

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

Debido su alta relación área/volumen, los materiales a escala nanométrica presentan propiedades físicoquímicas que los diferencian del material en bulto. Es por esto que se han desarrollado modelos matemáticos que describan con mayor precisión el comportamiento de las interacciones de los materiales a estas escalas. Los estudios de nanoindentación hacen uso de estos modelos y de la rama de la mecánica de contacto para deducir las propiedades mecánicas y adhesivas (como dureza, ductilidad, fuerza de adhesión), de un sinfín de materiales. En este artículo se realiza la simulación computacional de un nanoindentador de diamante entrando en contacto con una película delgada de oro. Se calculan las profundidades de indentación y se comparan con datos experimentales con el fin de elucidar en la veracidad de dichos modelos. Los resultados muestran diferencias significativas entre los datos reales y los teóricos, pero hay similitudes en la forma del comportamiento, lo cual puede indicar que hay otros fenómenos que no se están tomando en cuenta en la simulación.

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 ámbi-

to 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.

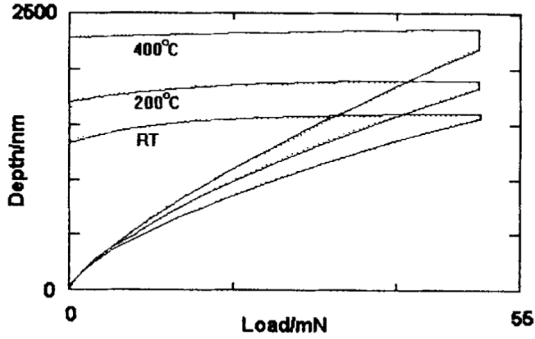


Figura 1: Gráfica carga-profundidad de una película de oro [1].

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-profundidad. 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 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

La simulación se implementa con el software de desarrollo Python v3.10.1 [8], mientras que el código completo se puede encontrar en el repositorio en GitHub de Torres [9].

En el código 1 se toman datos reales de una curva carga-profundidad de experimentos realizados en películas de oro por Beake y Smith [1]. Asimismo, se introducen los parámetros de geometría, módulo elástico y trabajo de adhesión descritos en la sección 4.

Código 1: Datos Experimentales y Parámetros de Operación

```
1 datos = pd.read_csv('DatosReales.txt',
2     delimiter = ',')
3 F = (datos.Carga)*(10**-3) #N
4 d_r = datos.Deformacion
5 E = 85*(10**9) #Pa
6 R = 200*(10**-9) #m
7 g = 300*(10**-3) #J/m2
```

Las líneas del código 2 introducen las listas donde se guardan los valores calculados de profundidades de indentación para ambos modelos, así como las diferencias de profundidad entre los datos experimentales y los calculados.

Código 2: Listas de Profundidades de Indentación y Diferencias

```
1 hertz_list = []
2 jkr_list = []
3 diffa = []
4 diffb = abs(d_r - hertz_list)
5 diffc = abs(d_r - jkr_list)
```

Las funciones $a()$, d_{hertz} y d_{jkr} del código 3 definen las ecuaciones para calcular el área de contacto según el modelo JKR, a_{JKR} , la profundidad de indentación según el modelo Hertziano, d_{HERTZ} , y la profundidad de indentación según el modelo JKR, d_{JKR} , respectivamente.

Código 3: Funciones de Ecuaciones de los Modelos

```
1 def a(F):
2     return (((3*R)/(4*E))*(F + 3*g*pi*R + np
3         .sqrt((6*g*pi*R*F) + (3*g*pi*R)**2)))
4         *(1/3)
5 def d_hertz(F):
6     return (((9*(F**2))/(16*(E**2)*R))
7         *(1/3))*(10**9)
8 def d_jkr(F, a, p1, p2):
9     return (((pi*a)/(2*E))*(p1 + 2*p2))
10    *(10**9)
```

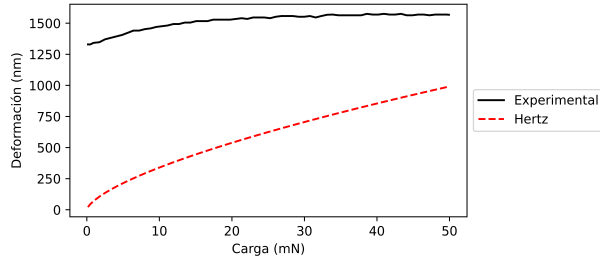
En el código 4 se comienza a introducir la fuerza debido al indentador, y se calculan el área de contacto, a_{JKR} , los componentes de presión, p_0 y p'_0 , así como las profundidades de indentación, d_{HERTZ} y d_{JKR} . Para cada dato de fuerza aplicada se calcula la diferencia entre las profundidades Hertzianas y de JKR y se agregan a la lista.

Código 4: Implementación de Modelos Matemáticos

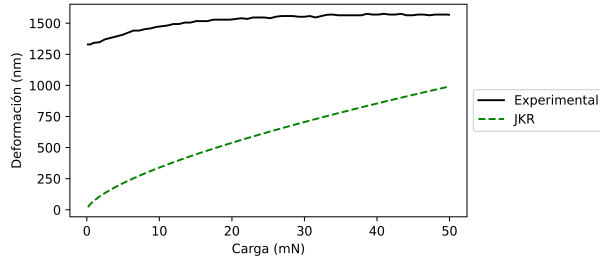
```
1 for f in F:
2     A = a(f)
3     p1 = (2*A*E)/(pi*R)
4     p2 = -1 * np.sqrt((2*g*E)/(pi*A))
5     hertz = d_hertz(f)
6     jkr = d_jkr(f, A, p1, p2)
7     hertz_list.append(hertz)
8     jkr_list.append(jkr)
9     diffa.append(abs(jkr - hertz))
```

6. Resultados

En la figura 2 se observa una comparación entre las gráficas carga-profundidad de los datos experimentales y los calculados con el modelo Hertziano (figura 2a) y los calculados con el modelo JKR (figura 2b).



(a) Gráficas carga-profundidad de datos experimentales y modelo Hertziano.



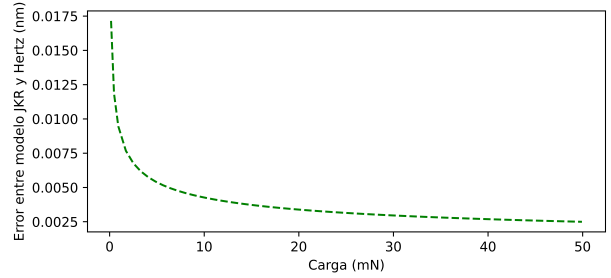
(b) Gráficas carga-profundidad de datos experimentales y modelo JKR.

Figura 2: Comparaciones entre datos experimentales y datos de los modelos Hertziano y JKR.

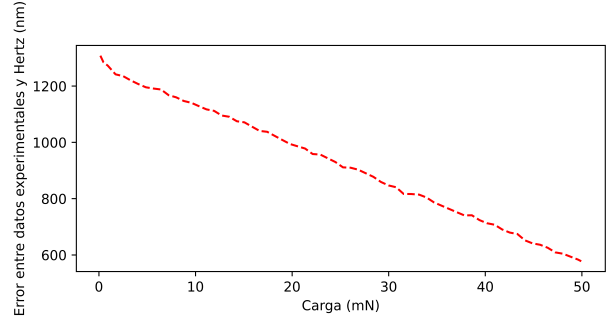
La figura 3 muestra los errores absolutos en profundidades de indentación entre ambos modelos (figura 3a), entre los datos experimentales y el modelo Hertziano (figura 3b), y entre los datos experimentales y el modelo JKR (figura 3c).

6.1. Discusión

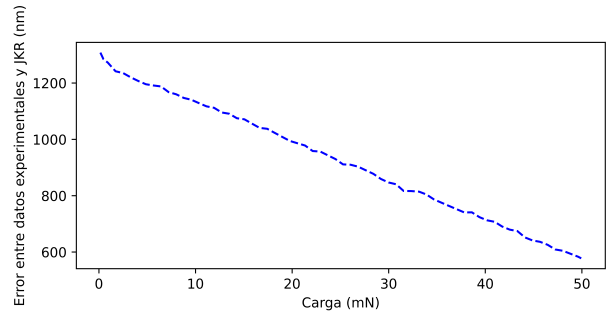
Como se puede apreciar de la figura 2, no parece haber una gran diferencia entre las profundidades de indentación calculadas por ambos modelos, aunque sí que la hay al comparar con los datos experimentales. Sin embargo, parecen seguir una curvatura muy similar. Además, al comparar los errores absolutos entre el modelo Hertziano y el JKR, se puede percibir una gran diferencia a cargas bajas, mientras que esta disminuye a cargas mayores, justo como lo predicen dichos modelos. Lo mismo aplica al comparar cada uno de los modelos con los datos experimentales, excepto que en estas instancias las diferencias son mucho mayores.



(a) Error absoluto entre el modelo Hertziano y el JKR.



(b) Error absoluto entre datos experimentales y el modelo Hertziano



(c) Error absoluto entre datos experimentales y el modelo JKR

Figura 3: Errores absolutos entre los datos experimentales y ambos modelos.

7. Conclusión

En el trabajo presente se opta por hacer una simulación muy directa, además de que no se toman en cuenta otros fenómenos como las fuerzas de fricción existentes entre superficies, lo cual puede aumentar el área de contacto, aumentando a su vez la profundidad de indentación. Sin embargo, se comprueban las predicciones hechas por Johnson, Kendal y Roberts, en el que hay un aumento apreciable en cuanto a la profundidad de indentación a comparación con los estimados por Hertz, sobre todo a cargas aplicadas bajas, esto debido a las interacciones de adhesión en las superficies.

7.1. Trabajo a Futuro

Debido al tiempo limitado del proyecto, no se ha podido realizar una simulación con un mayor grado de complejidad, en el que se implemente un modelo de dinámica molecular y en el que se tomen en cuenta las interacciones entre átomos de la película delgada de oro y la geometría del indentador de diamante. Además, se podrían tomar en cuenta fuerzas de fricción tangenciales, lo cual acercaría los resultados de la simulación al comportamiento real de los materiales.

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).
- [8] Python Software Foundation, The Python Software Foundation is an organization devoted to advancing open source technology related to the Python programming language, 2022. URL: <https://www.python.org/>.
- [9] J. Torres, Proyecto Integrador, 2022. URL: <https://github.com/FeroxDeitas/Simulacion-Nano/tree/main/Tareas/Proyecto%20Integrador>.