

Simulación por dinámica molecular del contacto entre sólidos

Javier Munilla, Mario Castro*, Alberto Carnicero

Grupo de Dinámica No Lineal, Escuela Técnica Superior de Ingeniería (ICAI)

Universidad Pontificia Comillas de Madrid

28015 Madrid

El problema del contacto entre sólidos se remonta a los primeros experimentos de Leonardo da Vinci. La deformación plástica o elástica de dos sólidos en contacto, el problema de la fricción o el desgaste son algunos de los problemas relacionados con el contacto que tienen importantes aplicaciones tanto en Física como en Ingeniería^{1,2}. No obstante, en muchos casos, el conocimiento detallado de los mecanismos microscópicos no es bien conocido por lo que se utilizan algunas aproximaciones semiempíricas (como los coeficientes estático y dinámico del rozamiento o los llamados "mapas de desgaste"³).

Tradicionalmente se ha utilizado la hipótesis del continuo para describir este tipo de fenómenos. Esta descripción ha resultado especialmente exitosa en el caso del contacto elástico. Por debajo del límite de plasticidad es posible demostrar, por ejemplo, que la longitud de penetración, δ , de dos sólidos en contacto sometidos a una fuerza compresiva, F , obedece una ley de potencias (conocida como la Ley de Hertz, línea discontinua en la figura 1) de la forma: $\delta \sim F^{2/3}$.

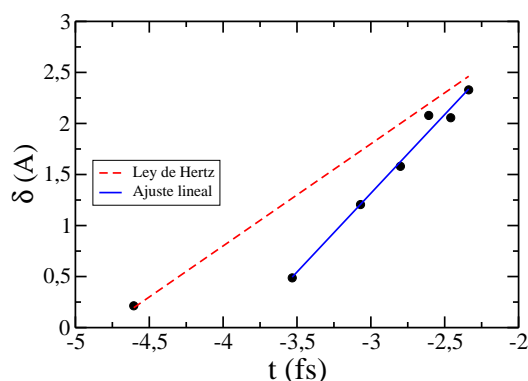


Figura 1. Comparativa entre la ley de Hertz (línea discontinua roja) mediante simulación por dinámica molecular (puntos negros).

Por el contrario, no existe por el momento una teoría similar para el caso del desgaste por fricción¹.

En este trabajo se presenta un estudio mediante dinámica molecular del contacto entre dos sólidos. La dinámica molecular permite simular de manera realista el contacto a escala microscópica y analizar el papel de la temperatura y la fuerza externa en la formación de defectos, la deformación plástica y, en última instancia, el desgaste por fricción.

Los principales resultados del estudio son⁴:

- Para sistemas de pocos átomos (correspondiente a *asperidades* nanométricas se viola la ley de Hertz (figura 1). Para ello se simula el contacto de dos cilindros y se determina la longitud de penetración. Dado el carácter microscópico del sistema, las fluctuaciones son importantes y la longitud de penetración sólo tiene sentido estadísticamente (ver figura 2)

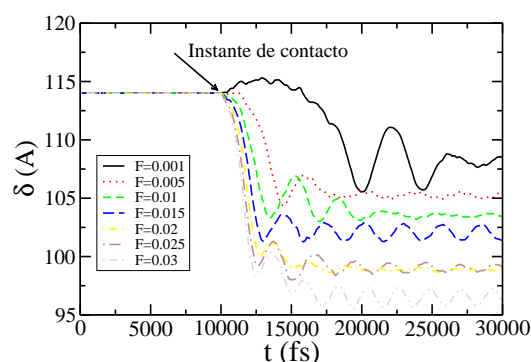


Figura 2. Evolución temporal de la longitud de penetración en función de la carga.

- En la región de contacto se produce una elevación muy significativa de la temperatura. Si el sistema está en contacto con una fuente de disipación de calor, el efecto del calentamiento sólo tiene lugar en las proximidades del contacto.
- En el caso del deslizamiento, este calentamiento da lugar a la fusión local de los sólidos y es el desencadenante de la formación de defectos (vacantes o dislocaciones) que originan el proceso de fractura y posterior desprendimiento de material. Esta fusión local en la región de contacto puede ser responsable de la violación de ley de Hertz (por tratarse de un límite plástico).

* mario@upcomillas.es

¹ K. L. Johnson, *Contact Mechanics* (CUP, 1987).

² B. N. J. Persson, *Sliding Friction: Physical Principles and Applications* (Springer, 2000).

³ E. Rabinowicz, E., *Friction and Wear of Materials* (Wiley-Interscience, 1995).

⁴ J. Munilla, A. Carnicero, y M. Castro, *en preparación* (2007).