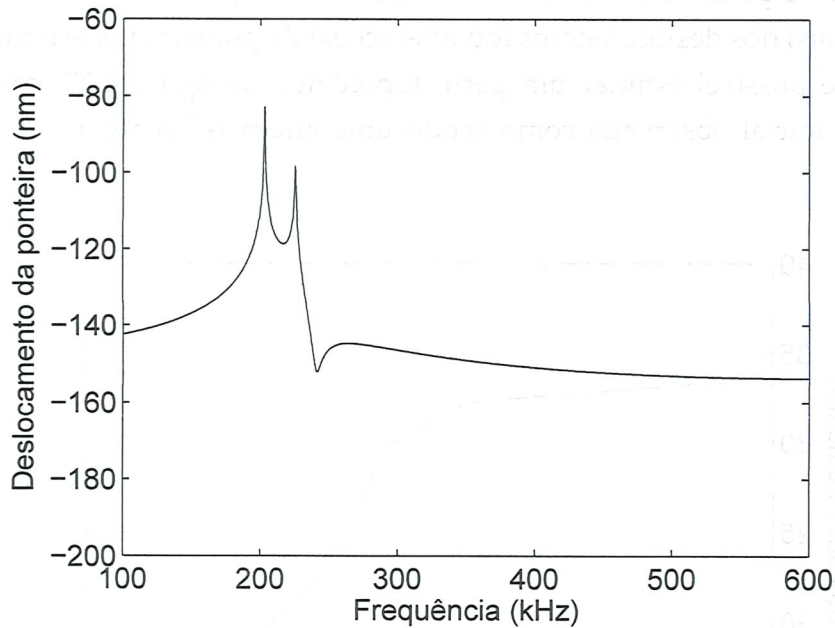


Figura 4.27: Resposta em frequência do sistema livre da presença das forças de interação ($d \gg 100nm$)

Na figura 4.28 observa-se que não há a presença de forças de repulsão (quadro referente à força de repulsão vazio), e que as forças de atração existentes não são suficientes para interferir no movimento oscilatório da ponteira da microviga.

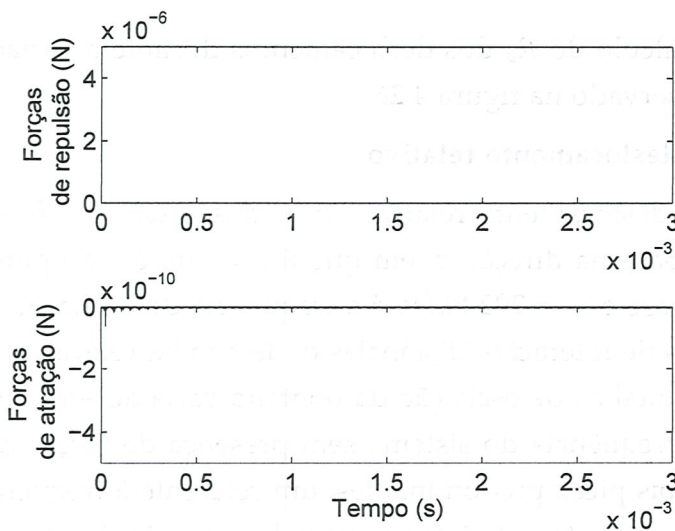


Figura 4.28: Forças de interação para distância inicial $d = 100nm$.

Observa-se um histórico (fig. 4.29(a)) simétrico ao eixo das amplitudes, e uma resposta em frequência (fig. 4.29(b)) que apresenta apenas os picos de excitação e de ressonância da microviga. Para tais simulações adotou-se $d = 100nm$. Verifica-se que na região transiente registram-se amplitudes de oscilação de aproximadamente

$\pm 100nm$, estabilizando (região permanente) com uma amplitude de $\pm 50nm$ simétrica ao eixo dos deslocamentos.

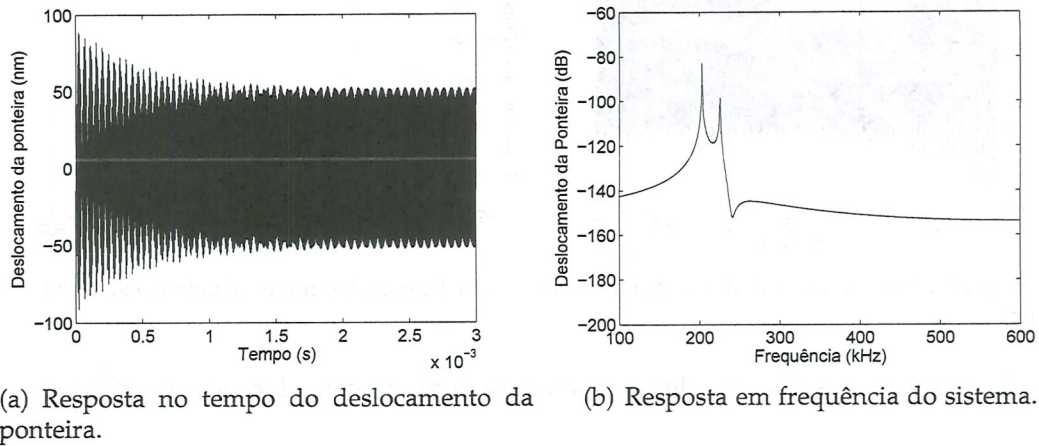


Figura 4.29: Resposta do deslocamento da ponteira considerando $d = 100nm$.

Diminuindo a distância para $d = 90nm$ (fig. 4.30), ocorre uma maior atuação das forças de atração, e a presença das forças de repulsão (fig. 4.30) pode ser observada.

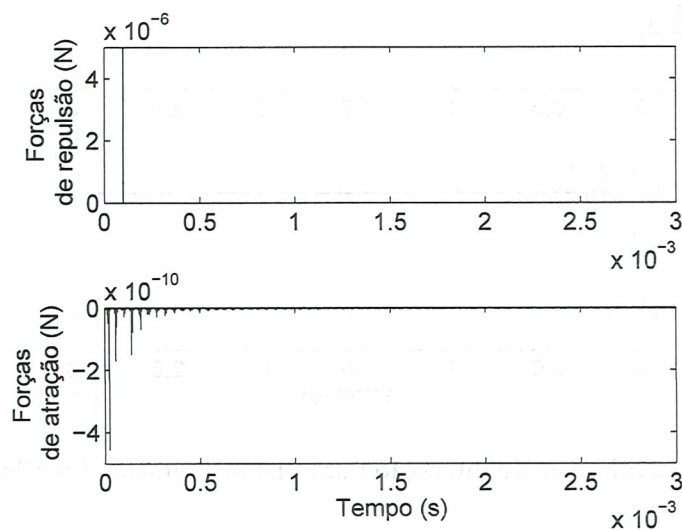
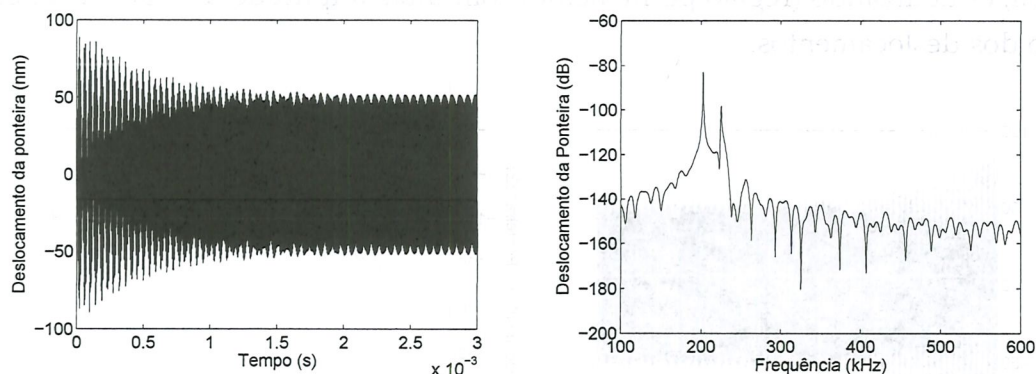


Figura 4.30: Forças de interação para distância inicial $d = 90nm$.

Como consequência, surgem distorções e novos picos na resposta em frequência, mesmo assim, os dois picos originais continuam predominantes. No histórico de deslocamentos da ponteira, verifica-se uma suave mudança de amplitude com mínimo de $-89,5nm$ e máximo de $88,7nm$.



(a) Resposta no tempo do deslocamento da ponteira. (b) Resposta em frequência do sistema.

Figura 4.31: Resposta do deslocamento da ponteira considerando $d = 90nm$.

Para $d = 80nm$, nota-se que existe uma maior manifestação de forças de atração e repulsão, influenciando suavemente a dinâmica do sistema.

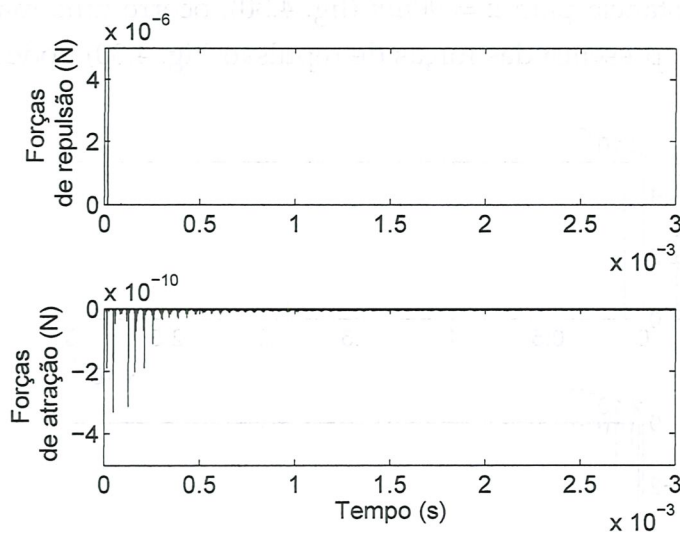
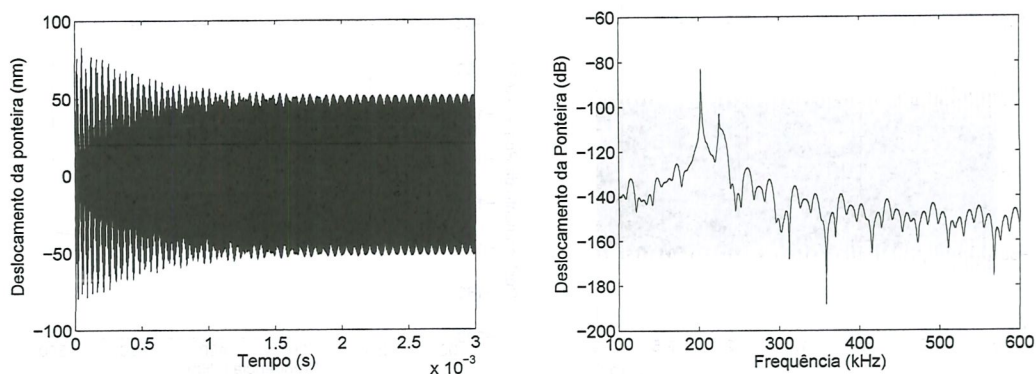


Figura 4.32: Forças de interação para distância inicial $d = 80nm$.

Na figura 4.33, o histórico de deslocamentos apresenta uma maior diminuição de amplitude na região transiente, com máximo de $83nm$ e mínimo de $-79,5nm$, a resposta em frequência começa a apresentar novos picos com maior amplitude.



(a) Resposta no tempo do deslocamento da ponteira. (b) Resposta em frequência do sistema.

Figura 4.33: Resposta do deslocamento da ponteira considerando $d = 80nm$.

Diminuindo a distância inicial ($d = 70nm$), observa-se, como esperado, aumento da presença das forças de interação.

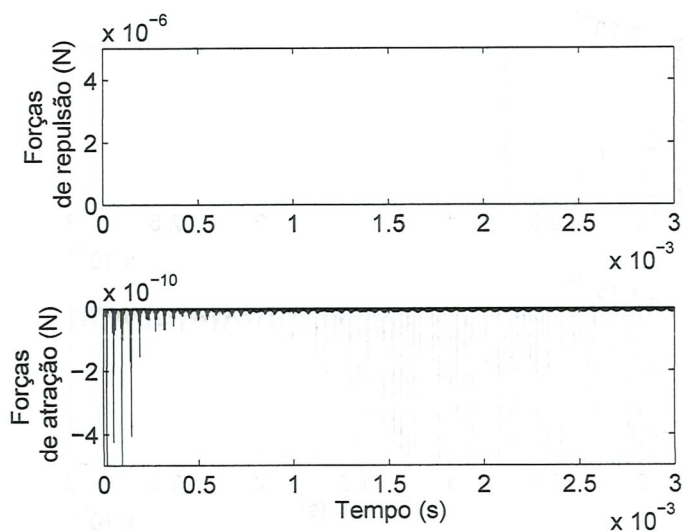
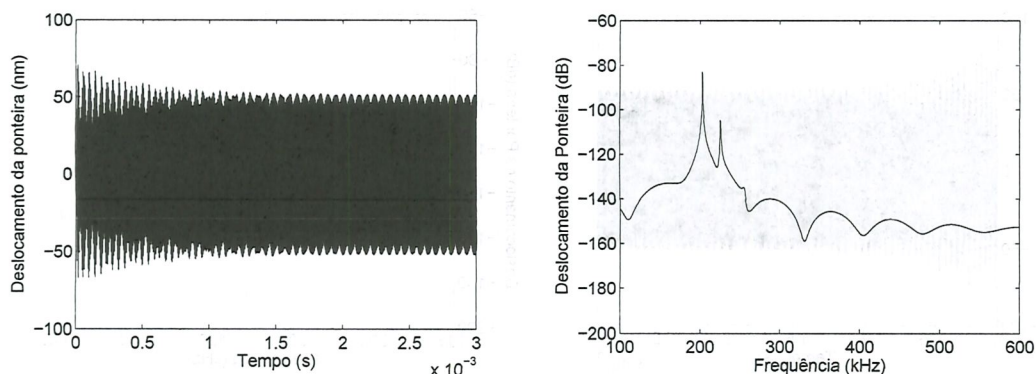


Figura 4.34: Forças de interação para distância inicial $d = 70nm$.

Na figura 4.35, percebe-se uma maior diminuição na amplitude da região transiente com $(-67$ a $71nm)$, além do surgimento de um pequeno pico próximo ao pico de ressonância. Nesse ponto, as forças de interação começam a afetar de forma mais significativa o movimento oscilatório da ponteira.



(a) Resposta no tempo do deslocamento da ponteira. (b) Resposta em frequência do sistema.

Figura 4.35: Resposta do deslocamento da ponteira considerando $d = 70nm$.

As amplitudes de oscilação da ponteira, com $d = 60nm$, variam de entre -59 e $60nm$.

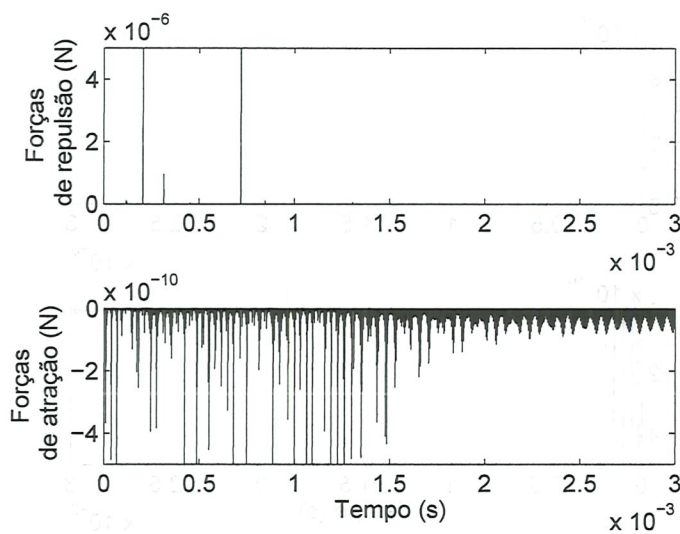
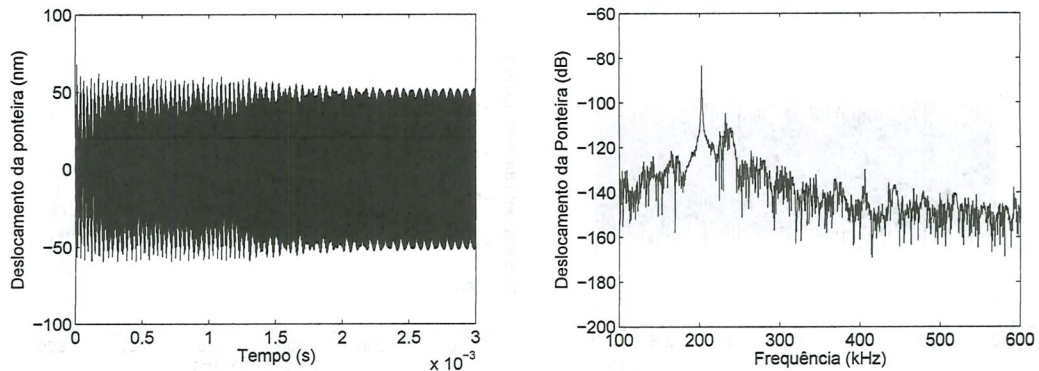


Figura 4.36: Forças de interação para distância inicial $d = 60nm$.

Percebe-se uma maior alteração tanto nos deslocamentos quanto na resposta em frequência. Na resposta no tempo, figuras 4.37(a) e 4.37(b), a região transiente quase não é visível.



(a) Resposta no tempo do deslocamento da ponteira.

(b) Resposta em frequência do sistema.

Figura 4.37: Resposta do deslocamento da ponteira considerando $d = 60nm$.

Na resposta em frequência, surgem novos picos, evidenciando que as não linearidades, inerentes às forças de interação alteram de forma importante a resposta do sistema.

À medida que a ponteira se aproxima da superfície da amostra, os efeitos das forças de interação se tornam mais evidentes na resposta do sistema, alterando o movimento oscilatório da ponteira e alterando a frequência de ressonância da microviga.

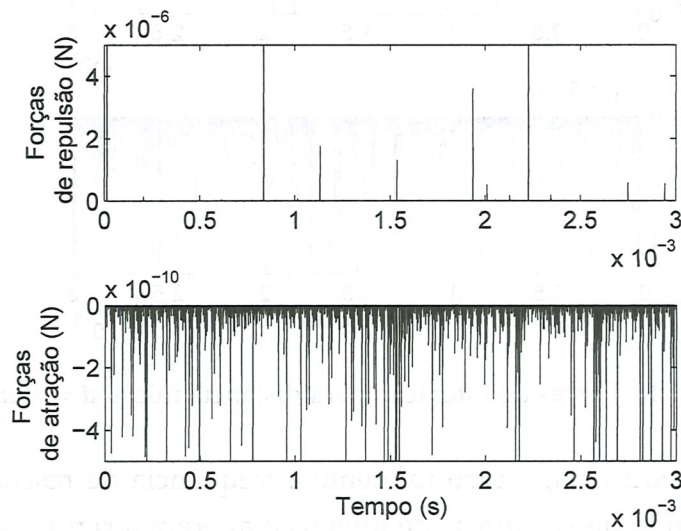
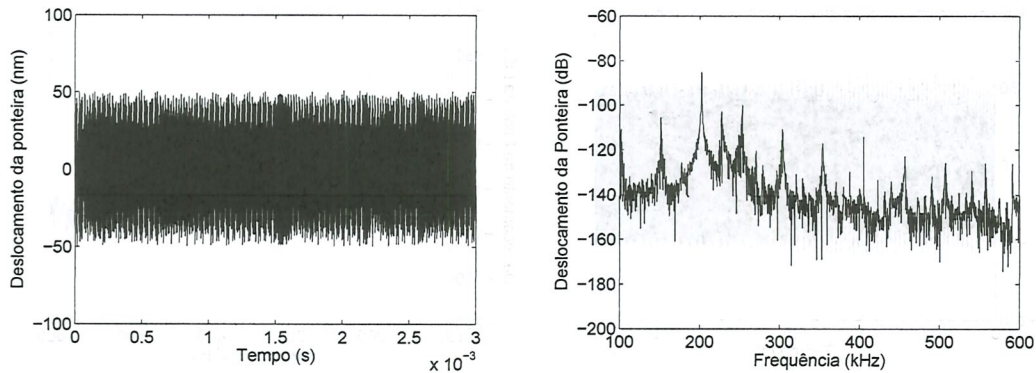


Figura 4.38: Forças de interação para distância inicial $d = 50nm$.

Na figura 4.39, não há mais a presença da região transiente e as amplitudes de oscilação da ponteira variam de -49 a $51nm$. Assim como no modelo acoplado, surgem vários picos evidenciando a influência das não linearidade inerentes às forças de interação.



(a) Resposta no tempo do deslocamento da ponteira. (b) Resposta em frequência do sistema.

Figura 4.39: Resposta do deslocamento da ponteira considerando $d = 50nm$.

A partir de $d = 40nm$, a resposta no tempo do deslocamento perde a simetria, com oscilação mínima de $-39nm$ e máxima de $45nm$.

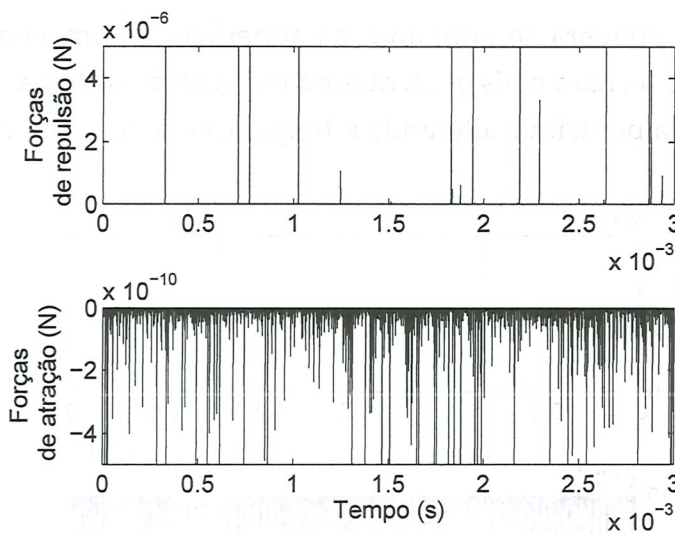
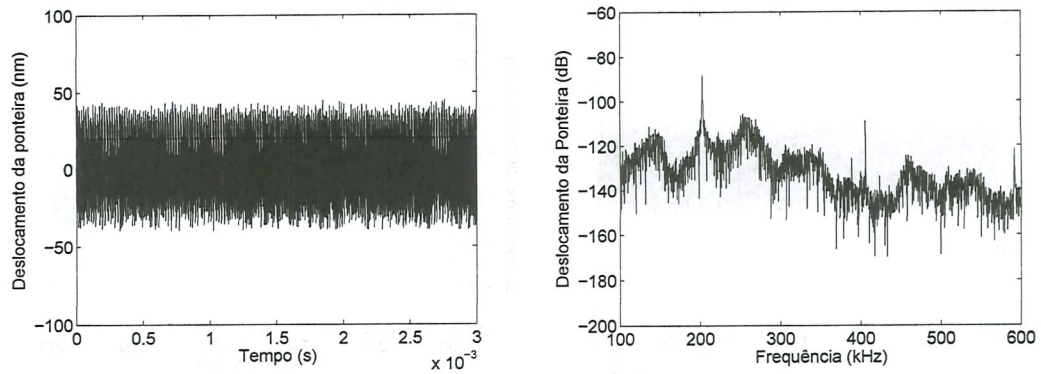


Figura 4.40: Forças de interação para distância inicial $d = 40nm$.

Na resposta em frequência, o pico referente à frequência de ressonância deixa de ser evidente, mostrando que as forças de interação alteram a rigidez da microviga.

A amplitude de vibração varia de -29 à $42nm$ quando a distância inicial $d = 30nm$.



(a) Resposta no tempo do deslocamento da ponteira. (b) Resposta em frequência do sistema.

Figura 4.41: Resposta do deslocamento da ponteira considerando $d = 40nm$.

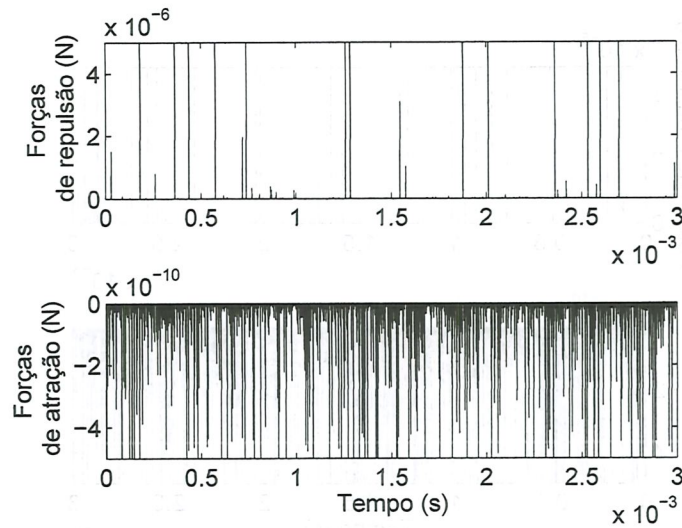
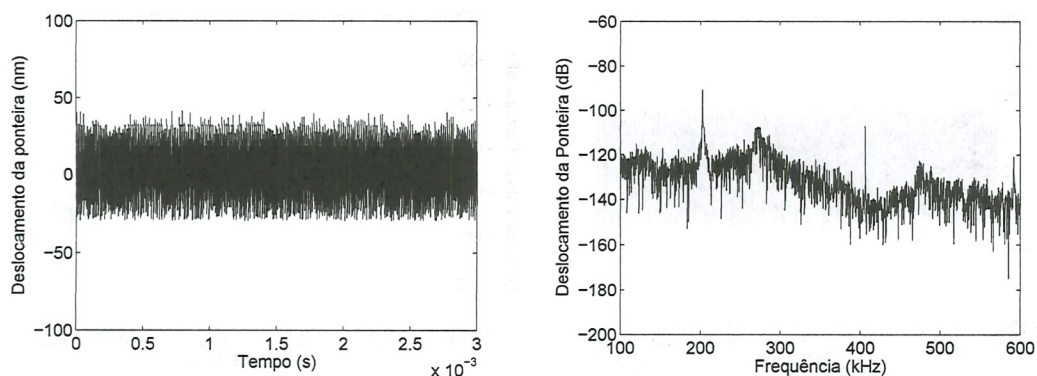


Figura 4.42: Forças de interação para distância inicial $d = 30nm$.

Neste ponto, surgem picos referentes à múltiplos da frequência de excitação.



(a) Resposta no tempo do deslocamento da ponteira. (b) Resposta em frequência do sistema.

Figura 4.43: Resposta do deslocamento da ponteira considerando $d = 30nm$.

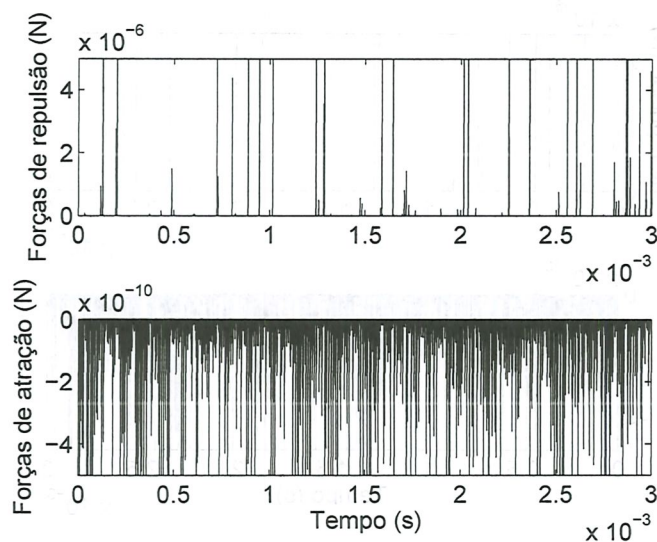
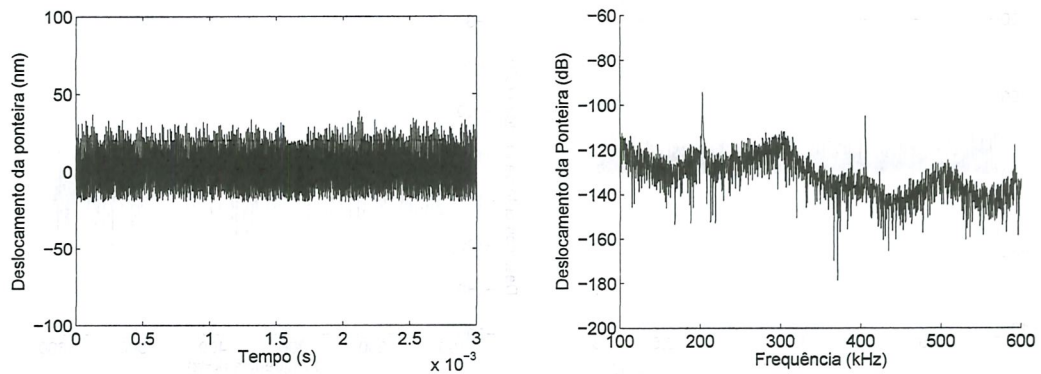


Figura 4.44: Forças de interação para distância inicial $d = 20nm$.

Na figura 4.45, já não é mais possível observar a presença da frequência de ressonância, o histórico de deslocamento perdeu a simetria, achatado na parte inferior e totalmente irregular na parte superior.



(a) Resposta no tempo do deslocamento da ponteira. (b) Resposta em frequência do sistema.

Figura 4.45: Resposta do deslocamento da ponteira considerando $d = 20nm$.

Por fim, com d definido com décimos de nanômetro, o sistema encontra-se operando no modo não contato, as forças de repulsão dominam e achatam o histórico na parte inferior, enquanto as forças de atração diminuem a amplitude máxima de oscilação. Observa-se que picos múltiplos do valor da frequência de excitação estão evidentes.

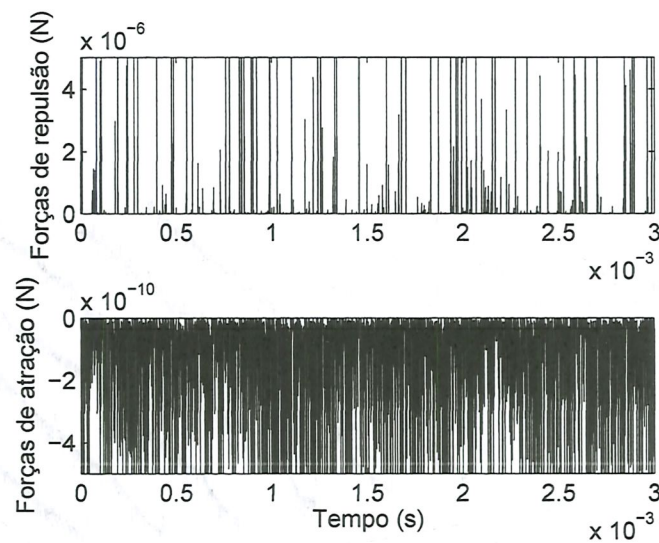
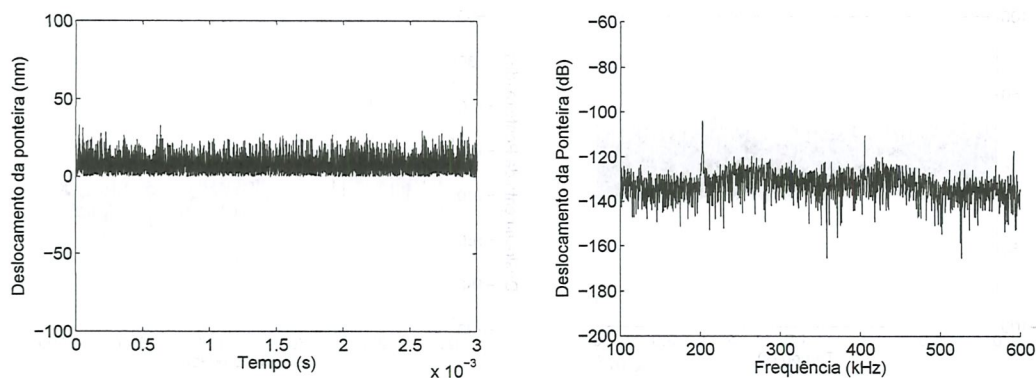


Figura 4.46: Forças de interação para distância inicial $d = 0,4nm$.



(a) Resposta no tempo do deslocamento da ponteira. (b) Resposta em frequência do sistema.

Figura 4.47: Resposta do deslocamento da ponteira considerando $d = 0.4nm$.

Na figura 4.48, pode-se observar as diferentes respostas em frequência obtidas com a variação da distância inicial d . É possível observar que, à medida que a ponteira se aproxima da superfície da amostra, as interações se intensificam, mudando características importantes da dinâmica do sistema, tais como, picos de ressonância e comportamento das amplitudes de oscilação.

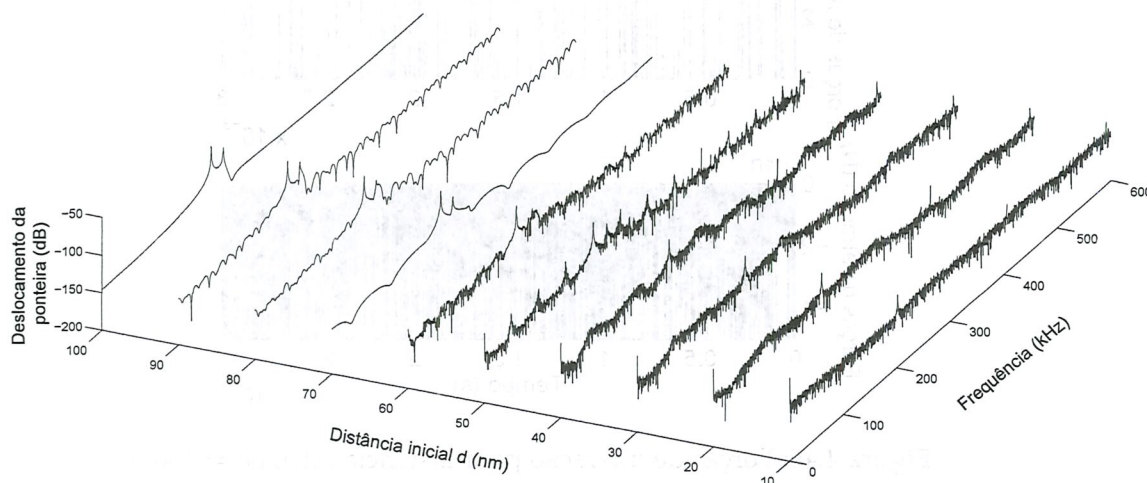


Figura 4.48: Resposta em frequência do deslocamento da ponteira para diferentes distâncias entre ponteira e amostra.

Com relação aos deslocamentos, o que se apresenta na figura 4.49 é uma síntese de todos os históricos apresentados nesta seção. Observa-se que à medida que a distância entre ponteira e amostra diminui, a amplitude de oscilação diminui, inclusive perdendo a região transiente. O achatamento não acontece apenas na parte inferior

das amplitudes, já que está limitada à superfície da amostra, mas a parte superior também sofre achatamento, graças à presença das forças de interação.

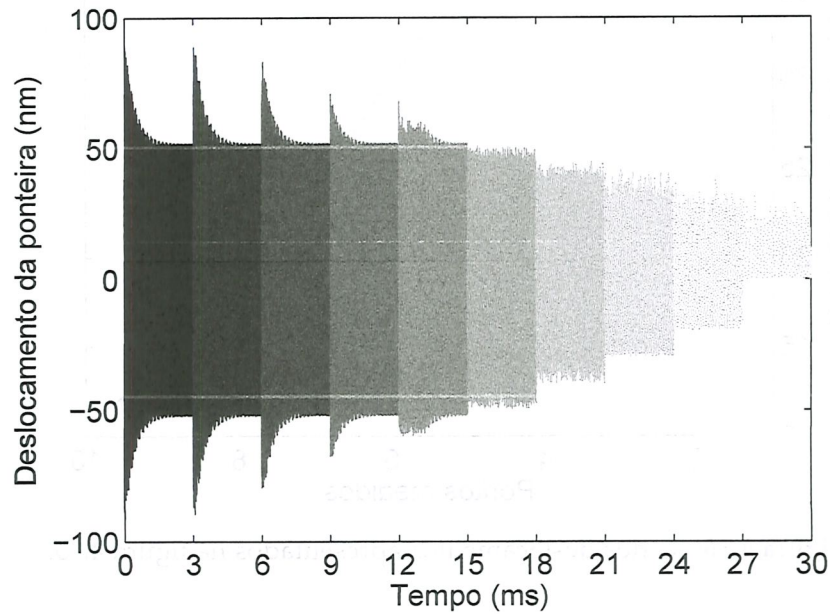


Figura 4.49: Modificação da resposta no tempo do deslocamento da ponteira com a variação da distância entre ponteira e superfície da amostra.

O processo realizado nas simulações é similar ao usado na aquisição de imagens do AFM, já que, ponto a ponto, varias oscilações da ponteira são medidas. Como realizado anteriormente, o R_q dos deslocamentos em cada distância inicial é calculado, dessa forma, obtém-se um perfil de topologia.

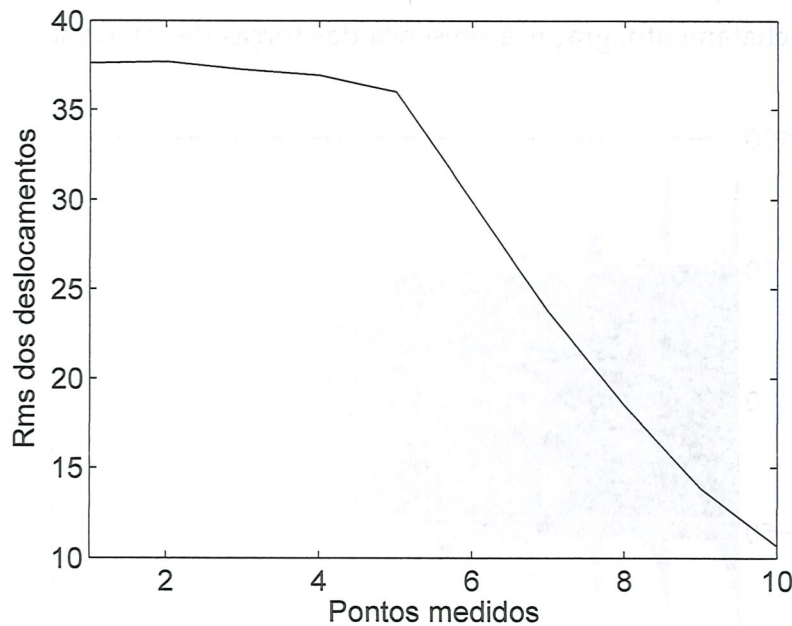


Figura 4.50: R_q dos deslocamentos apresentados na figura 4.25.

4.3 Análise das forças de interação

A análise das forças de interação foi realizada usando os deslocamentos da ponteira obtidos nas simulações anteriores, a partir da variação da distância inicial ($d = (100; 90; 80; 70; 60; 50; 40; 30; 20; 0,4) nm$) entre a ponteira e superfície da amostra. As curvas obtidas, tanto para o modelo com deslocamento relativo quanto para o modelo acoplado, apresentam a evolução da intensidade das forças de interação à medida que a distância entre ponteira e amostra aumenta. Comparando as figuras 4.51 e 4.52 com a figura 1.2, constata-se que a evolução das forças de interação dos modelos numéricos tem o mesmo comportamento das forças de interação quando assume-se o modo não contato de operação.

Mesmo usando um modelo de forças de interação que representa o modo contato intermitente de operação (Potencial de Lennard Jones), não foi possível reproduzir a região da figura 1.2 referente a este modo de operação.

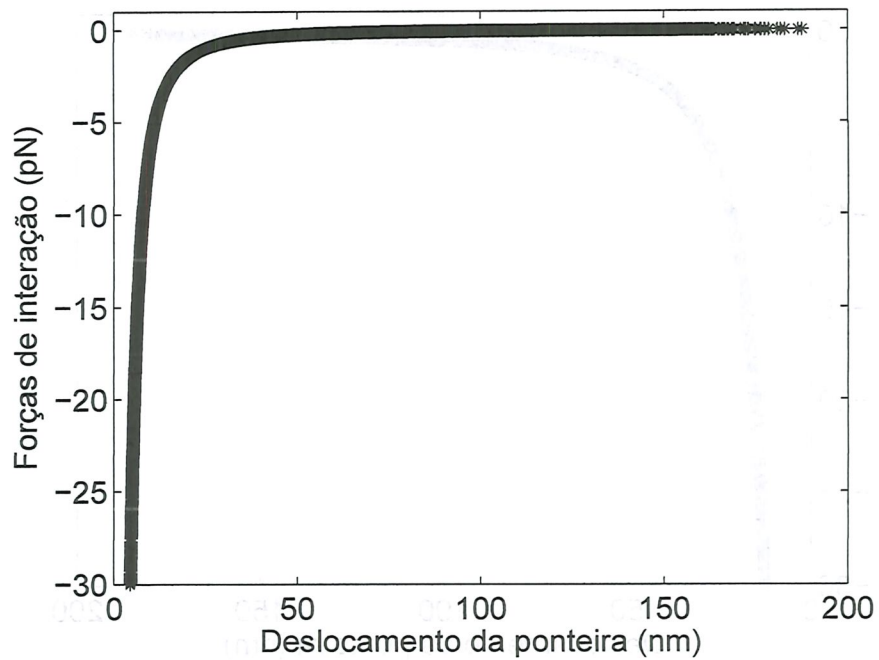


Figura 4.51: Forças de interação em função da distância ponteira-amostra usando o modelo acoplado.

Como previsto, nas proximidades da superfície da amostra (deslocamentos menores), percebe-se que as forças de interação têm maior intensidade, à medida que a ponteira se distancia, as forças de interação aproximam-se de zero (distâncias maiores).

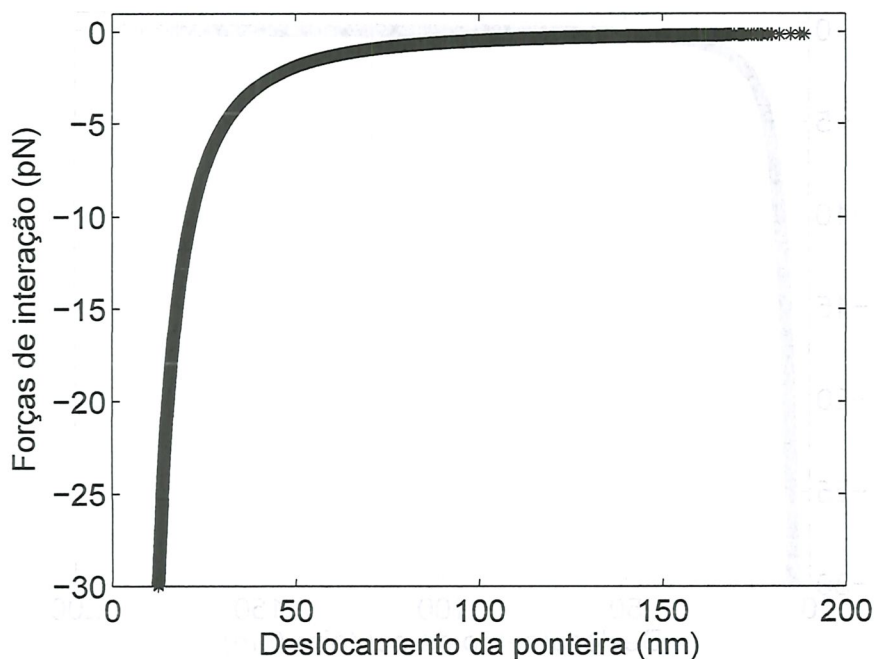


Figura 4.52: Forças de interação em função da distância ponteira-amostra usando o modelo com deslocamento relativo.

Para distâncias com estas ordens de grandeza (décimos de nanômetros), se torna difícil obter resultados numéricos, pois muitas vezes, as simulações não convergem. Por esse motivo, não foi possível obter nas figuras 4.51 e 4.52 a região que apresenta o comportamento das forças de interação do modo contato intermitente.

4.4 Obtenção da topologia de superfícies usando os modelos obtidos

Nesta seção, a partir dos modelos obtidos, a ideia principal é reproduzir uma pequena área de uma superfície real obtida através de um Microscópio de Força Atômica.

4.4.1 Apresentação dos dados experimentais

Em colaboração com o Laboratório de Filmes Filmes da Usp de São Paulo, foi realizado, via AFM, o escaneamento de uma superfície de diamante. Para tanto, utilizou-se um scan size (distância entre pontos de análise) de $2,91\text{nm}$, com 512×512 pontos de medição. Uma área de $2,25\mu\text{m}^2$ foi analisada e os valores das alturas variam de -431 a 625nm . A figura 4.54 apresenta a tela do AFM, onde os resultados são apresentados.

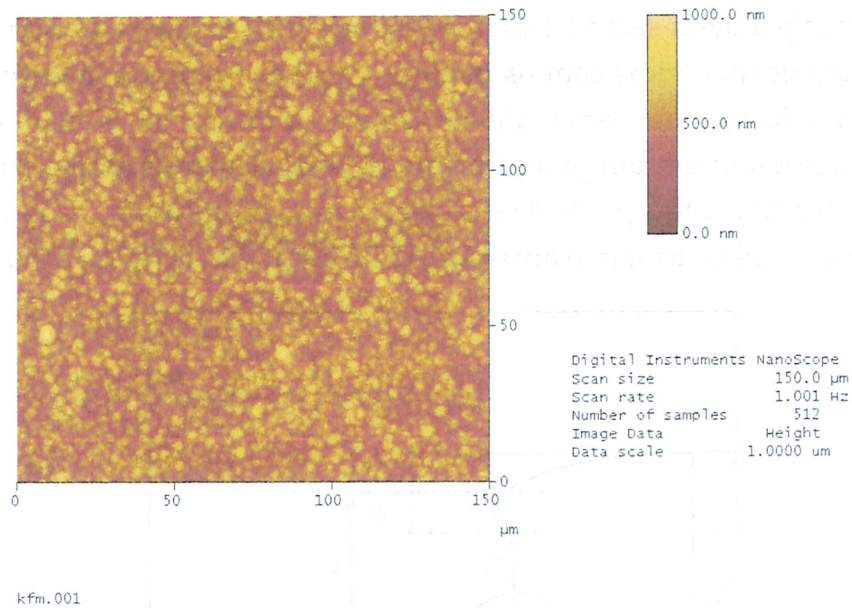


Figura 4.53: Superfície de diamante obtida via AFM.

Além da tela gerada pelo AFM, foi possível obter os dados referentes às alturas medidas ponto a ponto, dessa maneira, foi possível reproduzir a superfície da figura 4.53 usando estes dados. Esta imagem pode ser vista na figura 4.54.

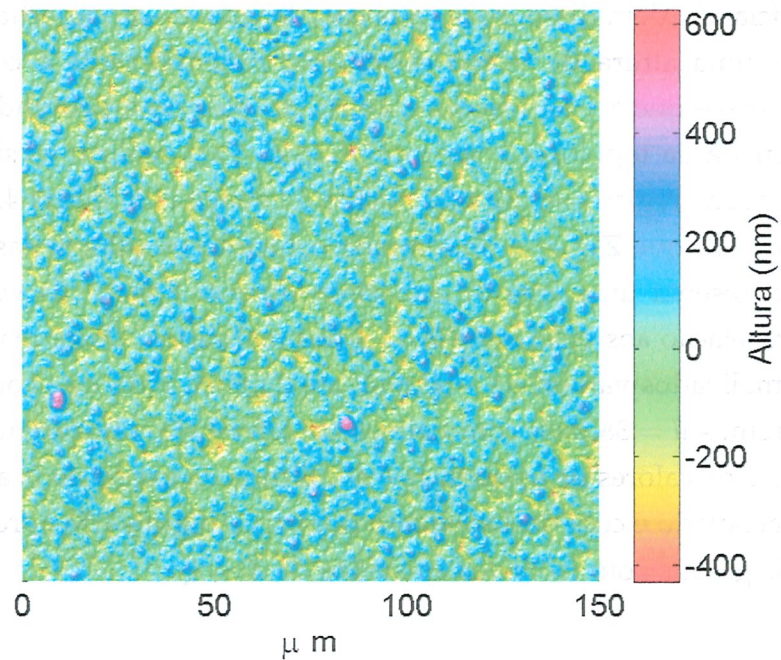


Figura 4.54: Superfície de diamante obtida com dados da figura 4.53.

4.4.2 Processo de obtenção da topologia de uma superfície

A ideia principal desta seção é tentar reproduzir uma pequena área da figura 4.54 usando simulações numéricas com os modelos obtidos. Como no modelo ainda não existe o sistema de controle para realinhar a base da microviga, e assim estabelecer um *set point*, pensou-se em um procedimento para recalcular as alturas da topologia obtida experimentalmente a partir de simulações numéricas, assim, cada uma dessas alturas (*pixel*) será utilizada como apresentado no esquema da figura 4.55.

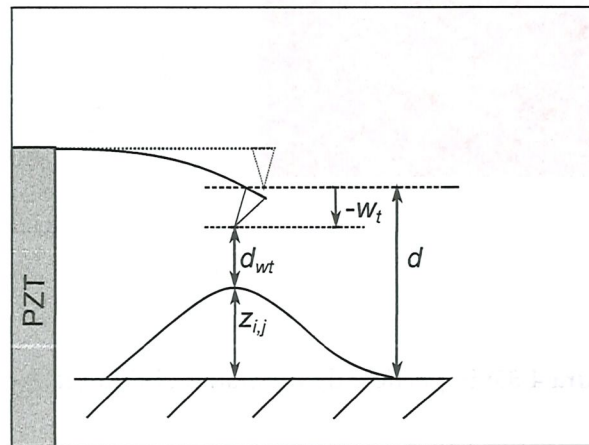


Figura 4.55: Representação do sistema com a presença de um pico e com deflexão.

Neste procedimento, $d_{wt} = d - z_{i,j} + w_t$ representa a distância entre ponteira e superfície da amostra, levando em conta a amplitude de oscilação da ponteira w_t e a distância inicial d . Além disso, para cada coordenada $z_{i,j}$ da superfície, com $1 \leq i \leq m$ e $1 \leq j \leq n$, uma altura de relevo obtida experimentalmente é considerada, desta forma, assume-se que $z_{i,j}$ representa a altura do pico ou a profundidade do vale de uma coordenada da topologia a ser reproduzida. Para realizar as simulações desejadas, uma pequena região com 32×32 pontos da imagem da figura 4.54 é considerada. Assim, assume-se que $Z_{32 \times 32}$ é uma matriz contendo os valores das alturas desta região, que representa uma área de aproximadamente $8,8 \mu m^2$ da superfície original. Ajustes com relação aos valores de $Z_{32 \times 32}$ são realizados. Desta maneira, seus novos valores normalizados variam de $-30,6 nm$ até $23,6 nm$. Para este conjunto de simulações, adotaremos $d = 38,6 nm$ como altura de referência, utilizaremos os parâmetros da tabela 3.1 e os valores de frequência e amplitude de excitação usados para análises do modelo acoplado e com deslocamento relativo. A figura 4.56 apresenta a topologia da superfície gerada com os dados ajustados de $Z_{32 \times 32}$.

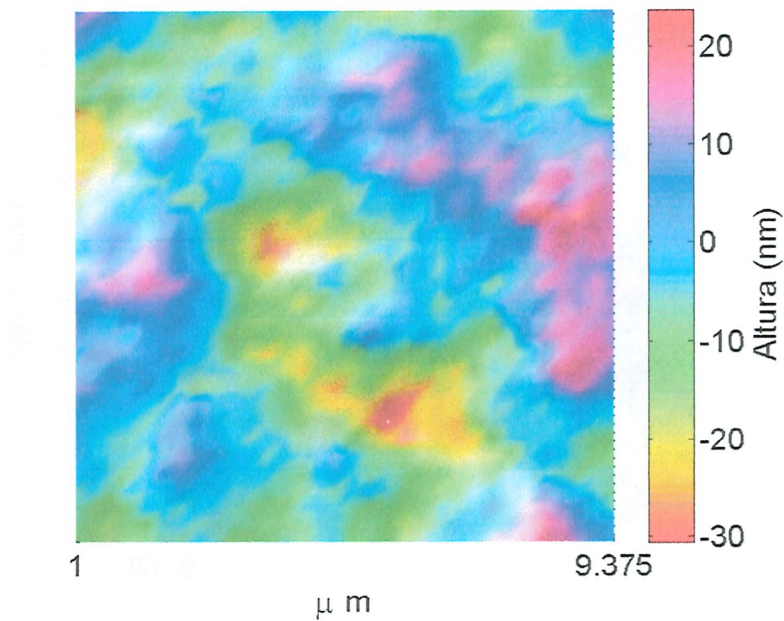


Figura 4.56: Imagem da topologia da superfície a ser reproduzida.

Para tentar reproduzir a figura 4.56, foram realizadas 1024 interações para cada um dos 32×32 pontos. Na sequência, o *rms* das medições foi calculado, assim, obteve-se a altura que originou o pixel referente a cada ponto. Por fim, gerou-se a topologia superfície através das medições usando os modelos acoplado e com deslocamento relativo.

A figura 4.57 é a topologia da superfície considerada usando o modelo com acoplamento piezolétrico. Nela, nota-se que, em relação à figura 4.56, os contornos gerais são mantidos e os picos e vales aparecem nas mesmas regiões. Com relação às alturas, a imagem obtida com o modelo acoplado realça as regiões com menores alturas, que variam de $-28,3$ a $-10,7nm$.

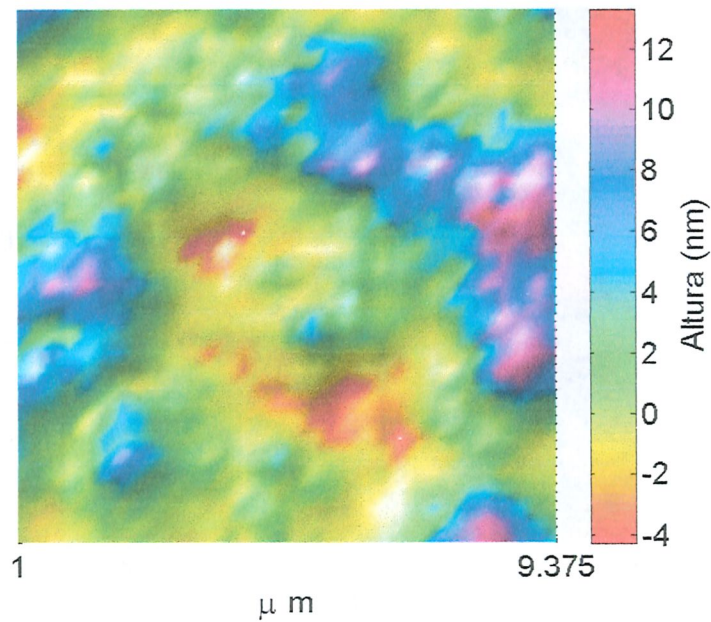


Figura 4.57: Imagem da topologia da superfície obtida com o modelo acoplado.

A partir do modelo com deslocamento relativo, obtém-se a figura 4.58. Nesta topologia, nota-se que são mantidos os contornos, bem como as posições referentes à picos e vales, as alturas variam de $-10,7$ à $23,8\text{nm}$. Assim como a figura 4.57, destacam-se as regiões de menores alturas.

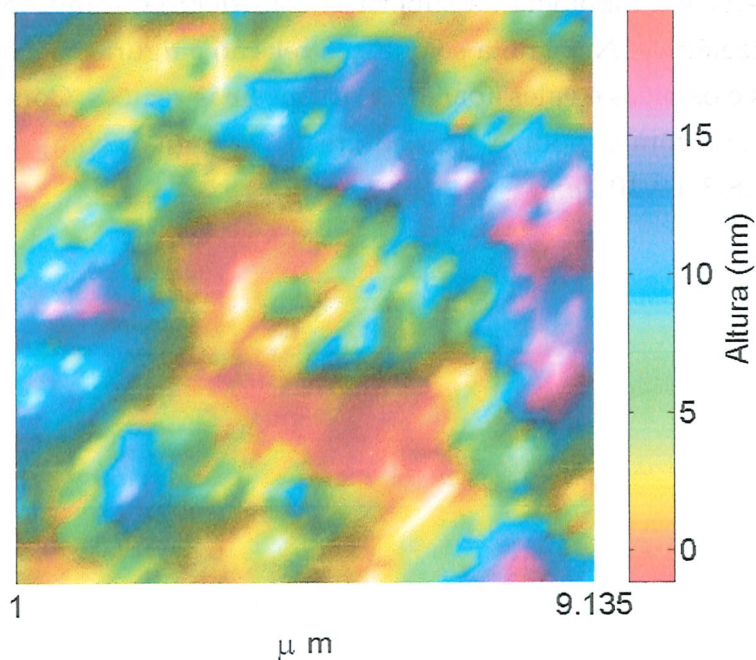


Figura 4.58: Comparação entre superfície real e superfície obtida com modelo de base móvel.

Capítulo 5

Conclusões e trabalhos futuros

5.1 Conclusões

Esta tese apresentou um estudo sobre modelagem e análise do comportamento dinâmico de microvigas encontradas em Microscópios de Força Atômica, incluindo suas interações com a amostra escaneada e com o atuador responsável pelo movimento. Para a modelagem da microviga, foi considerada a teoria de Bernoulli-Euler com adição de massa e inércia da ponteira na extremidade livre. No modelo, considerou-se que os parâmetros geométricos e materiais mantinham-se constantes ao longo do comprimento da viga. O modelo foi discretizado usando o Método dos Elementos Finitos com funções de interpolação cúbicas de Hermite para o deslocamento transversal (deflexão) da microviga. Devido à concepção do modelo, foi possível considerar diferentes tipos de condições de contorno para a extremidade engastada da microviga. Quatro modelos foram desenvolvidos, sendo eles: 1) base deslizante e ponteira livre com força imposta na base, 2) base deslizante e ponteira livre com deslocamento prescrito na base, 3) base engastada e ponteira livre com deslocamento relativo àquele da base, e 4) base deslizante e ponteira livre com base acoplada a atuador piezolétrico. A ponteira foi modelada como um cone de base circular, acoplado ao último nó da extremidade livre da microviga, pois dessa forma, não importa o tamanho dos elementos finitos considerados, a ponteira se mantém do mesmo tamanho.

Em colaboração com o Laboratório de Filmes Finos do Instituto de Física da Universidade de São Paulo foi possível caracterizar uma microviga real, obtendo-se não somente seus dados geométricos, como também o valor de sua frequência de ressonância e o seu fator Q . Em posse desses dados estimou-se o fator de amortecimento para que, usando os dados geométricos e materiais, fosse possível validar os modelos, comparando os valores dos picos de ressonância. Ao usar os parâmetros reais nos modelos matemáticos, percebeu-se que o sistema com base deslizante-livre e força imposta não seria adequado, pois, a microviga apresentou uma frequência de ressonância com valor bem diferente do experimental. Os outros modelos apresentaram valores bem próximos ao experimental, com erro relativo bem pequeno. Ainda as-

sim, o segundo modelo com deslocamento prescrito na base foi excluído devido a dificuldades encontradas na simulação.

A primeira contribuição desta tese fica evidente nesta análise: os modelos matemáticos obtidos são paramétricos e flexíveis, tornando assim, a modelagem de um sistema com outras características uma tarefa de fácil implementação.

Os dois últimos modelos com deslocamento relativo e acoplamento eletromecânico foram escolhidos. A partir da modelagem e validação desses modelos, iniciou-se uma nova etapa do projeto, que consistia na análise do sistema base-microviga-ponteira diante da presença das forças de interação que foram modeladas usando o potencial de Lennard Jones.

As análises começaram estabelecendo, através de simulações numéricas, para que valores de distância ponteira-amostra os efeitos das forças de interação começam a ser observados. Para estes valores, foi realizada uma análise do efeito do número de modos de vibração considerados. Os resultados indicam que quatro modos de vibração são suficientes para representar adequadamente a dinâmica do sistema, para os dois modelos considerados, mesmo quando sujeito às não-linearidades devidas à interação entre ponteira e amostra. Modelos com menos graus de liberdade falham dependendo das condições de interação. Esta informação, que pode até certo ponto ser estendida a outras propostas de modelo, constitui uma segunda contribuição desta tese.

A fase seguinte do trabalho tratou de analisar o efeito da diminuição da distância entre ponteira e amostra no comportamento dinâmico da microviga. Foi observado que à medida que a distância diminui, aumenta a influência das forças de interação, (atração e repulsão).

Estes efeitos foram observados tanto na resposta no tempo quanto na resposta em frequência do deslocamento da ponteira, sendo que, na última, picos de ressonância são modificados e, por vezes, novos picos são observados. No que diz respeito às amplitudes de oscilação, as mesmas ficam menores e irregulares, à medida que as forças de atração e repulsão ficam mais intensas. Um resultado que surge nesta etapa do trabalho é que as forças de repulsão perturbam com mais intensidade o sistema, já que têm uma intensidade maior. Apresenta-se também uma dificuldade em representar as forças de atração e repulsão numa mesma figura, dada a diferente ordem de grandeza entre elas.

Finalmente, os modelos desenvolvidos foram utilizados para tentar reproduzir a topologia de uma superfície de amostra com base apenas no deslocamento observado na ponteira da microviga. Para tal, uma superfície real foi considerada para a definição de uma malha de valores de distância entre ponteira e amostra. Simulações numéricas foram, então, realizadas considerando estes valores de distância para obter a amplitude de deslocamento da ponteira. Os resultados obtidos, com os dois mode-

los, indicam que a amplitude de deslocamento da ponteira é um estimador satisfatório para a topologia da superfície de uma amostra com propriedades físicas uniformes. Esta constatação constitui uma terceira contribuição desta tese.

5.2 Trabalhos Futuros

O próximos passos do projeto serão possivelmente a implementação de uma lei de controle posicional para obter-se amostras a partir do erro calculado entre a distância existente e a calculada durante a simulação. Com a implementação de um controle PID com as mesmas características do sistema real será possível não somente analisar, mas propor novas configurações para melhorar o funcionamento do AFM. Uma análise excitando-se frequências de ordem maior também podem ser realizadas, já que alguns trabalhos vem sendo feitos nesse sentido, com intuito de se estudar outras características das amostras analisadas.

Pontos a serem estudados no futuro: 1) Simulação do controle posicional com base no efeito da interação, 2) Inclusão da dinâmica transversal (d variando ao longo de x e y , portanto do tempo) para simular a alteração contínua da distância e como isso afeta o tempo para o sistema chegar no regime permanente, 3) Proposição e estudo de técnicas de controle que permitam uma varredura mais rápida da superfície da amostra, 4) Estudo da viabilidade de identificar a topologia da superfície de uma amostra quando sujeito à variação das propriedades físicas da amostra ao longo da superfície, 5) Análise das não linearidades do sistema por meio de diagramas de bifurcação, bacias de atração e uso de outras ferramentas que auxiliam na análise da dinâmica não linear do sistema .

5.3 Lista de Publicações Derivadas da Tese

Nesta seção apresentam-se os trabalhos publicados durante o período de realização do trabalho.

- 1 - Publicação nos anais do 22nd International Congress of Mechanical Engineering (COBEM 2013, realizado de 03 a 07 de novembro de 2013, Ribeirão Preto - SP.) com trabalho intitulado "Modeling and Simulation of a Vibrating Microcantilever Beam in Atomic Force Microscope";
- 2 - Publicação nos anais do VII Congresso Nacional de Engenharia Mecânica (Conem, realizado de 10 a 15 de agosto de 2014, Uberlândia -MG.) com trabalho intitulado "Experimental Validation and Analysis of a Finite Element Model for Cantilever Beams Used in Atomic Force Microscope";
- 3 - Publicação nos anais do XVII International Symposium on Dynamic Problems of Mechanics (DINAME 2015, a ser realizado de 22 a 27 de fevereiro de 2015, Natal

2009 - RN) sob título "Modeling and Performance analysis of an active controlled non-linear Beam Used in Atomic Force Microscopes;

Esta dissertação foi avaliada com o seguinte parecer:

5.1 - Trabalhos Futuros

Os trabalhos futuros a serem desenvolvidos no âmbito deste projeto de pesquisa devem ser pautados em duas direções principais. A primeira delas diz respeito à realização de estudos experimentais que possam validar os resultados obtidos nas simulações realizadas. A segunda direção diz respeito à realização de estudos teóricos que possam melhorar o desempenho do sistema de controle proposto. Para isso, é necessário que sejam desenvolvidos novos algoritmos de controle que possam lidar com as não linearidades presentes no sistema de controle proposto.

Portanto, os trabalhos futuros a serem desenvolvidos no âmbito deste projeto de pesquisa devem ser pautados em duas direções principais. A primeira delas diz respeito à realização de estudos experimentais que possam validar os resultados obtidos nas simulações realizadas. A segunda direção diz respeito à realização de estudos teóricos que possam melhorar o desempenho do sistema de controle proposto. Para isso, é necessário que sejam desenvolvidos novos algoritmos de controle que possam lidar com as não linearidades presentes no sistema de controle proposto.

5.2 - Lista de Publicações Científicas de Referência

Nesta seção apresentamos os trabalhos publicados durante o desenvolvimento deste trabalho.

1 - *Modeling and Performance analysis of an active controlled non-linear Beam Used in Atomic Force Microscopes*. Dissertação de Mestrado em Engenharia de Controle e Automação, Universidade Federal do Rio de Janeiro, 2009.

2 - *Modeling and Performance analysis of an active controlled non-linear Beam Used in Atomic Force Microscopes*. Trabalho de Conclusão de Curso, Universidade Federal do Rio de Janeiro, 2009.

3 - *Modeling and Performance analysis of an active controlled non-linear Beam Used in Atomic Force Microscopes*. Trabalho de Conclusão de Curso, Universidade Federal do Rio de Janeiro, 2009.

Referências Bibliográficas

- AIMÉ, J.-P. et al. Nonlinear dynamic behavior of an oscillating tip-microlever system and contrast at the atomic scale. *Physical review letters*, American Physical Society, v. 82, n. 17, p. 3388, 1999.
- BALTHAZAR, J. M.; TUSSET, A. M.; BUENO, A. M. On control strategies, including parametric errors, applied to an Atomic Force Microscope nonlinear vibrating problem. In: *1st International Symposium on Uncertainty Quantification and Stochastic Modeling (Uncertainties 2012)*. Maresias, SP: [s.n.], 2012.
- BINNIG, G.; ROHRER, H. Scanning Tunneling Microscopy. *Surface Science*, North-Holland Publishing Company, v. 126, p. 236–244, 1983.
- CLAEYSSEN, J. R. The Timoshenko Model in Atomic Force Microscopy. *Proceedings of 9th Brazilian Conference of Dynamics and Their Applications (DINCON)*, Serra Negra, SP, 2010.
- DANKOWICZ, H. Nonlinear dynamics as an essential tool for non-destructive characterization of soft nanostructures using tapping-mode atomic force microscopy. *Philosophical transactions. Series A, Mathematical, physical, and engineering sciences*, v. 364, n. 1849, p. 3505–20, 2006.
- EATON, P.; WEST, P. *Atomic Force Microscopy*. [S.l.]: OUP Oxford, 2010.
- FANG, Y. et al. Nonlinear Control Techniques for the Atomic Force Microscope System. *Dynamic Systems and Control*, Asme, v. 2002, p. 373–380, 2002.
- FERRI, F. et al. Measurement of the Nanoscale Roughness by Atomic Force Microscopy: Basic Principles and Applications. INTECH Open Access Publisher, 2012.
- GALEMBECK, F. et al. Microscopia de sondas: uma caixa de ferramentas da nanotecnologia. *Ciência e Cultura*, scielocec, v. 65, p. 37 – 43, 07 2013. ISSN 0009-6725.
- HERRMANN, P. S. P. et al. Microscopia de Varredura por Força : uma Ferramenta Poderosa no Estudo de Polímeros. *Polímeros: ciência e tecnologia*, p. 51–61, 1997.
- HSU, J.-C.; LEE, H.-L.; CHANG, W.-J. Flexural vibration frequency of atomic force microscope cantilevers using the timoshenko beam model. *Nanotechnology*, v. 18, n. 28, p. 285503, 2007.
- ISRAELACHVILI, J. N. *Intermolecular and Surface Forces*. 2nd. ed. [S.l.]: Academic Press, 1991. 236 p.

JALILI, N.; LAXMINARAYANA, K. A review of atomic force microscopy imaging systems: application to molecular metrology and biological sciences. *Mechatronics*, v. 14, n. 8, p. 907–945, out. 2004.

KAHROBAIYAN, M.; RAHAEIFARD, M.; AHMADIAN, M. Nonlinear dynamic analysis of a v-shaped microcantilever of an atomic force microscope. *Applied Mathematical Modelling*, v. 35, n. 12, p. 5903 – 5919, 2011.

LOPES Jr; STEFFEN Jr; SAVI, M. *Dynamics of Smart Systems and Structures: Concepts and Applications*. [S.l.]: Springer International Publishing, 2016.

LOZANO, J. R.; GARCIA, R. Theory of multifrequency atomic force microscopy. *Physical review letters*, American Physical Society, v. 100, p. 076102, Feb 2008.

MAIA, N.; SILVA, J. *Theoretical and Experimental Modal Analysis*. [S.l.]: Research Studies Press, 1997. (Engineering dynamics series).

MEYER, E. Atomic force microscopy. *Progress in Surface Science*, v. 41, n. 1, p. 3–49, set. 1992.

NAYFEH, A.; PAI, P. *Linear and Nonlinear Structural Mechanics*. [S.l.]: Wiley, 2008. (Wiley Series in Nonlinear Science).

NOZAKI, R. et al. Nonlinear Control System Applied to Atomic Force Microscope Including Parametric Errors. *Journal of Control, Automation and Electrical Systems*, v. 24, n. 3, p. 223–231, 2013.

RODRIGUES, K. et al. Preventing chaotic motion in tapping-mode atomic force microscope. *Journal of Control, Automation and Electrical Systems*, Springer, v. 25, n. 6, p. 732–740, 2014.

RUPPERT, M. G.; MOHEIMANI, S. R. Multimode q control in tapping-mode afm: Enabling imaging on higher flexural eigenmodes. IEEE, 2016.

RUTZEL, S.; LEE, S. I.; RAMAN, A. Nonlinear dynamics of atomic-force-microscope probes driven in Lennard-Jones potentials. *Proceedings of the Royal Society A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences*, v. 459, n. 2036, p. 1925–1948, ago. 2003.

SALVADORI, M. C. *Notas de aula: Curso de Microscopia de Força Atômica e Tunelamento*. 2013.

SALVADORI, M. C. *Laboratório de Filmes Finos do Instituto de Física da Universidade de São Paulo*. 2014. <<http://fap.if.usp.br/~lff/spm.html>>. [Online; accessed 19-July-2016].

SANTOS, S.; BARCONS, V. Anharmonicity in multifrequency atomic force microscopy. *ArXiv e-prints*, jul. 2014.

SAVI, M. *Dinâmica Não-linear e Caos*. [S.l.]: E-PAPERS, 2006.

SCHILDERS, W. *Introduction to model order reduction*. [S.l.]: Springer, 2008. 3–32 p.

SEBASTIAN, A. et al. Harmonic and power balance tools for tapping-mode atomic force microscope. *Journal of Applied Physics*, v. 89, n. 11, 2001.

SHUIQING, H.; RAMAN, A. Chaos in Atomic Force Microscopy. *Physical Review Letters*, v. 96, n. 3, jan. 2006.

TECNOLÓGICA, S. I. *A nanotecnologia que está na superfície*. 2015. [Www.inovacaotecnologica.com.br/noticias/noticia.php?artigo=nanotecnologia-na-superficie](http://www.inovacaotecnologica.com.br/noticias/noticia.php?artigo=nanotecnologia-na-superficie). [Online; accessed 26-Setembro-2016].

YAMASUE, K.; HIKIHARA, T. Control of microcantilevers in dynamic force microscopy using time delayed feedback. *Review of Scientific Instruments*, v. 77, n. 5, 2006.

ZANETTE, S. I. *Funcionamento de um Microscópio de Força Atômica*. Disponível em <http://www.cbpf.br/nanos/Apostila/00.html>, acesso: 22 de dez. de 2012, 2012.