

## **Nanoindentación de Carbono tipo diamante : una aproximación teórica, computacional y experimental.**

Felipe Valencia<sup>1,2</sup>.

<sup>1</sup>Centro para el desarrollo de la Nanociencia y Nanotecnología (CEDENNA), Santiago.

<sup>2</sup>Departamento de Computación e Industrias, Facultad de Ciencias de la Ingeniería, Universidad Católica del Maule, Talca.

\*felipe.valenciad@gmail.com

### **Abstract**

El carbono amorfo (aC), en particular el carbono tipo diamante (DLC), es uno de los materiales de recubrimiento más prometedores y estudiados en la industria; sin embargo, muchos de los mecanismos a escala atómica involucrados en su proceso de deformación plástica no se comprenden por completo[1]. La respuesta mecánica de las películas de carbono tipo diamante con diferentes concentraciones de  $sp^3$  se investiga mediante experimentos de nanoindentación, simulaciones ab-initio y simulaciones de dinámica molecular clásica. Las simulaciones ab-initio y clásicas muestran una buena concordancia para  $sp$  y el contenido de  $sp$  de las muestras in-silico. El módulo elástico y la dureza de las películas de DLC aumentan con el contenido de  $sp^3$ , para  $sp^3$  entre 10% y 55%, y se obtiene una excelente concordancia entre experimentos y simulaciones. Se muestra que las distribuciones de deformación simuladas son altamente anisotrópicas, a diferencia de las predicciones de escala continua para usar un indentador perfectamente esférico en un sólido amorfo. Las simulaciones de dinámica molecular también revelan dos modos de plasticidad diferentes según el nivel de  $sp^3$  de la muestra indentada. Para películas con concentraciones de  $sp^3$  inferiores al 40%, la plasticidad está mediada principalmente por la transición de  $sp^2$  a  $sp^3$ . Para concentraciones más altas de  $sp^3$ , la deformación plástica se atribuye a la densificación debido al reordenamiento de los enlaces. Con todo, nuestro trabajo ofrece un estudio completo de DLC, que revela mecanismos inesperados de deformación plástica que no se habían considerado antes. Nuestro estudio podría ayudar a la comprensión fundamental de los recubrimientos de carbono amorfo para fines científicos y tecnológicos. de estos materiales para aplicaciones de transporte y almacenamiento de hidrógeno.

Acknowledgement: This work was supported by the Fondo Nacional de Investigaciones Científicas y Tecnológicas (FONDECYT, Chile) under grants #1190662 ( FV), #11190484 (FV). The authors thanks to Financiamiento Basal para Centros Científicos y Tecnológicos de Excelencia AFB180001. Powered@NLHPC: this research was partially supported by the supercomputing infrastructure of the NLHPC (ECM-02).

### **References**

[1] Valencia et al. Nanoindentation of Amorphous Carbon: a combined experimental and simulation approach, Acta Materialia, 203 (15), 116485, 2021