XXV CONGRESO NACIONAL DE INGENIERÍA MECÁNICA
Santander, 10-13 junio 2025
Universidad de Cantabria

Comparación de diferentes modelos de dinámica molecular para describir contactos diamante-metal en la nanoescala

S. González-Tortuero[1a], M.A. Garrido[1b], J. Rodriguez[1c]

[1] *DIMME, Grupo de Durabilidad e Integridad Mecánica de Materiales Estructurales. Universidad Rey Juan Carlos. C/ Tulipán, s/n. 28933 Móstoles. Madrid. España.*

[a] soledad.gtortuero@urjc.es , [b] miguelangel.garrido@urjc.es , [c] jesus.rodriguez.perez@urjc.es

Estudiar y analizar los contactos mecánicos a muy baja escala es imprescindible para diseñar adecuadamente sistemas microelectromecánicos (MEMS) y nanoelectromecánicos (NEMS). Las diferentes estrategias empleadas para simular estos sistemas mecánicos en la nanoescala influyen directamente en los resultados obtenidos. En el contexto de las simulaciones mediante dinámica molecular de ensayos de nanoindentación en metales cúbicos centrados en las caras (FCC) comúnmente se emplean varias simplificaciones. Entre ellas se incluyen la suposición de que el penetrador es un sólido rígido, así como la exclusión de efectos adhesivos entre el penetrador y la muestra. Estas simplificaciones no sólo determinan los resultados obtenidos, sino que también condicionan la aplicabilidad de los modelos de contacto basados en la mecánica del continuo para describir y tratar los resultados.

En este estudio se han realizado simulaciones numéricas basadas en dinámica molecular de ensayos de indentación con punta de diamante en oro y níquel. En los cálculos realizados se ha trabajado con cuatro modelos diferentes de indentador en contacto con muestras de metal FCC: un penetrador rígido sin adhesión, un penetrador rígido con adhesión, un penetrador deformable sin adhesión y un penetrador deformable con adhesión. En el trabajo se analiza la influencia de considerar o no la deformación del indentador de diamante, así como las diferencias obtenidas al considerar los efectos adhesivos entre la muestra y el penetrador. Para ello, se han obtenido las curvas fuerza-desplazamiento en el proceso de indentación y se han determinado las propiedades mecánicas. Además, en estas simulaciones propuestas también se ha determinado el radio de contacto durante el proceso de descarga, para compararlo con las predicciones de los modelos de contacto basados en la mecánica de medios continuos.

1. Introducción

El contacto entre sólidos es un aspecto crucial en numerosos sistemas ingenieriles. Los fenómenos de fricción, desgaste y deformación se han tratado de describir mediante la mecánica de contacto, debido a su presencia en componentes que entran en contacto. Inicialmente, esta disciplina fue desarrollada para la macroescala. Sin embargo, el gran desarrollo que han tenido los micro y nano sistemas electromecánicos (MEMS y NEMS) en las últimas décadas ha puesto de manifiesto la necesidad de tener en cuenta otros fenómenos que adquieren un papel muy relevante a escala nanométrica, como la adhesión.

Una de las técnicas más empleadas cuando el volumen a estudiar es reducido es la nanoindentación. Esta técnica permite determinar propiedades mecánicas como el módulo elástico o la dureza, poniendo en contacto un indentador de geometría conocida con el material a ensayar, mediante un registro continuo de fuerza-desplazamiento [1,2]. Sin embargo, los modelos del continuo pueden ser cuestionados cuando se analiza la escala nanométrica, debido a la naturaleza anisótropa y por la heterogeneidad del material a esa escala. Además, resulta muy difícil encontrar ensayos experimentales en contactos a escala atómica, debido a las numerosas fuentes de error que son más acusados cuando la escala de medida es tan reducida [3].

Por este motivo, las herramientas de simulación numérica han adquirido mayor relevancia, dado que ofrecen una alternativa para poder analizar efectos como el de la adhesión a escala atómica y compararlos con los modelos teóricos de contacto [4]. Aunque son muchos los sistemas que se han modelizado con este fin, aún existe bastante discrepancia sobre la línea a seguir para la simulación de estos sistemas [5].

En el campo de la nanoindentación se han realizado un número significativo de contribuciones, especialmente para materiales metálicos. En estos estudios se emplean diferentes metodologías para modelizar el proceso de indentación a escala atómica. Aspectos como el impacto de la orientación cristalográfica en metales FCC y el espesor de la capa ha sido investigado mediante simulaciones de dinámica molecular (MD) por numerosos investigadores [6,7,8]. Por ejemplo, Zhao et al. evaluaron estos factores en las propiedades mecánicas de un conjunto formado por capas alternas de níquel y plata [9].

Otros fenómenos, como la aparición de dislocaciones en muestras metálicas durante el ciclo de indentación, se han sometido a análisis con la ayuda de herramientas de MD [10,11]. Huang et al. investigaron el impacto de las capas de grafeno en la formación de dislocaciones en un sustrato de níquel [12]. Sus resultados indicaron que la introducción de capas de grafeno provocaba una reducción de la velocidad de propagación de las dislocaciones.

En su estudio de capas de níquel sobre sustratos de cobre, Shinde et al. investigaron el impacto del tamaño del indentador, la velocidad de indentación y el espesor del recubrimiento sobre la formación de dislocaciones y la dureza [13]. Sus resultados revelaron que el aumento de la velocidad de indentación a 150 m/s daba lugar a un aumento significativo de la dureza, llegando a ser hasta un 36% superior a la observada en las simulaciones realizadas a 50 m/s.

Otros efectos, como el tamaño de grano del níquel en la deformación obtenida en el proceso de indentación, también han sido analizados por autores como Tucker y Foiles [14]. Adicionalmente, en este trabajo concluyeron que la velocidad del indentador no afecta a las propiedades obtenidas cuando este parámetro se varía de 0,5 a 5 m/s.

Estas publicaciones son solo una muestra de los artículos que pueden encontrarse sobre simulaciones de MD a escala atómica. Pero todas estas publicaciones tienen un punto de partida común: el indentador se modela como una región libre de átomos que simplemente repele los átomos de los sustratos al acercarse a ellos. Este enfoque de modelización no tiene en cuenta el efecto de la adhesión a escala atómica entre el indentador y la muestra/recubrimiento. En consecuencia, al analizar las curvas fuerza-desplazamiento obtenidas en los ensayos, se emplean modelos de contacto como el modelo hertziano [15] o el método desarrollado por Oliver y Pharr para determinar la dureza y el radio de contacto entre el indentador y la muestra [16].

Sin embargo, a esta escala tan reducida, algunos fenómenos específicos adquieren especial relevancia debido a las fuerzas interatómicas, como los fenómenos de adhesión [17,18]. Para evaluar el impacto de la adhesión entre el indentador y la muestra durante el proceso de indentación, es esencial construir un modelo del indentador que comprenda una región de átomos y, además, introducir un potencial de interacción débil entre las dos regiones.

Este enfoque de modelización ha sido empleado por numerosos autores para examinar una serie de fenómenos asociados al proceso de indentación en metales. Por ejemplo, Fang y Wu realizaron simulaciones por MD de ensayos de indentación en capas de níquel, aluminio y aluminio-níquel, para determinar el impacto de la deformación, el contacto y la adhesión [19]. Los resultados de este estudio demostraron el «salto» de átomos de las muestras al indentador, así como la pérdida de algunos de estos átomos cuando permanecen adheridos al indentador de diamante tras el proceso de indentación.

En este tipo de publicaciones el indentador se considera un sólido infinitamente rígido; por lo tanto, no puede deformarse en contacto con la muestra. Además, aunque se considera el potencial de interacción entre los dos sólidos, se emplean modelos de contacto que no tienen en cuenta los fenómenos adhesivos, lo que da lugar a discrepancias entre los resultados numéricos y las predicciones teóricas.

Un ejemplo de este hecho es la investigación desarrollada por Li et al. que analizaron la influencia de la adherencia en la indentación esférica de un indentador rígido sobre cobre [20]. En este estudio, los investigadores emplearon los modelos de contacto de Hertz, JKR [21] y DMT [22] para analizar los resultados obtenidos y llegaron a la conclusión de que ninguno de estos modelos de contacto podía explicar completamente el comportamiento observado del sustrato de cobre.

Indudablemente, la elección de los diferentes potenciales de interacción entre los átomos implicados en el problema es la clave para realizar una buena simulación de dinámica molecular, pero para simular un ensayo de indentación también es necesario elegir la mejor manera de simular los dos sólidos que entran en contacto (indentador y muestra) y la interacción entre ellos en la zona de contacto.

2. Metodología

2.1. Modelización de los sistemas atómicos

En este estudio se han realizado simulaciones numéricas del ensayo de indentación, por medio de la herramienta Large-scale Atomic/Molecular Massively Parallel (LAMMPS) [23].

Con el fin de comparar los diferentes sistemas de simulación, se han modelizado muestras de oro y níquel de 160x90x160 Å, considerando un sistema de referencia cartesiano XYZ. Sobre estos sistemas se han impuesto condiciones de periodicidad en X y Z para simular sustratos infinitos, dado que la dirección de la indentación es a lo largo del eje Y.

Las muestras metálicas se encuentran divididas en dos grupos de átomos: los átomos fijos que constituyen la capa inferior de las muestras hasta una altura de 5 Å y se encuentran fijos durante el proceso de indentación; y el resto de los átomos de la muestra denominados átomos newtonianos que se mueven libremente obedeciendo la ley de movimiento. Las interacciones entre los átomos de las muestras metálicas de oro, cobre y níquel se han modelizado mediante el potencial de Foiles et al. [24].

Se han modelizado cuatro tipos de sistemas para analizar la indentación a escala atómica con un indentador de diamante de 20 Å de radio. La diferencia entre estos sistemas radica en la modelización del indentador de diamante: indentadores que se pueden deformar en contacto con la muestra metálica, con y sin adhesión; e indentadores rígidos que no se pueden deformar en contacto con la muestra metálica, también con y sin adhesión. En los modelos con el indentador deformable, la interacción entre los átomos de carbono se ha descrito mediante el potencial de Tersoff [25,26].

En la figura 1 se muestra la representación de los sistemas modelizados. El caso más realista sería el que se observa en la figura 1 a) en el cual se permite que el indentador se pueda deformar cuando entra en contacto con la muestra metálica, para ello sólo se ha impuesto el movimiento en el casquete esférico superior de 5 Å del indentador y el resto de los átomos se mueven acorde a la ley de movimiento. En la figura 1 b) se muestra una de las primeras simplificaciones que se pueden hacer al modelizar estas indentaciones diamante-metal, el indentador se considera como un sólido rígido impidiendo que se deforme cuando entran en contacto ambos sólidos, debido a la gran diferencia entre el diamante y el metal.

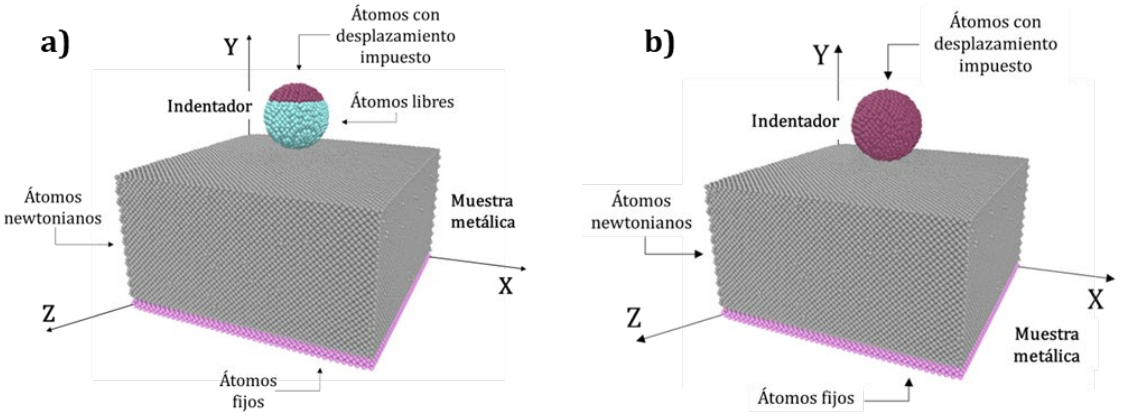


Figura 1: Representación de los sistemas modelizados en DM: a) sistema con un indentador deformable; y b) sistema con un indentador rígido

En estos modelos, se han empleado las reglas de las mezclas de Lorentz-Berthelot [27,28] para determinar los parámetros de interacción del potencial de Lennard-Jones que rige las interacciones débiles entre diamante-metal. Los parámetros considerados son la energía del pozo de potencial ε, la distancia a la que el potencial es nulo σ y la distancia a partir de la cual no se consideran las interacciones débiles r_{corte}. Para los átomos metálicos considerados en este trabajo se han utilizado los parámetros propuestos por Erkoç [29] y para los átomos de diamante los calculados por Che et al. [30]. Ambos grupos de valores se han incluido en la Tabla 1.

Tabla 1: Parámetros de interacción LJ

Contacto	ε (eV)	σ (Å)	r_{corte} (Å)
Au-C	**0.035**	**3.02**	**8**
Ni-C	**0.038**	**2.84**	**7.2**

La siguiente simplificación bastante aceptada en la bibliografía es omitir el efecto de la adhesión entre el indentador y la muestra. Con este propósito, se ha modelizado el sistema con el indentador deformable, pero considerando una energía de pozo de potencial de LJ muy próxima a cero (10^{-4} eV). De esta forma, solo se considera el efecto de repulsivo del indentador sobre el metal, para evitar la interpenetración.

Por último, se considera también el modelo sin adhesión con el indentador rígido, haciendo uso del comando "indent" de LAMMPS, que permite incluir una región carente de átomos que actúa repeliendo los átomos más cercanos.

En todas las simulaciones se ha realizado en primer lugar una minimización de la energía potencial, para asegurar que todos los átomos se encuentran en su posición de equilibrio de mínima energía. Después se ha sometido el sistema a un colectivo canónico (NVT) a 300 K durante 60 ps. Una vez el sistema está en equilibrio se inicia el proceso de indentación a 20 m/s hasta que la profundidad de indentación alcanza 4 Å. Durante el proceso de indentación los átomos sin desplazamiento impuesto, se encuentran sometidos a un colectivo microcanónico (NVE).

2.2. Análisis de los resultados

Para comparar los distintos métodos de modelización planteados, se han estudiado las propiedades obtenidas de las indentaciones numéricas. En las indentaciones donde se ha considerado los efectos de la adhesión entre la muestra y el indentador, se ha aplicado el modelo de contacto de Maugis con la aproximación de Piétrement y Troyon [31], siguiendo la metodología propuesta por González-Tortuero et al. [32]. De esta forma, es posible determinar el módulo elástico del metal FCC E y la energía de adhesión entre esta muestra y el indentador de diamante ω, sin presuponer un modelo de contacto o alguna de estas propiedades.

En las indentaciones donde no se considera la adhesión, se ha aplicado el modelo de contacto de Hertz, obteniendo el módulo elástico de los metales FCC analizados.

Adicionalmente, se ha obtenido el radio de contacto a entre el indentador y la muestra metálica. El procedimiento comienza con la identificación el centro de masas del indentador. A continuación, se determina el casquete esférico de los átomos de la muestra metálica, que cumplan que su distancia al centro de masas del indentador es igual a la distancia del radio del indentador más la distancia de equilibrio. Estos átomos metálicos del casquete esférico se proyectan sobre el plano XZ y se calcula, a su vez, su centro de masas y la distancia de cada átomo a este punto. El radio de contacto se considera como el mayor valor más repetido de las distancias obtenidas empleando una distribución de valor extremo, como se puede observar en la Figura 2.

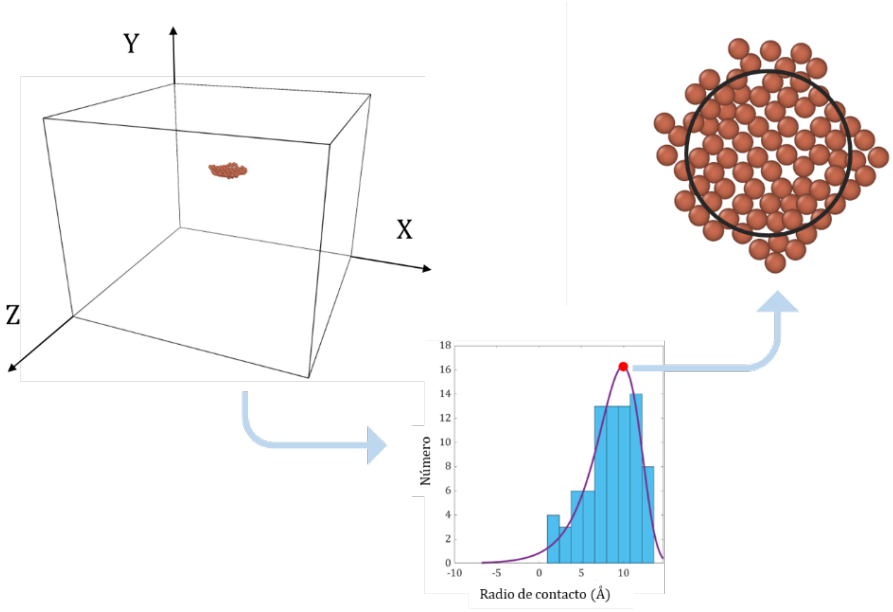


Figura 2: Representación del casquete esférico obtenido de los átomos metálicos y la determinación del radio de contacto.

3. Resultados y discusión

En las Figuras 3 a) y b) se recogen las curvas fuerza F- desplazamiento δ del proceso de indentación de diamante sobre níquel cuando se considera la adhesión entre ambos materiales, con un indentador deformable y rígido, respectivamente. En estas gráficas se incluye el proceso de carga y de descarga obtenidos mediante la simulación numérica y, adicionalmente, se ha representado el registro F-δ obtenido al aplicar el modelo de Maugis con la aproximación de PT, obteniendo así el módulo elástico del metal E y la energía de adhesión del contacto ω.

Como se puede observar en la Figura 3, los resultados obtenidos en las curvas F-δ son muy similares tanto si se considera el indentador como un sólido que se puede deformar o como un sólido rígido. En ambos casos, se ha obtenido un valor máximo de fuerza de adhesión de 10 nN. Además, los valores máximos de fuerza en el inicio de la rama de descarga son de 104 y 109 nN para el indentador deformable y rígido, respectivamente.

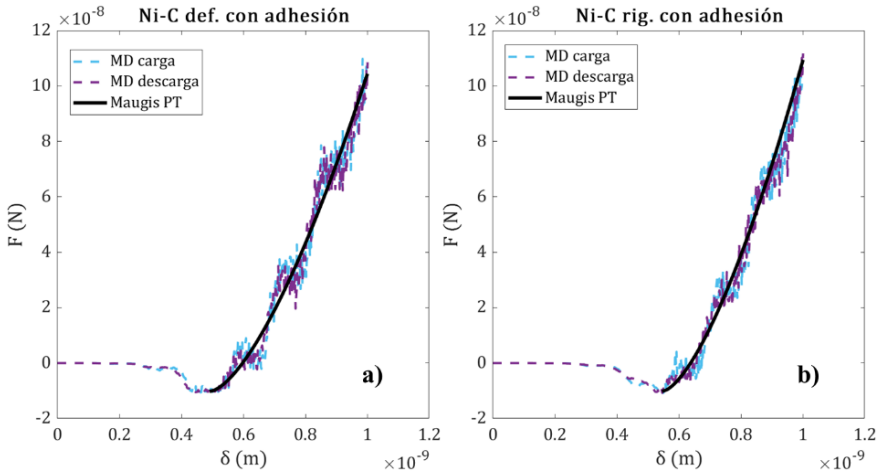


Figura 3: Curvas F-δ del proceso de indentación Ni-C considerando el efecto de la adhesión entre el metal y el indentador de diamante: a) indentador deformable; b) indentador rígido.

En las Figuras 4 a) y b) se muestran los resultados del proceso de indentación de diamante sobre níquel sin considerar los efectos de la adhesión, cuando se considera el indentador de diamante deformable y rígido, respectivamente. En este caso se pueden observar muchas más fluctuaciones locales en el registro de fuerza cuando se emplea el comando facilitado por LAMMPS. En estos casos, no se observa el registro de fuerza negativo asociado al efecto adhesivo entre ambos materiales y en el inicio de la rama de descarga los valores máximos de fuerza registrados son de aproximadamente 114 nN, un valor ligeramente superior a los mostrados en la Figura 3.

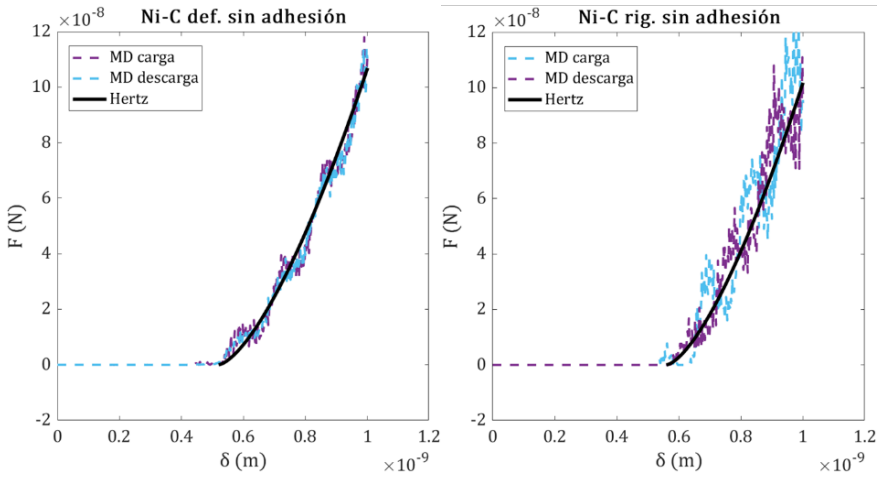


Figura 4: Curvas F-δ del proceso de indentación Ni-C sin considerar el efecto de la adhesión entre el metal y el indentador de diamante: a) indentador deformable; b) indentador rígido.

Analizando los registros obtenidos con los modelos de contacto adecuados en cada caso modelizado, se han obtenido los parámetros mostrados en la Tabla 2, donde se ha incluido el radio combinado R^* y la referencia del módulo elástico teórico E_t:

Tabla 2: Propiedades obtenidas del contacto Ni-C en el proceso de indentación

Indentador	Adhesión	Modelo de contacto	*Et* (GPa)	*E* (GPa)	*ω* (J/m2)	*R** (Å)
Deformable	**Sí**	**Maugis**	**205**	**204**	**0.86**	**20**
Rígido	**Sí**	**Maugis**	**205**	**204**	**0.84**	**20**
Deformable	**No**	**Hertz**	**205**	**202**	**-**	**-**
Rígido	**No**	**Hertz**	**205**	**206**	**-**	**-**

En la Figura 5 se muestran las curvas F-δ obtenidas de las simulaciones numéricas del proceso de indentación Au-C en el que se considera los efectos de la adhesión. En la Figura 5 a) se muestra el registro obtenido al considerar un indentador deformable y en la b) cuando se supone a este sólido rígido.

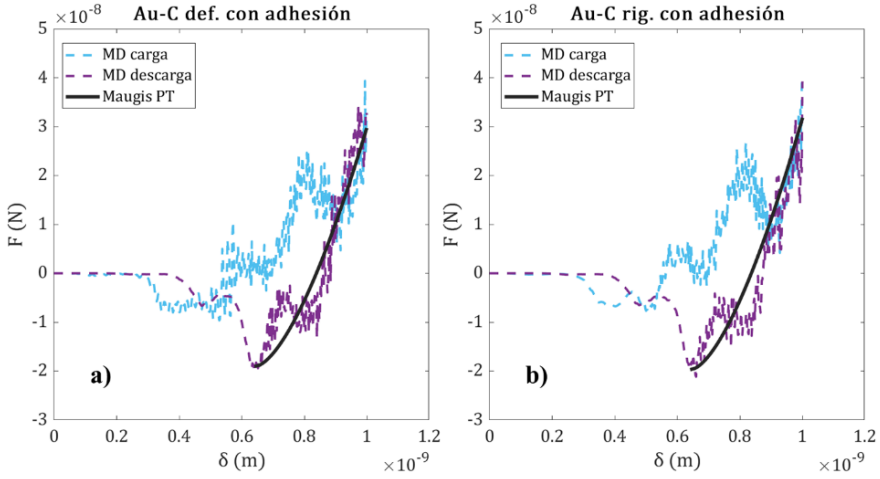


Figura 5: Curvas F-δ del proceso de indentación Au-C considerando el efecto de la adhesión entre el metal y el indentador de diamante: a) indentador deformable; b) indentador rígido.

De nuevo, en estos registros donde solo se varía la modelización del indentador, se observan gráficas muy similares. En estos casos, el valor máximo de fuerza obtenido en la rama de descarga es de 20 y 25 nN en el caso del indentador deformable y rígido, respectivamente. Estos registros significativamente inferiores a los obtenidos en el contacto Ni-C, debido a la diferencia de rigidez de los materiales. Adicionalmente, el valor de la fuerza máxima de adhesión es de 19 nN en los dos casos modelizados de Au-C. Aunque el valor de la fuerza de adhesión es 9 nN superior que en el contacto Ni-C, se puede observar en la Figura 5 la presencia de un ciclo de histéresis entre la rama de carga y descarga, para la misma profundidad de penetración.

Por otro lado, en la Figura 6, también se recogen las curvas F-δ en el proceso de indentación del Au-C, pero sin considerar la energía de adhesión entre estos sólidos. En la Figura 6 a) se considera un indentador de diamante sin

adhesión con la muestra deformable, y en la Figura 6 b) se ha modelizado el indentador rígido a través del comando "indent" que proporciona LAMMPS. Como se ilustra, no considerar el efecto de la adhesión cambia sustancialmente el registro obtenido, ya que en las Figuras 6 a) y b) no se presenta el ciclo de histéresis. Además, los valores máximos de fuerza en el inicio de la descarga son superiores que en los dos casos donde se considera la adhesión, siendo estos valores de 38 nN en ambos casos. Este incremento es de aproximadamente un 50% respecto de la simulación anterior.

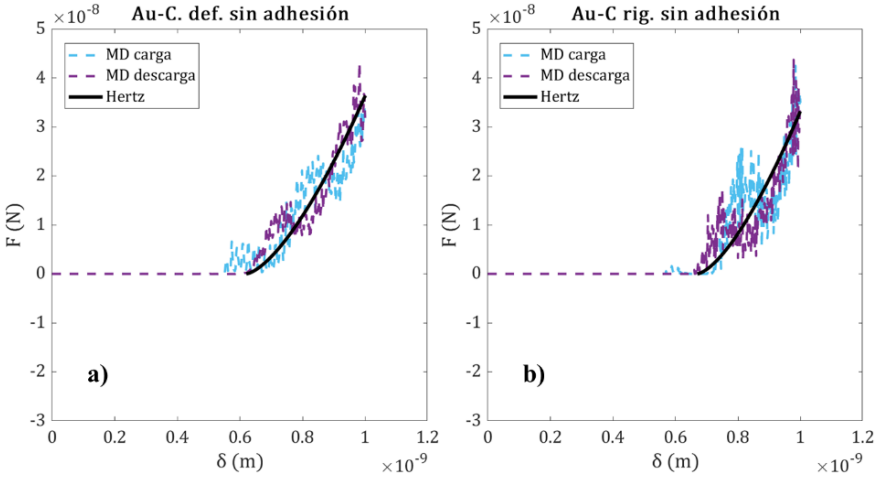


Figura 6: Curvas F-δ del proceso de indentación Au-C sin considerar el efecto de la adhesión entre el metal y el indentador de diamante: a) indentador deformable; b) indentador rígido.

En la Tabla 3 se muestran los resultados obtenidos en cada simulación del módulo elástico del oro y de la energía de adhesión (si procede) del contacto oro-diamante:

Tabla 3: Propiedades obtenidas del contacto Au-C en el proceso de indentación

Indentador	Adhesión	Modelo de contacto	Et (GPa)	E (GPa)	ω (J/m2)	$R*$ (Å)
Deformable	**Sí**	**Maugis**	**73**	**75**	**0.64**	**51**
Rígido	**Sí**	**Maugis**	**73**	**76**	**0.65**	**52**
Deformable	**No**	**Hertz**	**73**	**71**	**-**	**-**
Rígido	**No**	**Hertz**	**73**	**76**	**-**	**-**

Para finalizar esta comparativa, también se han determinado los radios de contacto en las simulaciones como se ha descrito en el apartado de metodología. Estos valores se han representado junto con las predicciones para este parámetro que proporcionan los principales modelos de la mecánica de contacto: Hertz, DMT, JKR y Maugis con la aproximación COS, como se muestra en las Figuras 7 a) y b) para el caso del Ni-C y Au-C, respectivamente.

Como se puede observar en la Figura 7 a) los radios de contacto obtenidos de las simulaciones numéricas del Ni-C presentan poca variación entre sí, tanto si se considera el indentador deformable como rígido, o si no se tiene en cuenta el fenómeno de adhesión. Estos resultados se encuentran muy próximos a las predicciones de Hertz o DMT, excepto en los últimos pasos de la descarga donde la medición se aleja de estos modelos.

Sin embargo, en la Figura 7 b) que recoge los radios de contacto determinados en las simulaciones Au-C, se observa una tendencia completamente distinta al caso Ni-C. En el contacto Au-C, despreciar los efectos de la adhesión produce unos errores en la estimación del radio de contacto de aproximadamente del 30%. Adicionalmente, si se empleasen las predicciones del modelo JKR, se sobrestimaría este parámetro, dando lugar a una estimación incorrecta de las propiedades mecánicas de este material.

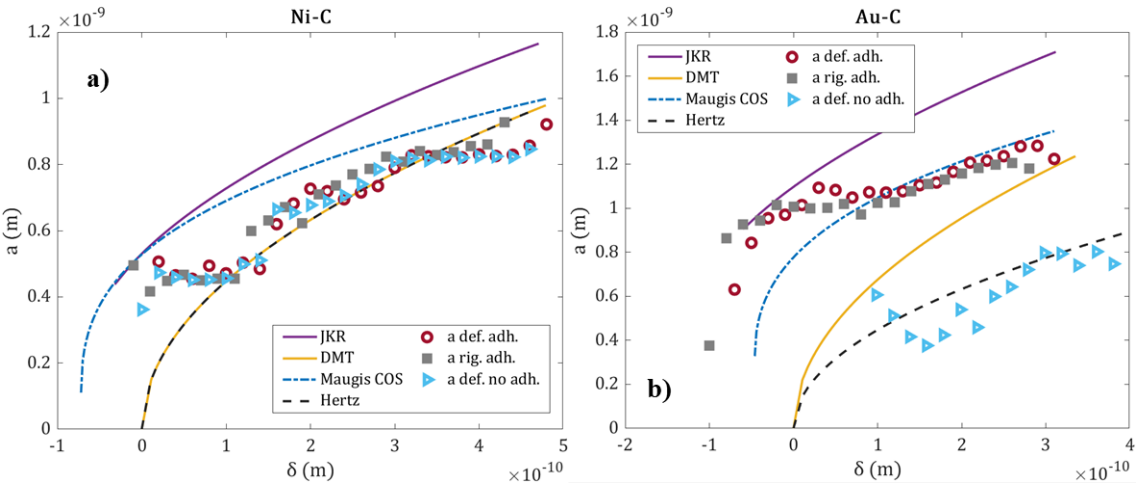


Figura 7: Radio de contacto obtenidos en la rama de descarga del proceso de indentación mediante MD: a) Ni-C; b) Au-C.

4. Conclusiones

Del estudio realizado de las indentaciones de diamante sobre metales FCC, se pueden extraer las siguientes conclusiones:

- El carácter rígido o deformable del indentador no afecta a los resultados obtenidos, debido a la gran diferencia que existe entre la rigidez del diamante y del metal FCC. Por este motivo, es posible realizar esta simplificación en la simulación, sin comprometer los resultados obtenidos.
- Los cuatro modelos propuestos permiten obtener satisfactoriamente el módulo elástico del metal ensayado. Sin embargo, es necesario considerar adecuadamente el modelo de contacto a emplear.
- Aunque las modelizaciones que no tienen en cuenta la adhesión entre el indentador y el metal FCC, permiten obtener el módulo elástico del material aplicando el modelo de contacto de Hertz, proporcionan registros F-δ completamente distintos de los que se obtendrían en un caso real. Este hecho es más evidente cuando se observan los registros F-δ que presentan un ciclo de histéresis en el proceso de indentación.
- Despreciar los efectos de la adhesión entre el indentador de diamante y las muestras metálicas FCC a estas escalas, produce errores significativos en otras mediciones como la del radio de contacto. Esta desviación provoca a su vez errores en la estimación de las propiedades mecánicas de los materiales analizados.

5. Referencias

[1] Palacio MLB, Bhushan B. Tutorial review Depth-sensing indentation of nanomaterials and nanostructures. Mater Charact 2013;78:1–20. https://doi.org/10.1016/j.matchar.2013.01.009.

[2] Tricoteaux A, Duarte G, Chicot D, Bourhis E Le, Bemporad E, Lesage J. Depth-sensing indentation modeling for determination of Elastic modulus of thin films. Mech Mater 2010;42:166–74. https://doi.org/10.1016/j.mechmat.2009.11.016.

[3] Fischer-Cripps AC. Nanoindentation. Third Edit. Springer; 2011. https://doi.org/10.1007/978-1-4419-9872-9.

[4] Lee JG. Computational Materials Science: An Introduction. First. CRC Press; 2012.

[5] Wan S, Sinclair RC, Coveney P V. Uncertainty quantification in classical molecular dynamics. Philos Trans R Soc A 2021;379:20200082. https://doi.org/10.1098/rsta.2020.0082.

[6] Huang J, Liu Y, Yu X, Huang Y, Liu G, Huang Z, et al. Nano mechanical property analysis of single crystal copper using Berkovich nano indenter and molecular dynamic simulation. Comput Mater Sci 2021;188:110237. https://doi.org/10.1016/j.commatsci.2020.110237.

[7] Komanduri R, Chandrasekaran N, Raff LM. MD simulation of indentation and scratching of single crystal aluminum. Wear 2000;240:113–43. https://doi.org/10.1016/S0043-1648(00)00358-6.

[8] Fang TH, Chang WY, Huang JJ. Dynamic characteristics of nanoindentation using atomistic simulation. Acta Mater 2009;57:3341–8. https://doi.org/10.1016/j.actamat.2009.03.048.

[9] Zhao Y, Peng X, Fu T, Sun R, Feng C, Wang Z. MD simulation of nanoindentation on (001) and (111) surfaces of Ag-Ni multilayers. Phys E Low-Dimensional Syst Nanostructures 2015;74:481–8. https://doi.org/10.1016/j.physe.2015.08.020.

[10] Liu H, Xu C, Liu C, He G, Yu T, Li Y. Probing the indentation induced nanoscale damage of rhenium. Mater Des 2020;186:108362. https://doi.org/10.1016/j.matdes.2019.108362.
[11] Ziegenhain G, Hartmaier A, Urbassek HM. Pair vs many-body potentials: Influence on elastic and plastic behavior in nanoindentation of fcc metals. J Mech Phys Solids 2009;57:1514–26. https://doi.org/10.1016/j.jmps.2009.05.011.
[12] Huang Y, Yang Z, Lu Z. Nanoindentation of bio-inspired graphene/nickel nanocomposites: A molecular dynamics simulation. Comput Mater Sci 2021;186:109969. https://doi.org/10.1016/j.commatsci.2020.109969.
[13] Shinde AB, Patil S, Patil P, Salunkhe R, Sande R, Pawar S, et al. Dislocation and deformation analysis of Cu-Ni thin films during Nano-indentation using molecular dynamics simulation approach. Mater Today Proc 2021;49:1453–61. https://doi.org/10.1016/j.matpr.2021.07.226.
[14] Tucker GJ, Foiles SM. Molecular dynamics simulations of rate-dependent grain growth during the surface indentation of nanocrystalline nickel. Mater Sci Eng A 2013;571:207–14. https://doi.org/10.1016/j.msea.2012.08.045.
[15] Hertz H. Miscellaneous Papers. London: MacMillan and Co.; 1896.
[16] Oliver WC, Pharr GM. An improved technique for determining hardness and elastic modulus using load and displacement sensing indentation experiments. J Mater Res 1992;7:1564–83. https://doi.org/10.1557/JMR.1992.1564.
[17] Johnson KL. Mechanics of adhesion. Tribol Int 1999;31:413–8.
[18] Perni S, Prokopovich P. Multi-asperity elliptical JKR model for adhesion of a surface with non-axially symmetric asperities. Tribol Int 2015;88:107–14. https://doi.org/10.1016/j.triboint.2015.03.001.
[19] Fang TH, Wu JH. Molecular dynamics simulations on nanoindentation mechanisms of multilayered films. Comput Mater Sci 2008;43:785–90. https://doi.org/10.1016/j.commatsci.2008.01.066
[20] Li L, Song W, Xu M, Ovcharenko A, Zhang G. Atomistic insights into the loading - Unloading of an adhesive contact: A rigid sphere indenting a copper substrate. Comput Mater Sci 2015;98:105–11. https://doi.org/10.1016/j.commatsci.2014.10.064.
[21] Johnson KL, Kendall K, Roberts AD. Surface energy and the contact of elastic solids. Proc R Soc A Math Phys Eng Sci 1971;324:301–13. https://doi.org/10.1098/rspa.1971.0141.
[22] Derjaguin B V., Muller VM, Toporov YP. Effect of contact deformations on the adhesion of particles. J Colloid Interface Sci 1975;53:314–26. https://doi.org/10.1016/0021-9797(75)90018-1.
[23] Thompson AP, Aktulga HM, Berger R, Bolintineanu DS, Michael Brown W, Crozier PS, et al. LAMMPS - A flexible simulation tool for particle-based materials modeling at the atomic, meso, and continuum scales. Comput Phys Commun 2021:108171. https://doi.org/10.1016/j.cpc.2021.108171.
[24] Foiles SM, Baskes MI, Daw MS. Embedded-atom-method functions for the fcc metals Cu, Ag, Au, Ni, Pd, Pt, and their alloys. Phys Rev B 1986;33:7983–91. https://doi.org/10.1103/PhysRevB.33.7983.
[25] Tersoff J. New empirical approach for the structure and energy of covalent systems. Phys Rev B 1988;37:6991–7000. https://doi.org/10.1103/PhysRevB.37.6991.
[26] Tersoff J. Modeling solid-state chemistry: Interatomic potentials for multicomponent systems. Phys Rev B 1989;39:5566–8. https://doi.org/10.1103/PhysRevB.39.5566.
[27] Lorentz HA. Ueber die Anwendung des Statzes vom Virial in der kinetischen Theorie der Gase. Ann Phys 1881;248:127–36. https://doi.org/10.1002/andp.18812480110.
[28] Berthelot D. Sur le mélange des gaz. C R Hebd Seances Acad Sci 1898;126:1703–855.
[29] Erkoç Ş. Empirical many-body potential energy functions used in computer simulations of condensed matter properties. Phys Rep 1997;278:79–105. https://doi.org/10.1016/S0370-1573(96)00031-2.
[30] Che J, Cagin T, Goddard WA. Generalized extended empirical bond-order dependent force fields including nonbond interactions. Theor Chem Acc 1998;102:346–54. https://doi.org/10.1007/s002140050506.
[31] O. Piétrement, M. Troyon, General equations describing elastic indentation depth and normal contact stiffness versus load, J. Colloid Interface Sci. 226 (2000) 166–171. https://doi.org/10.1006/jcis.2000.6808.
[32] González-Tortuero S, Garrido MA, Rodríguez J. An adhesion study in Ni and Cu nanocontacts from a molecular dynamics perspective. Eur J Mech A/Solids 2023;99. https://doi.org/10.1016/j.euromechsol.2023.104942.