

MINISTÉRIO DA DEFESA  
EXÉRCITO BRASILEIRO  
DEPARTAMENTO DE CIÊNCIA E TECNOLOGIA  
INSTITUTO MILITAR DE ENGENHARIA  
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA DE DEFESA

DOUGLAS CABRAL GONÇALVES

INVESTIGAÇÃO DAS PROPRIEDADES MECÂNICAS DO ALUMÍNIO  
POR DINÂMICA MOLECULAR: LIMITE DE ESCOAMENTO,  
MÓDULOS DE ELASTICIDADE E CISALHAMENTO E COEFICIENTE  
DE POISSON

RIO DE JANEIRO  
2026

DOUGLAS CABRAL GONÇALVES

INVESTIGAÇÃO DAS PROPRIEDADES MECÂNICAS DO ALUMÍNIO POR DINÂMICA  
MOLECULAR: LIMITE DE ESCOAMENTO, MÓDULOS DE ELASTICIDADE E  
CISALHAMENTO E COEFICIENTE DE POISSON

Dissertação de Mestrado apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Engenharia de Defesa do Instituto Militar de Engenharia no âmbito da Linha de Pesquisa de Mecatrônica, Matéria Condensada e Sistemas de Armas, como requisito parcial para obtenção do título de Mestre em Engenharia de Defesa.

Orientadores: Prof. Jakler Nichele Nunes, D.Sc.  
Prof. Itamar Borges Junior, D.Sc.

**Rio de Janeiro**  
**2026**

©2026

INSTITUTO MILITAR DE ENGENHARIA

Praça General Tibúrcio, 80 – Praia Vermelha

Rio de Janeiro – RJ CEP 22290-270

Este exemplar é de propriedade do Instituto Militar de Engenharia, que poderá incluí-lo em base de dados, armazenar em computador, microfilmear ou adotar qualquer forma de arquivamento.

É permitida a menção, reprodução parcial ou integral e a transmissão entre bibliotecas deste trabalho, sem modificação de seu texto, em qualquer meio que seja ou venha a ser fixado, para pesquisa acadêmica, comentários e citações, desde que sem finalidade comercial e que seja feita a referência bibliográfica completa.

Os conceitos expressos neste trabalho são de responsabilidade do autor e dos orientadores.

Gonçalves, Douglas Cabral.

Investigação das Propriedades Mecânicas do Alumínio por Dinâmica Molecular: Limite de Escoamento, Módulos de Elasticidade e Cisalhamento e Coeficiente de Poisson/ Douglas Cabral Gonçalves – Rio de Janeiro 2026  
105 f.

Orientadores: Jakler Nichele Nunes e Itamar Borges Junior

Dissertação de Mestrado – Instituto Militar de Engenharia, Engenharia de Defesa, 2026.

1. dinâmica molecular 2. mecânica elástica 3. propriedades mecânicas 4. termodinâmica estatística 5. alumínio  
i. Nunes, Jakler Nichele (orient.) ii. Junior, Itamar Borges (orient.) iii. Investigação das Propriedades Mecânicas do Alumínio por Dinâmica Molecular: Limite de Escoamento, Módulos de Elasticidade e Cisalhamento e Coeficiente de Poisson

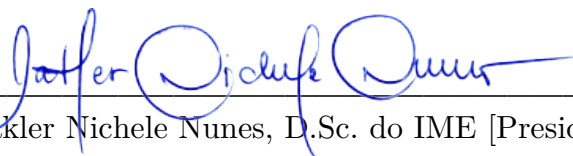
**DOUGLAS CABRAL GONÇALVES**

**INVESTIGAÇÃO DAS PROPRIEDADES MECÂNICAS DO ALUMÍNIO POR  
DINÂMICA MOLECULAR: LIMITE DE ESCOAMENTO, MÓDULOS DE  
ELASTICIDADE E CISALHAMENTO E COEFICIENTE DE POISSON**

Dissertação de Mestrado apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Engenharia de Defesa do Instituto Militar de Engenharia, no âmbito da Linha de Pesquisa em Mecatrônica, Matéria Condensada e Sistemas de Armas, como requisito parcial para obtenção do título de Mestre em Engenharia de Defesa.

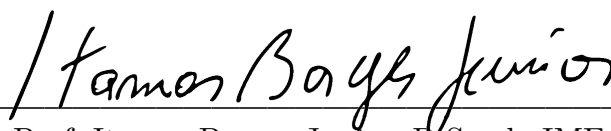
Orientadores: Prof. Jakler Nichele Nunes, D.Sc.  
Prof. Itamar Borges Junior D.Sc.

Aprovada em 26 de fevereiro de 2026 pela seguinte Banca Examinadora:



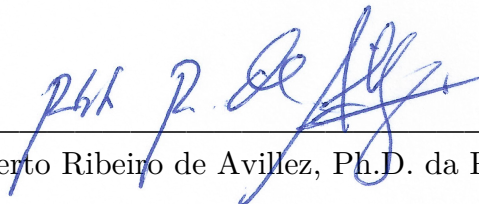
---

Prof. Jakler Nichele Nunes, D.Sc. do IME [Presidente]



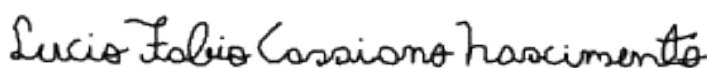
---

Prof. Itamar Borges Junior, D.Sc. do IME



---

Prof. Roberto Ribeiro de Avillez, Ph.D. da PUC-Rio



---

Prof. Lucio Fábio Cassiano Nascimento, D.Sc. do IME

Rio de Janeiro  
2026

*“Dedico este trabalho à minha esposa Naimara e à minha mãe Gleise, que são os maiores amores da minha vida”*

## AGRADECIMENTOS

Os agradecimentos principais são direcionados a Deus, à minha família, aos professores Jakler Nichele, Itamar Borges, Roberto Avillez e Lucio Nascimento, ao Departamento de Engenharia de Defesa (SE/10), à Marinha do Brasil, em especial à Diretoria de Sistemas de Armas da Marinha e à minha orientadora técnica CC(EN) Débora Guimarães, bem como às agências de fomento CAPES, FAPERJ (Processos nº E-26/210.067/2021, E-26/200.008/2020, E-26/211.046/2021, E-26/201.251/2022, E-26/204.294/2024) e CNPq (Processos nº 406804/2022-2, 409754/2023-4, 300281/2025-0).

*“Acho que somos cegos. Cegos, mas enxergando. Cegos que podem ver, mas não vêem.”*

(José Saramago em *Ensaio sobre a Cegueira*)

## RESUMO

O alumínio destaca-se entre os metais por sua baixa massa específica, elevada resistência mecânica e excelente resistência à corrosão. Nesse contexto, apresenta-se uma investigação teórico-computacional das propriedades mecânicas do alumínio por meio de simulações de dinâmica molecular baseadas no potencial de interação do tipo *Embedded Atom Method*. O estudo foi estruturado em duas etapas. Na primeira etapa, foi avaliado o limite termodinâmico necessário à reprodução das propriedades elásticas do alumínio, incluindo o módulo de elasticidade, o módulo de cisalhamento e o coeficiente de Poisson. Os resultados demonstraram que essas propriedades convergem para valores compatíveis com os obtidos experimentalmente quando o sistema simulado contém um número suficiente de átomos para representar o comportamento macroscópico. Por outro lado, observou-se que a tensão limite de escoamento, a resiliência e a tenacidade permanecem fortemente dependentes do tamanho do sistema, não alcançando convergência dentro dos limites práticos de simulação. Esses resultados confirmam a confiabilidade da dinâmica molecular na determinação de propriedades elásticas, ao mesmo tempo em que evidenciam suas limitações na reprodução de fenômenos plásticos em escala nanoscópica. Na segunda etapa, investigou-se a dependência da tensão limite de escoamento em relação à taxa de deformação, em duas temperaturas distintas. As simulações de tração uniaxial revelaram que o comportamento do alumínio segue uma lei de potência modificada, que incorpora um termo de correção proposto neste estudo. Além disso, o valor obtido para a tensão de referência aproximou-se da tensão teórica de escoamento ideal do alumínio, confirmando a coerência física do modelo proposto. Os resultados obtidos evidenciam a viabilidade da metodologia adotada e reforçam a relevância da dinâmica molecular como ferramenta computacional versátil para a compreensão, em nível atômico, dos mecanismos que regem o comportamento mecânico dos materiais.

**Palavras-chave:** Dinâmica Molecular; Mecânica Elástica; Propriedades Mecânicas; Termodinâmica Estatística; Alumínio.

## ABSTRACT

Aluminum stands out among metals for its low density, high mechanical strength, and excellent corrosion resistance. In this context, it is presented a theoretical and computational investigation of the mechanical properties of aluminum through molecular dynamics simulations based on the Embedded Atom Method interaction potential. The study was structured in two main stages. In the first stage, the thermodynamic limit required for reproducing the elastic properties of aluminum, including the elastic modulus, shear modulus, and Poisson's ratio, was evaluated. The results showed that these properties converge to values consistent with experimental data when the simulated system contains enough atoms to represent macroscopic behavior. On the other hand, it was observed that the yield stress, resilience, and toughness remain strongly dependent on system size, not reaching convergence within the practical limits of molecular dynamics simulations. These findings confirm the robustness of molecular dynamics in characterizing elastic properties while highlighting its limitations in reproducing plastic phenomena at the macroscopic scale. In the second stage, the dependence of yield stress on the strain rate was investigated under two different temperatures. The uniaxial tensile simulations revealed that the behavior of aluminum follows a modified power-law relationship that incorporates a correction term proposed in this study. Furthermore, the value obtained for the reference stress approached the theoretical ideal yield stress of aluminum, confirming the physical consistency of the proposed model. The results demonstrate the feasibility of the adopted methodology and reinforce the relevance of molecular dynamics as a versatile computational tool for understanding, at the atomic scale, the mechanisms governing the mechanical behavior of materials.

**Keywords:** Molecular dynamics; Elastic mechanics; Mechanical properties; Statistical thermodynamics; Aluminum.

## LISTA DE FIGURAS

Figura 2.1 – Tensão uniaxial.....	27
Figura 2.2 – Curva tensão deformação de engenharia.....	30
Figura 2.3 – Escala dimensional dos principais tipos de defeitos cristalinos. Adaptado de Meyers e Chawla (2008).....	48
Figura 3.1 – Caixa de simulação do alumínio.....	53
Figura 4.1 – Modelo da caixa de simulação.....	60
Figura 4.2 – Equilibração do sistema: (a) Temperatura com $N = 13.500$ e $32.000$ átomos; (b) Energia potencial para $N = 13.500$ átomos.....	61
Figura 4.3 – Curva tensão–deformação para diferentes tamanhos de amostras.....	62
Figura 4.4 – Análise visual das discordâncias em função da deformação do tamanho do sistema: (a) $N = 4000$ , $\epsilon = 13.9\%$ ; (b) $N = 13500$ , $\epsilon = 13.3\%$ ; (c) $N = 32000$ , $\epsilon = 13,8\%$ ; (d) $N = 4000$ , $\epsilon = 14.2\%$ ; (e) $N =$ $13500$ , $\epsilon = 15.0\%$ e (f) $N = 32000$ , $\epsilon = 14,5\%$ . As cores indicam discordâncias perfeitas (azul), de Shockley (verde) e do tipo <i>stair-rod</i> (rosa).....	63
Figura 4.5 – Dependência dos módulos em relação ao número de átomos ( $N$ ): (a) elasticidade ( $E$ ) e (b) cisalhamento ( $G$ ).....	64
Figura 4.6 – Dependência em relação ao número de átomos ( $N$ ): (a) módulo de Poisson ( $\nu$ ) e (b) limite de escoamento ( $\sigma_y$ ).....	65
Figura 4.7 – Comparação entre os sistemas com $N = 13.500$ e $N = 32.000$ : (a) variação da densidade de discordâncias com a deformação e (b) evolução da estrutura cristalina CFC durante a deformação.....	68
Figura 4.8 – Gráfico comparativo entre a tensão calculada pela energia de Helmholtz e tensão de virial para sistemas com número de átomos ( $N$ ) iguais a: (a) $13.500$ e (b) $32.000$ . .....	70
Figura 4.9 – Curva tensão – deformação para $T = 300$ K em diferentes taxas de deformação: (a) $10^8$ s <sup>-1</sup> – $10^{13}$ s <sup>-1</sup> e (b): $5 \cdot 10^8$ s <sup>-1</sup> a $5 \cdot 10^{12}$ s <sup>-1</sup> . .....	74
Figura 4.10 – Curva tensão – deformação para $T = 373$ K em diferentes taxas de deformação: (a) $10^8$ s <sup>-1</sup> – $10^{13}$ s <sup>-1</sup> e (b): $5 \cdot 10^8$ s <sup>-1</sup> a $5 \cdot 10^{12}$ s <sup>-1</sup> . .....	74
Figura 4.11 – Diferentes tipos de discordâncias para $T = 300$ K a $10^8$ s <sup>-1</sup> . Os átomos foram omitidos para permitir a visualização das discordâncias. As cores indicam discordâncias perfeitas (azul), de Shockley (verde) e do tipo <i>stair-rod</i> (rosa). .....	75
Figura 4.12 – Evolução da densidade de discordâncias (a) e da estrutura cristalina CFC (b) ao longo da deformação, sob taxa de deformação de $10^8$ s <sup>-1</sup> ..	76
Figura 4.13 – Evolução da densidade de discordâncias (a) e da estrutura cristalina CFC (b) ao longo da deformação, sob taxa de deformação de $10^9$ s <sup>-1</sup> ..	77

Figura 4.14 – Evolução da densidade de discordâncias (a) e da estrutura cristalina CFC (b) ao longo da deformação, sob taxa de deformação de $10^{10} \text{ s}^{-1}$ .	77
Figura 4.15 – Evolução da densidade de discordâncias (a) e da estrutura cristalina CFC (b) ao longo da deformação, sob taxa de deformação de $10^{11} \text{ s}^{-1}$ .	78
Figura 4.16 – Evolução da densidade de discordâncias (a) e da estrutura cristalina CFC (b) pela deformação, sob taxa de deformação de $5 \cdot 10^{11} \text{ s}^{-1}$ .	78
Figura 4.17 – Evolução da densidade de discordâncias (a) e da estrutura cristalina CFC (b) ao longo da deformação, sob taxa de deformação de $10^{12} \text{ s}^{-1}$ .	79
Figura 4.18 – Percentual das diferentes estruturas cristalinas em ambas as temperaturas ao término do ensaio, em função da taxa de deformação.	81
Figura 4.19 – Componentes das tensões principais no instante da nucleação das discordâncias em função da taxa de deformação: (a) $\sigma_{xx}$ , (b) $\sigma_{yy}$ e (c) $\sigma_{zz}$ .	82
Figura 4.20 – Equação proposta do limite de escoamento para taxas de deformação de $10^8 \text{ s}^{-1}$ a $5 \cdot 10^{11} \text{ s}^{-1}$ nas temperaturas: (a) 300 K; (b) 373 K.	83
Figura 7.1 – Curva tensão–deformação obtida diretamente da simulação de dinâmica molecular, sem aplicação de pós-processamento.	105
Figura 7.2 – Curva tensão–deformação após a aplicação do filtro de média móvel (janela de cinco pontos, cinco repetições).	105
Figura 7.3 – Diferença entre as tensões da dinâmica molecular e da curva filtrada ao longo da deformação, definida como $\Delta\sigma = \sigma_{MD} - \sigma_{filtro}$ .	105

## LISTA DE TABELAS

Tabela 3.1 – Parâmetros EAM para o Al, fonte: Al99.eam.alloy.....	51
Tabela 3.2 – Cluster computacional. ....	58
Tabela 4.1 – Valores dos múltiplos da constante de rede ( $p$ ), número de átomos ( $N$ ) e comprimento inicial ( $l_0$ ) utilizados nas simulações.....	60
Tabela 4.2 – Comparação das propriedades mecânicas elásticas ( $E$ , $G$ e $\nu$ ) para $N = 13.500$ e $N = 32.000$ átomos. ....	66
Tabela 4.3 – Valores de deformação em que há nucleação das discordâncias ( $\epsilon_0$ ) nas temperaturas 300 K e 373 K para taxas de deformação de $10^8 \text{ s}^{-1}$ a $10^{12} \text{ s}^{-1}$ .....	80
Tabela 4.4 – Coeficientes da equação proposta para o limite de escoamento em ambas as temperaturas.....	85
Tabela 3.2 – Cluster computacional. ....	58
Tabela 4.1 – Valores dos múltiplos da constante de rede ( $p$ ), número de átomos ( $N$ ) e comprimento inicial ( $l_0$ ) utilizados nas simulações.....	60
Tabela 4.2 – Valores de deformação em que há nucleação das discordâncias ( $\epsilon_0$ ) nas temperaturas 300 K e 373 K para taxas de deformação de $10^8 \text{ s}^{-1}$ a $10^{12} \text{ s}^{-1}$ .....	80
Tabela 4.3 – Coeficientes da equação proposta para o limite de escoamento em ambas as temperaturas.....	85

## LISTA DE SÍMBOLOS

### SÍMBOLOS LATINOS

$A$	propriedade física de um sistema, Eq. 2.42
$\langle A \rangle$	média de ensemble de uma propriedade física de um sistema, Eq. 2.42
$a$	parâmetro de rede (Å)
$b$	tensor de Cauchy-Green à esquerda (adimensional), Eq. 2.41
$C$	tensor de elasticidade (Pa), Eqs. 2.24, 2.25, 2.28, 2.29
$D$	termo dissipativo (J), Eqs. 2.17, 2.18 e 2.19
$d_l$	comprimento de discordância (m), Eq. 2.43
$E$	módulo de elasticidade (Pa), Eqs. 2.4, 2.6, 2.23, 2.33
$F$	energia livre de Helmholtz (J), Eqs. 2.19, 2.20, 2.21, 2.28, 2.35
$f$	energia de inserção (J), Eq. 2.38
$G$	módulo de cisalhamento, Eqs. 2.6, 2.7
$K$	energia cinética (J), Eq. 2.36
$k_s$	constante de proporcionalidade do material ( $\text{N} \cdot \text{m}^{-1}$ ), Eq. 2.16
$m$	massa (kg), Eq. 2.39
$N$	número de átomos (adimensional), Eqs. 2.37, 2.38, 2.40, 2.41
$n$	sensibilidade à taxa de deformação (adimensional), Eqs. 2.10, 4.1
$p$	momento ( $\text{N} \cdot \text{m}$ ), Eq. 2.36
$q$	posição (m), Eq. 2.36
$q_{ij}^l$	tensor de deformação local ao redor do átomo $l$ (adimensional), Eqs. 2.40, 2.41
$Q$	calor (J), Eqs. 2.13, 2.14
$\dot{Q}$	fluxo de calor (W), Eqs. 2.13, 2.19
$r$	distância entre átomos (m), Eqs. 2.37, 2.38, 2.39, 2.40
$S$	entropia ( $\text{J} \cdot \text{K}^{-1}$ ), Eqs. 2.13, 2.17, 2.18
$T$	temperatura (K), Eqs. 2.11, 2.13, 2.17, 2.18
$t$	tempo (s), Eqs. 2.8, 2.9, 2.13, 2.17, 2.18, 2.19, 2.36, 2.42
$U$	energia interna (J), Eqs. 2.13, 2.18
$V$	volume ( $\text{Å}^3$ ), Eqs. 2.28, 2.35, 2.39, 2.43
$v$	velocidade ( $\text{m} \cdot \text{s}^{-1}$ ), Eq. 2.39
$W$	trabalho (J), Eq. 2.13
$\dot{W}$	potência (W), Eqs. 2.13, 2.15, 2.19
$x$	deslocamento (m), Eqs. 2.16, 2.20, 2.21, 2.40
$\dot{x}$	derivada temporal do deslocamento (m), Eq. 2.15

## SÍMBOLOS GREGOS

$\gamma$	deformação angular (adimensional), Eq. 2.7
$\delta$	delta de Kronecker (adimensional), Eqs. 2.29, 2.33, 2.34
$\varepsilon$	deformação de engenharia (adimensional), Eqs. 2.1, 2.2, 2.3, 2.4, 2.8, 2.9, 2.22, 2.24, 2.25, 2.27, 2.28, 2.33
$\varepsilon_v$	deformação verdadeira (adimensional), Eq. 2.2
$\dot{\varepsilon}$	taxa de deformação ( $s^{-1}$ ), Eqs. 2.9, 2.20, 2.33, 2.34, 2.35, 4.1
$\Theta$	energia potencial do sistema (J), Eqs. 2.36, 2.37, 2.38
$\kappa$	constante de sensibilidade ao encruamento (adimensional), Eqs. 2.10, 4.1
$\lambda$	primeiro parâmetro de Lamé (Pa), Eqs. 2.29, 2.32, 2.34, 2.35
$\lambda_c$	parâmetro de correção da estrutura cristalina Eq. (2.42)
$\mu$	segundo parâmetro de Lamé (Pa), Eqs. 2.29, 2.30, 2.32, 2.34, 2.35
$\nu$	coeficiente de Poisson (adimensional), Eqs. 2.3, 2.6, 2.30, 2.31, 2.32, 2.33
$\rho$	representa a densidade eletrônica local ( $m^{-3}$ ), Eq. 2.38
$\rho_d$	densidade de discordâncias ( $m^{-2}$ ), Eq. 2.43
$\sigma$	tensor de tensão (Pa), Eqs. 2.5, 2.25, 2.26, 2.33, 2.34
$\sigma_0$	tensão limite de escoamento teórico (Pa), Eq. 4.1
$\sigma_{VM}$	tensão de Von Mises (Pa), Eq. 2.12
$\sigma_{xx}$	tensão no eixo $x$ (Pa), Eqs. 2.4, 2.5, 2.22, 2.34, 2.39
$\sigma_y$	tensão limite de escoamento (Pa), Eqs. 2.10, 4.1
$\tau$	tensão de cisalhamento (Pa), Eqs. 2.5, 2.7
$\phi$	potencial de interação (J), Eqs. 2.37, 2.38
$\mathcal{F}$	força externa (N), Eqs. 2.15, 2.16, 2.20, 2.21
$\mathcal{H}$	hamiltoniano do sistema (J), Eq. 2.36

# SUMÁRIO

<b>1 INTRODUÇÃO .....</b>	<b>16</b>
1.1 REVISÃO DA LITERATURA.....	17
1.2 PROBLEMA E HIPÓTESE .....	21
1.3 OBJETIVOS.....	22
1.4 JUSTIFICATIVA .....	23
<b>2 FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA .....</b>	<b>27</b>
2.1 PROPRIEDADES MECÂNICAS E A ABORDAGEM TERMODINÂMICA .....	27
2.2 TERMODINÂMICA ESTATÍSTICA .....	37
2.3 FORÇAS, TENSÕES, DEFORMAÇÕES MOLECULARES .....	43
2.4 DINÂMICA MOLECULAR .....	45
2.5 DEFEITOS E RESISTÊNCIA MECÂNICA.....	48
<b>3 METODOLOGIA.....</b>	<b>50</b>
3.1 SISTEMA DE INTERESSE .....	50
3.2 POTENCIAIS INTERATÔMICOS OU CAMPO DE FORÇA .....	50
3.3 PROTOCOLO DE SIMULAÇÃO.....	51
3.4 PÓS-PROCESSAMENTO DOS RESULTADOS DAS SIMULAÇÕES .....	55
3.5 METADADOS.....	57
3.6 INFRAESTRUTURA LABORATORIAL.....	57
<b>4 RESULTADOS E DISCUSSÃO .....</b>	<b>59</b>
4.1 INVESTIGAÇÃO DO TAMANHO MÍNIMO DO SISTEMA.....	59
4.2 DEPENDÊNCIA DO LIMITE DE ESCOAMENTO NA TAXA DE DEFORMAÇÃO.....	72
4.3 LIMITAÇÃO DOS RESULTADOS PARCIAIS.....	86
<b>5 CONCLUSÃO .....</b>	<b>88</b>

5.1 CONCLUSÕES SÓLIDAS: REGIME ELÁSTICO .....	89
5.2 CONCLUSÕES CONDICIONAIS: ESCOAMENTO EM ALTAS TAXAS DE DEFORMAÇÃO .....	90
5.3 PERSPECTIVAS DE CONTINUIDADE.....	91
6 REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS .....	93
<b>7 APÊNDICES.....</b>	<b>101</b>
7.1 APÊNDICE 1: ARQUIVO DE ENTRADA DO LAMMPS PARA ENSAIO DE TRAÇÃO.....	102
7.2 APÊNDICE 2: ANÁLISE DO PÓS-PROCESSAMENTO POR MÉDIA MÓVEL DAS CURVAS TENSÃO-DEFORMAÇÃO .....	104

## 1 INTRODUÇÃO

As propriedades mecânicas dos materiais desempenham papel fundamental na avaliação da resistência mecânica. A compreensão dessas propriedades é crítica para garantir a integridade estrutural e a segurança dos aparatos mais variados diante de fenômenos como fadiga, corrosão sob tensão e fluência (TELLES, 2003). Propriedades como o limite de escoamento, os módulos de elasticidade e de cisalhamento e o coeficiente de Poisson fornecem informações essenciais sobre o comportamento mecânico dos materiais, permitindo avaliar sua resposta a tensões e deformações (NORTON, 2019).

O estudo dessas propriedades mecânicas é desafiador, pois envolve a interação de fenômenos microscópicos, como o movimento de discordâncias e as imperfeições da rede cristalina em função das condições de carregamento, avaliados pela distribuição de tensões e deformações ao longo do material. Esse desafio é ainda maior em ligas metálicas, cerâmicas e compósitos, cujas propriedades mecânicas dependem das microestruturas heterogêneas, variações na composição química, no tamanho de grão e na orientação cristalográfica (GROSS & SEELIG, 2018).

A abordagem tradicional, baseada na mecânica do contínuo, considera os materiais homogêneos em nível local, assumindo que as propriedades mecânicas são constantes em elementos de volume infinitesimais. Esse modelo, amplamente utilizado em métodos numéricos como o método dos elementos finitos, é eficaz para resolver diversos problemas práticos (ZIENKIEWICZ *et al.*, 2013). Contudo, essa abordagem apresenta limitações para descrever comportamentos mecânicos em escala nanoscópica, em que as imperfeições dos materiais e as interações atômicas desempenham papéis fundamentais, o que inviabiliza a aplicação direta de modelos contínuos (SHIMADA *et al.*, 2015).

Nessa escala, os materiais são representados por suas redes cristalinas, nas quais os átomos ocupam posições definidas (CALLISTER & RETHWISCH, 2020) e, por meio

de análises como o método CNA “*Common Neighbor Analysis*” (TSUZUKI *et al.*, 2007; FAKEN & JÓNNSON, 1994), é possível identificar desvios da estrutura cristalina ideal, como defeitos e falhas, que impactam diretamente as propriedades mecânicas.

A abordagem atomística, portanto, surge como uma alternativa para investigar tensões e deformações, permitindo avaliar como as propriedades macroscópicas emergem das interações interatômicas. Ao realizar simulações por dinâmica molecular, torna-se viável estudar as propriedades mecânicas de materiais em nível atômico, compreendendo como a rede cristalina responde ao carregamento externo e como falhas locais afetam o início da deformação plástica. Esse tipo de abordagem fornece informações sobre os mecanismos de deformação responsáveis pelo comportamento mecânico dos materiais (HAN *et al.*, 2021; NIE *et al.*, 2016).

Esta pesquisa insere-se nesse contexto ao investigar as propriedades mecânicas de materiais por meio da análise do comportamento atomístico, por meio de simulações de dinâmica molecular. Com foco em propriedades elásticas, como módulo de elasticidade, coeficiente de Poisson, módulo de cisalhamento, limite de escoamento e resiliência, pretende-se contribuir para um entendimento detalhado das relações entre a estrutura atomística dos materiais e seu comportamento mecânico macroscópico. Esses resultados são essenciais para o projeto de materiais de alta resistência, com aplicações estratégicas em áreas como aeroespacial, defesa e infraestrutura (FINDIK, 2021).

## 1.1 REVISÃO DA LITERATURA

O estudo pioneiro sobre as propriedades mecânicas dos materiais foi desenvolvido por Robert Hooke no século XVII, que formulou, em 1678, a Lei de Hooke, que descreve a relação linear entre força e deslocamento. Posteriormente, com o avanço da mecânica dos sólidos, surgiram contribuições fundamentais como as de Thomas Young, que

introduziu o conceito de módulo de elasticidade no início do século XIX, permitindo quantificar a rigidez dos materiais a partir da Lei de Hooke incorporando os conceitos de tensão e deformação. Essas formulações nortearam o entendimento do comportamento elástico dos materiais homogêneos e isotrópicos. Com efeito, o módulo de cisalhamento representa uma extensão da Lei de Hooke para deformações angulares, relacionando a tensão de cisalhamento com a deformação angular por meio de um comportamento linear elástico, sendo essencial para caracterizar a resposta dos materiais sob esforços cortantes (TIMOSHENKO, 1953).

Em 1827, Siméon Denis Poisson introduziu a propriedade mecânica coeficiente de Poisson, que descreve a relação entre a deformação transversal e a deformação longitudinal em um material submetido a esforços uniaxiais. O coeficiente de Poisson é fundamental para avaliar a resposta elástica dos materiais, permitindo estabelecer a lei de Hooke generalizada para materiais isotrópicos homogêneos sob carregamento multiaxial (BEER *et al.*, 2015).

Com o desenvolvimento da mecânica dos materiais, a compreensão dos limites de resistência dos materiais avançou significativamente no final do século XIX e no início do século XX. A tensão limite de escoamento, que caracteriza o início da deformação plástica permanente em um material, foi estudada em detalhes no final do século XIX por meio de experimentos de tração e teorias da plasticidade desenvolvidas por cientistas como Henri Tresca e Richard Edler von Mises. Tresca formulou um critério de escoamento baseado na máxima tensão de cisalhamento, enquanto von Mises, no início do século XX, propôs um critério mais abrangente, conhecido como critério de energia de distorção (critério de von Mises), amplamente utilizado para descrever o comportamento plástico de materiais dúcteis (NORTON, 2019).

O estudo dos modelos constitutivos entre tensão e deformação no regime elástico-plástico avançou no século XX com o desenvolvimento de modelos empíricos capazes de descrever o comportamento mecânico e suas propriedades. Ramberg e Osgood (1943)

apresentaram um modelo matemático que relaciona a deformação total de um material com a tensão aplicada, incorporando uma componente elástica e uma plástica por meio de uma expressão exponencial, sendo amplamente utilizado para descrever o comportamento não linear de metais submetidos a pequenas deformações plásticas. Hollomon (1945) propôs um modelo baseado em uma lei de potência, segundo a qual a tensão é proporcional à deformação plástica elevada a um expoente empírico, o que permite representar o fenômeno de encruamento em materiais metálicos. Esses modelos constituem uma base para a análise do comportamento de materiais sob carregamentos complexos, fornecendo parâmetros que permitem avaliar a resistência e a ductilidade em aplicações práticas.

Embora o estudo do comportamento mecânico e as propriedades mecânicas já denotem um campo amadurecido, pesquisas recentes têm avançado no desenvolvimento de modelos de nanoestruturas baseados em simulações de dinâmica molecular, visando explorar o comportamento de materiais de interesse para a indústria, como alumínio, cobre, níquel, silício, grafeno, entre outros. Esses estudos se fundamentam nos princípios da mecânica elástica e da fratura, avaliando suas aplicações e limitações quando empregados em escalas moleculares (ANDERSON, 2017).

Carlton e Ferreira (2007) investigaram o efeito Hall-Petch inverso em metais nanocristalinos, enfatizando o papel dos contornos de grão. Em contraste, Pastor-Abia *et al.* (2011) estudaram nanofios monocristalinos de alumínio, nos quais a ausência de contornos altera os mecanismos de escoamento. Essa diferença estrutural evidencia que o comportamento mecânico em escala nanométrica depende fortemente da morfologia cristalina adotada, o que pode levar a respostas distintas.

Alavi *et al.* (2010) analisaram a influência da taxa de deformação e da temperatura em nanofios bimetálicos, observando variações significativas nas propriedades mecânicas. Zhou *et al.* (2023), por sua vez, investigaram a influência do comprimento inicial de trincas sob diferentes taxas de deformação. Embora ambos os estudos

abordem o papel da taxa de deformação, a literatura ainda apresenta abordagens fragmentadas, sem uma sistematização clara da dependência constitutiva entre tensão de escoamento e taxa de deformação em regimes típicos de dinâmica molecular.

Stepanova e Bronnikov (2019) utilizaram dinâmica molecular para modelar a propagação de trincas em placas de cobre monocristalino sob carregamentos de modo I e II. Os resultados foram consistentes com as teorias existentes, destacando-se a influência da estrutura cristalina na propagação da fratura.

Wang *et al.* (2021) analisaram o comportamento mecânico do silício por meio de ensaios e simulações de dinâmica molecular, observando que o material apresenta maior resistência à tração do que à compressão, com variações no módulo de cisalhamento e resistividade elétrica associadas à deformação.

Moura *et al.* (2024) aplicaram a dinâmica molecular para avaliar o desempenho balístico de estruturas de grafeno do tipo “kirigami”, demonstrando que sua capacidade de dissipação de energia cinética torna o material promissor para aplicações em defesa.

Embora os estudos mencionados utilizem a dinâmica molecular para investigar as propriedades mecânicas de materiais, outras pesquisas também merecem destaque, como as de Koh *et al.* (2005), Park *et al.* (2009), Meraj *et al.* (2016), Nie *et al.* (2017) e Meraj & Paul (2017). A investigação de propriedades como limite de escoamento, módulo de elasticidade e coeficiente de Poisson pela abordagem atomística tem se consolidado como um tema de alta relevância na literatura atual, devido à sua importância para o desenvolvimento de novos materiais e estudos sobre a escala nanoscópica.

Apesar dos avanços relatados na literatura, ainda são escassos os estudos que integrem, de maneira estruturada, os efeitos simultâneos da taxa de deformação e da temperatura em simulações atomísticas, incorporando explicitamente modelos constitutivos de origem macroscópica, como leis de potência, para descrever o comportamento mecânico em regime plástico.

Esse estudo busca preencher essa lacuna, avaliando a aplicabilidade de um modelo constitutivo macroscópico simples, do tipo lei de potência, ajustado a dados obtidos por dinâmica molecular, de modo a descrever tendências observadas no regime de altas taxas de deformação típicas de simulações atomísticas. Para tal, será empregado um problema de otimização não linear (LAGARIAS *et al.*, 1998), com base nos resultados obtidos por meio de simulações de dinâmica molecular, visando compreender as variações do comportamento mecânico em nível atômico sob diferentes condições de carregamento.

## 1.2 PROBLEMA E HIPÓTESE

O comportamento mecânico de diversos materiais e suas propriedades são tradicionalmente avaliados por meio de ensaios, como o de tração e o de dureza (CALLISTER & RETHWISCH, 2020). Entretanto, o estudo experimental atomístico do comportamento mecânico exige o emprego de técnicas avançadas, como microscopia de força atômica, difração de raio-X, testes de tração baseados em sistemas microeletromecânicos (MEMS) e microscopia eletrônica de transmissão de alta resolução (HAN *et al.*, 2021). Esses métodos, embora eficazes, demandam equipamentos sofisticados, infraestrutura especializada e recursos humanos qualificados, o que resulta em custos elevados. Por outro lado, a dinâmica molecular surge como uma alternativa robusta e acessível para simular, em escala molecular, o comportamento mecânico dos materiais (BUEHLER, 2008). Nesse contexto, a questão que orienta este estudo é:

*Como a abordagem atomística, por meio da dinâmica molecular, permite determinar as propriedades elásticas de sistemas homogêneos e monocristalinos de alumínio?*

A respeito desse problema, a hipótese que fundamenta a condução da pesquisa é:

*Há uma equivalência entre o comportamento atomístico e o macroscópico do alumínio na determinação de propriedades elásticas, tais como o módulo de elasticidade, o módulo de cisalhamento e o coeficiente de Poisson.*

Essa hipótese é bem estabelecida, pois fundamenta-se nos artigos que investigaram propriedades mecânicas de metais cristalinos em escala nanométrica a partir da abordagem atomística, evidenciando a relação entre o comportamento microscópico e as propriedades elásticas dos materiais (WU *et al.*, 2004; GREER *et al.*, 2005; KOH *et al.*, 2005; CARLTON & FERREIRA, 2007; PARK *et al.*, 2009, ALAVI *et al.*, 2010; PASTOR-ABIA *et al.*, 2011; MERAJ *et al.*, 2016; NIE *et al.*, 2017 e MERAJ & PAUL 2017; WANG *et al.*, 2021; GOWTHAMAN, 2023 e GOWTHAMAN & JAGADEESHA, 2024).

### 1.3 OBJETIVOS

Diante desse contexto, o objetivo geral desta pesquisa é investigar a equivalência entre a abordagem atomística e a abordagem macroscópica na determinação das propriedades mecânicas elásticas lineares do alumínio, em nível atômico, por meio de simulações de dinâmica molecular, com ênfase no módulo de elasticidade, no módulo de cisalhamento e no coeficiente de Poisson.

Para alcançar o objetivo geral, são definidos os seguintes objetivos específicos:

- a) estabelecer uma base metodológica para simular deformações elásticas em sólidos utilizando a dinâmica molecular;

- b) investigar as propriedades mecânicas do alumínio incluindo o módulo de elasticidade, o módulo de cisalhamento e o coeficiente de Poisson em função da deformação elástica, da temperatura e do tamanho do corpo de prova;
- c) investigar os limites em que a abordagem atomística permite determinar as propriedades mecânicas do alumínio, distinguindo o regime elástico linear daquele associado ao início da deformação plástica;
- d) analisar comparativamente a resposta mecânica do alumínio no regime elástico obtida no domínio atomístico e aquela reportada no macroscópico, identificando eventuais desvios e suas origens físicas;
- e) analisar, de forma complementar, a influência da taxa de deformação e da temperatura sobre a tensão limite de escoamento do alumínio em condições típicas de simulações por dinâmica molecular, caracterizadas por elevadas taxas de deformação, reconhecendo-se as limitações inerentes à descrição do comportamento mecânico em regimes fora do equilíbrio termodinâmico.

#### 1.4 JUSTIFICATIVA

A busca por inovação tecnológica no campo da defesa nacional é um dos pilares estratégicos para a soberania e segurança de um país. O Brasil, por meio do Programa de Aceleração do Crescimento (PAC) (BRASIL, 2024) tem investido em iniciativas como o Programa de Desenvolvimento de Submarinos (PROSUB) e a fabricação de aeronaves de transporte KC-390, ações que fortalecem a indústria nacional e promovem o desenvolvimento tecnológico da nação.

A pesquisa intitulada “Investigação das Propriedades Mecânicas do Alumínio por Dinâmica Molecular” insere-se nesse contexto ao propor uma análise detalhada do comportamento mecânico do alumínio em escala molecular. Com ênfase em propriedades elásticas, o estudo busca fornecer subsídios para o desenvolvimento de

materiais baseados no alumínio capazes de apresentar alto desempenho mecânico em condições extremas. Utilizando métodos de dinâmica molecular, a pesquisa adota uma abordagem inovadora, ao conectar a compreensão dos fenômenos em nível atômico com propriedades mecânicas de interesse prático, promovendo a integração entre ciência básica e aplicada e impulsionando o avanço tecnológico em setores estratégicos como defesa e aeroespacial.

As propriedades mecânicas são fundamentais para compreender os mecanismos de deformação elástica e plástica dos materiais, pois determinam sua capacidade de resistir a cargas, deformações e impactos. O conhecimento detalhado dessas propriedades sob diferentes taxas de deformação e temperaturas é essencial para prever e racionalizar o comportamento estrutural dos materiais, especialmente antes da ocorrência de fraturas. Essas informações são indispensáveis para o desenvolvimento de sistemas que operam sob condições extremas, como cascos de submarinos, blindagens e componentes aeronáuticos, garantindo, assim, alta segurança e confiabilidade operacional (GROSS & SEELIG, 2018; WESSING *et al.*, 2021).

No contexto militar, a pesquisa alinha-se diretamente às demandas estratégicas da Marinha, do Exército e da Aeronáutica. Em particular, para a Marinha do Brasil, o estudo atende às necessidades previstas no Programa de Cursos e Estágios conduzido pelo Instituto Naval de Pós-Graduação, que contempla Áreas e Linhas de Interesse Estratégico de Pesquisa (AIEP e LIEP). Destaca-se o alinhamento com as seguintes AIEP: Informação e Tomada de Decisão; Tópicos em Ciências Exatas; Plataformas e Tecnologias de Defesa Naval; Logística; Projetos e Ciclo de Vida. Descritas pelas seguintes LIEP, a pesquisa contribui para Sistemas de Simulação, Física, Matemática Aplicada, Materiais, Estruturas e Sistemas de Casco, e Ciclo de Vida. Ao atender as AIEP e LIEP, o estudo contribui para os objetivos do Plano Estratégico da Marinha (PEM 2040), dentre os quais se destaca a Obtenção da Capacidade Operacional Plena,

voltada para a promoção da autonomia produtiva e tecnológica no setor de defesa e impele a soberania tecnológica (BRASIL, 2020).

A Diretoria de Sistemas de Armas da Marinha (DSAM) será diretamente beneficiada pelos resultados desta pesquisa. A análise atomística permite determinar propriedades mecânicas de interesse em condições extremas de temperatura e de taxas de deformação, fatores críticos para o desempenho e a confiabilidade de sistemas de armas embarcados, como canhões e mísseis.

Além do contexto militar, a pesquisa possui potencial significativo de contribuir para diversas áreas, como as áreas social, educacional, tecnológica, econômica e profissional. No contexto social, a análise de propriedades mecânicas pode ser ampliada para aplicações biomédicas. Por exemplo, KWON *et al.* (2020) observaram que células cancerígenas exibem menor módulo de elasticidade do que células normais. Estudos semelhantes poderiam ser estendidos por meio de dinâmica molecular para investigar outras propriedades, como o módulo de cisalhamento e o coeficiente de Poisson, possibilitando avanços no diagnóstico e no tratamento de doenças.

No âmbito educacional, nuclear uma área de pesquisa no Instituto Militar de Engenharia em simulação de materiais sólidos, ampliando as vocações de formação e de pesquisa do Laboratório de Fluidodinâmica Computacional Multiescala.

No contexto tecnológico e econômico, a dinâmica molecular auxilia na avaliação e no desenvolvimento de novos materiais, permitindo prever propriedades mecânicas antes da fabricação. Por exemplo, essa técnica permite simular o comportamento de materiais, como ligas de aço, grafeno (Moura *et al.*, 2024) e nanofios de carbetto de silício, em escala atômica, antecipando sua resistência e durabilidade (CAO *et al.*, 2023). Após as simulações, os materiais podem ser fabricados e testados em laboratório, confirmando sua viabilidade em condições reais. Esse processo otimiza o desenvolvimento de componentes mais resistentes e duráveis, além de economizar recursos, com impacto direto nos setores industriais.

Portanto, a pesquisa proposta apresenta relevância tanto no contexto militar quanto no civil, promovendo avanços tecnológicos com aplicações em segurança, defesa e indústria. A interdisciplinaridade do estudo, que integra física, ciência dos materiais, engenharia mecânica e simulação computacional, reforça seu alinhamento com as diretrizes estratégicas das Forças Armadas e com os objetivos do Programa de Pós-Graduação em Engenharia de Defesa do IME. Ao promover a inovação e a soberania tecnológica, a pesquisa contribui para a construção de um futuro mais seguro e autônomo para o Brasil.

## 2 FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA

### 2.1 PROPRIEDADES MECÂNICAS E A ABORDAGEM TERMODINÂMICA

O comportamento mecânico de um material apresenta uma relação entre a deformação e a carga aplicada, dependendo diretamente de propriedades mecânicas como o limite de escoamento, módulo de elasticidade, módulo de cisalhamento, coeficiente de Poisson, resistência, dureza, ductilidade e tenacidade (NORTON, 2019).

Nesse contexto, as estruturas são projetadas para operar no regime elástico devido às deformações reversíveis, o que preserva a integridade estrutural e reduz custos com manutenção e reparos. Esse regime é descrito pela mecânica do contínuo que visa estabelecer relações entre os carregamentos aplicados (tensor tensão) e os deslocamentos (vetor deslocamento) e deformações (tensor deformação) resultantes na estrutura, criando assim uma conexão entre as forças locais e a resposta estrutural (SPENCER, 2004). A Figura 2.1 apresenta um corpo submetido a tensão uniaxial  $\sigma_{xx}$ .

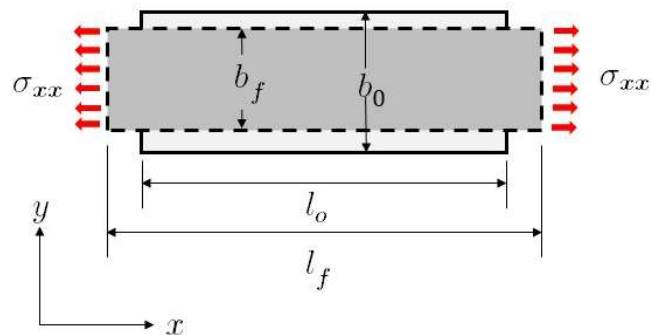


Figura 2.1 – Tensão uniaxial.

A análise das propriedades mecânicas dos materiais baseia-se no conceito de deformação, que descreve a variação geométrica de um corpo sob a ação de tensões. A

deformação de engenharia<sup>1</sup> é caracterizada na equação (2.1) e a deformação verdadeira<sup>2</sup> pela equação (2.2).

$$\varepsilon_{xx} = \frac{l_f - l_0}{l_0} \quad \varepsilon_{yy} = \frac{b_f - b_0}{b_0} \quad (2.1)$$

$$\varepsilon_v = \ln(1 + \varepsilon) \quad (2.2)$$

onde  $l_f$  é o comprimento longitudinal final,  $l_0$  o comprimento longitudinal inicial,  $b_f$  a largura final e  $b_0$  a largura inicial,  $\varepsilon$  a deformação de engenharia,  $\varepsilon_v$  a deformação verdadeira.

A deformação pode ser elástica, quando o material retorna à sua forma original após a remoção das cargas, ou plástica, quando ocorrem deformações permanentes. O coeficiente de Poisson caracteriza a relação entre as deformações em direções perpendiculares, conforme apresentado na equação (2.3). O módulo de elasticidade, também conhecido como módulo de Young, quantifica a rigidez do material no regime elástico e relaciona a tensão aplicada à deformação correspondente, refletindo a capacidade do material de resistir à deformação elástica. Essa relação linear entre tensão e deformação é expressa pela equação (2.4) e é fundamental para avaliar o comportamento elástico dos materiais (BEER *et al.*, 2015).

$$\nu = -\frac{\varepsilon_{yy}}{\varepsilon_{xx}} \quad (2.3)$$

$$\sigma_{xx} = E\varepsilon_{xx} \quad (2.4)$$

em que  $\nu$  o coeficiente de Poisson,  $\sigma$  é a tensão e  $E$  o módulo de elasticidade.

---

<sup>1</sup> A deformação de engenharia é definida como a razão entre a variação do comprimento e o comprimento inicial de um material.

<sup>2</sup> A deformação verdadeira é uma medida que considera as mudanças incrementais no comprimento do material em relação ao comprimento atual para o cálculo da deformação.

O tensor de tensão é um tensor de segunda ordem, representado por  $\boldsymbol{\sigma}$ , e descreve o estado de tensão em um ponto de um corpo submetido a carregamento. Em materiais isotrópicos, possui até seis componentes independentes, associadas às tensões normais e de cisalhamento, equação (2.5) (BEER et al., 2015)

$$\boldsymbol{\sigma} = \begin{pmatrix} \sigma_{xx} & \tau_{xy} & \tau_{xz} \\ \tau_{yx} & \sigma_{yy} & \tau_{yz} \\ \tau_{zx} & \tau_{zy} & \sigma_{zz} \end{pmatrix} \quad (2.5)$$

As componentes da diagonal principal,  $\sigma_{xx}$ ,  $\sigma_{yy}$  e  $\sigma_{zz}$ , correspondem às tensões normais nas direções  $x$ ,  $y$  e  $z$ , respectivamente, e as componentes  $\tau_{xy}$ ,  $\tau_{xz}$ ,  $\tau_{yx}$ ,  $\tau_{yz}$ ,  $\tau_{zx}$  e  $\tau_{zy}$  representam as tensões de cisalhamento que atuam tangencialmente aos planos em direções combinadas. Pela diagonalização de  $\boldsymbol{\sigma}$ , obtêm-se os autovalores ( $\sigma_1$ ,  $\sigma_2$  e  $\sigma_3$ ), denominados tensões principais, que representam as tensões normais em uma base em que as tensões de cisalhamento são nulas (NORTON, 2019).

O módulo de cisalhamento é função do módulo de elasticidade e do coeficiente de Poisson, equação (2.6). De forma semelhante à relação linear entre tensão e deformação no módulo de elasticidade, o módulo de cisalhamento descreve a relação linear entre a tensão de cisalhamento e a deformação angular, conforme a equação (2.7).

$$G = \frac{E}{2(1 + \nu)} \quad (2.6)$$

$$\tau = G\gamma \quad (2.7)$$

onde  $G$  o módulo de cisalhamento,  $\tau$  a tensão de cisalhamento e  $\gamma$  a deformação angular.

Outras propriedades mecânicas, tais como o limite de escoamento, a resiliência e as regiões elásticas e plásticas, são determinadas por meio de ensaios destrutivos, como tração, flexão, dureza e impacto (CALLISTER & RETHWISCH, 2020). A Figura 2.2

apresenta uma curva tensão, deformação de engenharia comumente obtida pelo ensaio de tração.

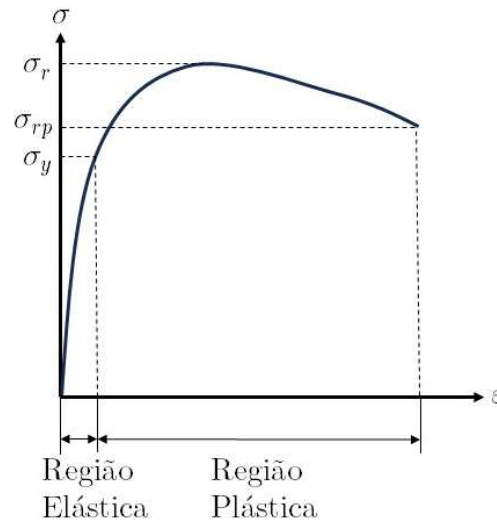


Figura 2.2 – Curva tensão deformação de engenharia.

A tensão limite de escoamento, indicada na Figura 2.2 como  $\sigma_y$ , é a tensão a partir da qual o material inicia a deformação plástica. Em materiais metálicos, esse limite é convencionalmente determinado por uma deformação de engenharia de 0,2%. A partir desta deformação, inicia-se o movimento das discordâncias na estrutura cristalina, destacando a transição entre a região elástica e a plástica. A resiliência é calculada pela área sob a curva tensão-deformação em toda a região elástica, representando a energia elástica máxima que o material pode armazenar antes do escoamento. A tenacidade é calculada pela área sob toda a curva tensão-deformação até o ponto de ruptura, representando a capacidade do material de absorver energia até a fratura e a capacidade de suportar impactos (CALLISTER & RETHWISCH, 2020).

Materiais dúcteis demonstram grande tenacidade e materiais frágeis apresentam pequenas ductilidade e tenacidade. A tensão máxima durante um ensaio corresponde ao limite de resistência à tração  $\sigma_r$ , que identifica o ponto em que o material suporta a máxima tensão antes da instabilidade plástica. Após essa tensão, inicia-se o processo

de estrição, caracterizado pela redução localizada da seção transversal até alcançar a tensão de ruptura  $\sigma_{rp}$  (NORTON, 2019).

Para muitos materiais, a curva tensão-deformação é sensível à taxa de deformação e à temperatura (CALLISTER & RETHWISCH, 2020). A deformação pode ser calculada pela taxa de deformação, conforme a equação (2.8). Assumindo uma taxa de deformação constante e uma deformação inicial nula, a deformação é proporcional ao tempo pela taxa de deformação, conforme a equação (2.9).

$$\varepsilon = \int \dot{\varepsilon} dt \quad (2.8)$$

$$\varepsilon = \dot{\varepsilon} \cdot t \quad (2.9)$$

Em materiais metálicos maciços, propriedades mecânicas como a tensão de escoamento ( $\sigma_y$ ) geralmente dependem tanto da taxa de deformação ( $\dot{\varepsilon}$ ) quanto da temperatura (DIETER, 1986). Essa dependência pode ser descrita por uma relação do tipo lei de potência (MEYERS & CHAWLA, 2008):

$$\sigma_y = \kappa \dot{\varepsilon}^n \quad (2.10)$$

em que  $\kappa$  e  $n$  dependem do material, sendo  $n$  o expoente que representa a sensibilidade à taxa de deformação e  $\kappa$  uma constante que quantifica a magnitude do encruamento por taxa de deformação. Segundo Meyers e Chawla (2008), os valores típicos de  $n$  para materiais metálicos maciços variam entre 0,02 e 0,2. Essa sensibilidade pode ser quantificada de forma mais explícita pela relação:

$$n = \left. \frac{\partial \ln \sigma}{\partial \ln \dot{\varepsilon}} \right|_{\dot{\varepsilon}, T} \quad (2.11)$$

A faixa típica de  $n$  reportada para metais maciços (0,02 – 0,2) está associada a condições experimentais usuais, nas quais a plasticidade é governada predominantemente pelo movimento de discordâncias pré-existentes. Em sistemas nanométricos e em simulações de dinâmica molecular, entretanto, operam-se taxas de deformação muito elevadas e escalas de tempo muito curtas, frequentemente com microestruturas idealizadas e baixa densidade inicial de defeitos. Nesse regime, a plasticidade tende a ser controlada pela nucleação e pela evolução das discordâncias, o que pode aumentar a sensibilidade aparente à taxa de deformação e, conseqüentemente, resultar em valores ajustados de  $n$  superiores aos típicos de materiais maciços. Assim, valores de  $n$  acima dessa faixa não necessariamente indicam inconsistência, mas sim mudança de regime físico; essa discussão é retomada na seção 4.2.

Além da dependência da taxa de deformação e da temperatura, outro aspecto essencial no estudo do escoamento é a forma como o estado de tensões aplicado ao material é representado. Em materiais metálicos maciços e dúcteis, como o alumínio, o escoamento plástico não depende apenas da magnitude de uma única componente de tensão, mas sim da combinação das tensões principais atuantes. Nesse contexto, o critério de von Mises é amplamente aceito como referência para descrever a condição de início do escoamento.

Segundo Dieter (1986) e Meyers & Chawla (2008), o critério estabelece que o escoamento ocorre quando a chamada tensão equivalente de von Mises atinge a tensão de escoamento determinada em um ensaio uniaxial. Essa tensão equivalente é definida a partir das tensões principais do tensor de tensões ( $\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3$ ), pela relação:

$$\sigma_{VM} = \sqrt{\frac{1}{2}[(\sigma_1 - \sigma_2)^2 + (\sigma_2 - \sigma_3)^2 + (\sigma_3 - \sigma_1)^2]} \quad (2.12)$$

O critério de von Mises é particularmente adequado para metais dúcteis quando o escoamento é governado pela energia de distorção. Em ensaios de tração uniaxial e em

condições próximas de tensão plana ou de multiaxialidade moderada, a tensão equivalente  $\sigma_{VM}$  fornece um escalar conveniente para comparar estados de tensão com o limite obtido em tração simples. Entretanto, à medida que o estado de tensões se torna fortemente triaxial, com contribuição hidrostática significativa, a relação entre  $\sigma_{VM}$  e o início do escoamento pode se tornar menos representativa, e fenômenos como restrição plástica e sensibilidade à pressão passam a influenciar a resposta.

Essa formulação é especialmente útil em simulações numéricas e em análises de elementos finitos, pois permite reduzir um estado multiaxial de tensões a um único valor escalar comparável ao limite obtido em tração simples.

Sob outra perspectiva, a relação entre tensões e deformações pode ser estendida a partir de uma abordagem termodinâmica da energia da deformação elástica. A primeira e segunda leis da termodinâmica estabelecem que (SONNTAG & VAN WYLEN, 2009):

$$dU = \delta W + \delta Q; \quad \frac{\partial U}{\partial t} = \delta \dot{W} + \delta \dot{Q} \quad (2.13)$$

$$dS \geq \frac{\delta Q}{T}; \quad \frac{\partial S}{\partial t} \geq \frac{\delta \dot{Q}}{T} \quad (2.14)$$

onde  $U$  é a energia interna,  $\delta W$  o trabalho realizado pelo sistema,  $\delta Q$  o calor fornecido ao sistema,  $\delta \dot{W}$  a potência realizada pelo sistema no tempo,  $\delta \dot{Q}$  o fluxo de calor fornecido ao sistema,  $T$  a temperatura e  $S$  a entropia. A potência pode ser calculada pelas seguintes equações:

$$\delta \dot{W} = \dot{x} \mathcal{F} \quad (2.15)$$

$$\mathcal{F} = k_s \Delta x \quad (2.16)$$

sendo  $\mathcal{F}$  a força externa aplicada,  $k_s$  a constante de proporcionalidade do material,  $\Delta x$  o deslocamento e  $\dot{x}$  a derivada do deslocamento em relação ao tempo.

A segunda lei afirma que a variação de entropia é sempre maior ou igual à entropia fornecida ao sistema na forma de calor. A diferença entre o lado esquerdo e o lado direito da equação (2.13) corresponde a uma fonte interna de calor devido à dissipação. Dessa forma, a taxa de dissipação é dada por:

$$\frac{\partial D}{\partial t} = T \frac{\partial S}{\partial t} - \delta \dot{Q} \geq 0 \quad (2.17)$$

Ao isolar o termo do calor da equação da primeira lei (2.13) e substituir na equação (2.17):

$$\frac{\partial D}{\partial t} = \delta \dot{W} - \frac{\partial}{\partial t} (U - TS) \quad (2.18)$$

$$\frac{\partial D}{\partial t} = \delta \dot{W} - \frac{\partial F}{\partial t} \quad (2.19)$$

em que  $F$  é a energia livre de Helmholtz, que representa a capacidade máxima do sistema realizar trabalho (CALLEN, 1985). No regime elástico, todo o trabalho mecânico é reversível, dessa forma o termo dissipativo  $D$  é nulo e o trabalho é determinado pela equação (2.17). Portanto, no regime elástico, a equação (2.19) pode ser reescrita como:

$$\dot{\varepsilon} \left( \mathcal{F} - \frac{\partial F}{\partial x} \right) = 0 \quad (2.20)$$

$$\mathcal{F} = \frac{\partial F}{\partial x} \quad (2.21)$$

A equação (2.20) é válida no regime em que a dissipação é desprezível, condição tipicamente associada à resposta elástica e reversível, o que torna a equação (2.21) uma conexão entre os domínios macroscópico e microscópico, representados pela força externa e pela energia livre de Helmholtz, respectivamente. É importante ressaltar que para sólidos, o produto da entropia pela temperatura é pequeno e pode ser desprezado

(BUEHLER, 2008). A densidade volumétrica de energia livre de Helmholtz fornece a expressão para a tensão escalar do tensor de tensões, equação (2.22). Por fim, a equação (2.23) apresenta o cálculo do módulo de elasticidade ( $E$ ) a partir da densidade de energia livre de Helmholtz (BUEHLER, 2008).

$$\sigma_{i,j} = \frac{\partial(F/V)}{\partial\varepsilon_{i,j}} \quad (2.22)$$

$$E = \frac{\partial^2(F/V)}{\partial\varepsilon^2} \quad (2.23)$$

As relações obtidas a partir da energia livre de Helmholtz, Eqs. (2.22) e (2.23), pressupõem resposta elástica e reversível, isto é, um regime de quase-equilíbrio no qual a dissipação interna é desprezível e a tensão pode ser interpretada como derivada da densidade de energia de deformação. Nesse contexto, a energia livre de Helmholtz fornece uma ligação consistente entre microestrutura e propriedades elásticas (por exemplo,  $E$  e  $G$ ) no escopo da mecânica linear elástica. Em contraste, após o início da plasticidade, a deformação passa a ser governada por mecanismos dissipativos e irreversíveis, como nucleação e mobilidade de discordâncias e rearranjos estruturais, de modo que a interpretação energética deixa de ser estritamente conservativa. Portanto, a abordagem termodinâmica baseada em  $F/V$  é empregada nesta dissertação como fundamentação para a elasticidade, enquanto a caracterização de propriedades plásticas requer análise específica do regime fora do equilíbrio.

A equação 2.4 descreve a lei de Hooke uniaxial. Entretanto, é conveniente utilizá-la de forma generalizada para calcular outras propriedades mecânicas a partir da densidade de energia livre de Helmholtz ( $F/V$ ) e do tensor de elasticidade ( $\mathbf{C}$ ), conforme as equações (2.24) a (2.28) (GURTIN, 1981; BUEHLER, 2008).

$$\boldsymbol{\sigma} = \mathbf{C} : \boldsymbol{\varepsilon} \quad (2.24)$$

$$\sigma_{i,j} = C_{i,j,k,l} \varepsilon_{k,l} \quad (2.25)$$

$$\boldsymbol{\sigma} = \sigma_{i,j} \mathbf{e}_i \otimes \mathbf{e}_j \quad (2.26)$$

$$\boldsymbol{\varepsilon} = \varepsilon_{k,l} \mathbf{e}_k \otimes \mathbf{e}_l \quad (2.27)$$

$$C_{ijkl} = \frac{\partial^2(F/V)}{\partial \varepsilon_{ij} \partial \varepsilon_{kl}} \quad (2.28)$$

em que o operador “.” representa o produto de contração dupla entre tensores e “ $\otimes$ ” denota o produto tensorial.

O tensor elasticidade é um tensor de 4<sup>a</sup> ordem, sendo constituído por 81 componentes que descrevem as propriedades elásticas de um material; entretanto, ao considerar um material anisotrópico, o tensor de elasticidade pode ser reduzido em até 21 constantes independentes através das simetrias  $C_{i,j,k,l} = C_{j,i,k,l} = C_{i,j,l,k} = C_{k,l,i,j}$  (DIETER, 1986).

Considerando um material isotrópico, a quantidade de constantes elásticas que descrevem o tensor de elasticidade é reduzida significativamente, sendo representada por apenas duas constantes, formalmente denominadas constantes de Lamé  $\lambda$  e  $\mu$ . Nesse sentido, as componentes do tensor elasticidade, as tensões, deformações e a densidade de energia livre de Helmholtz, se correlacionam com as constantes de Lamé de acordo com as equações (2.29 – 2.35) (GROSS & SEELIG, 2018; BUEHLER, 2008).

$$C_{i,j,k,l} = \mu(\delta_{i,k}\delta_{j,l} + \delta_{i,l}\delta_{j,k}) + \lambda\delta_{i,j}\delta_{k,l} \quad (2.29)$$

$$\mu = \frac{E}{2(1 + \nu)} \quad (2.30)$$

$$\nu = \frac{E - 2\mu}{2\mu} \quad (2.31)$$

$$\lambda = \frac{3\nu\mu}{1 - 2\nu} \quad (2.32)$$

$$\varepsilon_{i,j} = -\frac{\nu}{E}\sigma_{k,k}\delta_{i,j} + \frac{1 + \nu}{E}\sigma_{i,j} \quad (2.33)$$

$$\sigma_{i,j} = \lambda\varepsilon_{k,k}\delta_{i,j} + 2\mu\varepsilon_{i,j} \quad (2.34)$$

$$\begin{aligned} \frac{F}{V} = \frac{1}{2}(\lambda + 2\mu)(\varepsilon_{i,i} + \varepsilon_{j,j} + \varepsilon_{k,k})^2 \\ + 2\mu(\varepsilon_{i,j}^2 + \varepsilon_{k,i}^2 + \varepsilon_{j,k}^2 - \varepsilon_{i,i}\varepsilon_{j,j} - \varepsilon_{i,i}\varepsilon_{k,k} - \varepsilon_{j,j}\varepsilon_{k,k}) \end{aligned} \quad (2.35)$$

onde  $\delta$  é o delta de Kronecker,  $\mu$  o módulo de cisalhamento ( $G$ ) e  $F/V$  além de representar a densidade da energia de Helmholtz é interpretado fisicamente como a densidade de energia de deformação, ou seja, se a grandeza  $F$  de um determinado material é conhecida, é possível estabelecer uma conexão direta entre tensão e deformação dentro do escopo da mecânica linear elástica e calcular as demais propriedades mecânicas equações (2.1) a (2.35) sem a necessidade de realizar ensaios mecânicos. Entretanto, para determinar  $F$ , é necessário utilizar simulações de dinâmica molecular (BUEHLER, 2008).

Do ponto de vista termodinâmico, o módulo de Young é função de  $F$ . Dessa forma, há um acoplamento entre a temperatura e a energia livre de Helmholtz, evidenciando a dependência do comportamento mecânico do material em virtude da diminuição do módulo de elasticidade quando há aumento da temperatura. Esse acoplamento é importante pois o módulo de elasticidade é uma das propriedades mais fundamentais nos sólidos e está correlacionado analiticamente com outras grandezas aparentemente inusitadas, como energia interna, temperatura e entropia, que por sua vez são fundamentais na termodinâmica estatística.

## 2.2 TERMODINÂMICA ESTATÍSTICA

A Termodinâmica Estatística é a teoria que descreve e racionaliza a relação entre fenômenos macroscópicos e propriedades microscópicas de um sistema de interesse, sendo amplamente utilizada na física, química e engenharia (HUANG, 1987; SEKERKA, 2015; SETHNA, 2020). Essa teoria permite prever e explicar o comportamento de sistemas em condições de equilíbrio termodinâmico, quando

propriedades como temperatura e pressão são uniformes, e em condições fora do equilíbrio ao descrever e determinar flutuações, correlações, comportamento não-linear e estados de transição, característicos de processos como a deformação em sólidos.

Ao relacionar as escalas microscópica e macroscópica, a Termodinâmica Estatística permite determinar grandezas físicas fundamentais, como energia interna, energia livre de Helmholtz e temperatura, que foram descritas na seção 2.1 e são essenciais para calcular propriedades mecânicas elásticas, como módulo de elasticidade, coeficiente de Poisson e módulo de cisalhamento.

É conveniente para a Termodinâmica Estatística utilizar a formulação hamiltoniana da mecânica clássica, em que a energia total de um sistema molecular é descrita pela função matemática, o Hamiltoniano  $\mathcal{H}$ , como:

$$\mathcal{H}(\mathbf{q}, \mathbf{p}, t) = K(\mathbf{p}(t)) + \Theta(\mathbf{q}(t)) \quad (2.36)$$

onde  $\mathbf{p}$  é o momento,  $\mathbf{q}$  é a posição,  $K$  a energia cinética e  $\Theta$  a energia potencial do sistema. Ao estudar sólidos, a contribuição da energia cinética é pequena e o hamiltoniano do sistema é calculado a partir da energia potencial.

Nesse contexto, a obtenção das propriedades mecânicas está diretamente relacionada ao cálculo da energia potencial do sistema, determinada a partir dos potenciais interatômicos. O papel dos potenciais interatômicos, ou campos de força, é fornecer expressões numéricas ou analíticas capazes de determinar a energia potencial de um sistema de partículas, sendo, portanto, dados de entrada fundamental para simulações (GONZÁLEZ, 2011). Esses potenciais são estabelecidos com base em parâmetros obtidos experimentalmente ou a partir de simulações baseadas na teoria quântica (KAMBERAJ, 2020).

Essa abordagem teórica, embora eficaz, apresenta limitações significativas, pois a precisão dos resultados depende diretamente da qualidade dos parâmetros empregados

nos potenciais e das limitações inerentes aos modelos utilizados (RAPAPORT, 2004). Como esses potenciais são derivados de dados experimentais ou de cálculos teóricos, sua capacidade de prever propriedades mecânicas está intrinsecamente ligada à fidelidade desses parâmetros ao refletir o comportamento real do material. Assim, a qualidade da parametrização do campo de força é um fator crítico que pode influenciar a confiabilidade das propriedades mecânicas obtidas por meio dessa técnica.

Diversos potenciais interatômicos com diferentes níveis de precisão foram desenvolvidos, cada um com suas vantagens e limitações, sendo a escolha do mais adequado dependente das características do sistema e dos objetivos da simulação (KAMBERAJ, 2020; ZHOU & LIU, 2022). As abordagens para construir os potenciais variam desde os potenciais baseados em pares átomo – átomo, como a de Lennard-Jones (LJ) (RAHMAN, 1964; CLERI *et al.*, 1997) e Morse (MORSE, 1929); potenciais reativos, como o “ReaxFF” (VAN DUIN *et al.*, 2001); potenciais de alta acurácia baseados na teoria do funcional da densidade (SPRINGBORG, 1997; CAR & PARRINELLO, 1985) e potenciais de multicorpos, também denominados de “*Embedded Atom Method*” (EAM) (FINNIS & SINCLAIR, 1984).

É importante ressaltar que não existe um único potencial capaz de descrever o comportamento de todos os materiais. A escolha do potencial interatômico depende da aplicação e do material (STEPANOVA & BRONNIKOV, 2019; MOURA *et al.*, 2024; MISHIN *et al.*, 2001) e das condições termodinâmicas de interesse para a investigação do fenômeno e do sistema.

Os potenciais de pares são os mais simples e menos custosos computacionalmente, pois a energia total do sistema é obtida ao somar todas as contribuições energéticas das ligações dos pares de partículas do sistema, conforme apresentado na equação (2.37):

$$\Theta = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^N \phi(r_{i,j}) \quad (2.37)$$

em que  $N$  é o número de átomos e o termo  $\phi(r_{i,j})$  representa a energia potencial entre dois átomos, sendo função da distância  $r_{i,j}$  entre eles.

Uma limitação significativa dos potenciais de pares é a incapacidade de descrever corretamente as propriedades elásticas dos metais. A simplificação de que a energia total do sistema é igual à soma das energias entre pares de átomos não consegue captar os efeitos energéticos locais associados às imperfeições típicas dos sólidos, como lacunas, interstícios, movimento de discordâncias, superfícies externas, contornos de grão, poros, trincas e inclusões (BUEHLER, 2008; CALLISTER & RETHWISCH, 2020). A superfície externa, por exemplo, desempenha um papel crucial em análises de deformação, pois a energia necessária à propagação de um defeito está diretamente relacionada à energia superficial necessária para gerar duas novas superfícies (ANDERSON, 2017; LEMAITRE & DESMORAT, 2005).

Para contabilizar todos os efeitos locais energéticos e avaliar a resistência das ligações metálicas, o potencial interatômico de múltiplos corpos EAM (*Embedded Atom Method*), é o potencial mais utilizado para modelar metais (ZHOU *et al.*, 2023; STEPANOVA & BRONNIKOV, 2019; Becker *et al.*, 2013). A equação (2.38) descreve o potencial EAM (MISHIN *et al.*, 2001):

$$\Theta_i = \sum_{j=1}^{N_i} \phi(r_{i,j}) + f(\rho_i) \quad (2.38)$$

onde  $\rho_i$  representa a densidade eletrônica local ao redor do átomo  $i$ , enquanto  $f$  é a função de incorporação, que descreve como a energia de um átomo específico depende da densidade eletrônica. A densidade eletrônica é determinada pela posição do átomo  $i$  em relação aos átomos vizinhos, e a função  $f$  representa a influência do ambiente eletrônico sobre sua energia total. O potencial EAM inclui um termo de interação entre

pares de átomos,  $\phi(r_{i,j})$  que descreve as forças de atração e repulsão entre eles (STOTT & ZAREMBA, 1980; MISHIN *et al.*, 1999). Dessa forma, o potencial EAM tem maior precisão na reprodução das propriedades elásticas de metais em comparação aos potenciais de Lennard-Jones (LJ) e Morse (DAW & BASKES, 1984).

Além do EAM, existem outros potenciais interatômicos de múltiplos corpos desenvolvidos para diferentes tipos de materiais e interações (BRENNER, 1989; JUSTO *et al.*, 1998; BARTOK *et al.*, 2018). O potencial Stillinger-Weber é empregado para modelar o comportamento de materiais com ligações covalentes, como o silício, ao incluir termos de interações de dois e três corpos para capturar efeitos de ângulos de ligação que são relevantes em estruturas covalentes (STILLINGER & WEBER, 1985).

O potencial REBO (JOHNSTON & PARR, 1963) “*Reactive Empirical Bond Order*” e sua versão estendida, AIREBO “*Adaptive Intermolecular Reactive Empirical Bond Order*” (STUART *et al.*, 2000), foram desenvolvidos para descrever materiais com ligações covalentes e interações complexas, como o grafeno e nanotubos de carbono. O REBO considera a ordem de ligação e adapta a energia de acordo com a posição dos átomos vizinhos, enquanto o AIREBO adiciona termos de van der Waals para capturar interações de longo alcance.

Enquanto o EAM é adequado para metais, nos quais a estrutura é menos dependente de ângulos e mais influenciada pela densidade eletrônica local, os potenciais Stillinger-Weber, REBO e AIREBO são projetados para capturar a geometria e a dependência angular características dos materiais covalentes, permitindo modelar com precisão as interações e deformações nesses sistemas (BUEHLER, 2008).

Diante da importância dos potenciais interatômicos na descrição das interações entre partículas, a termodinâmica estatística oferece ferramentas adicionais para investigar o comportamento de sistemas materiais em nível nanoscópico. Nesse contexto, os ensembles estatísticos mimetizam diferentes condições termodinâmicas macroscópicas e levam a relações específicas válidas para cada ensemble.

Em Termodinâmica Estatística um ensemble é o conjunto de todas as configurações possíveis que um sistema microscópico pode acessar, respeitando as restrições impostas a ele. Entre os diversos tipos de ensembles estatísticos, os mais amplamente utilizados na mecânica estatística incluem o ensemble microcanônico (NVE), o ensemble canônico (NVT), e o ensemble isobárico-isotérmico (NPT) (MCQUARRIE, 1976), em que, conforme o caso, o número de partículas  $N$ , o volume  $V$ , a energia  $E$ , a temperatura  $T$  ou a pressão  $P$  são especificados.

Nesse sentido, o limite termodinâmico corresponde a uma condição fundamental para a aplicação da teoria, em que o número de partículas  $N$  e o volume  $V$  do sistema tendem ao infinito, mantendo-se constante a densidade. Nesse limite, o comportamento assintótico das formulações microscópicas converge para a descrição macroscópica, tornando as flutuações relativas das grandezas termodinâmicas desprezíveis, permitindo que os valores médios calculados nos ensembles sejam representativos do comportamento macroscópico do sistema. Assim, o limite termodinâmico embasa a aplicação da termodinâmica estatística a materiais reais, fornecendo a ponte entre a descrição microscópica, baseada em átomos ou moléculas, e as propriedades observadas em sistemas macroscópicos.

O ensemble microcanônico é adequado para modelar sistemas fechados e isolados, caracterizados por um número fixo de partículas  $N$ , volume  $V$  e energia total  $E$  (SETHNA, 2020). O ensemble isobárico-isotérmico mantém constantes o número de partículas  $N$  e a temperatura  $T$ , permitindo a variação do volume  $V$  e energia  $E$  enquanto a pressão  $P$  é fixada (JÄMBECK & LYUBARTSEV, 2012, 2013; TAM & LAU, 2015; QIU *et al.*, 2020; SRIVASTAVA & SHARMA, 2022).

Em estudos de deformação utilizando a Termodinâmica Estatística, o ensemble isobárico-isotérmico é particularmente adequado para a modelagem (LI *et al.*, 2020; OUYANG *et al.*, 2024), pois permite simular ensaios de deformação sob condições de pressão e temperatura controladas, semelhantes às conduzidas em experimentos

macroscópicos. No regime elástico linear, no qual a resposta do material permanece próxima ao equilíbrio termodinâmico, o aumento do tamanho do sistema conduz à convergência das grandezas médias, caracterizando a aproximação ao limite termodinâmico. Esse comportamento favorece a determinação consistente das propriedades elásticas, como os módulos de elasticidade e de cisalhamento, bem como o coeficiente de Poisson.

Entretanto, em processos de deformação que envolvem o início da plasticidade, a resposta mecânica passa a ser governada por mecanismos dissipativos e fora do equilíbrio, como a nucleação e a mobilidade de discordâncias, efeitos de tamanho e dependência com a taxa de deformação. Nesses casos, o uso do ensemble NPT não constitui um critério de validade geral, e a convergência associada ao limite termodinâmico pode não ser observada para grandezas como a tensão limite de escoamento, cuja interpretação permanece condicionada ao regime físico acessível às simulações de dinâmica molecular.

### 2.3 FORÇAS, TENSÕES, DEFORMAÇÕES MOLECULARES

A abordagem termodinâmica da densidade de energia de deformação permite calcular propriedades mecânicas elásticas, fornecendo valores de tensão e deformação que representam o comportamento médio do material. No entanto, essa abordagem não captura as tensões e deformações locais da rede cristalina em um determinado ponto.

Assim, o tensor tensão de virial foi introduzido para possibilitar a análise de tensões em pontos locais de interesse, sendo definido como o equilíbrio entre contribuições cinemáticas e de forças. A contribuição das forças é calculada especificamente a partir dos potenciais de interação que descrevem as interações interatômicas. Esses potenciais são fundamentais para capturar a resposta local do material, permitindo avaliar a

tensão diretamente nas regiões de interesse, conforme descrito na equação (2.39) (TSAI, 1979):

$$\sigma_{ij} = \frac{1}{V} \left( \sum_{\alpha} m_{\alpha} v_{\alpha,i} v_{\alpha,j} + \frac{1}{2} \sum_{\alpha, \beta, \alpha \neq \beta} \left( \frac{\partial \phi(\mathbf{r})}{\partial r} \frac{r_i}{r} r_j \Big|_{r=r_{\alpha\beta}} \right) \right) \quad (2.39)$$

em que  $V$  é o volume,  $m$  a massa,  $\phi$  o potencial de interação,  $\mathbf{v}$  a velocidade,  $r_i$  a projeção da distância atômica do vetor  $\mathbf{r}$  no eixo de coordenada  $i$  e os índices  $\alpha$  e  $\beta$  são referentes à numeração dos átomos considerados no cálculo.

A análise da deformação em sistemas atomísticos pode ser conduzida por meio do cálculo do campo de deformação local, que fornece uma medida geométrica das variações na estrutura da rede atômica. A deformação atômica local é determinada ao comparar o desvio da configuração atual da rede com uma configuração de referência, geralmente assumida como a da rede não deformada. Essa análise baseia-se na definição do tensor  $q_{ij}^l$ , conforme apresentado na equação 2.40. Para descrever o comportamento elástico em termos contínuos, o tensor de Cauchy-Green à esquerda,  $b_{ij}^l$ , é definido a partir de  $q_{ij}^l$  utilizando um fator de correção correspondente à estrutura cristalina, como descrito na equação 2.41 (ZIMMERMAN, 1999). Além disso, a deformação de engenharia é calculada como a variação total da deformação na configuração atual em relação à de referência (SPENCER, 2004).

É importante destacar que, diferentemente do tensor de tensão virial, que exige determinar média temporal e espacial para convergir ao conceito de tensão da mecânica do contínuo, o tensor deformação é válido de forma instantânea, por ser geométrico. No entanto, ressalta-se que essa definição de deformação é mais precisa em regiões afastadas de superfícies e interfaces, onde os efeitos de borda e as interações atômicas complexas podem distorcer a medição da deformação geométrica (BUEHLER, 2008).

$$q_{ij}^l = \frac{1}{N} \sum_{k=1}^N \frac{\Delta x_i^{kl} \Delta x_j^{kl}}{r_0^2} \quad (2.40)$$

$$b_{ij}^l = \frac{N}{\lambda_c} q_{ij}^l = \frac{1}{\lambda_c} \sum_{k=1}^N \frac{\Delta x_i^{kl} \Delta x_j^{kl}}{r_0^2} \quad (2.41)$$

onde  $\Delta x_i^{kl} = x_i^l - x_i^k$ ;  $\Delta x_j^{kl} = x_j^l - x_j^k$  representa o deslocamento entre o átomo  $l$  na configuração atual e o átomo  $k$  na configuração de referência, para as coordenadas nas direções  $i, j$ .  $N$  é o número de átomos mais próximos a ser considerado,  $\lambda_c$  é o fator de correção para diferentes tipos de estrutura cristalina, sendo igual a  $4/3$  para uma estrutura do tipo cúbico de face centrada e  $r_0$  a distância na configuração de referência não deformada.

## 2.4 DINÂMICA MOLECULAR

A Dinâmica Molecular (MD) é uma técnica de simulação computacional que permite racionalizar o comportamento dinâmico de sistemas em escala molecular, a partir da determinação, ao longo do tempo, da posição e da velocidade dos átomos. A partir dessas trajetórias, é possível determinar diversas propriedades físicas do sistema, utilizando os princípios da mecânica clássica para descrever a evolução das partículas considerando as interações interatômicas por meio de potenciais de interação, como os descritos na seção 2.2 (RAPAPORT, 2004; ALDER & WAINWRIGHT, 1959; RAHMAN, 1964).

A MD se baseia na hipótese ergódica, um conceito fundamental da mecânica estatística, segundo a qual as médias das propriedades calculadas em ensembles estatísticos são equivalentes às médias temporais do sistema em equilíbrio (KAMBERAJ, 2020). Essa equivalência é uma hipótese forte, assumida como ponto de partida e não garantida, uma vez que a ergodicidade do sistema não pode ser formalmente assegurada em todos os casos. Em outras palavras, ao longo do tempo,

espera-se que o sistema explore todos os seus estados acessíveis do espaço de fases, permitindo que as médias temporais representem com precisão as propriedades macroscópicas do sistema. Essa relação é expressa pela equação (2.42):

$$\langle A \rangle = \lim_{t \rightarrow \infty} \int_0^t A(t) dt \quad (2.42)$$

onde  $\langle A \rangle$  é a média do ensemble de uma propriedade física  $A$  do sistema.

Dessa forma, é possível determinar propriedades termodinâmicas macroscópicas de interesse, como pressão e energia interna, devido à convergência esperada no limite, sem a necessidade de percorrer todos os estados possíveis do sistema ou de explorar um intervalo de tempo infinito (GALLAVOTTI, 1995).

A construção de potenciais de interação, como discutido na seção 2.2, envolve cálculos de energia e forças que aumentam significativamente em complexidade computacional com o crescimento do número de partículas no sistema, demandando o uso de algoritmos eficientes para processar as interações entre os átomos. Mesmo em sistemas pequenos, compostos por milhares átomos, é necessário resolver milhares de equações simultâneas, exigindo métodos eficientes de integração numérica. Algoritmos como o Verlet e métodos de integração de ordem superior são amplamente utilizados para garantir a estabilidade e a precisão durante a simulação (FRENKEL & SMIT, 2002). Durante as simulações, as equações de movimento são discretizadas em intervalos de tempo, permitindo a determinação de propriedades termodinâmicas de interesse do sistema (RAPAPORT, 2004).

Antes de iniciar a simulação em sólidos, é fundamental realizar a etapa de equilíbrio para garantir que o sistema atinja o equilíbrio termodinâmico. Esse processo é crucial para eliminar tensões residuais na rede cristalina, que podem surgir devido à atribuição aleatória das velocidades iniciais aos átomos ou a eventuais desajustes na configuração inicial do material (OUYANG *et al.*, 2024).

O LAMMPS (*Large-Scale Atomic/Molecular Massively Parallel Simulator*), programa utilizado nas simulações desta dissertação (THOMPSON *et al.*, 2022) emprega uma estratégia para reduzir o custo computacional, baseada na construção de listas de vizinhos que armazenam apenas as partículas localizadas dentro do raio de corte e aquelas ligeiramente além dessa distância (KAMBERAJ, 2020). Essa abordagem evita a necessidade de calcular as interações entre todas as partículas a cada passo de simulação. As listas de vizinhos são atualizadas periodicamente, garantindo precisão no cálculo das forças interatômicas (BUEHLER, 2008).

Para a análise das deformações locais na rede cristalina, são avaliadas as modificações estruturais em comparação com um estado de referência, semelhante às equações 2.40 e 2.41. Essa avaliação utiliza o algoritmo “*Common Neighbor Analysis*” (CNA), descrito por Tsuzuki *et al.* (2007) e Faken & Jónnson (1994), que classifica os átomos de acordo com a configuração de suas vizinhanças cristalográficas (como CFC, CCC ou HC), permitindo identificar a evolução das estruturas cristalinas e a presença de discordâncias ao longo da simulação. A visualização das discordâncias e sua extração são realizadas por meio do algoritmo “*Dislocation Extraction Algorithm*” (DXA), desenvolvido por Stukowski & Albe (2010b), que analisa distorções locais e representa as discordâncias graficamente.

Em resumo, a dinâmica molecular é uma técnica eficaz para a análise de propriedades mecânicas em materiais sólidos, pois permite avaliar constantes elásticas e determinar tensões e deformações de acordo com a escolha correta do potencial interatômico e do ensemble estatístico. Esse enfoque supera as limitações da mecânica do contínuo, ao descrever o comportamento discreto atomístico do sistema. No entanto, para que a análise se aproxime da realidade física, é fundamental considerar a influência dos defeitos estruturais, que exercem papel determinante na resistência mecânica dos materiais.

## 2.5 DEFEITOS E RESISTÊNCIA MECÂNICA

O comportamento mecânico dos materiais não pode ser explicado apenas pelas ligações atômicas ou pelas propriedades intrínsecas da rede cristalina. Na prática, propriedades como limite de escoamento, ductilidade e tenacidade são fortemente condicionadas pela presença de defeitos estruturais. Tais imperfeições podem ocorrer em diferentes escalas, desde vacâncias e intersticiais atômicos (defeitos pontuais), passando por discordâncias e falhas de empilhamento (defeitos lineares e planares), até contornos de grão (defeitos volumétricos) (CALLISTER & RETHWISCH, 2020).

A Figura 2.3 apresenta a escala dimensional dos principais tipos de defeitos cristalinos. Os defeitos pontuais eletrônicos ocorrem em dimensões da ordem de  $10^{-14}$  m, enquanto os defeitos pontuais atômicos situam-se em torno de  $10^{-10}$  m. Em maiores dimensões, aparecem os defeitos lineares, como as discordâncias, tipicamente na faixa de nanômetros a micrômetros. Os defeitos interfaciais, como contornos de grão, estendem-se por dimensões ainda maiores, até a escala micrométrica. Já os defeitos volumétricos, como inclusões e porosidades, podem atingir a escala milimétrica. Cada tipo de defeito exerce influência distinta sobre a resistência mecânica, sendo que defeitos em maiores escalas geralmente dominam o comportamento estrutural em comparação aos defeitos atômicos (MEYERS & CHAWLA, 2008).

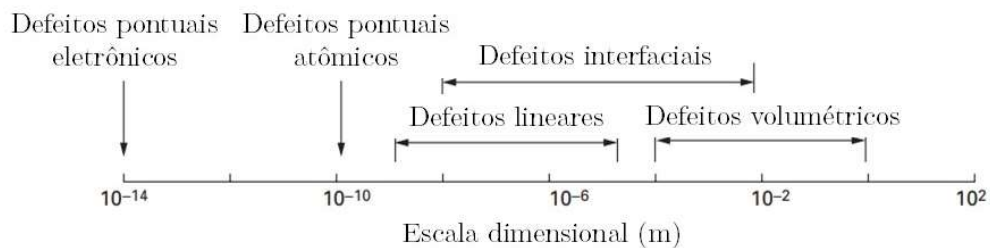


Figura 2.3 – Escala dimensional dos principais tipos de defeitos cristalinos. Adaptado de Meyers e Chawla (2008)

A deformação plástica em metais cristalinos é predominantemente governada pelo movimento e pela interação de discordâncias. Um parâmetro fundamental para caracterizar a atividade de discordâncias é a densidade linear de discordâncias, definida como:

$$\rho_d = \frac{d_l}{V} \quad (2.43)$$

em que  $d_l$  é o comprimento total de discordâncias e  $V$  é o volume instantâneo da célula de simulação. Em materiais macroscópicos, o início da plasticidade ocorre em deformações significativamente menores, tipicamente entre 0,2% e 0,4%, e as densidades de discordâncias estão na ordem de  $10^{10}$  a  $10^{12}$  m<sup>-2</sup> para materiais bem recozidos, ou  $10^{14}$  a  $10^{15}$  m<sup>-2</sup> para metais submetidos a intenso trabalho a frio, conforme relatado por Hull e Bacon (2011).

Nos nanomateriais, como *whiskers* metálicos, a influência desses defeitos se torna ainda mais significativa devido às dimensões reduzidas, que limitam o espaço disponível para a movimentação e interação das discordâncias (ROHITH *et al.*, 2019). Em consequência, o limite de escoamento desses sistemas pode se aproximar do limite de escoamento teórico de monocristais sem defeitos, que é aproximadamente igual a  $E/10$ , conforme apresentado por Courtney (2000). A análise da escala de tamanho dos defeitos é, portanto, essencial para compreender como a resistência mecânica emerge a partir da microestrutura do material.

### 3 METODOLOGIA

Neste capítulo, são discutidos o sistema de interesse estudado ao longo da pesquisa, os parâmetros do potencial utilizado na análise, o protocolo de simulação e o pós-processamento dos resultados obtidos.

#### 3.1 SISTEMA DE INTERESSE

Este estudo investigou as propriedades mecânicas do alumínio por meio de simulações de dinâmica molecular como metodologia central. O alumínio foi selecionado como principal objeto de estudo devido às suas propriedades amplamente conhecidas, como baixa densidade, elevada resistência à corrosão, elevada relação resistência-peso e notável resistência mecânica, características que justificam sua ampla aplicação na engenharia, em especial em equipamentos de sistemas de armamentos embarcados da Marinha.

A justificativa para essa inclusão também se baseia na diversidade de aplicações industriais desse material, que permitem explorar as capacidades e limitações da técnica de dinâmica molecular em diferentes contextos. O objetivo é avaliar como a precisão dessas propriedades variam com as condições simuladas, como taxas de deformação, temperatura e geometrias.

As análises realizadas para o alumínio servirão como referência metodológica para futuras pesquisas de propriedades mecânicas de outros materiais, permitindo uma comparação sistemática de suas propriedades elásticas e comportamentos mecânicos.

#### 3.2 POTENCIAIS INTERATÔMICOS OU CAMPO DE FORÇA

No presente trabalho, o alumínio, metal de estrutura cúbica de face centrada (CFC), é modelado pelo campo de força EAM, amplamente reconhecido como

apropriado para descrever esse tipo de material (SOLEYMANI *et al.*, 2014; XUAN *et al.*, 2018; LI *et al.*, 2020; CAO *et al.*, 2025). Os parâmetros específicos do potencial empregado para o alumínio, conforme equação (2.38), são descritos na Tabela 3.1 de acordo com a estrutura cristalina e o parâmetro de rede ( $a$ ) utilizados na investigação das propriedades mecânicas de alumínio.

Tabela 3.1 – Parâmetros EAM para o Al, fonte: Al99.eam.alloy

<http://www.ctcms.nist.gov/potentials/>.

$$f(\rho = 1,000007124973119) = -2,714794949876463$$

Al, CFC, $a = 4.05 \text{ \AA}$		
$r^2(\text{\AA})$	$\rho(\text{eV})$	$\phi(\text{eV})$
8,201250	0,074118766040777	-0,021456387999721
16,402500	0,008018049028526	-0,027491448591413
24,603750	0,002288913416527	-0,010208454558405
32,805000	0,000628309693000	0,001851934890694

### 3.3 PROTOCOLO DE SIMULAÇÃO

Todas as simulações computacionais serão realizadas no LAMMPS, utilizando o potencial interatômico EAM para o alumínio puro (MISHIN, 1999), representado pela liga Al1199, que é a liga comercial de maior pureza, com aproximadamente 99% (METALS HANDBOOK, 1990). Esse potencial tem sido aplicado de forma confiável em diversos estudos envolvendo sistemas de alumínio, incluindo investigações sobre o comportamento de discordâncias, reforço em compósitos e dinâmicas de solidificação (SOLEYMANI *et al.*, 2014; XUAN *et al.*, 2018; LI *et al.*, 2020; CAO *et al.*, 2025). Um exemplo de input do LAMMPS para o ensaio de tração do alumínio está disponível no APÊNDICE 1.

As simulações foram conduzidas no ensemble isobárico-isotérmico (NPT), com controle de temperatura e pressão por meio do termostato e barostato de Nosé-Hoover

(NOSÉ, 1984; HOOVER, 1985) e constantes de amortecimento de temperatura ( $T_{damp}$ ) e pressão ( $P_{damp}$ ) iguais a 1 ps, para determinar as propriedades mecânicas do alumínio e investigar a dependência da tensão limite de escoamento em diferentes temperaturas: 300K e 373 K, a uma pressão constante de zero bar e diferentes taxas de deformação que variam de  $10^8 \text{ s}^{-1}$  a  $10^{13} \text{ s}^{-1}$ . Essas taxas são consideravelmente superiores às observadas nas simulações conduzidas no ambiente macroscópico, devido à limitação da técnica da dinâmica molecular em realizar simulações com taxas de deformação inferiores a  $10^6 \text{ s}^{-1}$ . É importante mencionar que a faixa de taxas adotada neste estudo abrange inclusive regimes de carregamento associados a eventos balísticos em escala atomística. Considerando o comprimento nanométrico do domínio simulado, taxas de deformação da ordem de  $10^{11} \text{ s}^{-1}$  correspondem a velocidades de alongamento equivalentes da ordem de  $10^3 \text{ m/s}$ , comparáveis às velocidades características de eventos balísticos; enquanto taxas menores representam carregamentos dinâmicos elevados.

Com o objetivo de avaliar possíveis vieses sistemáticos associados ao acoplamento termostato–barostato, foram realizadas simulações adicionais variando-se os valores de  $T_{damp}$  e  $P_{damp}$  para 0.1; 0.5; 1.5 e 2 ps. A análise comparativa indicou que as variações relativas nas propriedades elásticas calculadas, como módulo de elasticidade e módulo de cisalhamento, permaneceram inferiores a 1% em relação ao caso base ( $P_{damp}$  e  $T_{damp}$  iguais a 1 ps), enquanto as variações observadas no coeficiente de Poisson apresentaram valores inferiores a 2.5% compatíveis com flutuações estatísticas esperadas em simulações atomísticas. Observou-se ainda que valores de  $T_{damp}$  e  $P_{damp}$  superiores a 5 ps resultaram em aumento significativo do tempo necessário para a estabilização da temperatura e da pressão, sem ganhos adicionais na precisão das propriedades mecânicas calculadas.

A modelagem do alumínio considerou uma estrutura monocristalina cúbica de face centrada (CFC), com parâmetro de rede de 4,05 Å (CALLISTER & RETHWISCH, 2020), valor que coincide com o parâmetro de rede de referência definido no potencial

EAM empregado (Mishin *et al.*, 1999), garantindo consistência entre o modelo atomístico e os dados experimentais. Os átomos foram organizados em um bloco cúbico, alinhado aos eixos cristalográficos  $[1\ 0\ 0]$ ,  $[0\ 1\ 0]$  e  $[0\ 0\ 1]$  nas direções  $x$ ,  $y$  e  $z$ , respectivamente, Figura 3.1. Essa disposição garante uma orientação cristalina bem definida para a simulação, essencial para estudar possíveis propriedades anisotrópicas e o comportamento mecânico sob condições controladas de carregamento, temperatura e pressão.

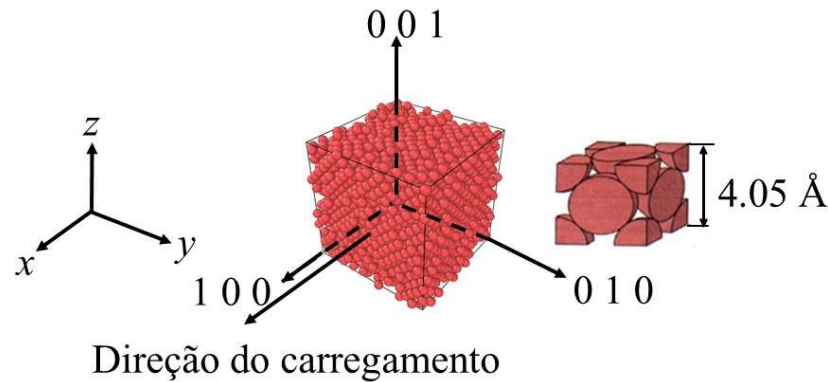


Figura 3.1 – Caixa de simulação do alumínio.

Condições de contorno periódicas foram adotadas nas simulações, permitindo que os sistemas se estendam além dos limites de uma única célula de simulação e que as partículas interajam com aquelas que estão “fora” da célula. Isso é importante porque muitos sistemas reais não são limitados por fronteiras, garantindo a conservação das propriedades dos sistemas e evitando efeitos indesejados nas bordas da caixa de simulação. Na simulação, foi definido um tamanho de vizinhança com raio de corte de  $5,0\ \text{Å}$ . Esse valor foi escolhido por ser ligeiramente maior que o parâmetro da rede cristalina do alumínio, igual a  $4,05\ \text{Å}$ , assegurando que todas as interações relevantes entre partículas vizinhas fossem consideradas sem aumentar desnecessariamente o custo computacional. Simulações com raio de corte superior a  $5,0\ \text{Å}$  não apresentaram

alteração nos resultados, embora tenham elevado significativamente o custo computacional de cada análise.

Antes do carregamento mecânico, as posições atômicas foram relaxadas pelo método de minimização do gradiente conjugado, na variante de Polak–Ribiere, que acelera a convergência ao combinar os gradientes de força atual e anterior (LAMMPS, 2022), com tolerâncias de energia e força de  $10^{-25}$ , máximo de 10.000 iterações e 50.000 avaliações de força.

Após a minimização, a simulação inicia com uma fase de equilibração de 75 picossegundos no ensemble NPT para garantir a convergência da média da energia potencial e temperatura. A pressão oscilou em torno do valor imposto, sem apresentar deriva sistemática ao longo da simulação, indicando adequada estabilização termodinâmica do sistema. O parâmetro de rede obtido ao final da equilibração manteve-se próximo ao valor de referência. Para avaliar a influência das condições iniciais, cada condição de simulação foi repetida com cinco sementes distintas na geração das velocidades iniciais, permitindo a análise da dispersão estatística das propriedades mecânicas calculadas. Após essa etapa, inicia-se o processo de deformação uniaxial na direção  $x$  de acordo com taxa de deformação constante e o número de passos configurado para alcançar uma deformação capaz de exceder o limite elástico do material.

O algoritmo Velocity-Verlet (SWOPE *et al.*, 1982) foi utilizado para integrar as equações de movimento de Newton, com um intervalo de tempo de 1 fs, totalizando uma quantidade de número passos compatível com a deformação de engenharia desejada. Os componentes de tensão foram calculados com base na tensão de virial, Eq. (2.39).

Durante o ensaio, os resultados foram registrados a cada 1000 passos de simulação, armazenando informações como a deformação na direção  $x$ , as tensões nas direções  $x$ ,  $y$  e  $z$ , a energia interna do sistema, as dimensões da caixa de simulação nas direções  $y$  e

$z$  e a temperatura em um arquivo de saída. Além desses dados numéricos, a simulação gerou arquivos visuais “*dump*” a cada 1000 passos, contendo informações detalhadas sobre a posição dos átomos, as simetrias locais e a energia potencial.

### 3.4 PÓS-PROCESSAMENTO DOS RESULTADOS DAS SIMULAÇÕES

Para atenuar as flutuações típicas das simulações de dinâmica molecular, todas as propriedades medidas ao longo das simulações foram pós-processadas com filtros de média móvel (OPPENHEIM & SCHAFER, 2010). O filtro aplicado utilizou uma janela de cinco pontos, em que cada valor suavizado foi calculado como a média aritmética dos cinco pontos vizinhos, atribuindo pesos iguais de 20% a cada ponto. Esse processo foi repetido cinco vezes para atenuar as flutuações dos dados sem comprometer suas tendências. O efeito quantitativo da suavização na curva tensão–deformação é analisado no APÊNDICE 2, onde se demonstra que a curva filtrada não distorce os valores de tensão, tampouco afeta a determinação da tensão limite de escoamento ou da resiliência do material.

Adicionalmente, o programa OVITO foi empregado para a visualização e análise microestrutural das simulações por meio dos arquivos *dumps*, possibilitando a identificação de defeitos cristalinos e alterações na rede ao longo dos ensaios (STUKOWSKI, 2010a). O comprimento total de discordâncias foi determinado pela soma das linhas classificadas como discordâncias perfeitas, de Shockley, Stair-rod, Hirth, Frank e demais tipos identificados pelo algoritmo DXA. O parâmetro de centrosimetria foi calculado para cada átomo, permitindo avaliar a simetria local da estrutura cristalina e acompanhar a propagação de defeitos, como o movimento de discordâncias e as transformações na rede (KELCHNER *et al.*, 1998; STUKOWSKI & ALBE, 2010b; STUKOWSKI, 2012). O limite de escoamento foi definido a partir da

análise do DXA, considerando o instante em que o primeiro frame do arquivo *dump* evidenciou a nucleação das discordâncias iniciais (STUKOWSKI, 2010b).

As propriedades mecânicas foram determinadas a partir dos dados da curva tensão–deformação no regime elástico. O módulo de elasticidade foi estimado pelo coeficiente angular oriundo da aproximação de uma reta aos pontos da curva tensão–deformação nesse regime. Os coeficientes de Poisson nas direções  $y$  e  $z$  foram calculados com base nas deformações laterais e axiais, e o módulo de cisalhamento foi determinado com base na sua relação com o módulo de Young e o coeficiente de Poisson, equações (2.3), (2.4) e (2.6). A resiliência foi calculada por meio de integração numérica utilizando o método de Simpson (2<sup>a</sup> regra), conforme Rice & Do (2012)

### 3.5 METADADOS

Com o objetivo de garantir a transparência e a reprodutibilidade dos experimentos numéricos conduzidos neste estudo, todos os arquivos essenciais foram disponibilizados em um repositório na nuvem. O material inclui os dados de entrada do LAMMPS, os resultados das simulações, tais como: curva tensão–deformação, densidade de discordâncias e a evolução da estrutura cristalina obtidas por meio do OVITO, além dos scripts em MATLAB utilizados nas análises. O acervo pode ser acessado pelo seguinte link:

[https://drive.google.com/drive/u/1/folders/1wzKG1B1vIQ\\_h75fMJD-tYafIqNXxq\\_sY](https://drive.google.com/drive/u/1/folders/1wzKG1B1vIQ_h75fMJD-tYafIqNXxq_sY).

O link disponibiliza os resultados deste trabalho organizados em dois diretórios, correspondentes às simulações descritas nas Seções 4.1 e 4.2. Em cada diretório, encontram-se dois arquivos introdutórios: “00\_leia-me.txt”, redigido em português, e “00\_readme.txt”, em inglês. Ambos têm como finalidade orientar a consulta aos dados e facilitar a navegação pelos materiais disponibilizados.

### 3.6 INFRAESTRUTURA LABORATORIAL

A execução deste projeto utilizou uma infraestrutura computacional formada por um cluster principal com 17 nós em operação (dlt01 a dlt21), quatro máquinas de bancada (cfd01 a cfd09) localizadas no IME e um cluster adicional composto por 3 nós (n04 a n08). As especificações técnicas desses recursos computacionais encontram-se apresentadas na Tabela 3.2.

Tabela 3.2 – Cluster computacional.

Máquina	Processador	Frequência/Cache	Core	Threads	Memória (GB)	Partição /data (TB)
dalton2	AMD Ryzen 9 7900X	4,7 Ghz/76 MB	12	24	16	---
n01	AMD Ryzen 9 7950X3D	4,2 Ghz/144 MB	16	32	64	3,2
n02	AMD Ryzen 9 7950X3D	4,2 Ghz/144 MB	16	32	64	3,2
n03	AMD Ryzen 7 3800X	2,20 Ghz/32 MB	8	16	32	1,5
n04	AMD Ryzen 7 3800X	2,20 Ghz/32 MB	8	16	32	1,5
n05	AMD Ryzen 9 7950X3D	4,2 Ghz/144 MB	16	32	64	3,2
n06	Intel Xeon E5-2620	2,10 Ghz/30 MB	2x6	24	132	0,3
n07	AMD Ryzen 9 7950X3D	4,2 Ghz/144 MB	16	32	64	3,2
n08	Intel i7-3770	3,4 Ghz/8 MB	4	8	32	0,8
n09	Intel i7-3770	3,4 Ghz/8 MB	4	8	32	0,8
n10	Intel i7-3770	3,4 Ghz/8 MB	4	8	32	0,8
n11	AMD Ryzen 9 7950X3D	4,2 Ghz/144 MB	16	32	64	3,2
n12	AMD Ryzen 9 7950X3D	4,2 Ghz/144 MB	16	32	64	3,2

## 4 RESULTADOS E DISCUSSÃO

Este capítulo apresenta os resultados das simulações de dinâmica molecular realizadas para determinar e racionalizar variadas propriedades mecânicas do alumínio, conforme descrito na seção 4.1. Também são discutidos os efeitos da taxa de deformação sobre o limite de escoamento, detalhados na seção 4.2. As análises abrangem a evolução das discordâncias e as alterações nas estruturas cristalinas, proporcionando uma investigação aprofundada do comportamento mecânico desse metal. Os resultados apresentados nas seções 4.1 e 4.2 ressaltam as potencialidades da dinâmica molecular como técnica de investigação, enquanto a seção 4.3 discute suas limitações.

### 4.1 INVESTIGAÇÃO DO TAMANHO MÍNIMO DO SISTEMA

Investigamos a dependência das propriedades mecânicas do alumínio para caixas nanométricas de simulação de diferentes tamanhos. Seis amostras, com dimensões variando de 2 a 20 vezes o parâmetro de rede ( $a$ ), correspondendo a 32 até 32.000 átomos, foram submetidas a um carregamento de tração uniaxial à temperatura de 300 K.

Avaliou-se a dispersão e a convergência das médias das propriedades mecânicas, como os módulos de Young e cisalhamento, o limite de escoamento e o coeficiente de Poisson, em função do tamanho do sistema, a fim de determinar o limiar a partir do qual os efeitos de tamanho finito se tornam desprezíveis e a determinação das propriedades mecânicas por meio das simulações atomísticas tem boa concordância com os valores macroscópicos no regime elástico linear. Além disso, discutem-se as variações do comportamento mecânico decorrentes do tamanho limitado do sistema, destacando a relevância dos resultados obtidas em escala atômica para os nanomateriais.

A estrutura cristalina do alumínio foi modelada como um monocristal cúbico de face centrada seguindo a orientação cristalográfica descrita na seção 3.3. Condições de

contorno periódicas foram aplicadas em todas as direções para suprimir os efeitos de borda e aproximar o comportamento do material do comportamento macroscópico.

Os átomos foram dispostos em uma célula de simulação cúbica, com arestas definidas como um múltiplo  $p$  da constante de rede. A Figura 4.1 ilustra a caixa de simulação, enquanto a Tabela 4.1 lista os valores de  $p$ , número de átomos ( $N$ ), comprimento inicial ( $l_0$ ) e volume ( $V$ ) empregados.

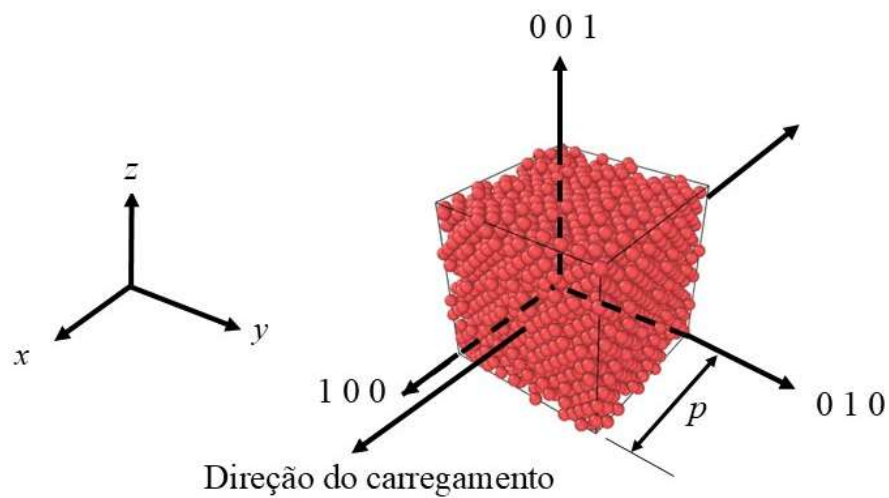


Figura 4.1 – Modelo da caixa de simulação.

Tabela 4.1 – Valores dos múltiplos da constante de rede ( $p$ ), número de átomos ( $N$ ) e comprimento inicial ( $l_0$ ) utilizados nas simulações

$p$	$N$	$l_0$ (Å)
2,0	32	8,1
3,0	108	12,2
5,0	500	20,3
10,0	4.000	40,5
15,0	13.500	60,8
20,0	32.000	81,0

A Figura 4.2 apresenta a etapa de equilibração da temperatura para  $N = 13.500$  e  $32.000$  átomos e da energia potencial para o sistema com  $N = 13.500$  átomos, confirmando o equilíbrio térmico. Essa etapa é essencial para eliminar as tensões internas resultantes das velocidades atômicas iniciais não nulas, conforme apresentado na Eq. (2.39).

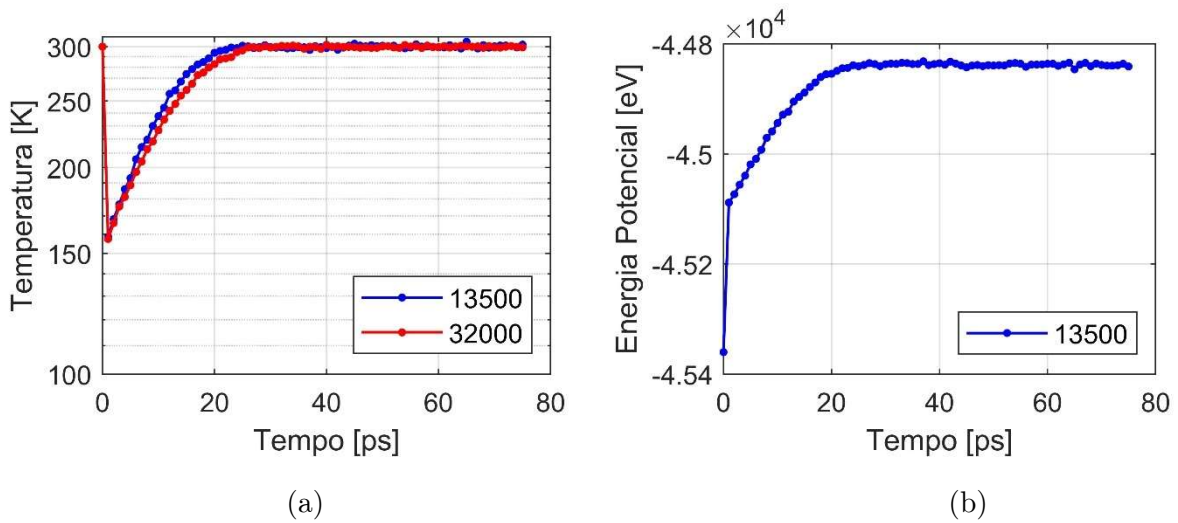


Figura 4.2 – Equilibração do sistema: (a) Temperatura com  $N = 13.500$  e  $32.000$  átomos; (b) Energia potencial para  $N = 13.500$  átomos.

Após a etapa de equilibração, o comprimento inicial  $l_0$  foi armazenado para os cálculos da deformação de engenharia. O ensaio de tração uniaxial foi realizado ao longo do eixo  $x$  no ensemble NPT a 300 K e pressão 0 Pa. Foi adotada uma taxa de deformação de  $10^9 \text{ s}^{-1}$ , por ser um valor típico utilizado em simulações de dinâmica molecular (PASTOR-ABIA *et al.*, 2011; OUYANG *et al.*, 2024; LI *et al.*, 2020) e garantir um equilíbrio entre eficiência computacional e precisão. Por outro lado, a utilização em regime quase estático, da ordem de  $10^{-4} \text{ s}^{-1}$ , inviabilizaria a realização das simulações computacionais devido ao elevado custo computacional.

Os componentes de tensão foram calculados a partir do tensor de tensão de virial e as simulações foram conduzidas até 20% de deformação de engenharia, valor que excede os limites típicos de deformação macroscópica, mas é coerente com a alta

resistência mecânica de nanomateriais e de materiais *whiskers* (LI *et al.*, 2010; MEYERS & CHAWLA, 2008).

A Figura 4.3 apresenta as curvas tensão-deformação obtidas para todas as amostras em função do número de átomos ( $N$ ) e indica a deformação na qual ocorre a transição do regime elástico para o plástico, destacada pelo início do movimento de discordâncias e pela correspondente tensão de escoamento ( $\sigma_y$ ). A região elástica se estende até o ponto em que se observa uma queda abrupta da tensão. Os valores de tensão e deformação são consistentes com os reportados na literatura para nanofios de alumínio (PASTOR-ABIA *et al.*, 2011; LI *et al.*, 2020). Todas as tensões reportadas são significativamente superiores às normalmente observadas em materiais macroscópicos, e todas as curvas apresentam uma região elástica prolongada antes da queda máxima de tensão. Esse comportamento é atribuído às dimensões nanométricas das amostras, que dificultam o movimento das discordâncias e, conseqüentemente, aumentam a resistência mecânica. Esse fenômeno é observado em materiais conhecidos como “*whiskers*” metálicos, cujas dimensões reduzidas conferem elevada resistência devido à limitação da mobilidade das discordâncias.

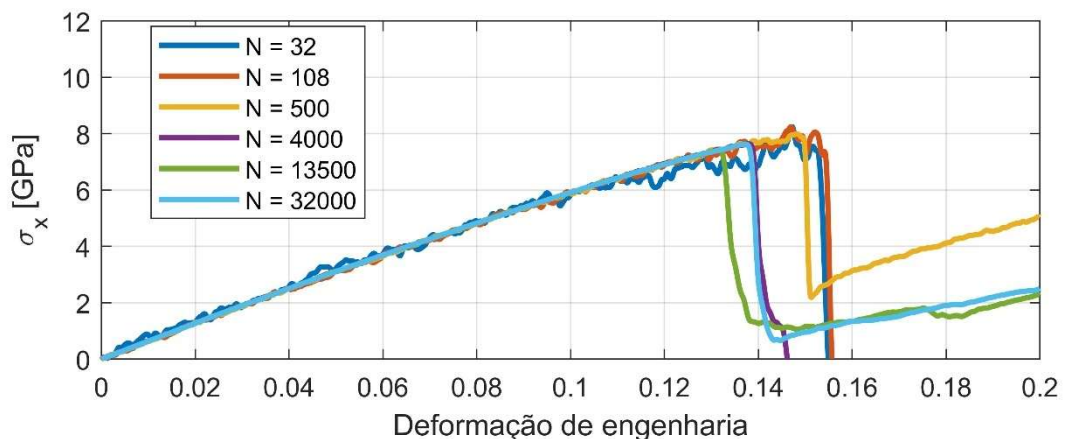


Figura 4.3 – Curva tensão–deformação para diferentes tamanhos de amostras.

A Figura 4.4 apresenta alguns instantes da análise visual da densidade de discordâncias para diferentes tamanhos de sistema e valores de deformação, destacando o início da plasticidade e sua evolução subsequente ao longo do processo de deformação.

É importante destacar que os átomos foram omitidos para facilitar a visualização das discordâncias. As subfiguras 4(a), 4(b) e 4(c) correspondem ao momento da primeira nucleação de discordância para os tamanhos de sistema  $N = 4.000$  ( $\varepsilon = 13,9\%$ ),  $N = 13.500$  ( $\varepsilon = 13,3\%$ ) e  $N = 32.000$  ( $\varepsilon = 13,8\%$ ), respectivamente. Esses resultados indicam que a nucleação de discordâncias em sistemas nanométricos de alumínio monocristalino ocorre apenas em níveis de deformação relativamente elevados. As subfiguras 4.4 (d), 4(e) e 4(f) mostram os mesmos sistemas:  $N = 4.000$  ( $\varepsilon = 14,2\%$ ),  $N = 13.500$  ( $\varepsilon = 15,0\%$ ) e  $N = 32.000$  ( $\varepsilon = 14,5\%$ ), respectivamente, em deformações ligeiramente superiores, onde a evolução e a propagação das discordâncias iniciais tornam-se mais evidentes.

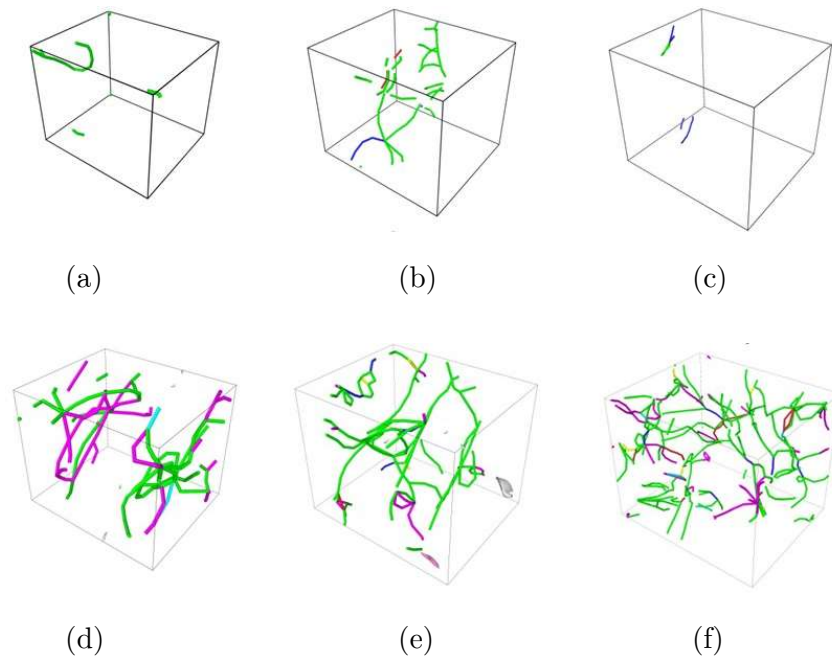


Figura 4.4 – Análise visual das discordâncias em função da deformação do tamanho do sistema: (a)  $N = 4000$ ,  $\varepsilon = 13.9\%$ ; (b)  $N = 13500$ ,  $\varepsilon = 13.3\%$ ; (c)  $N = 32000$ ,  $\varepsilon = 13,8\%$ ; (d)  $N = 4000$ ,  $\varepsilon = 14.2\%$ ; (e)  $N = 13500$ ,  $\varepsilon = 15.0\%$  e (f)  $N = 32000$ ,  $\varepsilon = 14,5\%$ . As cores indicam discordâncias perfeitas (azul), de Shockley (verde) e do tipo stair-rod (rosa).

A fim de distinguir os efeitos de tamanho finito das flutuações estatísticas inerentes às simulações de dinâmica molecular, cada condição de tamanho de sistema foi simulada por cinco replicações independentes, variando-se a semente (*seed*) utilizada na geração

das velocidades iniciais. Para cada propriedade mecânica, os valores reportados correspondem à média das cinco simulações, e as barras de erro correspondem a  $\pm 1$  desvio padrão amostral, quantificando a dispersão estatística associada a cada conjunto de cinco simulações.

As Figura 4.5 e 4.6 apresentam a investigação do limite termodinâmico para o módulo de Young ( $E$ ), módulo de cisalhamento ( $G$ ), coeficientes de Poisson nas direções  $y$  e  $z$  ( $\nu_y$  e  $\nu_z$ ), respectivamente, e a tensão limite de escoamento ( $\sigma_y$ ). Todos os valores experimentais de referência foram extraídos de Allen e Bartók (2022).

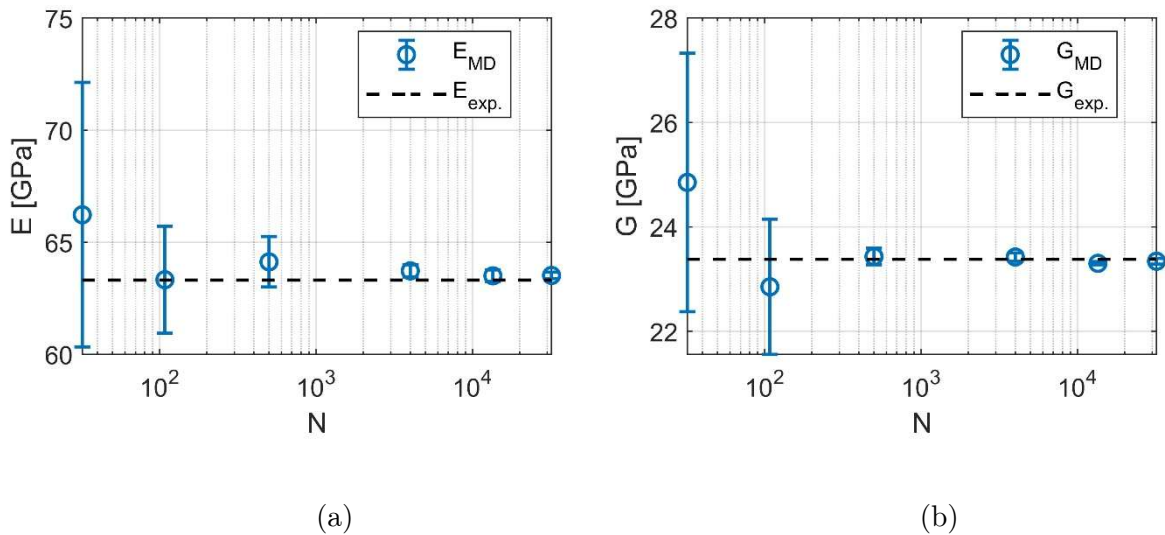


Figura 4.5 – Dependência dos módulos em relação ao número de átomos ( $N$ ): (a) elasticidade ( $E$ ) e (b) cisalhamento ( $G$ ).

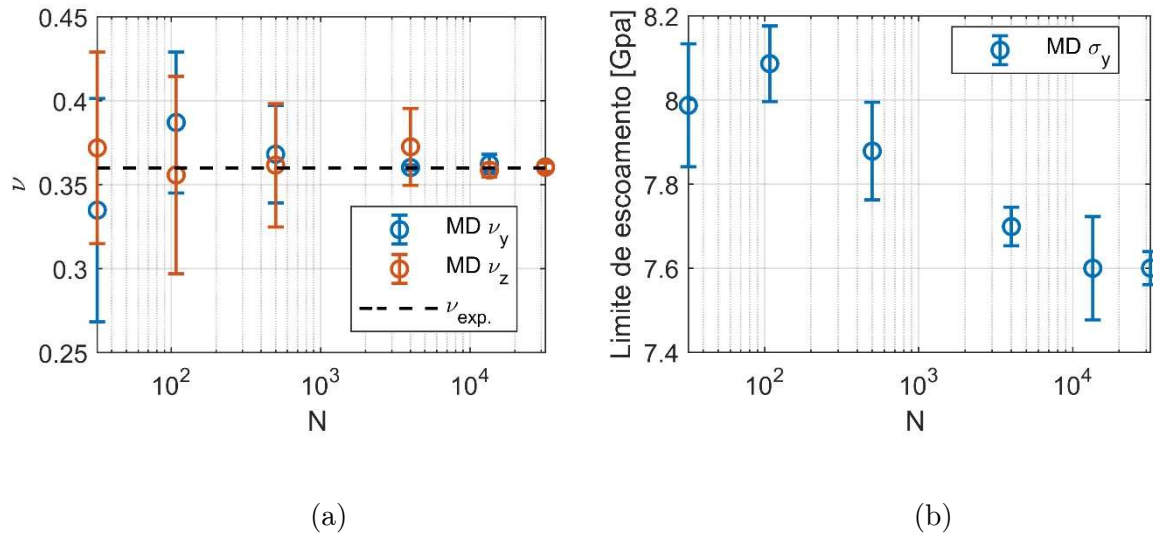


Figura 4.6 – Dependência em relação ao número de átomos ( $N$ ): (a) módulo de Poisson ( $\nu$ ) e (b) limite de escoamento ( $\sigma_y$ ).

Observa-se que, para as propriedades elásticas ( $E$ ,  $G$  e  $\nu$ ), a dispersão estatística decresce rapidamente com o aumento de  $N$ , tornando-se pequena para  $N \geq 13.500$ . A estabilização das médias, acompanhada da redução do desvio-padrão, indica que os efeitos de tamanho finito se tornam desprezíveis para essas propriedades, caracterizando a convergência ao limite termodinâmico no regime elástico. Em contraste, a tensão limite de escoamento não apresentou convergência, mesmo para maior caixa de simulação com 32.000 átomos, evidenciando que a convergência não é atingida para propriedades plásticas dentro da faixa de tamanhos avaliada.

Para  $N = 32$ , o menor sistema avaliado, é possível identificar a maior dispersão estatística das propriedades em comparação com sistemas maiores, sendo os erros relativos baseados na média observados maiores: 4,60% para  $E$ , 6,29% para  $G$ , -6,98% para  $\nu_y$  e 3,31% para  $\nu_z$ . Esses desvios são atribuídos à forte influência das flutuações estatísticas e dos efeitos de tamanho finito, particularmente acentuados em sistemas extremamente pequenos. Nessas configurações reduzidas, o baixo número de átomos é insuficiente para descrever adequadamente a resposta mecânica da rede cristalina, e os campos de deformação tornam-se altamente sensíveis a deformações locais e às condições de contorno. Com o progressivo aumento do tamanho do sistema, observa-se

menores dispersões nos cálculos de propriedades elásticas como os módulos de elasticidade e cisalhamento e o coeficiente de Poisson.

Em virtude do aumento do número de átomos, os efeitos de tamanho finito são progressivamente atenuados. Para  $N = 13.500$ , a média dos erros relativos em  $E$ ,  $G$ ,  $\nu_y$  e  $\nu_z$  são de 0,11%, -0,38%, -1,94% e -1,3%, respectivamente. Para  $N = 32.000$ , a média dos erros relativos são ainda mais reduzidos: 0,003% para  $E$ , -0,35% para  $G$ , 0,16% para  $\nu_y$  e -0,91% para  $\nu_z$ . Esses resultados indicam que, mesmo um sistema com apenas 13.500 átomos, quando comparado a um sistema macroscópico, é suficiente para atender ao limite termodinâmico no cálculo de  $E$ ,  $G$  e  $\nu$ . No entanto, esse número ainda é insuficiente para determinar com precisão a tensão de escoamento ( $\sigma_y$ ) e por consequência a resiliência e a tenacidade. A Tabela 4.2 Tabela 4.2 - Comparação das propriedades mecânicas elásticas ( $E$ ,  $G$  e  $\nu$ ) para  $N = 13.500$  e  $N = 32.000$  átomos.consolida os valores médios das propriedades mecânicas obtidas para os dois maiores sistemas avaliados neste estudo.

Tabela 4.2 - Comparação das propriedades mecânicas elásticas ( $E$ ,  $G$  e  $\nu$ ) para  $N = 13.500$  e  $N = 32.000$  átomos.

Prop. Mecânica	$N = 13500$	$N = 32000$	Erro Relativo
$E$ [GPa]	63,24	63,31	-0,11% / 0,003%
$G$ [GPa]	23,29	23,30	-0,38% / -0,35%
$\nu$ [-]	0,357	0,358	-1,94% / -0,91%

A deformação de nanomateriais, particularmente de estruturas monocristalinas como *whiskers* metálicos, é predominantemente governada pela nucleação de discordâncias, em vez do movimento de discordâncias pré-existentes, como ocorre tipicamente em materiais macroscópicos. Esse comportamento distinto pode ser

analisado por meio da evolução da curva de densidade de discordâncias e das alterações estruturais cristalinas durante a deformação.

Nesses materiais, as discordâncias são nucleadas e subseqüentemente aniquiladas ao encontrarem superfícies livres. Esse processo pode ser dividido em três estágios distintos, com base nas características da curva de densidade de discordâncias. O primeiro estágio é marcado por um aumento rápido na nucleação de discordâncias, o que leva a um pico na densidade de discordâncias, indicando o início da deformação plástica. Esse início ocorre em níveis de deformação significativamente mais elevados do que os observados em materiais macroscópicos. Durante essa etapa, a fração de átomos com estrutura cúbica de face centrada (CFC) diminui devido à formação de falhas de empilhamento e ao surgimento de estruturas cristalinas alternativas, como a cúbica de corpo centrado (CCC) e a hexagonal compacta (HCC). O segundo estágio, conhecido como exaustão de discordâncias, inicia quando a taxa de aniquilação de discordâncias supera a de nucleação, resultando em uma diminuição líquida da densidade de discordâncias. O sistema passa por rearranjos estruturais atômicos com recuperação parcial da estrutura CFC, o que indica mecanismos de recuperação induzidos pela deformação. O terceiro estágio, conhecido como esgotamento de discordâncias (*“dislocation starvation”*), caracteriza-se por um equilíbrio dinâmico entre nucleação e aniquilação de discordâncias, resultando em uma densidade praticamente constante. Esse mecanismo, em três estágios, representa uma mudança fundamental em relação aos mecanismos de plasticidade observados em materiais macroscópicos, nos quais predominam o movimento e a interação de uma rede de discordâncias pré-existentes.

As Figuras 4.7 (a) e (b) apresentam, respectivamente, a variação da densidade de discordâncias e a evolução da fração da estrutura cristalina do tipo CFC pela deformação para sistemas contendo  $N = 13.500$  e  $N = 32.000$  átomos.

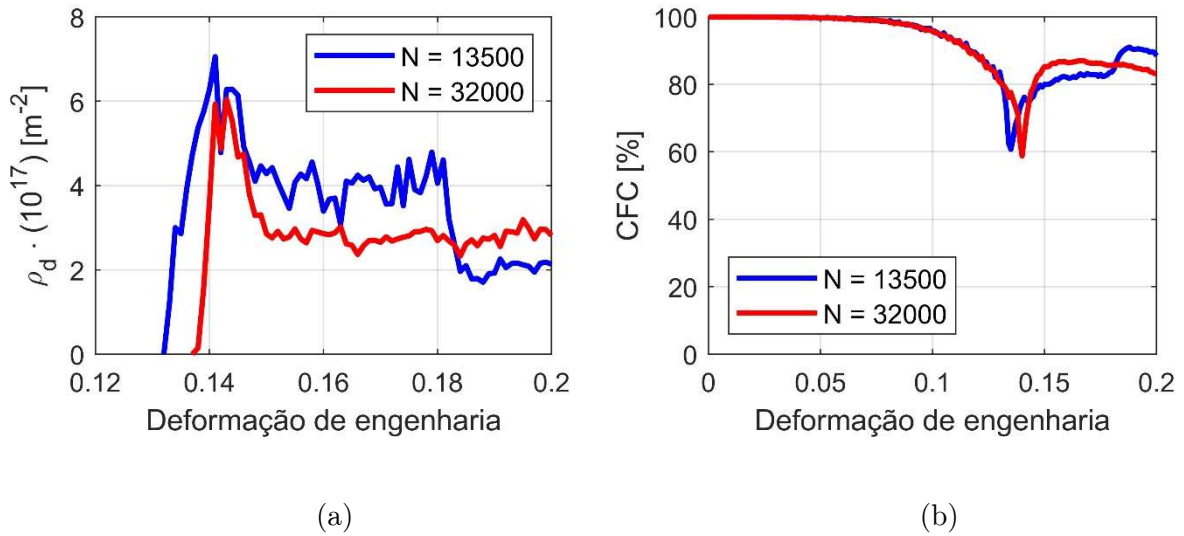


Figura 4.7 – Comparação entre os sistemas com  $N = 13.500$  e  $N = 32.000$ : (a) variação da densidade de discordâncias com a deformação e (b) evolução da estrutura cristalina CFC durante a deformação.

Para  $N = 13.500$ , a primeira discordância nucleia a uma deformação de  $\varepsilon = 13,2\%$  com a densidade aumentando até  $\varepsilon = 14,2\%$ . Nesse intervalo, a fração CFC reduz-se até aproximadamente 60%, principalmente em decorrência da formação de falhas de empilhamento associadas à nucleação e propagação de discordâncias parciais. O intervalo  $14,2\% \leq \varepsilon < 18,4\%$ , caracteriza o estágio de exaustão de discordâncias, marcado pela redução progressiva da densidade em função da interação e aniquilação entre discordâncias. Para  $\varepsilon \geq 18,4\%$ , observa-se o regime de esgotamento, no qual a densidade se estabiliza em aproximadamente  $2 \cdot 10^{17} \text{m}^{-2}$ , com  $d\rho_d/d\varepsilon \approx 0$ .

Para  $N = 32.000$ , a primeira discordância nucleia a  $\varepsilon = 13,7\%$ , com crescimento da densidade até  $\varepsilon = 14,1\%$ , acompanhado por redução da fração CFC para aproximadamente 58,14%. Embora a deformação de nucleação seja ligeiramente superior à observada para  $N = 13.500$ , essa diferença é compatível com a variabilidade estatística inerente a processos de nucleação homogênea em dinâmica molecular, os quais são sensíveis a flutuações térmicas. Observa-se que, para  $N = 32.000$ , o estágio de exaustão é mais curto, ocorrendo no intervalo  $14,2\% \leq \varepsilon < 15,0\%$ , e o regime de esgotamento é atingido com menor deformação quando comparado ao sistema menor.

Para  $\varepsilon \geq 15,0\%$ , a densidade de discordâncias estabiliza-se em aproximadamente  $3 \cdot 10^{17} \text{m}^{-2}$  com derivada próxima de zero. Esse comportamento pode ser atribuído ao maior volume cristalino disponível no sistema de 32.000 átomos, o que favorece a nucleação simultânea em múltiplas regiões e aumenta a probabilidade de interação e aniquilação entre discordâncias, acelerando a transição para o regime de saturação da densidade.

Ambas as amostras apresentaram mecanismos de rearranjo estrutural atômico parcial, com uma recuperação parcial da estrutura CFC à medida que a densidade de discordâncias diminuiu. Além disso, apresentaram próximas percentuais de estrutura CFC durante o regime de esgotamento de discordâncias ao longo da deformação.

No limite termodinâmico, em que  $N$  tende ao infinito (ou seja, em materiais macroscópicos), o início da plasticidade ocorre com deformações significativamente menores, tipicamente entre 0,2% e 0,4%, e as densidades de discordâncias são da ordem de  $10^{10}$  a  $10^{12} \text{m}^{-2}$  para materiais bem recozidos, ou de  $10^{14}$  a  $10^{15} \text{m}^{-2}$  para metais altamente encruados, conforme indicado por Hull e Bacon (2011). Em contraste, todas as densidades de discordâncias apresentadas na Figura 4.7 são várias ordens de grandeza superiores às observadas em materiais macroscópicos. Devido aos fenômenos de deformação associados às discordâncias, é evidente pela Figura 4.6 (b) que o limite termodinâmico para a tensão de escoamento não é satisfeito, em razão das dimensões nanométricas das amostras, que dificultam o movimento das discordâncias. Caso o comprimento da amostra fosse significativamente aumentado, a tensão de escoamento diminuiria proporcionalmente. No entanto, o custo computacional para realizar tais simulações via dinâmica molecular tornaria esse tipo de estudo inviável.

Além de determinar as tensões a partir da equação de virial, foi realizada uma análise exploratória utilizando a energia livre de Helmholtz, conforme equação (2.22). A Figura 4.8 apresenta o gráfico tensão deformação ao longo da simulação para diferentes tamanhos de caixa com 13.500 e 32.000 átomos, comparando os resultados

obtidos pela tensão de virial e pela energia livre de Helmholtz, desconsiderando a parcela do produto da entropia pela temperatura.

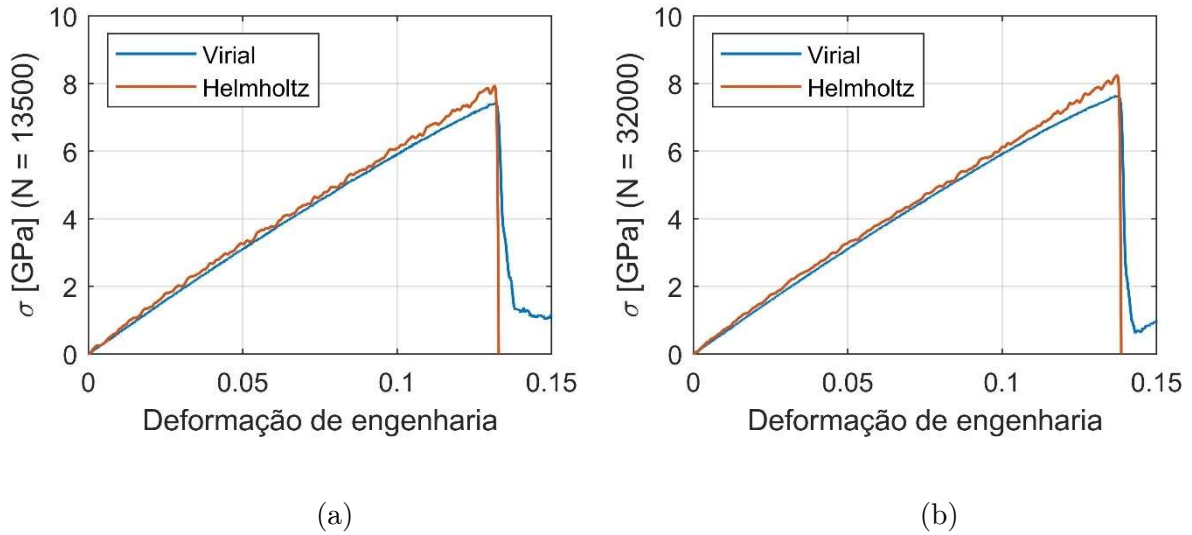


Figura 4.8 – Gráfico comparativo entre a tensão calculada pela energia de Helmholtz e tensão de virial para sistemas com número de átomos ( $N$ ) iguais a: (a) 13.500 e (b) 32.000.

Na Figura 4.8, observa-se, no regime elástico linear, que as curvas apresentam inclinações semelhantes, porém com um desvio sistemático crescente ao longo da deformação. Esse comportamento indica que a diferença entre os métodos não se restringe a um deslocamento constante, mas envolve uma contribuição adicional que varia com a deformação. Como a formulação da energia livre de Helmholtz utilizada considerou apenas a energia interna do sistema, é plausível associar parte desse desvio à ausência da contribuição entrópica. Durante a tração uniaxial, a expansão ao longo do eixo de carregamento tende a ampliar o espaço vibracional disponível nessa direção, favorecendo o aumento da entropia associada aos modos vibracionais longitudinais. O efeito combinado dessas variações pode manifestar-se como um desvio progressivo entre as curvas ao longo da deformação.

Entretanto, como a entropia não foi calculada explicitamente nas simulações, essa interpretação permanece qualitativa. Uma análise quantitativa exigiria a determinação

direta da contribuição entrópica ou a adoção de uma abordagem termodinâmica mais abrangente, o que não foi contemplado no escopo deste trabalho.

Ressalta-se que essa comparação possui caráter exploratório e está restrita ao regime elástico linear. Próximo ao limite de escoamento, observa-se um aumento mais pronunciado do desvio, coincidindo com o início da deformação plástica. Nessa região, o comportamento passa a ser governado por mecanismos dissipativos e processos fora do equilíbrio, o que evidencia uma limitação da aplicação direta da energia interna como aproximação da energia livre na determinação da tensão.

Em conclusão, a dinâmica molecular mostrou-se um método robusto para determinar e racionalizar propriedades elásticas de materiais, desde que o sistema possua dimensões suficientes e que a análise seja restrita ao regime elástico linear, em consonância com resultados já estabelecidos na literatura. Observou-se que  $E$ ,  $G$  e  $\nu$  convergem com números relativamente modestos de átomos, enquanto propriedades plásticas, como  $\sigma_y$  e grandezas derivadas (resiliência e tenacidade), permanecem fortemente influenciadas por efeitos de tamanho finito e não convergem dentro dos limites práticos da dinâmica molecular.

Adicionalmente, deve-se destacar que a caixa de simulação considerada não possuía defeitos cristalinos, o que contribuiu para o aumento da resistência mecânica. Nesse cenário, e em consonância com a hipótese inicial do trabalho, verificou-se que as propriedades elásticas como os módulos de elasticidade e cisalhamento e o coeficiente de Poisson mantêm consistência entre as escalas atômicas e macroscópica no regime elástico linear, podendo ser adequadamente determinadas por simulações moleculares.

## 4.2 DEPENDÊNCIA DO LIMITE DE ESCOAMENTO NA TAXA DE DEFORMAÇÃO

Com base nos resultados da seção 4.1, esta parte do trabalho investiga a dependência do limite de escoamento em relação à taxa de deformação do alumínio monocristalino, em temperaturas iguais a 300 K e 373 K. Embora essa relação já tenha sido amplamente estudada em materiais macroscópicos (ROSEN *et al.*, 1999; KASSNER & PEREZ-PRADO, 2000; GAMBIRASIO E RIZZI, 2016), sua análise em nanomateriais sob taxas extremas de deformação, de  $10^8 \text{ s}^{-1}$  a  $10^{13} \text{ s}^{-1}$ , permanece pouco explorada. Para isso, foram realizadas simulações de dinâmica molecular com o potencial EAM, considerando ensaios de tração uniaxial, a fim de investigar os efeitos das temperaturas e das taxas de deformação sobre o comportamento mecânico, com ênfase na evolução das discordâncias e pelas transformações das estruturas cristalinas.

Foram analisados o comportamento tensão-deformação, a densidade de discordâncias e a evolução da estrutura cristalina. Os resultados indicaram aumento da tensão de escoamento com o aumento da taxa de deformação e redução da tensão limite de escoamento com o aumento da temperatura. Para taxas acima de  $5 \cdot 10^{11} \text{ s}^{-1}$ , verificou-se o desenvolvimento de um estado triaxial de tensões, contribuindo para um comportamento mecânico anisotrópico.

Com base nos dados obtidos, ajustou-se uma versão modificada do modelo da lei de potência, Eq. (2.10), incorporando um termo constante para a tensão de escoamento em baixas taxas de deformação. Esse modelo representou de forma precisa a relação entre a tensão de escoamento e a taxa de deformação para as duas temperaturas, apresentando erros absolutos médios relativos inferiores a 2%. O valor do parâmetro ajustado mostrou concordância com a resistência teórica ideal de escoamento para monocristais livres de defeitos, o que reforça a capacidade preditiva das simulações atomísticas.

Os átomos foram dispostos em uma célula de simulação cúbica, conforme exposto na Figura 4.1, totalizando 32.000 átomos e aresta igual a 81 Å e as simulações foram conduzidas até uma deformação de engenharia de 50% no eixo  $x$ , valor que excede os limites típicos de deformação macroscópica, mas é compatível com a alta resistência mecânica característica dos nanomateriais (LI *et al.*, 2010). Foram aplicadas diferentes taxas de deformação, variando de  $10^8 \text{ s}^{-1}$  a  $10^{13} \text{ s}^{-1}$ , com valores intermediários de  $5 \cdot 10^8$ ,  $5 \cdot 10^9$ ,  $5 \cdot 10^{10}$ ,  $5 \cdot 10^{11}$  e  $5 \cdot 10^{12} \text{ s}^{-1}$ .

A Figura 4.9 ilustra as curvas tensão–deformação do alumínio cúbico nanocristalino sob diferentes taxas de deformação a 300 K, enquanto a Figura 4.10 apresenta o comportamento correspondente a 373 K. As Figuras 4.9(a) e 4.10(a) correspondem a simulações realizadas para taxas de deformação variando de  $10^8 \text{ s}^{-1}$  a  $10^{13} \text{ s}^{-1}$ , enquanto as Figuras 4.9(b) e 4.10(b) abrangem taxas intermediárias de  $5 \cdot 10^8 \text{ s}^{-1}$  a  $5 \cdot 10^{12} \text{ s}^{-1}$ . Conforme esperado, a tensão limite de escoamento apresenta clara dependência em relação à taxa de deformação e à temperatura. Taxas de deformação mais elevadas resultaram em aumento da resistência ao escoamento, em concordância com a sensibilidade à taxa de deformação observada em metais de estrutura CFC. Além disso, as tensões limite de escoamento foram, em geral, menores em 373 K quando comparado a 300 K, refletindo a redução da resistência mecânica característica de sistemas metálicos pelo aumento da temperatura.

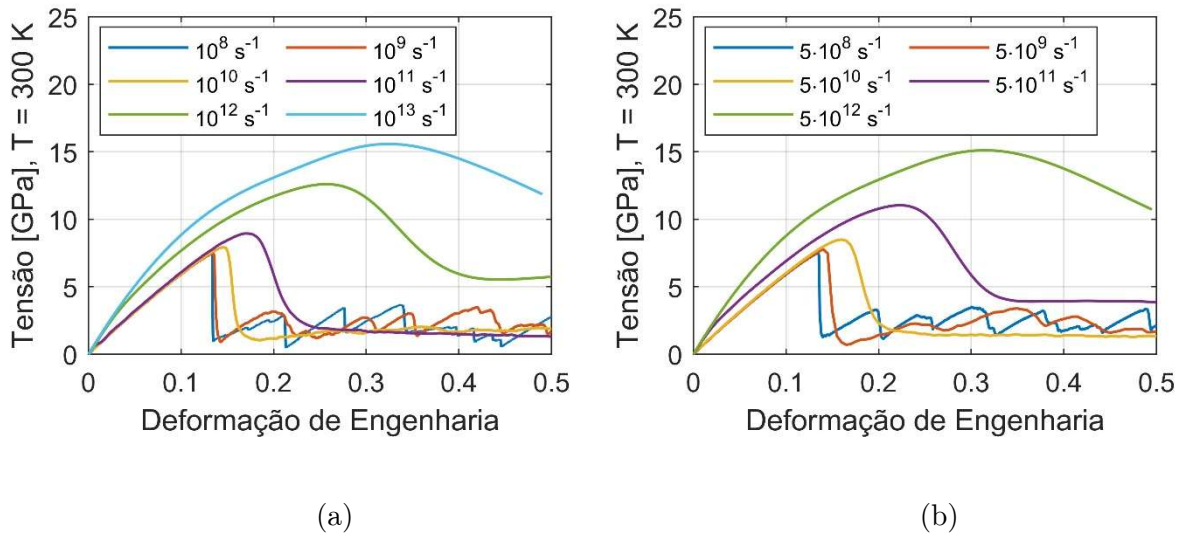


Figura 4.9 – Curva tensão – deformação para  $T = 300$  K em diferentes taxas de deformação: (a)  $10^8 \text{ s}^{-1} - 10^{13} \text{ s}^{-1}$  e (b):  $5 \cdot 10^8 \text{ s}^{-1}$  a  $5 \cdot 10^{12} \text{ s}^{-1}$ .

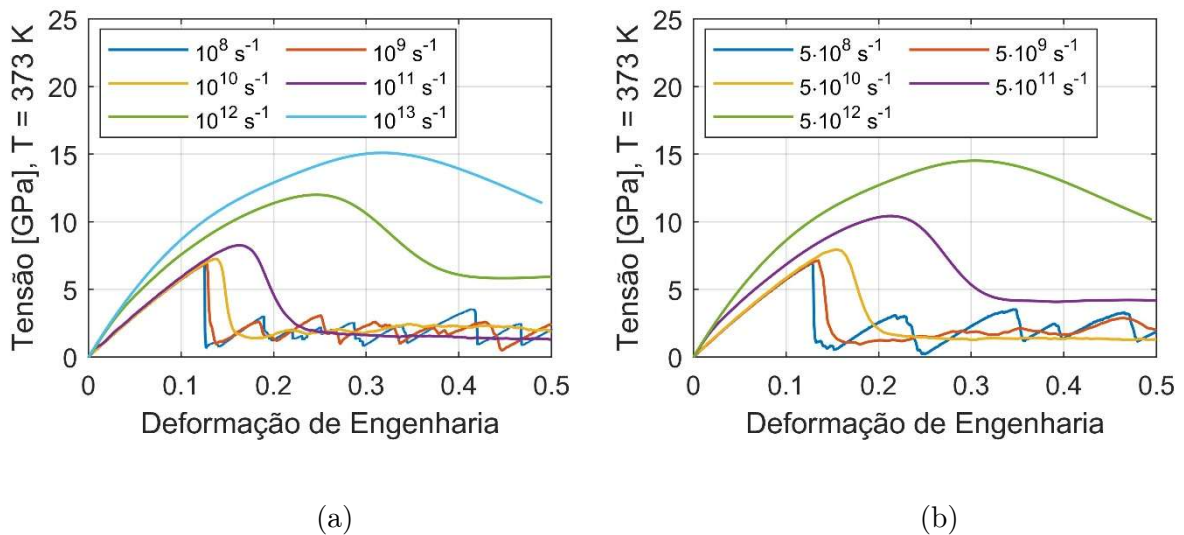


Figura 4.10 – Curva tensão – deformação para  $T = 373$  K em diferentes taxas de deformação: (a)  $10^8 \text{ s}^{-1} - 10^{13} \text{ s}^{-1}$  e (b):  $5 \cdot 10^8 \text{ s}^{-1}$  a  $5 \cdot 10^{12} \text{ s}^{-1}$ .

As Figuras 4.9 e 4.10 mostram que as curvas tensão–deformação apresentam comportamento linear bem definido para deformações de engenharia de até 17%, em taxas de deformação de  $10^8 \text{ s}^{-1}$  até  $10^{11} \text{ s}^{-1}$ , sem evidência de encruamento. As curvas atingem um ponto de tensão máxima, seguido de uma queda nos valores de tensão. Esse pico de tensão, no regime linear, corresponde ao limite de escoamento em nanomateriais e está associado ao início da nucleação de discordâncias. Além disso, o

pico ocorre em valores de deformação mais elevados à medida que a taxa de deformação aumenta.

Observa-se um aumento do ponto máximo de tensão com o aumento da taxa de deformação, em ambas as temperaturas analisadas. As curvas tensão–deformação também apresentam uma queda nos valores de tensão após o escoamento, comportamento semelhante ao relatado por Pastor-Abia *et al.* (2011). Essa queda torna-se mais suave para taxas de deformação superiores a  $5 \cdot 10^{11} \text{ s}^{-1}$ , tanto a 300 K quanto a 373 K.

Esse comportamento marca a transição para o regime de deformação plástica do nanocristal de alumínio, caracterizado por intensa atividade de discordâncias. Observa-se ainda que, para taxas de deformação inferiores a  $5 \cdot 10^{11} \text{ s}^{-1}$ , o ponto de escoamento aumenta de forma gradual, enquanto para taxas superiores a esse valor ocorre um aumento mais pronunciado do pico de tensão. A Figura 4.11 ilustra um instante do ensaio de tração, evidenciando diferentes tipos de discordâncias para a taxa de deformação de  $10^8 \text{ s}^{-1}$  a 300 K.

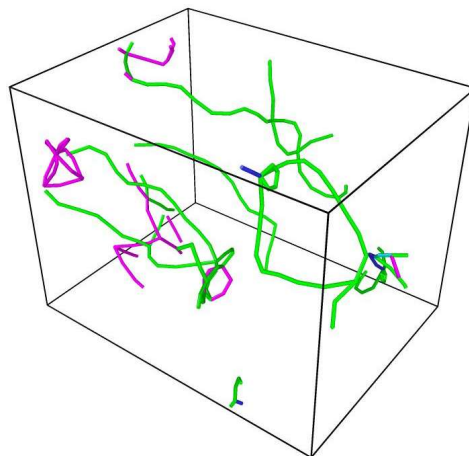


Figura 4.11 – Diferentes tipos de discordâncias para  $T = 300 \text{ K}$  a  $10^8 \text{ s}^{-1}$ . Os átomos foram omitidos para permitir a visualização das discordâncias. As cores indicam discordâncias perfeitas (azul), de Shockley (verde) e do tipo stair-rod (rosa).

A Figura 4.12 ilustra a densidade de discordâncias e a evolução da estrutura cristalina CFC para a taxa de deformação de  $10^8 \text{ s}^{-1}$ , tanto a 300 K quanto a 373 K, destacando os estágios iniciais de nucleação de defeitos em baixas taxas de deformação. As Figuras 4.14 a 4.18 apresentam a evolução da densidade de discordâncias e da estrutura cristalina CFC ao longo do ensaio para outras taxas de deformação, de  $10^9 \text{ s}^{-1}$  a  $10^{12} \text{ s}^{-1}$ , em ambas as temperaturas.

Observa-se que não houve nucleação de discordâncias a 300 K para taxas de deformação acima de  $5 \cdot 10^{11} \text{ s}^{-1}$  e, para taxas superiores a  $5 \cdot 10^{12} \text{ s}^{-1}$ , não ocorreu nucleação em nenhuma das temperaturas, onde a taxa de deformação é maior do que a velocidade de propagação de discordância no alumínio.

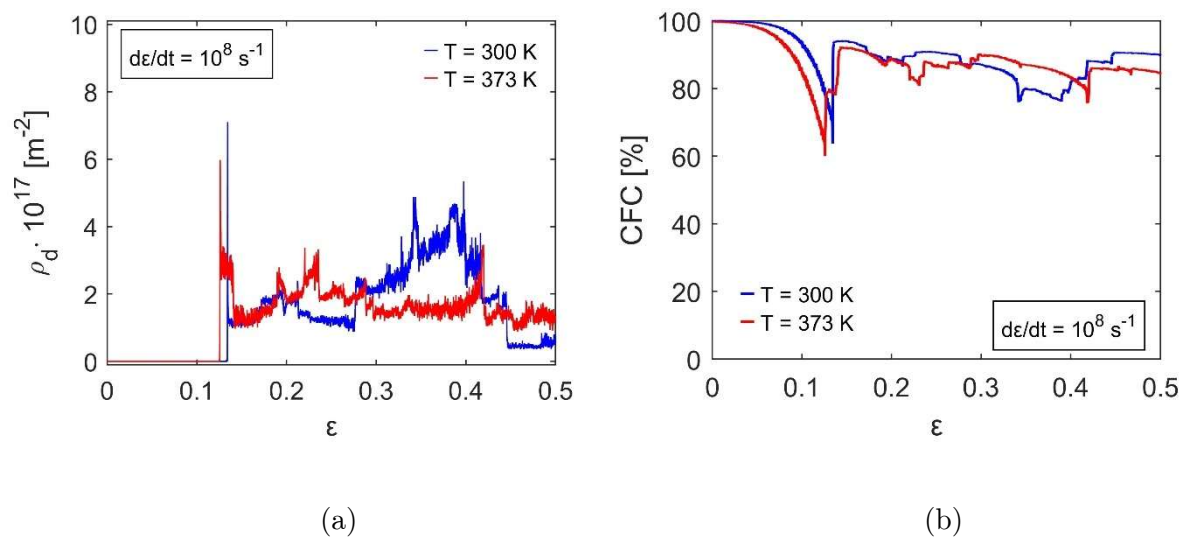


Figura 4.12 – Evolução da densidade de discordâncias (a) e da estrutura cristalina CFC (b) ao longo da deformação, sob taxa de deformação de  $10^8 \text{ s}^{-1}$ .

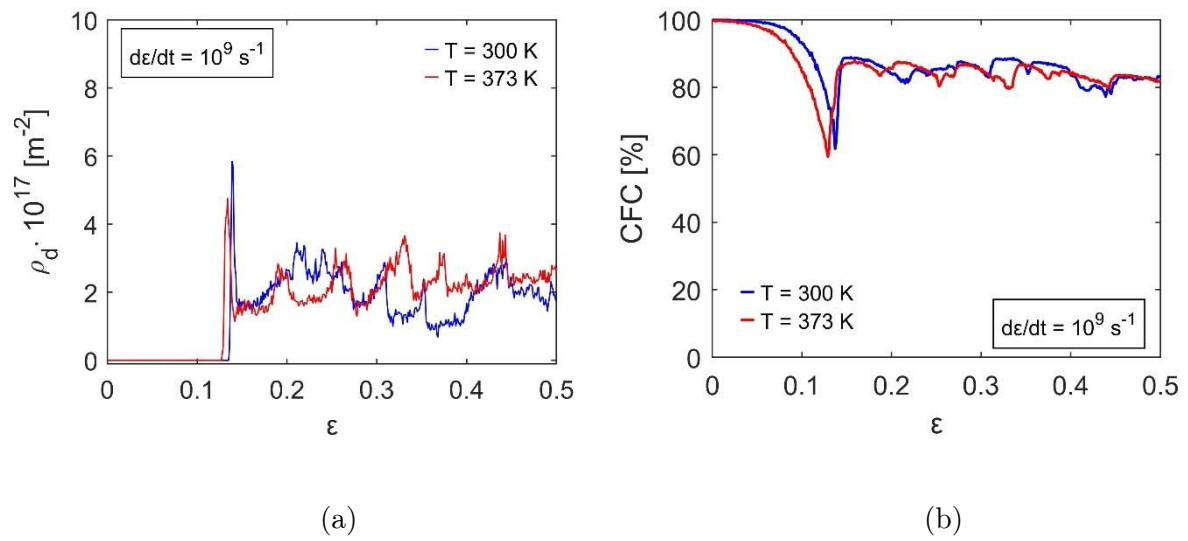


Figura 4.13 – Evolução da densidade de discordâncias (a) e da estrutura cristalina CFC (b) ao longo da deformação, sob taxa de deformação de  $10^9 \text{ s}^{-1}$ .

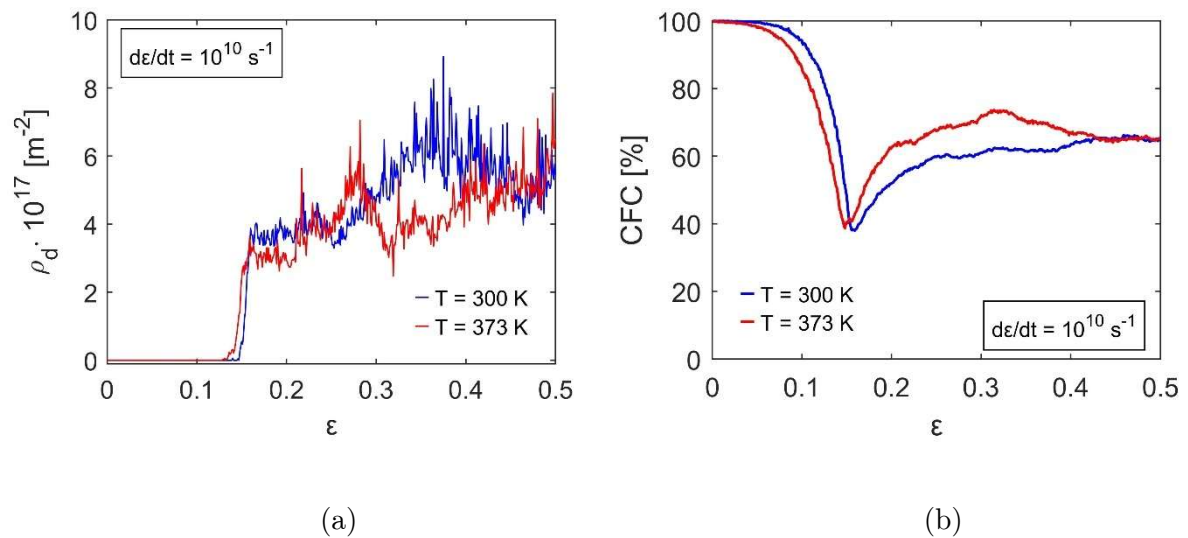


Figura 4.14 – Evolução da densidade de discordâncias (a) e da estrutura cristalina CFC (b) ao longo da deformação, sob taxa de deformação de  $10^{10} \text{ s}^{-1}$ .

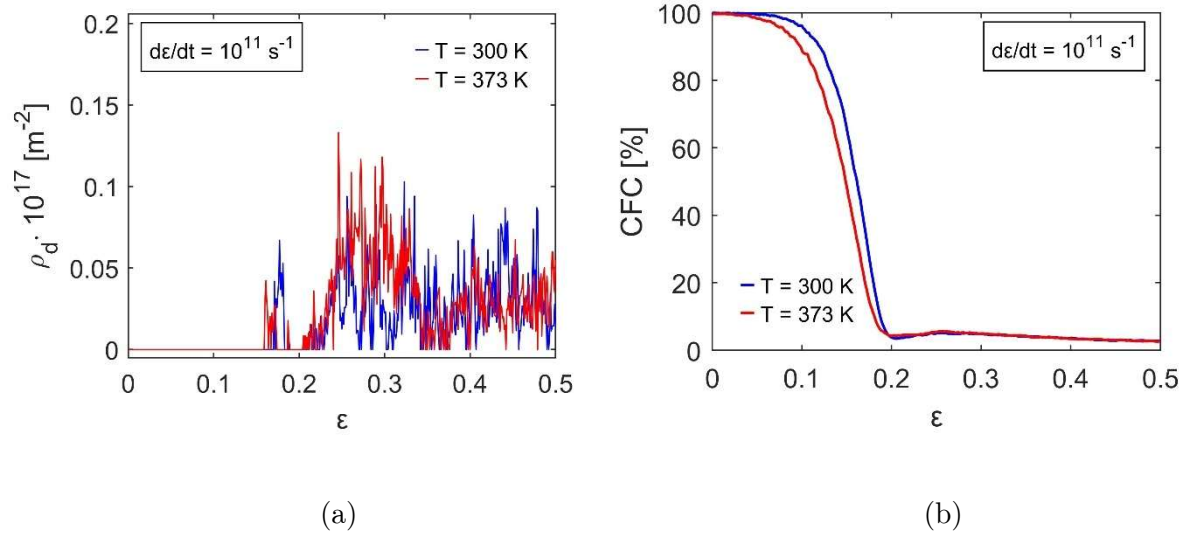


Figura 4.15 – Evolução da densidade de discordâncias (a) e da estrutura cristalina CFC (b) ao longo da deformação, sob taxa de deformação de  $10^{11} \text{ s}^{-1}$ .

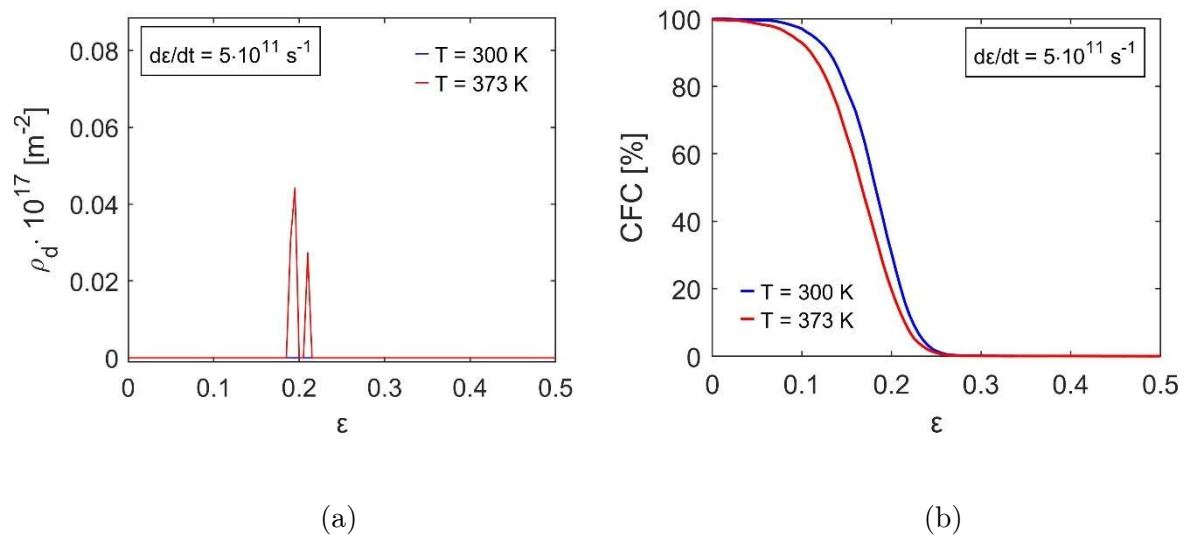


Figura 4.16 – Evolução da densidade de discordâncias (a) e da estrutura cristalina CFC (b) ao longo da deformação, sob taxa de deformação de  $5 \cdot 10^{11} \text{ s}^{-1}$ .

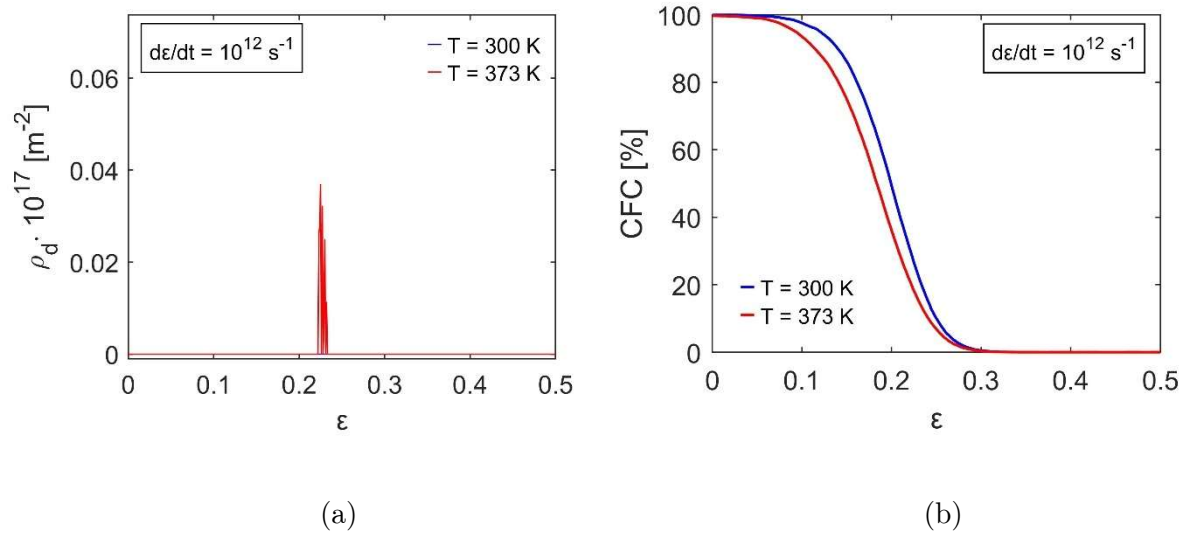


Figura 4.17 – Evolução da densidade de discordâncias (a) e da estrutura cristalina CFC (b) ao longo da deformação, sob taxa de deformação de  $10^{12} \text{ s}^{-1}$ .

Conforme ilustrado nas Figuras 4.12 a 4.17, verifica-se que, para uma mesma taxa de deformação, a nucleação de discordâncias e a alteração inicial da estrutura cristalina CFC ocorrem em valores menores de deformação a 373 K quando comparados a 300 K. Ademais, como evidenciado nas Figuras 4.9 e 4.10, o aumento da taxa de deformação está associado a maior resistência mecânica. Essa tendência é confirmada quantitativamente na Tabela 4.3 a qual apresenta os valores de deformação correspondentes ao início da nucleação das discordâncias, incluindo discordâncias e modificações na estrutura cristalina, em cada condição analisada. Esses pontos de nucleação caracterizam o início do processo de escoamento no nanocristal.

Tabela 4.3 – Valores de deformação em que há nucleação das discordâncias ( $\varepsilon_0$ ) nas temperaturas 300 K e 373 K para taxas de deformação de  $10^8 \text{ s}^{-1}$  a  $10^{12} \text{ s}^{-1}$ .

$d\varepsilon/dt \text{ [s}^{-1}\text{]}$	$\varepsilon_0 (T = 300 \text{ K})$	$\varepsilon_0 (T = 373 \text{ K})$
$10^8$	0,133	0,125
$5 \cdot 10^8$	0,135	0,128
$10^9$	0,135	0,127
$5 \cdot 10^9$	0,140	0,135
$10^{10}$	0,148	0,141
$5 \cdot 10^{10}$	0,160	0,155
$10^{11}$	0,171	0,161
$5 \cdot 10^{11}$	-	0,195
$10^{12}$	-	0,223

Conforme observado nas curvas de tensão–deformação (Figuras 4.9 e 4.10) e na Tabela 4.3, a deformação na qual ocorre o escoamento aumenta progressivamente desde a taxa de deformação de  $10^8 \text{ s}^{-1}$  até  $5 \cdot 10^{11} \text{ s}^{-1}$ . É importante destacar que a densidade de discordâncias diminui à medida que a taxa de deformação aumenta, para ambas as temperaturas, conforme ilustrado e detalhado nas Figuras 4.12(a) a 4.17(a).

A análise estrutural também revelou uma redução na fração de estrutura CFC e o surgimento de outros arranjos cristalinos durante a deformação, conforme exposto nas Figuras 4.12(b) a 4.17(b). Para taxas de deformação mais baixas, observa-se reorganização parcial da estrutura CFC em ambas as temperaturas, indicando a capacidade do sistema de preservar sua cristalinidade inicial sob condições de carregamento menos severas. Em taxas de deformação intermediárias, observa-se apenas uma pequena reorganização da estrutura CFC. Para taxas mais elevadas, não se observa reorganização estrutural, mas sim uma transformação contínua para configurações cristalinas alternativas durante a deformação. Notadamente, para taxas de deformação iguais ou superiores a  $5 \cdot 10^{11} \text{ s}^{-1}$ , a fração da estrutura cristalina CFC

atinge zero a 50% de deformação. Em contrapartida, taxas de deformação abaixo desse limite ainda apresentam uma fração remanescente de estrutura CFC, que aumenta à medida que a taxa de deformação diminui. A Figura 4.18 apresenta a estrutura cristalina remanescente no término da simulação, em ambas as temperaturas sob diferentes taxas de deformação, considerando uma deformação de engenharia de 50%, complementando as informações das Figuras 4.12 (b) a 4.17 (b) comparando as diferentes estruturas cristalinas em função das taxas de deformação e das temperaturas.

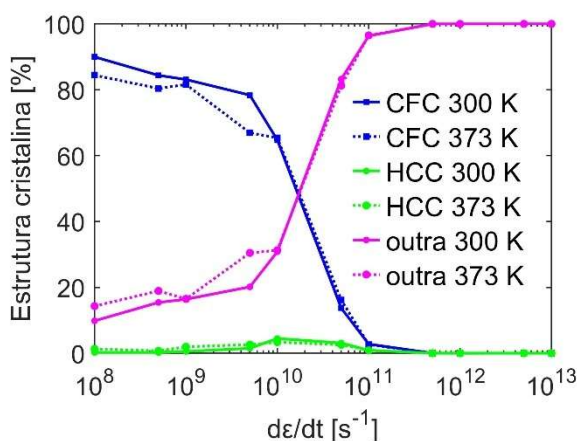


Figura 4.18 – Percentual das diferentes estruturas cristalinas em ambas as temperaturas ao término do ensaio, em função da taxa de deformação.

A curva observada na Figura 4.18 está em conformidade com os resultados reportados por Chen e Wu (2021) para uma liga à base de níquel submetida a carregamento de choque. No presente estudo, o alumínio puro não apresentou nenhuma fase CCC durante a deformação, o que está de acordo com a estabilidade de sua estrutura cristalina CFC na ausência de elementos de liga. É importante destacar que a curva identificada como “outra” apresenta um comportamento semelhante à resposta CCC descrita por Chen e Wu (2021). Ademais, os padrões de evolução das estruturas CFC e HCC neste estudo estão intimamente alinhados aos reportados por Chen e Wu (2021), reforçando a consistência das transições estruturais observadas.

A Figura 4.19 apresenta as tensões principais nas direções  $x$ ,  $y$  e  $z$  no início da nucleação de discordâncias, conforme indicado na Tabela 4.3 para cada taxa de deformação e temperatura.

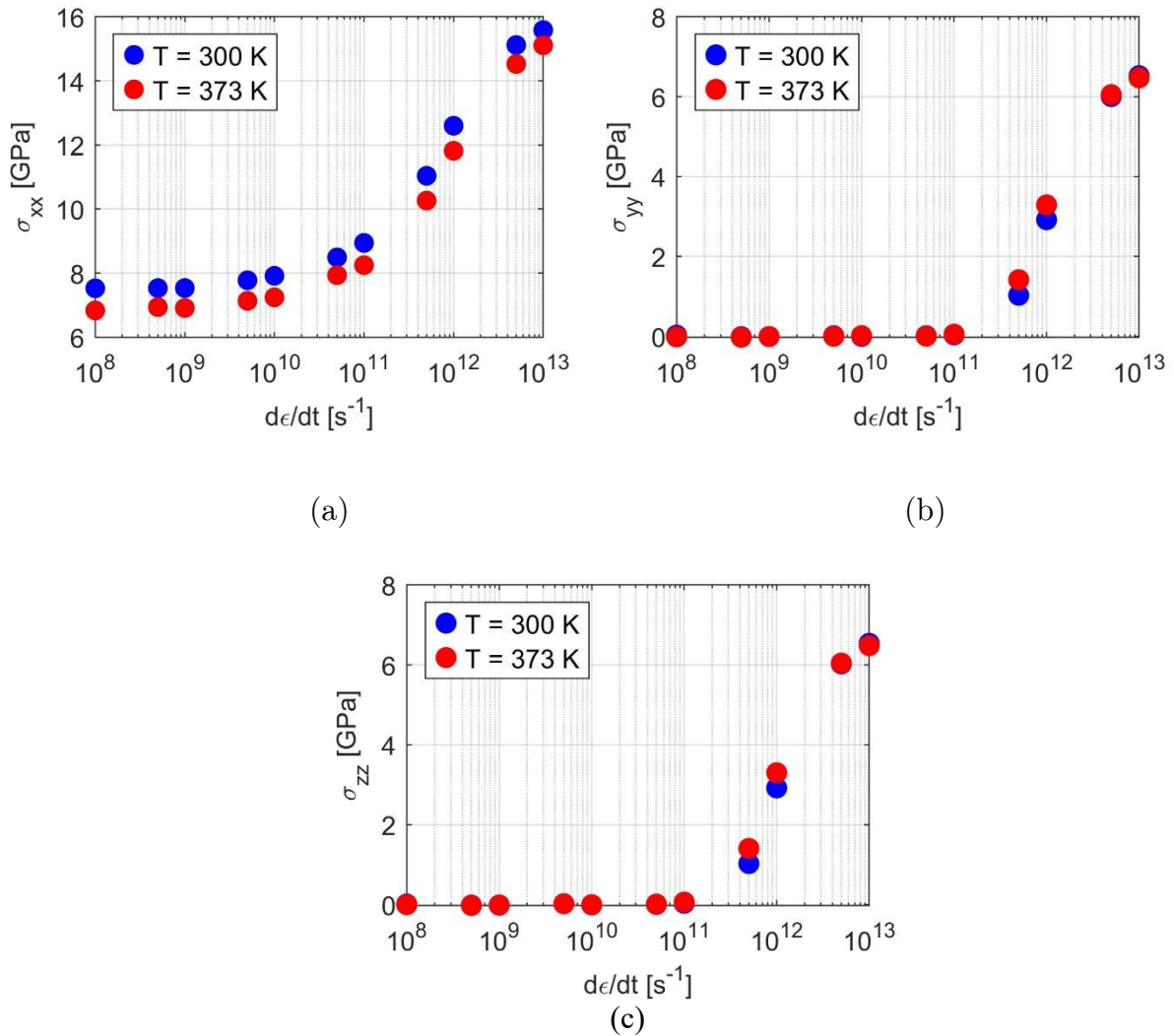


Figura 4.19 – Componentes das tensões principais no instante da nucleação das discordâncias em função da taxa de deformação: (a)  $\sigma_{xx}$ , (b)  $\sigma_{yy}$  e (c)  $\sigma_{zz}$ .

A partir da Figura 4.19(a), observa-se um aumento contínuo da tensão ao longo da direção  $x$  com o aumento da taxa de deformação, sendo os maiores níveis de tensão registrados a 300 K. Além disso, as Figuras 4.19(b) e 4.19(c) mostram que, para taxas de deformação iguais ou superiores a  $5 \cdot 10^{11} s^{-1}$ , desenvolve-se um estado triaxial de

tensões nas direções  $y$  e  $z$ , resultando em comportamento mecânico anisotrópico. Vale destacar que os valores de tensão são muito semelhantes em ambas as temperaturas.

Com o objetivo de combinar os efeitos das tensões nas direções  $y$  e  $z$ , a Figura 4.20 apresenta a tensão de von Mises ( $\sigma_{VM}$ ) utilizada para correlacionar a tensão de escoamento com a taxa de deformação no intervalo de  $10^8 \text{ s}^{-1}$  a  $5 \cdot 10^{11} \text{ s}^{-1}$ . O limite superior de  $5 \cdot 10^{11} \text{ s}^{-1}$  foi adotado por corresponder à taxa inicial de deformação na qual se verifica o surgimento de um estado triaxial de tensões. Além disso, são considerados dois modelos fundamentados na lei de potência: (i) o modelo macroscópico,  $\sigma_y = \kappa(\dot{\epsilon})^n$ , empregado para descrever sensibilidade à taxa de deformação, e (ii) o modelo proposto neste trabalho,  $\sigma_y = \kappa(\dot{\epsilon})^n + \sigma_0$ , que adiciona um termo representativo da resistência intrínseca ao escoamento.

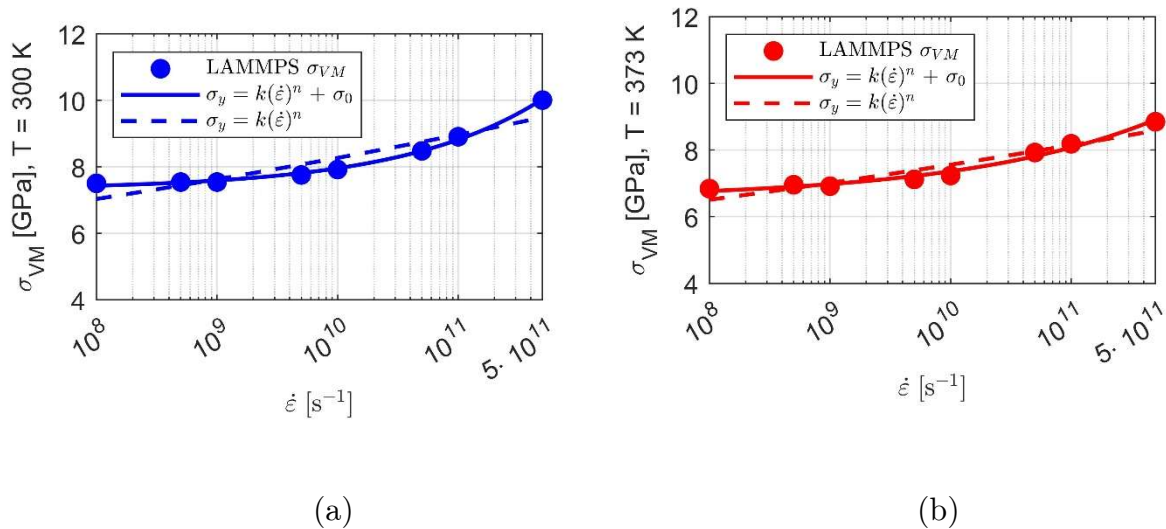


Figura 4.20 – Equação proposta para o limite de escoamento para taxas de deformação de  $10^8 \text{ s}^{-1}$  a  $5 \cdot 10^{11} \text{ s}^{-1}$  nas temperaturas: (a) 300 K; (b) 373 K.

O modelo macroscópico reproduz a tendência crescente da tensão com a taxa de deformação, porém apresenta limitações na descrição quantitativa do comportamento nas menores taxas investigadas. O ajuste do modelo  $\sigma_y = k(\dot{\epsilon})^n$ , resultou em um desvio quadrático médio (RMSD) de 0,32. Além disso, esse modelo não captura

satisfatoriamente os níveis de tensão de escoamento observados nas menores taxas de deformação, subestimando os valores obtidos nas simulações.

Os valores de tensão de escoamento obtidos nesse estudo, a 300 K, para taxas de deformação de  $10^8 \text{ s}^{-1}$ ,  $10^9 \text{ s}^{-1}$  e  $10^{10} \text{ s}^{-1}$  foram, respectivamente, 7,50 GPa, 7,54 GPa e 7,92 GPa. Esses resultados estão muito próximos dos relatados por Li *et al.* (2020) para alumínio monocristalino, que reportaram tensões de escoamento de 7,51 GPa, 7,59 GPa e 8,02 GPa para as mesmas taxas de deformação. Li *et al.* (2020) utilizaram uma célula de simulação de  $40 \times 20 \times 20$  unidades de rede, enquanto o presente estudo utilizou uma célula cúbica com dimensões de  $20 \times 20 \times 20$  unidades de rede. As diferenças relativas em relação a Li *et al.* (2020) foram de 0,06%, 0,61% e 1,24%, respectivamente. Essas pequenas variações são atribuídas principalmente à diferença no tamanho da célula de simulação e confirmam que a metodologia adotada aqui é consistente com trabalhos anteriores.

A 373 K, os valores de tensão de escoamento obtidos para as mesmas taxas de deformação foram 6,84 GPa, 6,92 GPa e 7,24 GPa, respectivamente. Comparando-se com os valores reportados por Li *et al.* (2020) a 400 K, que foram 6,64 GPa, 6,75 GPa e 7,14 GPa, as diferenças relativas foram de 3,06 %, 2,48 % e 1,37 %, respectivamente. Apesar das pequenas diferenças de temperatura e do tamanho da célula de simulação, os resultados mostram boa concordância com a literatura, reforçando ainda mais a confiabilidade da abordagem utilizada neste trabalho.

A curva proposta segue o modelo da Eq. (2.10) com a adição de uma constante, ou seja:

$$\sigma_y = \kappa(\dot{\epsilon})^n + \sigma_0 \quad (4.1)$$

O estado triaxial de tensão em taxas superiores a  $5 \cdot 10^{11} \text{s}^{-1}$ , bem como a redução na fração da estrutura cristalina CFC e na densidade de discordâncias, levam à perda de validade da curva proposta.

A Tabela 4.4 apresenta os valores dos coeficientes ( $\kappa$ ,  $n$  e  $\sigma_0$ ) para a equação proposta em ambas as temperaturas. O desvio quadrático médio da curva ajustada foi de 0,05 para 300 K e 0,09 para 373 K, enquanto o erro absoluto médio relativo foi de 0,53 % para 300 K e 1,17 % para 373 K, indicando que as curvas propostas para ambas as temperaturas apresentam boa concordância com os dados obtidos nas simulações do LAMMPS.

Tabela 4.4 – Coeficientes da equação proposta para o limite de escoamento em ambas as temperaturas

Coeficientes	300 K	373 K
$\kappa$ ( $10^{-4}$ ) [GPa]	1.320	1.172
$n$ [-]	0.368	0.268
$\sigma_0$ [GPa]	7.316	6.530

O parâmetro ajustado  $\sigma_0$  obtido a partir da Eq. proposta (4.1) deve ser interpretado como um parâmetro efetivo do modelo ajustado, representativo da resistência ao escoamento extrapolada dentro da janela de taxas acessível às simulações de dinâmica molecular. Embora seu valor seja numericamente próximo da tensão teórica ideal frequentemente estimada como  $E/10$  para monocristais livres de defeitos, onde  $E$  é o módulo de Young, conforme reportado por Courtney (2000), essa associação deve ser vista como qualitativa, uma vez que o ajuste foi realizado em um intervalo restrito de altas taxas de deformação.

O aumento da temperatura de 300 K para 373 K resulta na redução dos três parâmetros de ajuste do modelo de lei de potência. O coeficiente  $K$ , que quantifica a

magnitude do encruamento por taxa de deformação, diminui de  $1,320 \cdot 10^{-4}$  para  $1,172 \cdot 10^{-4}$  GPa, indicando que o efeito de reforço devido à taxa de deformação torna-se menos significativo em temperaturas elevadas. De forma similar, o expoente de sensibilidade à taxa de deformação  $n$  diminui de 0,368 para 0,268, sugerindo uma influência reduzida da taxa de deformação sobre a tensão de escoamento do material. Esse comportamento é consistente com mecanismos de deformação termicamente ativados, que se tornam mais proeminentes a temperaturas mais altas. Adicionalmente, a tensão teórica de escoamento em taxas de deformação muito baixas ( $\sigma_0$ ) reduz-se de 7,316 GPa para 6,530 GPa, refletindo o amolecimento geral do material com o aumento da temperatura.

#### 4.3 LIMITAÇÃO DOS RESULTADOS PARCIAIS

Os resultados obtidos até o momento fundamentam-se em uma abordagem teórica consistente e apresentam boa concordância com os dados reportados na literatura (COURTNEY, 2000; LI *et al.*, 2020). Contudo, é essencial discutir as limitações dos resultados sob alguns aspectos importantes.

O limite de escoamento apresentou boa concordância com os valores relatados na literatura para 300 K e 373 K (LI *et al.*, 2020). Contudo, novas análises são necessárias para avaliar o impacto do aumento da temperatura sobre suas propriedades e investigar o efeito inverso da resistência mecânica com o aumento da temperatura, conforme reportado em Dowding e Schuh (2024).

Outra limitação decorre da escolha de simulações conduzidas em alumínio puro monocristalino, a qual permite isolar mecanismos fundamentais associados à nucleação e à mobilidade de discordâncias, sem a influência de solutos, precipitados ou variações locais na energia de falha de empilhamento. Em ligas metálicas, a presença de elementos de liga pode alterar significativamente os mecanismos de escoamento, por meio da

interação entre discordâncias e solutos, da modificação da energia de falha de empilhamento e do surgimento de mecanismos adicionais de endurecimento.

No que se refere à caracterização microestrutural, a análise concentrou-se na identificação de discordâncias, na densidade de defeitos e na evolução da estrutura cristalina por meio de critérios amplamente empregados em dinâmica molecular, como centrosimetria e o algoritmo DXA. Embora a análise explícita de falhas de empilhamento possa fornecer informações adicionais sobre a deformação plástica em materiais CFC, tal investigação não foi considerada essencial para os objetivos do presente trabalho, uma vez que os mecanismos dominantes associados ao limite de escoamento foram adequadamente capturados pela nucleação e evolução inicial das discordâncias e pelas transformações estruturais observadas nas estruturas cristalinas.

Em síntese, as limitações aqui discutidas não comprometem as conclusões centrais do trabalho, mas delimitam seu escopo. Os resultados apresentados devem ser interpretados como válidos para alumínio monocristalino puro, em regimes de alta taxa de deformação acessíveis à dinâmica molecular, servindo como base para investigações futuras envolvendo ligas metálicas, contornos de grão e mecanismos adicionais de endurecimento.

## 5 CONCLUSÃO

Este trabalho teve como foco investigar a obtenção das propriedades mecânicas do alumínio e sua dependência em função do tamanho do sistema, taxa de deformação e temperatura a partir de simulações computacionais baseadas em dinâmica molecular. A escolha do alumínio permitiu a comparação direta dos resultados numéricos com dados experimentais amplamente disponíveis na literatura, enquanto a utilização do potencial EAM mostrou-se adequada, sendo essa escolha baseada em diversos outros estudos que utilizaram o mesmo potencial e demonstraram que esse potencial conduz a resultados confiáveis pela comunidade científica.

Com o intuito de delimitar o escopo de validade dos resultados obtidos, as conclusões deste estudo foram organizadas em duas categorias: conclusões sólidas, associadas ao regime elástico e ao comportamento próximo do equilíbrio termodinâmico, e conclusões condicionais, relacionadas ao escoamento plástico em altas taxas de deformação, típico de simulações de dinâmica molecular em escala nanométrica. Por fim, é discutido as perspectivas de continuidade da pesquisa.

Além da contribuição científica apresentada, a determinação confiável de propriedades mecânicas por meio da dinâmica molecular permite alimentar modelos constitutivos empregados em ferramentas de engenharia computacional amplamente utilizadas na análise estrutural de componentes críticos, como softwares baseados no método dos elementos finitos, a exemplo do ANSYS. A integração entre resultados atomísticos e modelos contínuos possibilita o desenvolvimento de abordagens multiescala mais realistas, reduzindo incertezas em simulações de estruturas submetidas a carregamentos extremos.

Adicionalmente, embora a dinâmica molecular envolva elevado custo computacional, esse custo é significativamente inferior ao associado à realização de ensaios balísticos e testes em altas taxas de deformação, que demandam infraestrutura

especializada e elevado investimento financeiro. Nesse sentido, a modelagem computacional constitui ferramenta estratégica para redução de custos, otimização do ciclo de desenvolvimento de materiais e antecipação do comportamento mecânico em aplicações de interesse da defesa.

## 5.1 CONCLUSÕES SÓLIDAS: REGIME ELÁSTICO

Um dos principais resultados consolidados deste trabalho foi a demonstração da convergência da média das propriedades mecânicas elásticas do alumínio, bem como a diminuição da dispersão estatística dessas propriedades, à medida que o número de átomos do sistema é aumentado, evidenciando a convergência do limite termodinâmico no regime elástico linear. Essa convergência permitiu a determinação dos módulos de elasticidade e cisalhamento e do coeficiente de Poisson a partir de sistemas nanoscópicos, reforçando a capacidade da dinâmica molecular em reproduzir propriedades macroscópicas no regime de deformação elástico linear.

Os resultados obtidos neste regime mostraram boa concordância com valores experimentais e dados reportados na literatura, confirmando a adequação do potencial EAM e da metodologia de simulação empregada. Nesse contexto, a elasticidade linear pode ser determinada pela termodinâmica estatística, uma vez que a resposta mecânica permanece associada a pequenas perturbações em torno do equilíbrio termodinâmico. Assim, os resultados elásticos apresentados neste trabalho constituem conclusões sólidas, com validade física bem estabelecida.

## 5.2 CONCLUSÕES CONDICIONAIS: ESCOAMENTO EM ALTAS TAXAS DE DEFORMAÇÃO

No que se refere ao comportamento plástico, este estudo investigou a dependência da tensão limite de escoamento em função da taxa de deformação, no intervalo de  $10^8$   $s^{-1}$  a  $10^{13}$   $s^{-1}$ , e da temperatura, para um material de alumínio nanocristalino submetido à tração uniaxial. Os resultados mostraram um aumento sistemático da tensão de escoamento com o aumento da taxa de deformação e uma redução consistente dessa tensão com o aumento da temperatura, em concordância qualitativa com tendências reportadas na literatura.

As curvas tensão–deformação evidenciaram um regime elástico bem definido, seguido do escoamento associado à nucleação de discordâncias, com quedas de tensão características do escoamento plástico em escala nanométrica para taxas de deformação entre  $10^8$   $s^{-1}$  e  $10^{11}$   $s^{-1}$ . A análise microestrutural corroborou essa interpretação, mostrando correlação direta entre o surgimento de defeitos cristalinos e o início da plasticidade. Entretanto, para taxas de deformação iguais ou superiores a  $5 \cdot 10^{11}$   $s^{-1}$ , observou-se o desenvolvimento de um estado de triaxialidade de tensões, com componentes mensuráveis nas direções  $y$  e  $z$ , indicando um regime fora do equilíbrio. Nesse intervalo, o comportamento mecânico passa a ser influenciado por efeitos inerciais, limitações do controle termodinâmico e pela própria natureza extrema das taxas de deformação, o que impõe restrições à extrapolação direta desses resultados para condições experimentais convencionais.

A relação entre a tensão de escoamento e a taxa de deformação foi modelada pela Eq. (4.1), com parâmetros ajustados que apresentaram excelente concordância com os dados de simulação, para taxas de deformação entre  $10^8$   $s^{-1}$  e  $5 \cdot 10^{11}$   $s^{-1}$  a 300 K e 373 K. O desvio quadrático médio (0,05 GPa a 300 K e 0,09 GPa a 373 K) e o erro absoluto médio relativo inferior a 2 % indicam a robustez do modelo proposto. O parâmetro  $\sigma_0$ ,

que representa a tensão de escoamento em taxas de deformação muito baixas, foi de 7,31 GPa a 300 K. Esse valor apresenta boa concordância com a resistência teórica ideal ao escoamento esperada para monocristais CFC livres de defeitos submetidos à tração normal, aproximadamente  $E/10$ , conforme reportado na literatura. Ainda assim, esse resultado deve ser interpretado como uma extrapolação fundamentada.

### 5.3 PERSPECTIVAS DE CONTINUIDADE

A abordagem empregada neste trabalho pode ser estendida à investigação de outros metais de estrutura CFC, como cobre e níquel, permitindo análises comparativas com os resultados obtidos para o alumínio e favorecendo o desenvolvimento de modelos para diferentes materiais. Outra linha de continuidade envolve a análise de ligas metálicas, na qual a escolha criteriosa do campo de força interatômico será um aspecto essencial. Nesse mesmo contexto, destaca-se o crescente interesse da comunidade científica por estudos de dinâmica molecular aplicados ao grafeno e a materiais compósitos, ampliando as possibilidades de aplicação da metodologia utilizada neste estudo.

Uma outra perspectiva de aprofundamento consiste na análise da propagação de nanotrincas por meio de simulações em dinâmica molecular, com os conceitos da mecânica da fratura para a investigação da tenacidade à fratura, utilizando parâmetros como o CTOD (*crack tip opening displacement*), a Integral J e o fator de intensidade de tensões  $K_{Ic}$ .

Além disso, este trabalho pode servir como base para a investigação de ligas e de materiais com contornos de grão, ampliando a metodologia a configurações mais complexas. Esse avanço irá auxiliar no projeto de componentes nanoestruturados de alto desempenho, especialmente em condições críticas de taxa de deformação e temperatura.

No contexto estratégico nacional, o domínio de técnicas de simulação atômica e modelagem multiescala representa um ativo tecnológico relevante para a soberania científica e industrial. A capacidade de estimar propriedades mecânicas a partir da escala atômica contribui para o projeto de blindagens leves, estruturas aeronáuticas, componentes submetidos a impacto e sistemas sujeitos a carregamentos dinâmicos severos. Ao reduzir a dependência exclusiva de ensaios experimentais onerosos, especialmente testes balísticos, a abordagem computacional permite acelerar o desenvolvimento de materiais, mitigar riscos técnicos e otimizar recursos financeiros. Dessa forma, a metodologia empregada e os resultados obtidos nesta pesquisa inserem-se em uma perspectiva estratégica, alinhada às atuais demandas tecnológicas das Forças Armadas.

## 6 REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- ALAVI, A.; MIRABBASZADEH, K.; NAYEBI, P.; ZAMINPAYMA, E. Molecular dynamics simulation of mechanical properties of Ni–Al nanowires. **Computational Materials Science**, v. 50, p. 10–14, 2010. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.commatsci.2010.06.037>.
- ALDER, B. J.; WAINWRIGHT, T. E. Studies in molecular dynamics. I. General method. **Journal of Chemical Physics**, v. 31, n. 2, p. 459-466, 1959. DOI: <https://doi.org/10.1063/1.1730376>.
- ANDERSON, T. **Fracture Mechanics: Fundamentals and Applications**. CRC Press 4th edition, 2017.
- ASM INTERNATIONAL. **Metals Handbook: Properties and Selection: Nonferrous Alloys and Special-Purpose Materials**. 10<sup>a</sup> ed., vol. 2, ASM International, 1990.
- BARTOK, A. P., KERMODE, J. R.; BERNSTEIN, N.; CSANYI, G. Machine learning a general-purpose interatomic potential for silicon. **Phys. Rev. X** 8, 041048, 2018. DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevX.8.041048>.
- BECKER, C.A.; TAVAZZA, F.; TRAUTT Z.T., BUARQUE DE MACEDO, R.A., Considerations for choosing and using force fields and interatomic potentials in materials science and engineering, **Curr. Opin. Solid State Mater. Sci.** 17 2013 277–283. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.cossms.2013.10.001>.
- BEER, F. P.; JOHNSTON, E. R.; EISENBERG, E. R. **Mecânica dos materiais**. 7<sup>a</sup> ed. McGraw Hill. 2015.
- BRASIL. Casa Civil. Inovação para a Indústria da Defesa, 2024. Disponível em: <https://www.gov.br/casacivil/pt-br/novopac/inovacao-para-a-industria-da-defesa/inovacao-para-a-industria-da-defesa>
- BRASIL. Marinha do Brasil. (2020). Programa Estratégico da Marinha (PEM 2040). Disponível em: <https://www.marinha.mil.br/pem2040>.
- BRENNER, D. W. Relationship between the embedded-atom method and Tersoff potentials. **Phys. Rev. Lett.**, 63(9):1022, 1989. DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.63.1022>.
- BUEHLER, M. J. **Atomistic modeling of materials failure**. Springer Science Business Media, 2008. DOI: <https://doi.org/10.1007/978-0-387-76426>
- CALLEN, HERBERT B. **Thermodynamics and an Introduction to Thermostatistics**. 2nd ed. New York: Wiley, 1985.
- CALLISTER, W. D.; RETHWISCH, D. G. **Ciência e Engenharia de Materiais: Uma Introdução**. 10. ed. Rio de Janeiro: LTC, 2020.
- CAO, L.; CHEN B.; WAN J.; SHEN J.; KONDOH K.; LI S., LI, J. Simultaneously improving strength and ductility of carbon nanotube (CNT)-reinforced aluminum matrix composites by embedding CNTs

inside matrix grains, **Compos. Part B** 296 (2025) 112240. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.compositesb.2025.112240>.

CAR R.; PARRINELLO M. Unified approach for molecular dynamics and density functional theory. **Phys. Rev. Lett.**, 55:2471, 1985. DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.55.2471>.

CARLTON, C. E.; FERREIRA, P. J. What is behind the inverse Hall–Petch effect in nanocrystalline materials? **Acta Materialia**, v. 55, n. 12, p. 3749–3756, 2007. DOI: [10.1016/j.actamat.2007.02.021](https://doi.org/10.1016/j.actamat.2007.02.021).

CHEN, B.; WU, W.-P. Molecular dynamics simulations of dynamics mechanical behavior and interfacial microstructure evolution of Ni-based single crystal superalloys under shock loading, **J. Mater. Res. Technol.** 15 6786–6796, 2021. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.jmrt.2021.11.116>.

CLERI F.; YIP S.; WOLF D.; PHILPOT S. Atomic-scale mechanism of cracktip plasticity: Dislocation nucleation and crack-tip shielding. **Phys. Rev. Lett.**, 79:1309–1312, 1997. DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.79.1309>.

COURTNEY, T.H. **Mechanical Behavior of Materials**, second ed., McGraw-Hill, Boston, 2000.

DAW, S. M.; BASKES M.I. Embedded-atom method: Derivation and application to impurities, surfaces and other defects in metals. **Phys. Rev. B**, 29(12):6443–6543, 1984. DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.29.6443>.

DIETER, G. E. **Mechanical metallurgy**, 2a ed., McGraw-Hill, 1986

DOWDING, I.; SCHUH, C.A. Metals strengthen with increasing temperature at extreme strain rates, **Nature** 630 91–95, 2024. DOI: <https://doi.org/10.1038/s41586-024-07420-1>.

FAKEN D., JÓNSSON H. Systematic analysis of local atomic structure combined with 3D computer graphics. **Computational Materials Science**, v. 2, n. 2, p. 279–286, 1994. ISSN 0927-0256. DOI: [https://doi.org/10.1016/0927-0256\(94\)90109-0](https://doi.org/10.1016/0927-0256(94)90109-0)

FINDIK, F. Nanomaterials and their applications, **Period. Eng. Nat. Sci.** 9 (2021) 62–75. DOI: <https://doi.org/10.21533/pen.v9.i3.828>.

FINNIS M.W; SINCLAIR J.E. A simple empirical n-body potential for transition metals. **Phil. Mag. A**, 50:45–55, 1984. DOI: <https://doi.org/10.1080/01418618408244210>.

FRENKEL, D.; SMIT, B. **Understanding Molecular Simulation: From Algorithms to Applications**, 2nd ed., Academic Press, Amsterdam, 2002. DOI: <https://doi.org/10.1016/B978-0-12-267351-1.X5000-7>.

GALLAVOTTI, G., Ergodicity, ensembles, irreversibility in Boltzmann and Beyond. **Journal of Statistical Physics**, Vol. 78, Nos. 5/6, 1995. DOI: [10.1007/BF02180143](https://doi.org/10.1007/BF02180143).

GAMBIRASIO L.; RIZZI E. An enhanced Johnson–Cook strength model for splitting strain rate and temperature effects on lower yield stress and plastic flow, **Comput. Mater. Sci.** 113 231–265, 2016. <https://doi.org/10.1016/j.commatsci.2015.11.034>.

GONZÁLEZ M. A. Force fields and molecular dynamics simulations. **SFN** 12:169–200, 2011. DOI: <https://doi.org/10.1051/sfn/201112009>.

GOWTHAMAN, S. Impact of atomic void clusters on the tensile behavior and its features of silicon carbide polycrystal through molecular dynamics analysis. **Silicon**, v. 15, p. 5221–5231, 2023. DOI: [10.1007/s12633-023-02405-7](https://doi.org/10.1007/s12633-023-02405-7)

GOWTHAMAN, S.; JAGADEESHA, T. Impact of nano crack and loading direction on the tensile features of FeCr alloy: a molecular dynamics analysis. **Functional Composites and Structures**, v. 6, p. 015002, 2024. DOI: [10.1088/2631-6331/ad1bad](https://doi.org/10.1088/2631-6331/ad1bad)

GREER, J. R.; OLIVER, W. C.; NIX, W. D. Size dependence of mechanical properties of gold at the micron scale in the absence of strain gradients. **Acta Materialia**, v. 53, n. 6, p. 1821–1830, 2005. DOI: [10.1016/j.actamat.2004.12.031](https://doi.org/10.1016/j.actamat.2004.12.031)

GROSS, D.; SEELIG, T. **Fracture Mechanics: With an Introduction to Micromechanics**. 3. ed. Cham: Springer International Publishing, 2018. DOI: <https://doi.org/10.1007/978-3-319-71090-7>.

GURTIN, M. E. **An Introduction to Continuum Mechanics. Mathematics in Science and Engineering**, v. 158. Elsevier Science, 265 p, 1981.

HAN, Y.; ZHOU J.; WANG, H.; GAO, L.; FENG, S.; CAO, K.; XU, Z.; LU, Y. Experimental nanomechanics of 2D materials for strain engineering. **Applied Nanoscience**, 11, 1075–1091, 2021. DOI: [10.1007/s13204-021-01702-0](https://doi.org/10.1007/s13204-021-01702-0).

HAN, YING; ZHOU, JINGZHUO; WANG, HEYI; GAO, LIBO; FENG, SHIZHE; CAO, Ke; XU, ZHIPING; LU, YANG. Experimental nanomechanics of 2D materials for strain engineering. **Applied Nanoscience**, v. 11, p. 1075-1091, 2021. DOI: [10.1007/s13204-021-01702-0](https://doi.org/10.1007/s13204-021-01702-0).

HONG HUE D.T.; TRAN V.-K.; NGUYEN V.-L., VAN LICH, L.; DINH V.-H., NGUYEN T.-G. High strain-rate effect on microstructure evolution and plasticity of aluminum 5052 alloy nano-multilayer: A molecular dynamics study, **Vacuum** 201, 2022 111104. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.vacuum.2022.111104>.

HOOVER, W. G. Canonical Dynamics: Equilibrium Phase-Space Distributions. **Physical Review A**, 31(3), 1695–1697, 1985. DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevA.31.1695>.

HUANG, K., **Statistical Mechanics**. 2 ed. John Wiley & sons. 1987.

HULL, D; BACON, D.J. **Introduction to Dislocations**, fifth ed., Butterworth-Heinemann, Oxford, 2011.

JÄMBECK, J. P. M.; LYUBARTSEV, A. P., An extension and further validation of an all-atomistic force field for biological membranes. **Journal of chemical theory and computation**. ACS. 8, 2938–2948 pp. 2012. DOI: <https://doi.org/10.1021/ct300342n>.

JÄMBECK, J. P. M.; LYUBARTSEV, A. P., Another piece of the membrane puzzle: extending slipids further. **Journal of chemical theory and computation**. ACS. 9, 774-784 pp. 2013. DOI: <https://doi.org/10.1021/ct300777p>.

JOHNSTON H.S.; PARR C.A. Activation energies from bond energies. I. Hydrogen transfer reactions. **J. Am. Chem. Soc.**, 85:2544–2551, 1963.

JUSTO, J. F.; BAZANT, M. Z.; KAXIRAS, E.; BULATOV, V. V.; YIP, S. Interatomic potential for silicon defects and disordered phases. **Phys. Rev. B** 58,2539–2550, 1998. DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.58.2539>.

KAMBERAJ, H. **Molecular Dynamics Simulations in Statistical Physics: Theory and Applications**. Springer, Cham, 2020. DOI: <https://doi.org/10.1007/978-3-030-35702-3>

KASSNER, M.E.; PEREZ-PRADO, M.-T. Five-power-law creep in single phase metals and alloys, **Prog. Mater. Sci.** 45 1–102, 2000. DOI: [https://doi.org/10.1016/S0079-6425\(99\)00006-7](https://doi.org/10.1016/S0079-6425(99)00006-7).

KELCHNER, C.L.; PLIMPTON, S.J.; HAMILTON, J.C. Dislocation nucleation and defect structure during surface indentation, **Phys. Rev. B** 58 11085–11088 1998. DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.58.11085>.

KOH, S. J. A.; LEE, H. P.; LU, C. 2005 Molecular dynamics simulation of a solid platinum nanowire under uniaxial tensile strain: temperature and strain-rate effects **Phys. Rev. B** 72 085414, 2005. DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.72.085414>.

KWON S.; YANG W.; MOON D.; KIM K. S. Comparison of Cancer Cell Elasticity by Cell Type. **J. Cancer**, 11(18):5403–5412, 2020. DOI: <https://doi.org/10.7150/jca.45897>.

LAGARIAS, J. C.; REEDS, J. A.; WRIGHT, M. H.; WRIGHT, P. E. Convergence Properties of the Nelder-Mead Simplex Method in Low Dimensions. **SIAM Journal of Optimization**, Vol. 9, Number 1, pp. 112–147, 1998. DOI: <https://doi.org/10.1137/S1052623496303470>.

LAMMPS. LAMMPS Documentation – Minimization styles: Conjugate Gradient, Sandia National Laboratories, 2022. <https://docs.lammps.org/minimize.html> (accessed 1 April 2025).

LEMAITRE, J; DESMORAT, R. **Engineering Damage Mechanics: Ductile, Creep, Fatigue and Brittle Failures**. Springer-Verlag Berlin Heidelberg. ISBN 3-540-21503-4, 2005. DOI: <https://doi.org/10.1007/b138882>.

LI, Q.; HUA, G.; LU, H.; YU, B.; LI, D.Y. Understanding the effect of plastic deformation on elastic modulus of metals based on a percolation model with electron work function, **JOM** 70 1130–1136, 2018. DOI: <https://doi.org/10.1007/s11837-018-2891-3>.

LI, X.; WEI, Y.; LU, L.; LU, K.; GAO, H. Dislocation nucleation governed softening and maximum strength in nano-twinned metals, **Nature** 464 877–880, 2010. DOI: <https://doi.org/10.1038/nature08929>.

LI, Z.; GAO, Y.; ZHAN, S.; ZHANG, Z. Molecular dynamics study on temperature and strain rate dependences of mechanical properties of single crystal Al under uniaxial loading, **AIP Adv.** 10 075321, 2020. DOI: <https://doi.org/10.1063/1.5086903>.

MCQUARRIE, D. A., **Statistical Mechanics**. Indiana University. Harper & Row. 1976.

MEKUYE, B.; ABERA, B. Nanomaterials: An overview of synthesis, classification, characterization, and applications, **Nano Select** 4 486–501, 2023. DOI: <https://doi.org/10.1002/nano.202300038>.

MERAJ, M.; YEDLA, N.; PAL, S. The effect of porosity and void on creep behavior of ultra-fine grained nano crystalline nickel **Material Letters**. 169 265–8, 2016. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.matlet.2016.01.128>.

MERAJ, M.; PAL, S. Healing mechanism of nanocrack in nanocrystalline metals during creep process **Appl. Phys. A** 123 1, 2017. DOI: <https://doi.org/10.1007/s00339-017-0760-5>.

MEYERS, M. A; CHAWLA, K. K. **Mechanical Behavior of Materials** 2nd edition, Cambridge Univ. Press, 2008.

MISHIN, Y.; MEHL, M.J.; PAPACONSTANTOPOULOS, D.A.; VOTER, A.F.; KRESS, J.D. Structural Stability and Lattice Defects in Copper: Ab Initio, Tight-Binding, and Embedded-Atom Calculations. **Phys. Rev. B** 63, 224106, 2001. DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.63.224106>.

MORSE P.M. Diatomic molecules according to the wave mechanics. II. vibrational levels. **Phys. Rev.**, 34:57–64, 1929. DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRev.34.57>.

MOURA A.; IPAVES B.; GALVÃO D. S.; AUTRETO P. A. Ballistic properties of highly stretchable graphene kirigami pyramid. **Comput. Mater. Sci.**, 232:112558, 2024. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.commatsci.2023.112558>.

NIE, S.; XING, Y.; KIM, G. J.; SIMONS, J. W. Nanotechnology Applications in Cancer. **Annual Review of Biomedical Engineering**, 9, 257–288, 2007. DOI: <https://doi.org/10.1146/annurev.bioeng.9.060906.152025>.

NIE, K.; WU, W. P.; ZHANG, X. L.; YANG, S. M. Molecular dynamics study on the grain size, temperature, and stress dependence of creep behavior in nanocrystalline nickel **J. Mater. Sci.** 52 2180–91, 2017. DOI: <https://doi.org/10.1007/s10853-016-0506-3>.

NORTON, Robert L. **Machine Design: An Integrated Approach**. 6. ed. Prentice Hall, 1.120 p. ISBN 0-13-5184231; 978-0-13-5184233, 2019.

NOSÉ, S. A molecular dynamics method for simulations in the canonical ensemble, **Mol. Phys.** 52 255–268, 1984. DOI: <https://doi.org/10.1080/00268978400101201>.

OPPENHEIM, A. V.; SCHAFER, R. W. **Discrete-Time Signal Processing**. 3.rd ed, Pearson, 2010. ISBN 978-0131988422.

OUYANG, D.; MAO, R.; ZHANG, L.; LIANG, S.; SONG, J. Study on the tensile properties of Al-Zn-Mg alloy based on molecular dynamics. **Engineering Failure Analysis**, v. 155, p. 107752, 2024. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.engfailanal.2023.107752>.

PARK, H. S.; CAI, W.; ESPINOSA, H. D. Mechanics of crystalline nanowires **MRS Bulletin** 178–183, 2009. DOI: <https://doi.org/10.1557/mrs2009.49>.

PASTOR-ABIA, L.; CATURLA, M. J.; SANFABIÁN, E.; CHIAPPE, G.; LOUIS, E. Abnormal stress drop at the yield point of aluminum nanowires: a molecular dynamics study. **Physical Review B**, v. 83, n. 16, p. 165441, 2011. DOI: [10.1103/PhysRevB.83.165441](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.83.165441)

QIU, L.; ZHU, N.; FENG, Y.; ZHANG, X.; WANG, X., Interfacial thermal transport properties of polyurethane/carbon nanotube hybrid composites. **International Journal of Heat and Mass Transfer**, 152 119565, 2020. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.ijheatmasstransfer.2020.119565>.

RAHMAN, A. Correlations in the motion of atoms in liquid argon. **Physical Review**, v. 136, n. 2A, p. 405-411, 1964. DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRev.136.A405>.

RAMBERG W., OSGOOD W.R.: Description of stress-strain curves by three parameters. **National Advisory Committee for Aeronautics**, Technical Note No. 902, Washington DC, 1943.

RAPAPORT, D. C. **The Art of Molecular Dynamics Simulation**. 2nd ed., Cambridge University Press, Cambridge, 2004.

RICE, R. G.; DO, D. D. **Applied Mathematics and Modeling for Chemical Engineers**. 2nd ed, John Wiley & Sons, ISBN 978-1118024720, 2012.

ROHITH, P.; SAINATH, G.; SRINIVASAN, V.S. Effect of size, temperature and strain rate on dislocation density and deformation mechanisms in Cu nanowires, **Physica B** 561 136–140, 2019. DOI: <https://doi.org/10.48550/arXiv.1911.11414>.

ROSEN, R.S.; PADDON, S.P.; KASSNER, M.E. The variation of the yield stress of Ti alloys with strain rate at high temperatures, **J. Mater. Eng. Perform.** 8 361–367, 1999. DOI: <https://doi.org/10.1361/105994999770346927>.

SEKERKA, R.F., **Thermal Physics: Thermodynamics and statistical mechanics for scientists and engineering**. 1<sup>st</sup> ed. Elsevier, 2015.

SETHNA, J. P., **Statistical Mechanics – Entropy, order parameters, and complexity**. Oxford: Clarendon Press, 2020.

SHIMADA, T.; OUCHI, K.; CHIHARA, Y.; KITAMURA, T. Breakdown of Continuum Fracture Mechanics at the Nanoscale. **Scientific Reports**, v. 5, 8596, 2015. DOI: [10.1038/srep08596](https://doi.org/10.1038/srep08596).

SOLEYMANI, M.; PARSA, M.H.; MIRZADEH, H. Molecular dynamics simulation of stress field around edge dislocations in aluminum, **Comput. Mater. Sci.** 84 83–96, 2014. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.commatsci.2013.11.053>.

SONNTAG, RICHARD E.; VAN WYLEN, GORDON J. **Fundamentos da Termodinâmica**. 7<sup>a</sup> ed. São Paulo: Blucher, 2009

SPENCER, A. J. M. **Continuum Mechanics**. New York: Dover Publications, 2004.

SPRINGBORG M. **Density-Functional Methods in Chemistry and Materials Science**. Wiley research series in Theoretical Chemistry, New York, 1997.

SRIVASTAVA, A., SHARMA, S., Molecular dynamics simulation of graphene-oxide/natural rubber composites. **International Conference on Materials Science and Engineering (ICMSE 2022)**. 1248 012059, 2020. DOI:10.1088/1757-899X/1248/1/012059.

STILLINGER F.; WEBER T.A. Computer-simulation of local order in condensed phases of silicon. **Phys. Rev. B**, 31(8):5262–5271, 1985. DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.31.5262>.

STEPANOVA L. V.; BRONNIKOV S. A. Molecular Dynamics Modeling of Crack Propagation. **J. Phys.: Conf. Ser.**, 1368(4):042039, 2019. DOI: <https://doi.org/10.1088/1742-6596/1368/4/042039>

STOTT, M. J.; ZAREMBA, E. Quasiatoms: An approach to atoms in nonuniform electronic systems. **Physical Review B**, v. 22, n. 4, p. 1564-1583, ago. 1980. DOI: 10.1103/PhysRevB.22.1564

STUART S.J., TUTEIN A.B.; HARRISON J.A. A reactive potential for hydrocarbons with intermolecular interactions. **J. Chem. Phys.**, 112(14):6472–6486, 2000. DOI: <https://doi.org/10.1063/1.481208>.

STUKOWSKI, A. Structure identification methods for atomistic simulations of crystalline materials. **Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering**, 20(4), 045021, 2012. DOI: [doi.org/10.1088/0965-0393/20/4/045021](https://doi.org/10.1088/0965-0393/20/4/045021)

STUKOWSKI, A. Visualization and analysis of atomistic simulation data with ovito—the open visualization tool. **Modelling Simul. Mater. Sci. Eng.**, 18(1):015012, 2010a. DOI: 10.1088/0965-0393/18/1/015012.

STUKOWSKI, A.; ALBE, K. Extracting dislocations and non-dislocation crystal defects from atomistic simulation data. **Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering**, 18(8), 085001, 2010b. DOI: [doi.org/10.1088/0965-0393/18/8/085001](https://doi.org/10.1088/0965-0393/18/8/085001).

SWOPE, W.C.; ANDERSEN, H.C.; BERENS, P.H.; WILSON, K.R. A computer simulation method for the calculation of equilibrium constants for the formation of physical clusters of molecules: Application to small water clusters, **J. Chem. Phys.** 76 637–649, 1982. DOI: <https://doi.org/10.1063/1.442716>.

TAM, L.; LAU, D., Moisture effect on the mechanical and interfacial properties of epoxy bonded material system: An atomistic and experimental investigation. **Polymer** 57. 132e142. 2015. DOI: <http://dx.doi.org/10.1016/j.polymer.2014.12.026>.

TELLES, P. C. S. **Materiais para Equipamentos de Processo**. 6ª edição, editora intercência, 2003.

THOMPSON, A. P.; AKTULGA, H. M.; BERGER, R.; BOLINTINEANU, D. S.; BROWN, W. M.; CROZIER, P. S.; VELD, P. J.; KOHLMAYER, A.; MOORE, S. G.; NGUYEN, T. D.; SHAN, R.; STEVENS, M. J.; TRANCHIDA, J.; TROTT, C.; PLIMPTON, S. J. LAMMPS - a flexible simulation tool for particle-based materials modeling at the atomic, meso, and continuum scales. **Computer Physics Communications**, 271:108171, 2022. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.cpc.2021.108171>.

TIMOSHENKO, S. P.; GOODIER, J. N. **History of strength of materials**, McGraw-Hill, New York 1953.

TSAI D.H. Virial theorem and stress calculation in molecular-dynamics. **J Chem. Phys.**, 70(3):1375–1382, 1979. DOI: <https://doi.org/10.1063/1.437577>.

TSUZUKI H., BRANICIO P. S., RINO J. P. Structural characterization of deformed crystals by analysis of common atomic neighborhood. **Computer Physics Communications**, v. 177, n. 6, p. 518-523. ISSN 0010-4655, 2007. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.cpc.2007.05.018>.

VAN DUIN A.C.T.; DASGUPTA S.; LORANT F.; GODDARD W.A. Reaxff: A reactive force field for hydrocarbons. **J. Phys. Chem. A**, 105:9396–9409, 2001. DOI: <https://doi.org/10.1021/jp004368u>.

WANG Y.; DING J.; FAN Z.; TIAN L.; LI M.; LU H.; ZHANG Y.; MA E.; LI J.; SHAN Z.wei. Tension–compression asymmetry in amorphous silicon. *Nature Materials*, 20(10):1371–1377, 2021. DOI: <https://doi.org/10.1038/s41563-021-01017-z>.

WESSING, J.; BRIEVA, A.; SAMMELSELG, V. Nanostructured coating for aluminum alloys used in aerospace applications, **J. Electrochem. Soc.** 169 071503, 2022. DOI: <https://doi.org/10.1149/1945-7111/ac7bb2>.

WU, H. A.; SOH, A. K.; WANG, X. X.; SUN, Z. H. Strength and fracture of single crystal metal nanowire. **Key Engineering Materials**, v. 261–263, p. 33–38, 2004. DOI: [10.4028/www.scientific.net/KEM.261-263.33](https://doi.org/10.4028/www.scientific.net/KEM.261-263.33)

XUAN, Y.; ZHANG, D.; NASTAC, L. An experimental and modeling investigation of Al-based nanocomposites manufactured via ultrasonic cavitation and solidification processing, **Mater. Today Proc.** 5 16022–16031, 2018. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.matpr.2018.05.047>.

ZHOU, K.; LIU, B., **Molecular dynamics simulation: Fundamentals and applications**. 1 ed. Elsevier, 2022.

ZHOU; JINJIE; XIAN; FANKAI; SHEN; JINCHUAN. Mechanisms during strain rate-dependent crack propagation of copper nanowires containing edge cracks. **Nanomaterials**, v. 13, n. 7, p. 1231, 2023. DOI: <https://doi.org/10.3390/nano13071231>.

ZIENKIEWICZ, O. C.; TAYLOR, R. L.; ZHU, J. Z. **The finite element method: its basis and fundamentals**. 7. ed. Nova York: McGraw Hill, 2013.

ZIMMERMANN J.A. **Continuum and atomistic modeling of dislocation nucleation at crystal surface ledges**. PhD thesis, Stanford University, 1999

7 APÊNDICES

## 7.1 APÊNDICE 1: ARQUIVO DE ENTRADA DO LAMMPS PARA ENSAIO DE TRAÇÃO

```
#####
# INPUT LAMMPS - ENSAIO TRAÇÃO
#####

# NÚMERO DE PASSOS NA SIMULAÇÃO (DEP. DA TX DE DEF.) -----
variable n_iter equal 500000 # deformação total = 50%

# ----- UNIDADES, PARÂMETRO DE REDE -----
# INITIALIZATION
units metal
dimension 3
boundary p p p
atom_style atomic
variable latparam equal 4.05

# ----- ÁTOMOS, ORIENTAÇÃO E CAIXA DE SIMULAÇÃO -----
# ATOM DEFINITION
lattice fcc ${latparam} orient x 1 0 0 orient y 0 1 0 orient z 0 0 1
region whole block 0 20 0 20 0 20
create_box 1 whole
create_atoms 1 region whole

# ----- POTENCIAL EAM -----
# DEFINE INTERATOMIC POTENTIAL
pair_style eam/alloy
pair_coeff * * Al99.eam.alloy Al # Arquivo Al99.eam.alloy

# ----- OBTENÇÃO DO CSYM E E POT -----

neighbor 5.0 bin
compute csym all centro/atom fcc
compute peratom all pe/atom

# ----- MINIMIZAÇÃO (GRADIENTE CONJUGADO) -----

reset_timestep 0
thermo 100
thermo_style custom step pe lx ly lz press pxx pyy pzz temp
fix 1 all box/relax iso 0.0 vmax 0.001
min_style cg
minimize 1e-25 1e-25 10000 50000
unfix 1 # Remover fixação da relaxação da caixa

# ----- EQUILIBRAÇÃO NPT (T = 300 K) -----

reset_timestep 0
timestep 0.001
velocity all create 300 12345 mom yes rot no
fix 1 all npt temp 300 300 1 iso 0 0 1 drag 1
thermo 1000
# dimensões da caixa, pressões, E. pot. e temp. na equilibração -
thermo_style custom step lx ly lz press pxx pyy pzz pe temp
run 75000 # Rodar equilibração 75 ps
```

```

variable etotal equal "pe + ke" # Define corretamente a energia total
variable U0 equal v_etotal # Agora U0 pode ser definida
print "Energia interna inicial, U0: ${U0}"
# Captura a energia interna inicial após equilíbrio
variable U0 equal "v_etotal"
print "Energia interna inicial: ${U0}"
unfix 1

# ----- ARMAZENAR COMP FINAL P CALC. DEF. -----

variable tmp equal "lx"
variable L0 equal ${tmp}
print "Initial Length, L0: ${L0}"

# ----- DEFORMAÇÃO -----

reset_timestep 0
fix 1 all npt temp 300 300 1 y 0 0 1 z 0 0 1 drag 1
variable srate equal 1.0e8 # strain rate = 1e8 s^-1
variable srate1 equal "v_srate / 1.0e12"
fix 2 all deform 1 x erate ${srate1} units box remap x

# ----- OUTPUTS -----

variable strain equal "(lx - v_L0)/v_L0"
variable p1 equal "v_strain"
variable p2 equal "-pxx/10000" # Gpa
variable p3 equal "-pyy/10000" # Gpa
variable p4 equal "-pzz/10000" # Gpa
variable p5 equal pe
variable etotal equal "pe + ke" # Energia interna total (potencial + cinética)
variable dim_y equal "ly" # Dimensão na direção y
variable dim_z equal "lz" # Dimensão na direção z
variable temp equal "temp" # Temperatura do sistema
fix def1 all print 1000 "${p1} ${p2} ${p3} ${p4} ${p5} ${etotal} ${dim_y} ${dim_z}
${temp}" file Al_tens_100.def1.txt screen no

# ----- DUMPS para pós processar OVITO (Disc, Estr Crist.)-----

dump 1 all cfg 1000 dump.tens_*.cfg mass type xs ys zs c_csym c_peratom fx fy fz
dump_modify 1 element Al

# ----- Display durante simulação -----

thermo 1000
thermo_style custom step v_strain temp v_p2 v_p3 v_p4 ke pe press
run ${n_iter}

# ----- TÉRMINO DA SIMULAÇÃO -----

print "All done"

```

## 7.2 APÊNDICE 2: ANÁLISE DO PÓS-PROCESSAMENTO POR MÉDIA MÓVEL DAS CURVAS TENSÃO–DEFORMAÇÃO

As curvas tensão–deformação obtidas por simulações de dinâmica molecular apresentam flutuações estatísticas inerentes à natureza discreta e térmica do sistema. Com o objetivo de atenuar essas oscilações sem modificar a tendência física global da resposta mecânica, foi aplicado um pós-processamento por média móvel com janela de cinco pontos, repetido cinco vezes ao longo de toda a curva.

A fim de justificar a adoção desse procedimento e verificar se a suavização introduz vieses sistemáticos nos resultados, este apêndice apresenta uma comparação direta entre a curva tensão–deformação bruta, obtida diretamente da simulação, e a curva correspondente após a aplicação do filtro. A Figura 7.1 mostra a curva tensão–deformação sem pós-processamento, enquanto a Figura 7.2 apresenta a mesma curva após a aplicação do filtro de média móvel.

Além da análise visual, foi realizada uma avaliação quantitativa da diferença entre as tensões calculadas antes e depois da suavização, definida como  $\Delta\sigma = \sigma_{\text{MD}} - \sigma_{\text{filtro}}$  ao longo de toda a deformação. A Figura 7.3 apresenta essa diferença, evidenciando que os desvios permanecem pequenos e distribuídos de forma aproximadamente simétrica em torno de zero.

Os resultados indicam que o valor médio de  $\Delta\sigma$  é próximo de zero, não sendo observado viés sistemático introduzido pelo filtro. Adicionalmente, a máxima diferença relativa observada na tensão de escoamento foi de  $-0,76\%$ , enquanto a diferença na resiliência entre as curvas bruta e filtrada é praticamente nula. Esses resultados confirmam que o procedimento de suavização atua predominantemente na redução do ruído estatístico, sem distorcer os valores de tensão nem alterar propriedades mecânicas de interesse, como a tensão de escoamento e a resiliência.

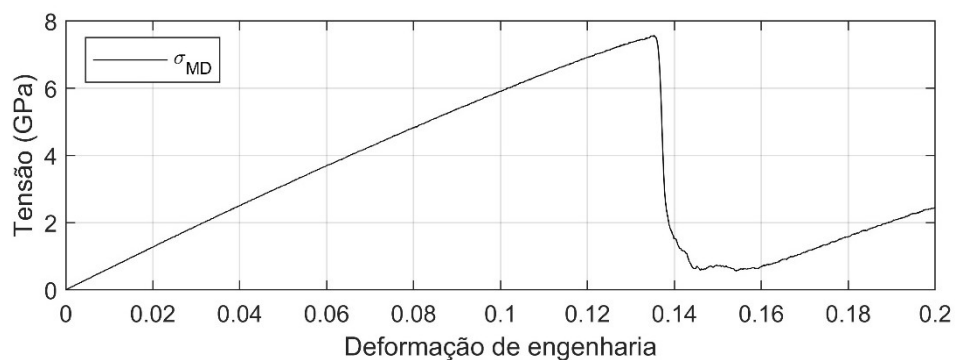


Figura 7.1 – Curva tensão–deformação obtida diretamente da simulação de dinâmica molecular, sem aplicação de pós-processamento.

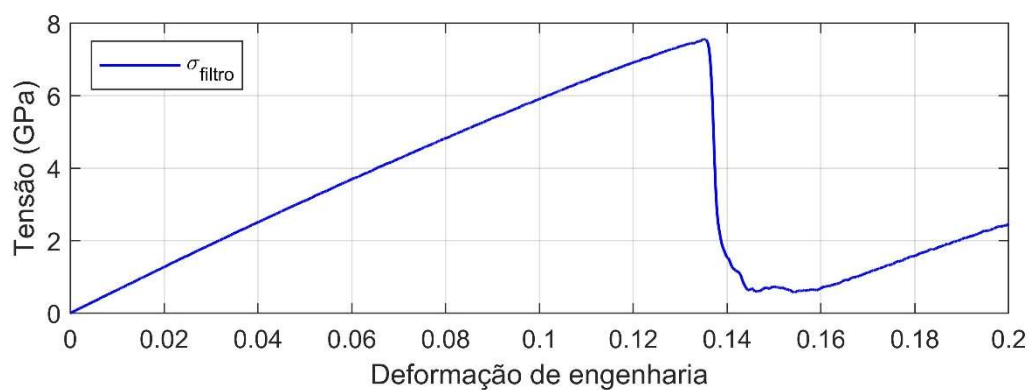


Figura 7.2 – Curva tensão–deformação após a aplicação do filtro de média móvel (janela de cinco pontos, cinco repetições).

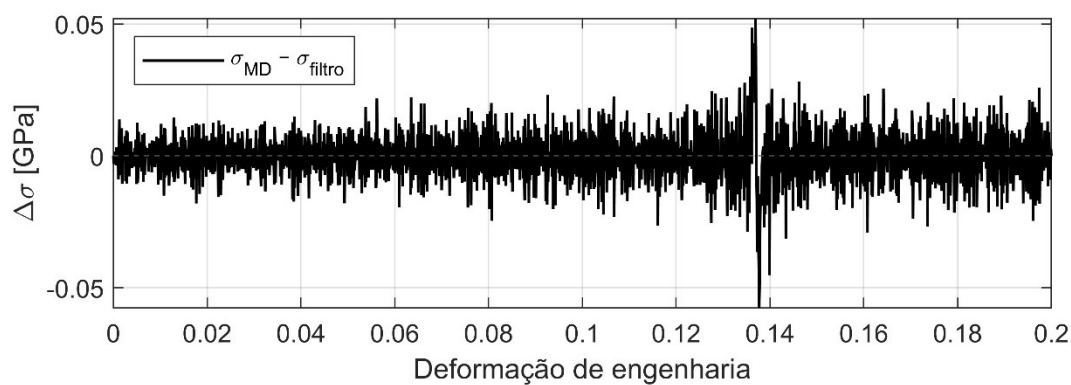


Figura 7.3 – Diferença entre as tensões da dinâmica molecular e da curva filtrada ao longo da deformação, definida como  $\Delta\sigma = \sigma_{MD} - \sigma_{filtro}$ .