

Sessão 15
QUÍMICA E FÍSICA TEÓRICAS

104

TRIBOLOGIA DE UM DÍMERO SOBRE UMA SUPERFÍCIE DE ÁTOMOS MÓVEIS. *Artur de Souza Lima Malabarba, Sebastian Goncalves (orient.) (UFRGS).*

O presente projeto busca encontrar relações fundamentais entre os parâmetros de um sistema nanoscópico, composto de uma molécula diatômica deslizando sobre uma superfície atômica unidimensional, e o coeficiente de atrito associado a esse movimento. O problema, de interesse básico e aplicado, tem sua origem no experimento de Krim e Widow (PRB 38, 12184 (1988)), onde foi medido pela primeira vez o atrito de uma monocamada de átomos deslizando sobre um substrato metálico cristalino, por meio de uma microbalança de quartzo. O sistema é modelado com potencial harmônico para a interação intermolecular do dímero, com potencial de Lennard-Jones para a interação dímero-superfície, e com potencial harmônico para os átomos da superfície. Nestes últimos acrescentamos termos de Langevin para introduzir temperatura. A dinâmica do sistema é simulada computacionalmente integrando as equações de movimento clássicas (Dinâmica Molecular). O coeficiente de atrito dímero-substrato é calculado aplicando-se uma força externa constante sobre o dímero e medindo a sua velocidade terminal em função da força aplicada. Variando gradualmente o valor de parâmetros individuais, é possível avaliar a dependência do coeficiente em relação a esses parâmetros. Os resultados revelam que o coeficiente de atrito do sistema depende sensivelmente da comensuração entre comprimento do dímero e a separação entre os átomos da superfície. Ele atinge seus valores máximos para comensurações próximas de 2 e de 0,5, e atinge seus valores mínimos para comensurações próximas de 1. Futuramente, esta pesquisa pode ser estendida para avaliar essa dependência em relação a outros parâmetros, como as massas atômicas e a temperatura. (PIBIC).