

## MODELAREA ȘI SIMULAREA UNUI PROCES DE REALIZARE A NANOĞĂURILOR PRIN ELECTROEROZIUNE

### MODELING AND SIMULATION OF A PROCESS OF NANOHOLES ELECTRICAL DISCHARGE MACHINING

BĂZĂR Diana, DUMITRU Steluța și DOGARU Adrian

Facultatea: Inginerie Industrială și Robotică, Specializarea: Tehnologia Construcțiilor de Mașini, Anul de studii: IV, e-mail: bazardiana20@gmail.com

Conducător științific: Prof. dr. ing. **Daniel GHICULESCU**

*ABSTRACT: The paper deals with the modeling and simulation of machining nanoholes by electrical discharge machining (nEDM). The state of the art is approached concerning different types of nanotechnologies applied for achieving nanoholes very much required nowadays in different fields like medicine, IT, electronics etc. The nEDM offers a lower cost technology to obtain nanoholes within the most used materials, in the mentioned domains, like Au, Ti and Ni. The finite element analysis with Comsol Multiphysics was applied to nEDM of nanoholes, based on two models: constant radius and time dependent radius of discharge plasma channel. The variations of hole radius and depth depending on discharge time were presented, emphasizing influence of material, and initial roughness. The data from computers models were validated by experiments from the state of the art.*

*CUVINTE CHEIE: nanogauri, nanotehnologii, electroeroziune, modelare, experimentare.*

#### 1. Introducere

Conceptul de nanotehnologie a fost introdus de Richard Feynman, prin lucrarea There's Plenty of Room at the Bottom. Domeniul nano cuprinde dimensiuni de la 1 la 999 nm.

În această prelegere, Feynman a prezentat studenților o scară mică, ceea ce creează un domeniu de cercetare în știință. Feynman are această idee grozavă de a reduce dimensiunea; este un indiciu pentru a ajuta oamenii de știință să descopere nanotehnologia. Posibilitatea manipulării și controlului obiectelor mici nu încalcă principiul fizicii și este posibil să fie nevoie să ne gândim la scară atomică. În aceeași linie de producție și consumatoare de timp, poate fi chiar un beneficiu economic pentru această afacere de a face lucrurile foarte mici și mici. Când avem capacitatea de a manipula materialele la scară atomică sau moleculară, am putea avea șansa de a merge mai departe la un nivel avansat. Mai mult, este posibil să aflăm multe fenomene inedite în lumea minusculă.[1]

Nanotehnologiile sunt tot mai des întâlnite în domeniul industrial, de la lasere până la prelucrări prin electroeroziune. Tehnologiile de prelucrare neconvenționale utilizează concentrarea de energie, de la sculă la piesă, pe o suprafață foarte mică, făcându-le mult mai adecvate pentru domeniul nano [18].

Procedee de prelucrare precum: acelea cu radiație laser, fascicul de electroni și de ioni, chimică și fotochimică sunt exemple de procedee care permit prelucrarea unor suprafețe compatibile cu domeniul nanometric.

Pentru fabricarea sistemelor la nano-scala avem nevoie de anumite caracteristici esențiale pentru prelucrarea cavităților, canalelor, etc. [2] Una dintre cele mai mari provocări cu care se confruntă prelucrarea la nano-scala [3] constă în producerea unor caracteristici la scară nano pe diverse materiale precum aur, nichel, polimeri metalizați pentru aplicații electronice și pe titan greu de tăiat, aliaje pentru aplicații bio-medicale [3]. Prin urmare, dezvoltarea de noi procese capabile de prelucrare nano dispune de o gama largă de materiale la care sunt esențiale o viteză mare și un cost redus.

Procedeul de electroeroziune (EDM – electrical discharge machining) poate răspunde la această provocare tehnologică datorită capacității sale de concentrare a descărcării de energie în canalul de plasmă, a cărui secțiune poate fi încadrată în domeniul micro, chiar și nano. De asemenea, EDM mai prezintă

avantajul costurilor mai scăzute decât a altor prelucrări neconvenționale cum ar fi laser, ion și prelucrarea fasciculului de electroni care sunt capabile să producă suprafețe prin ultraminiaturizare [4].

## 2. Echipamente pentru nano-electroeroziune

Diverse echipamente și procese utilizate pentru îndepărtarea materialului la scară nano ar fi: microscopul de scanare a sondei (STM) pe baza de indentare și zgariere [5-6], nano-imprimare [7], fascicul de ioni focalizați (FIB) [8-9], laser femto-second [10], litografie UV [11], litografie cu fascicul de electroni (EBL) [12] și litografie cu raze X [13]. Cele mai multe dintre aceste tehnici abordează în primul rând îndepărtarea materialelor polimerice și de siliciu.

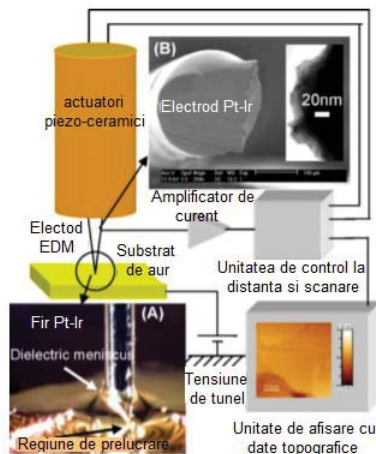


Fig. 1. Schema configurației nano-EDM.

Figura 1 prezintă o schemă a procesului nano-EDM cu inserții care prezintă geometria tipică a regiunii active a vârfului nano-sucei, interfața lichidă dintre vârful sucei și suprafața de aur atomic plană și morfologia tipică a vârfului. În timpul prelucrării, vârful sucei nano-EDM [17] a fost părtinitor astfel încât să producă curenți de tunel negativ, ceea ce duce la un flux de electroni de la vârful sucei nano-electrod către substrat, analog metodologiei utilizate în procesul EDM la scară macro .

Materialul Pt-Ir a fost ales datorită conductivității sale electrice bune, stabilității (electrodul nu oxidează în timpul procesului de prelucrare), și temperatura ridicată de topire, dar de asemenea se poate folosi și wolfram. Electrozii subțiri pot fi obținuți cu vârful ascuțit de câțiva atomi, care este necesar pentru STM.

## 3. Parametrii de proces

Procesul nano-EDM a fost realizat cu ajutorul unui instrument de electrod metallic (rază la vârf – 15-20 nm și fabricat dintr-un aliaj de Platină-Iridiu Pt-Ir) și un ulei dielectric “gata de folosință” (rezistență dielectrică > 41,2 kV/ 2,5 mm). Sondă conductoare electric și piesă de prelucrat au fost separate printr-un decalaj de 2 nm și STM a fost operat într-un mod de curent constant în timpul procesului de prelucrare [16].

Caracteristicile au fost scrise prin aplicarea a 10V între un vârf Pt-Ir și suprafața monstreii de aur folosind impulsuri de 60, 90 și 120 de secunde în ulei dielectric. Bavura creată prin prelucrare rămâne la suprafață, deoarece în aceste condiții experimentale nu a existat posibilitatea îndepărtării sale cu lichid dielectric (spălare).

Figura 2 (A) prezintă nano-EDM cu o caracteristică de raport de aspect -1: 1 pe suprafața de aur. Profilul secțional al funcției prin intermediul caracteristicii demonstrează îndepărtarea materialului bine definit cu profil în formă de "V". Diferența de descărcare de 2nm dintre electrod și substratul de aur a fost menținută de curentul de tunelare constantă. Astfel, acest profil în formă de "V" este imaginea negativă a electrodului utilizat pentru prelucrare, similar cu prelucrarea observată în EDM cu scufundare macro.

Figura 2 (B) prezintă morfologia materialului re-depus generat în timpul procesului nano-EDM. Un strat re-depus este, de asemenea, observat în mod obișnuit în procesele de prelucrare macro și micro descărcare.

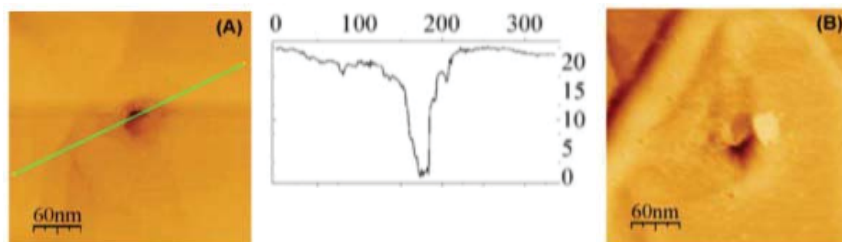


Fig. 2. (A) Secțiune transversală a unei funcții nano-EDM creată la 90 de secunde timp de prelucrare cu impuls de 10V, 1nA. (B): caracteristica Nano-EM creată la 240 secunde timp de prelucrare și 10V.

#### 4. Modelare cu metoda elementelor finite

Modelarea s-a realizat în Comsol Multiphysics cu ajutorul modulului dependent de timp al transferului de căldură în solide.

Relațiile de calcul utilizate în modelul Comsol sunt:

$$\rho C_p \frac{\partial T}{\partial t} + \rho C_p u_{trans} \cdot \nabla T = \nabla \cdot (k \nabla T) + Q \quad (1)$$

unde:  $\rho$  – densitatea [kg/m<sup>3</sup>];  $C_p$  – capacitatea calorică la presiune constantă [J/kg K];  $k$  – conductivitatea termică [W/mk];  $u_{trans}$  - vectorul de transport (în cazul modelului cu raza canalului de plasmă variabilă în timp) [m/s];  $Q$ - cantitatea de căldură introdusă în volumul piesei de probă de către descărcarea electrică [J].

Prima abordare a fost cu rază constantă a canalului de plasmă. A doua abordare studiată pentru realizarea prelucrărilor de nanogăurilor cu ajutorul EDM este acela cu rază variabilă a canalului de plasmă. Timpul de impuls ales pentru realizare este de 60, 90 și 120 secunde. Cel de-al doilea model realizat se bazează pe modelul lui Salonitis [19] care a considerat următoarea relație de calcul pentru rază canalului de descărcare în funcție de dependența de timp, adaptată pentru modelarea în COMSOL:

$$R_{cp} = 10000 \cdot I^{0,43} \cdot t_i^{0,44} \quad (2)$$

unde:  $I$  – curentul electric [A],  $t_i$  – timpul de impuls baleiat [s].

Etapele folosite la modelarea și simularea procesului de electroeroziune a nanogăurilor sunt prezentate în continuare:

*Etapa 1:* Parametrii de proces – în cadrul acestei etape s-a realizat parametrizarea procesului de realizare a nanogăurilor prin electroeroziune conform figurii 3 în cazul modelului cu rază constantă a canalului de plasmă, iar pentru abordarea cu rază variabilă a canalului de plasmă se adaugă parametrii prezentați în figura 4. În cazul celui de-al doilea model apare un timp de impuls baleiat care merge de la valoarea de 0 până la un timp de impuls final. Rularea programului a fost realizată pentru un timp de impuls final de 60, 90 și 120 de secunde.

Name	Expression	Value	Description
lp	2e6	2000000.0	lungime SF
hp	0.1e6	100000.0	inaltime SF
acr	100	100	raza microvale initiala
bcr	10	10	adancime microvale initiala
ti	0.1e-6	1.0E-7	timp de impuls
rcp	5	5	raza canal plasma
tf	2800 + 273.15	3073	temperatura de fierbere Au
rbg	250	250	raza bula gaz
tt	1064	1064	temperatura de topire Au

Fig. 3. Parametrizarea procesului de realizare a nanogăurilor prin electroeroziune modelare prin variație a timpului de impuls

Name	Expression	Value	Description
tif	90	90	timpul de impuls final
ti	0	0	timpul de impuls baleiat
rcpt	$k \cdot I^{0.43} \cdot t_i^{0.44}$	0	raza canal plasma dependenta...
k	10000	10000.0	constanta model Salonitis
I	1e-9	1.0E-9	curentul descarcarii

Fig.4. Parametrii utilizați pentru modelare cu rază variabilă în funcție de timpul de impuls

*Etapa 2:* Geometria – s-a realizat folosind unitatea de măsură nm pentru evitarea erorilor de desen. Acesta s-a reprezentat cu microneregularitățile suprafeței folosind 2 elipse, pentru a simula cât mai real situația prezentată. Pentru început s-a realizat un dreptunghi care reprezintă secțiunea canalului de plasmă format în timpul descărcării în procesul de gaurire n-EDM.

În cazul modelării cu rază variabilă a canalului de plasmă singură modificare care apare în cadrul geometriei. În plus față de modelul inițial apare raza canalului de plasmă dependentă de timp (rcpt) după relația dependenței de timp a lui Salonitis [19].

*Etapa 3:* Materialul – se alege materialul semifabricatului.

Materialele pe care le utilizăm pentru simulări sunt: Aur, Nichel și Tital. Acestea sunt cele mai utilizate în domeniul medical și electronic. În figura 5 se pot observa proprietățile de materialului care vor fi utilizate în continuare.

Property	Name	Value	Unit	Property group
✓ Thermal conductivity	k	327	W/(m*K)	Basic
✓ Heat capacity at constant pressure	Cp	125.604	J/(kg*K)	Basic
✓ Density	rho	rho(T)/K...	kg/m^3	Basic

Fig. 5. Selectarea materialului și proprietățile acestuia

*Etapa 4:* Au fost stabilite condițiile la limită pentru transferul de căldură – pentru a se realiza nanogăurirea, un prim pas este izolarea termică în jurul suprafeței unde este poziționată între 2 puncte (cele 2 puncte fiind marginea razei bulei de gaz față de origine  $\pm r_{bg}$ ). Acest lucru este evidențiat în figura 6. De asemenea este evidențiată temperatura materialului în mediul ambiant de 293.15K. În interiorul canalului de plasmă se setează temperatura de fierbere a Au +100K care este supraîncălzirea [4] conform figurii 7. Supraîncălzirea este dată de faptul că acolo există o presiune mare dată de canalul de plasmă pe zona unde se realizează descărcarea. Astfel presiunea fiind mare, materialul nu fierbe, doar se supraîncălzește și el va fierbe după ce se încheie descărcarea.

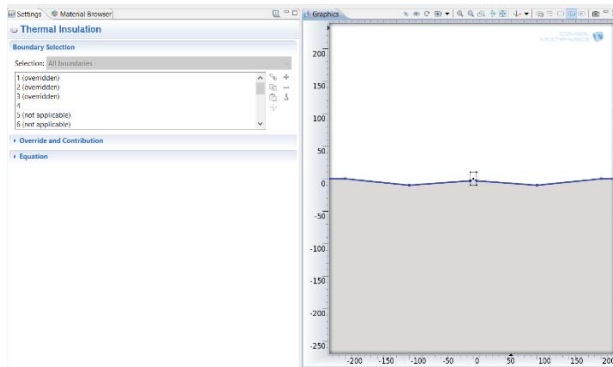


Fig. 6. Suprafețele izolate termic în jurul electrodului scula

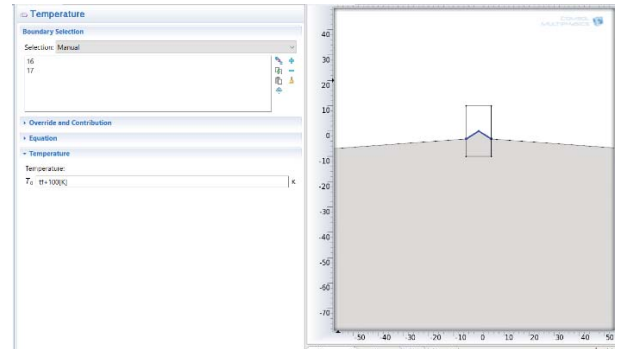


Fig. 7. Temperatura de fierbere a Aur-ului în interiorul canalului de plasmă

*Etapa 5:* Realizarea discretizării – în figura 8 este prezentată repartizarea mesh-ului în jurul suprafeței prelucrate, numărul de elemente ale mesh-ului pe piesă și calitatea medie a acestuia. În figura 8 este prezentată o calitate a rețelei obținută. În dreapta este prezentă bara de calitate a rețelei, unde 1 reprezintă calitatea maximă. Triunghiurile echilaterale reprezintă calitatea maximă iar cu cât triunghiurile sunt mai deformate cu atât calitatea scade.

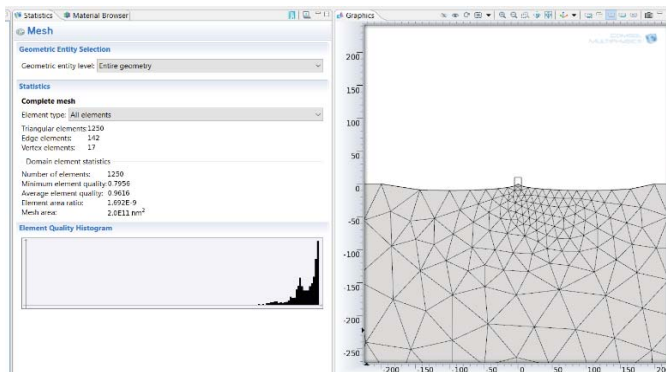


Fig. 8. Realizarea Mesh și elementele acestuia

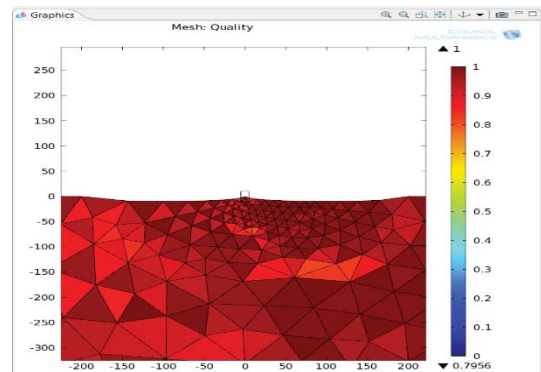


Fig. 9. Calitatea rețelei

#### *Etapa 6: Dependența de timp*

În această este prezentat domeniul de variație, unde 0 este valoarea inițială,  $0,1 \cdot t$  valoare intermediară și  $t$  valoare finală pentru modelul cu rază constantă a canalului de plasmă.

În cazul modelului cu rază variabilă a canalului de plasmă dependența de timp a procesului se modifică.

#### *Etapa 7: Rezultatele obținute*

În figura 10 este rezultatul final al modelului cu rază constantă a canalului de plasmă. Se poate observa domeniul care prin modelul supraîncălzirii ne arată că fierberea este principalul mecanism de îndepărtare a materialului la nano-EDM. În cadrul domeniului la temperatura minimă se utilizează temperatura de fierbere a materialului.

## 5. Rezultate obtinute

Conform informațiilor prezentate în paragrafele anterioare, am realizat două tipuri de modele simulate cu COMSOL Multiphysics pentru procedeul de gaurire nano EDM. Unul dintre aceste modele este cel cu rază constantă a canalului de plasmă ( $r_{cp} = 5 \text{ nm}$ ). S-a studiat variația razei și adâncimii prelucrate pentru diverse durate ale descărcări pe trei materiale: Aur, Titan și Nichel.

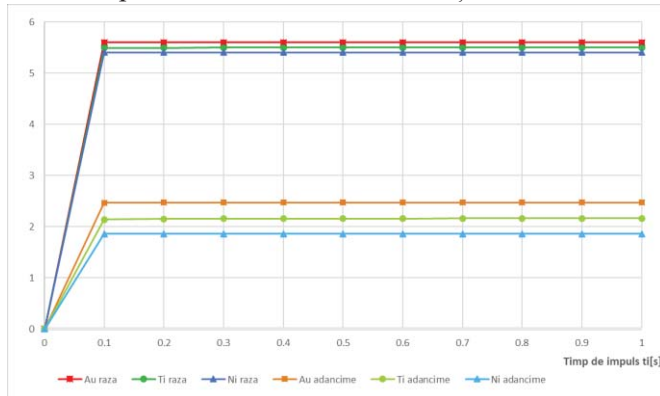


Fig. 11. Grafic de variație ale razei și adâncimii prelucrate [nm] pentru Aur, Titan și Nichel când rază canalului de plasmă este constantă

în funcție de timpul de impuls. Timpul de impuls ales pentru realizarea studiului este de 60, 90 și 120 secunde, pentru cele trei materiale. În figura 12 este prezentat graficul de variație al razei și adâncimii pentru cele trei materiale în funcție de timpul de impuls.

Pentru cel de-al doilea model, pentru care s-a realizat simularea procesului de electroeroziune a nano găurilor, s-au observat că în funcție de rugozitatea suprafeței mostrei, pe care s-a realizat procesul, sunt diferențe de prelucrare.

În figura 13 este prezentat graficul de variație a razei și adâncimii găurilor, când adâncimea microdepresiune de pe mostră diferă ( $Rz = bcr = 4, 8 \text{ și } 16 \text{ nm}$ ).

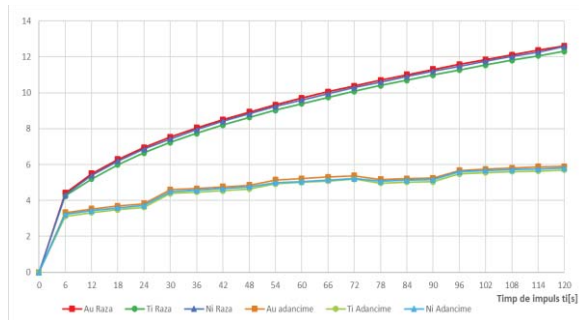


Fig. 12. Grafic de variație ale razei și adâncimii prelucrate [nm] pentru Aur, Titan și Nichel când raza canalului de plasmă este variabil în funcție de timpul de impuls (60, 90 și 120 secunde), la Rz constant

## 6. Concluzii

A fost abordată modelarea și simularea unui proces de prelucrare a nanogăurilor prin electroeroziune, utilizând metoda elementelor finite cu două modele de proces: cu rază constantă a canalului de plasmă și cu rază variabilă dependentă de timpul de descărcare. A fost determinată variația razei și

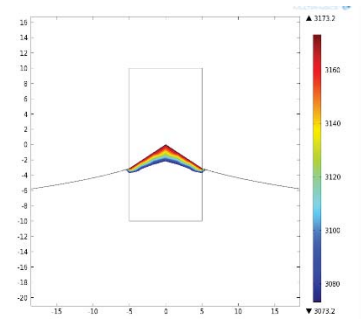


Fig.10. Material îndepărtat

Folosind modelul supraîncalzirii pe același grafic se reprezintă variația razei și adâncimii pentru cele trei materiale în intervalul 0 ... timpul de impuls și. Se studiază variația razei și adâncimii modificând timpul de impuls 0 ms ... 1s. În figura 11 este prezentat graficul de variație al razei și adâncimii pentru cele trei materiale în funcție de timpul de impuls.

Al doilea model studiat pentru prelucrarea nono găurilor cu ajutorul procesului EDM este acela cu rază variabilă

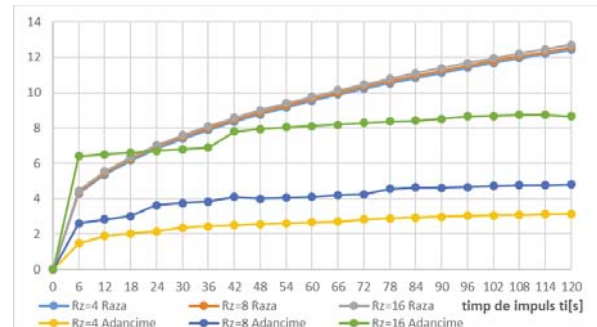


Fig. 13. Grafic de variația razei și adâncimii [nm] atunci când raza canalului de plasmă este variabilă în funcție de rugozitatea inițială Rz pentru Aur

adâncimii nanogăurii în cele două cazuri, obținându-se valori apropiate de datele experimentale din stadiul actual al domeniului. În cazul primului model, a fost pus în evidență o creștere bruscă a razei și adâncimii și menținerea pe un palier la creșterea duratei descărcării. La al doilea model, creșterea celor doi parametri este mai lentă la creșterea duratei descărcării. Comportamentul celor trei materiale studiate este relativ apropiat în acest domeniu dimensional. Valorile mai mari ale rugozității inițiale determină valori mai mari ale volumului de material prelucrat.

## 7. Bibliografie

- [1]. Feynman, Richard P. (1961). "There's Plenty of Room at the Bottom". In Gilbert, Horace D. (ed.). *Miniaturization*. Reinhold. pp. 282–296;
- [2]. Moseler et al. (2000), Formation, stability, and breakup of nanojets, *Science*, 289, 5482, 1165-1169;
- [3]. Wataha, J. C. et al. (1999), Ability of Ni-containing biomedical alloys to activate monocytes and endothelial cells in vitro, *J. Biomed. Mater. Res.*, 45, 3, 251-257;
- [4]. Jahan, M.P., et al. (2015), *Electrical Discharge Machining (EDM), Types, Technologies and Applications*, Nova Publishers, New York, USA;
- [5]. Binyang Du et al. (2001), Direct measurement of plowing friction and wear of a polymer thin film using the atomic force microscope, *J. Mater. Res.*, 16, 5, 3, 1487-92;
- [6]. Schumacher, H. W. et al. (1999), Nanomachining of mesoscopic electronic devices using an atomic force microscope, *Appl. Phys. Lett.*, 75, 8, 11 07-9;
- [7]. Austin, M. D. et al. (2004), Fabrication of 5 nm linewidth and 14 nm pitch features by nanoimprint lithography, *Appl. Phys. Lett.*, 84, 26, 5299-5301.
- [8]. Olbrich, A. et al. (1999), High aspect ratio all diamond tips formed by focused ion beam for conducting atomic force microscopy, *J. Vac. Sci. Technol. B*, 17, 4, 1570-4;
- [9]. Matsui, S. et al. (2000), Three-dimensional nanostructure fabrication by focused-ion-beam chemical vapor deposition, *J. Vac. Sci. Technol. B* 18. 6. 3181-3184;
- [10]. Ostendorf, A. et al. (2003), Precise deep drilling of metals by femtosecond laser pulses, *RIKEN Review*, 50, 87-9;
- [11]. Madou, Marc J. (2002), *Fundamentals of Microfabrication: The Science of Miniaturization*, CRC Press, New York;
- [12]. Park, Y.D. et al. (2000), Comparative study of Ni nanowires patterned by electron-beam lithography and fabricated by lift-off and dry etching techniques, *J. Vac. Sci. Technol. B*, 18, 1, 16-20;
- [13]. Guckel, H. (1998), High-aspect-ratio micromachining via deep X-ray lithography, *Proc IEEE*, 86, 8, 1586- 93;
- [14]. Binnig, G. et al. (1982), Surface studies by scanning tunneling microscopy, *Phys. Rev. Lett.*, 49, 57-61;
- [15]. Guo, C. X. (1992), Material transfer between metallic tips and surface in the STM, *Ultramicroscopy*, 42-44, Part B, 1452-1458;
- [16]. Ajay P. Malshe, K. Virwani, K.P. Rajurkar and D. Deshpande, (2005), *Investigation of Nanoscale Electro Machining (nano-EM) in Dielectric Oil*, Elsevier Ltd., USA;
- [17]. A.J. Melmed, (1991) The art and science and other aspects of making sharp tips. *J. Vac. Sci. Technol. B*, 9(2), 601-608;
- [18]. Pokropivny, V. et al. (2007), *Introduction to nanomaterials and Nanotechnology*, ISBN 973-9949-11-741-3, Tartu University Press;
- [19]. K. Salonitis, A. Stouraras, P. Stavropoulos G. Chryssolouris (2009), Thermal modelling of the material removal rate and surface roughness for die-sinking EDM, *International Journal of Advanced Manufacturing Technology*, Vol. 40, No. 3-4, pp. 316-323.