

Modelado de nanoindentación de una película delgada de oro

Jorge A. Torres Quintanilla

Posgrado en Maestría en Ciencias de la Ingeniería con Orientación en Nanotecnología.

Facultad de Ingeniería Mecánica y Eléctrica.

Universidad Autónoma de Nuevo León.

Resumen

Palabras clave: Mecánica de contacto, nanoindentación, adhesión, simulación

1. Introducción

La mecánica de contacto es un área de la tribología que estudia la deformación de sólidos que se tocan entre sí en uno o más puntos. Se hace una distinción entre los esfuerzos que actúan en un objeto de manera perpendicular (normal) y los que son causados por fricción, que tienen una dirección tangencial entre superficies. El estudio de estos esfuerzos y deformaciones es especialmente útil para determinar las propiedades mecánicas y adhesivas que presentan los materiales, como la dureza, módulo elástico y punto de fractura.

En la rama de la nanotecnología, los materiales presentan una alta relación área/volumen comparada al material en bulto, lo cual altera sus propiedades mecánicas y adhesivas. Esto implica que deben proponerse modelos matemáticos que definan con mayor precisión el comportamiento de la materia a tales escalas. Los estudios de nanoindentación son pruebas muy comunes en este ámbito de la ciencia, y se utilizan para determinar un rango de propiedades que presentan los nanomateriales. Estas pruebas consisten en la aplicación de una fuerza al material cuyas propiedades se desean saber por medio de una punta muy fina con geometría y propiedades mecánicas conocidas, usualmente de diamante o un material de alta dureza. Esto se hace con el propósito de causar una indentación en el material estudiado, cuya geometría está directamente relacionada con sus propiedades mecánicas y de adhesión.

En el presente se propone una simulación de los dos modelos más comúnmente utilizados en estudios de nanoindentación, con un enfoque específico en las propiedades de una película delgada de oro. Los resultados se comparan con datos reales obtenidos de pruebas de nanoindentación realizadas por Beake y Smith [1] bajo condiciones similares.

2. Antecedentes

Experimentos como los realizados por Beake y Smith [1] y Dietker *et al.* [2] ya han utilizado la técnica de nanoindentación para medir las propiedades mecánicas de diversos materiales, incluyendo películas delgadas de oro. Los anteriores se basan en el modelo de contacto elástico descrito por Hertz [3] y en la técnica desarrollada por Oliver y Pharr [4], con la cual determinan el módulo elástico y la dureza de diversos materiales por medio de la gráfica carga-desplazamiento. Un ejemplo de este tipo de gráfica se puede observar en la figura 1.

3. Trabajos Relacionados

En su trabajo, Kelchner *et al.* [5] realizan la simulación de una prueba de nanoindentación de una película delgada de oro con dimensiones de $24 \times 21 \times 16$ nm y un indentador de geometría esférica con un radio de 8 nm. Hacen uso de un modelo de dinámica molecular paralela

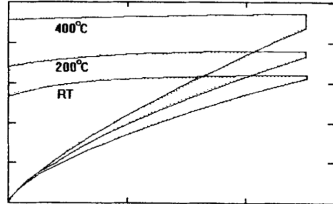


Figura 1: Gráfica carga-deformación de una película de oro [1].

para simular el comportamiento de 470,000 átomos al entrar en contacto con el indentador, así como de las ecuaciones descritas en el modelo Hertziano. Sus resultados son muy prometedores, ya que no solamente encuentran que el comportamiento simulado se acerca en buena medida al real, sino que pueden determinar puntos de dislocación en la estructura cristalina del oro.

4. Modelo Propuesto

En el presente se hace uso de los dos modelos más comúnmente utilizados en el ámbito de mecánica de contacto. El primero de ellos es el descrito por Hertz [3], en el cual no se toman en cuenta las propiedades adhesivas de los materiales, por lo que la profundidad de indentación está determinada únicamente por la fuerza aplicada F , el módulo elástico reducido de ambos materiales en contacto E^* , y la dimensión característica del indentador R , como se puede apreciar en la ecuación 1.

$$d_{HERTZ} = \left(\frac{9F^2}{16E^{*2}R} \right)^{\frac{1}{3}} \quad (1)$$

El módulo elástico reducido E^* es una función de los módulos elásticos (E_1, E_2), y de las relaciones de Poisson (ν_1, ν_2), de ambos materiales, como se expresa en la ecuación 2.

$$\frac{1}{E^*} = \frac{1 - \nu_1^2}{E_1} + \frac{1 - \nu_2^2}{E_2} \quad (2)$$

El segundo modelo es el descrito por Johnson, Kendall y Roberts (JKR) [6], en el cual toman en cuenta la energía de adhesión existente entre ambas superficies, por lo que el área de contacto resultante es mayor que la descrita por el modelo Hertziano, y cuya profundidad de indentación depende ahora del trabajo de adhesión ejercido

entre ambos materiales $\Delta\gamma$ y de las presiones ejercidas por la fuerza aplicada (p_0, p'_0), como se observa en la ecuación 3.

$$d_{JKR} = \frac{\pi a_{JKR}}{2E^*} (p_0 + 2p'_0) \quad (3)$$

Las presiones p_0 y p'_0 están determinadas por la ecuación 4, donde los términos a_{JKR} y $\Delta\gamma$ son el área de contacto descrita por el modelo JKR y el trabajo de adhesión ejercido entre ambas superficies, los cuales se encuentran expresados en las ecuaciones 5 y 6, respectivamente. γ_1 y γ_2 son las energías de adhesión de cada uno de los materiales en contacto, mientras que γ_{12} es el término de interacción.

$$p_0 = \frac{2a_{JKR}E^*}{\pi R}; p'_0 = - \left(\frac{2\Delta\gamma E^*}{\pi a_{JKR}} \right)^{\frac{1}{2}} \quad (4)$$

$$a_{JKR} = \left\{ \frac{3R}{4E^*} \left[F + 3\Delta\gamma\pi R + \sqrt{6\Delta\gamma\pi R F + (3\Delta\gamma\pi R)^2} \right] \right\}^{\frac{1}{3}} \quad (5)$$

$$\Delta\gamma = \gamma_1 + \gamma_2 - \gamma_{12} \quad (6)$$

Para los modelos matemáticos presentados, se propone la simulación de un nanoindentador con una punta de diamante tipo Berkovich, de geometría esférica con un radio $R = 200$ nm. El módulo elástico reducido se obtiene de datos experimentales realizados por Dietiker *et al.* [2], y se toma como $E^* = 85$ GPa. El trabajo de adhesión entre el diamante y el oro se toma como $\Delta\gamma = 300$ mJ/m², dados los datos obtenidos experimentalmente por Gane *et al.* [7]. Por último, la fuerza aplicada F se aumenta gradualmente en un rango de 0 - 50 mN, y se calculan las profundidades de indentación descritas por las ecuaciones de ambos modelos. La teoría apunta a una diferencia significativa entre ambos modelos en las profundidades de indentación a cargas muy bajas, mientras que esta diferencia iría disminuyendo conforme se aumenta la carga aplicada.

5. Implementación

6. Resultados

6.1. Discusión

7. Conclusión

7.1. Trabajo a Futuro

Referencias

- [1] B. D. Beake, J. F. Smith, High-temperature nanoindentation testing of fused silica and other materials, *Philosophical Magazine A* 82 (2002) 2179 – 2186. doi:doi:[10.1080/01418610208235727](https://doi.org/10.1080/01418610208235727).
- [2] M. Dietiker, R. D. Nyilas, C. Solenthaler, R. Spolenak, Nanoindentation of single-crystalline gold thin films: Correlating hardness and the onset of plasticity, *Acta Materialia* 56 (2008) 3887 – 3899. doi:doi:[10.1016/J.ACTAMAT.2008.04.032](https://doi.org/10.1016/J.ACTAMAT.2008.04.032).
- [3] H. Hertz, On the contact of elastic solids, 1896.
- [4] W. Oliver, G. Pharr, An improved technique for determining hardness and elastic modulus using load and displacement sensing indentation experiments, *Journal of Materials Research* 1992 7:6 7 (1992) 1564 – 1583. doi:doi:[10.1557/JMR.1992.1564](https://doi.org/10.1557/JMR.1992.1564).
- [5] C. L. Kelchner, S. Plimpton, J. C. Hamilton, Dislocation nucleation and defect structure during surface indentation, *Physical Review B - Condensed Matter and Materials Physics* 58 (1998) 11085 – 11088. doi:doi:[10.1103/PHYSREVB.58.11085](https://doi.org/10.1103/PHYSREVB.58.11085).
- [6] K. L. Johnson, K. Kendall, A. D. Roberts, Surface energy and the contact of elastic solids, *Proceedings of the Royal Society of London. A. Mathematical and Physical Sciences* 324 (1971) 301 – 313. doi:doi:[10.1098/rspa.1971.0141](https://doi.org/10.1098/rspa.1971.0141).
- [7] N. Gane, P. F. Pfaelzer, D. Tabor, Adhesion between clean surfaces at light loads, *Proceedings of the Royal Society of London. A. Mathematical and Physical Sciences* 340 (1974) 495 – 517. doi:doi:[10.1098/rspa.1974.0167](https://doi.org/10.1098/rspa.1974.0167).