

Università degli Studi di Padova - Dipartimento di Ingegneria
Industriale

Corso di Laurea in Ingegneria Chimica e dei Materiali

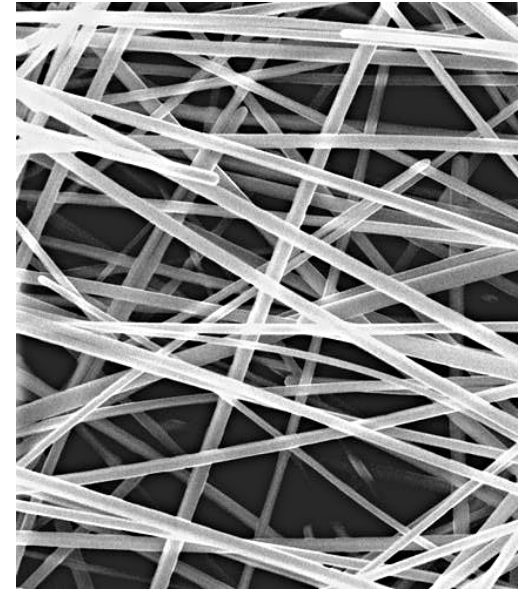
Relazione per la prova finale
***«Studio del comportamento meccanico di un nanowire
di Ag per mezzo di simulazioni atomistiche»***

Tutor universitario: Prof.ssa Lucia Nicola

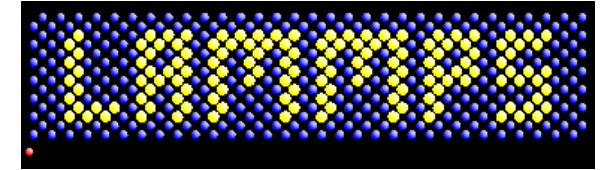
Laureanda: *Isobel Maeve Cordone*

Padova, 10/07/2024

- ▶ I nanowire di Ag sono di notevole interesse per le loro proprietà elettriche, meccaniche e ottiche.
- ▶ Sono usati per creare degli elettrodi flessibili e trasparenti, formando dei network attraverso i quali passa corrente.
- ▶ Alcune applicazioni: schermi flessibili, pannelli fotovoltaici, sensori biologici.

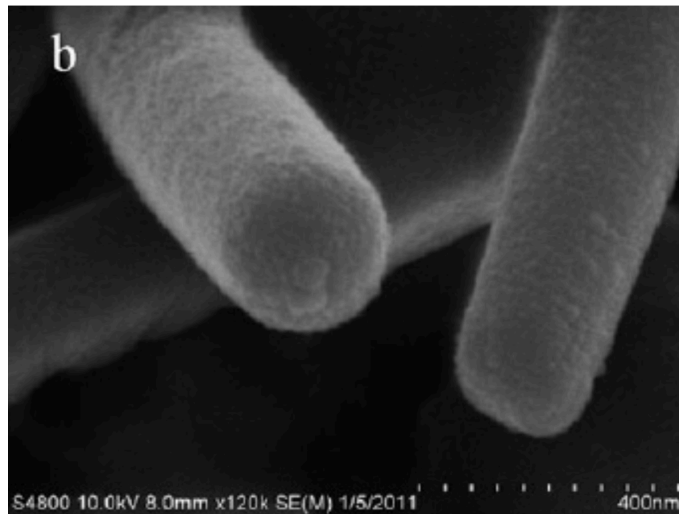


Analisi della risposta meccanica dei nanowire quando sottoposti ad una prova di tensione attraverso delle simulazioni scritte con il software LAMMPS

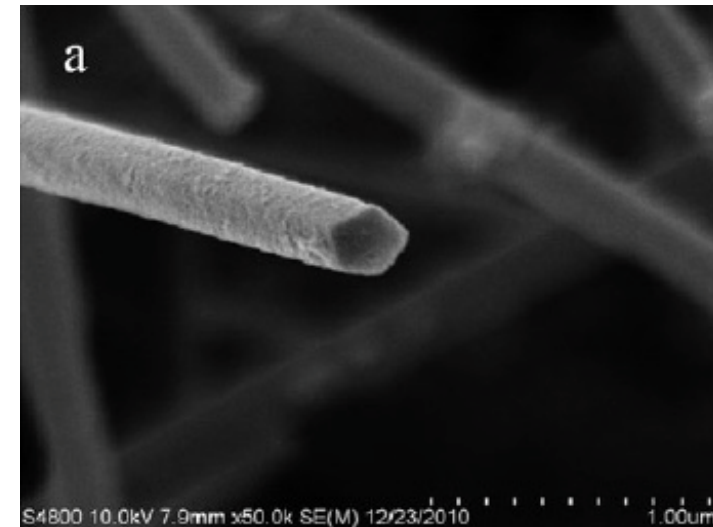


Due morfologie diverse sono state messe a confronto:

- ▶ Single-crystal omogeneo con sezione circolare
- ▶ Forma pentatwinned, con piani geminati disposti pentagonalmente



Single-crystal



Pentatwinned

Calcolo delle proprietà elastiche per un cristallo di Ag attraverso LAMMPS

► Orientazione x[100] y[010] z[001]

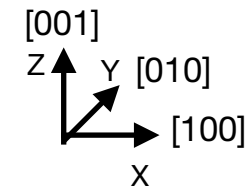
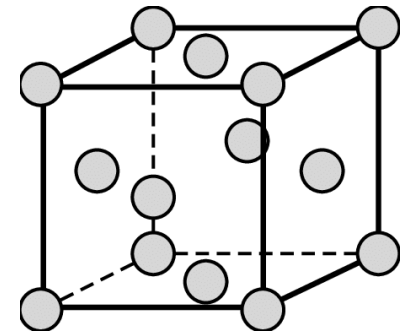
$$\mathbf{C} = \begin{bmatrix} 124.5 & 93.8 & 93.8 & 0 & 0 & 0 \\ 93.8 & 124.5 & 93.8 & 0 & 0 & 0 \\ 93.8 & 93.8 & 124.5 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 46.2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 46.2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 46.2 \end{bmatrix}$$

[GPa]

Tensore di elasticità

Modulo di Young $E = 84.21$

Coefficiente di Poisson $\nu = 0.43$



- ▶ Orientazione x[10-1] y[010] z[101]

$$\mathbf{C} = \begin{bmatrix} 155.3 & 93.8 & 62.9 & 0 & 0 & 0 \\ 93.8 & 124.5 & 93.8 & 0 & 0 & 0 \\ 62.9 & 93.8 & 155.3 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 46.2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 15.4 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 46.2 \end{bmatrix}$$

[GPa]

Tensore di elasticità

Modulo di Young $E = 84.92$

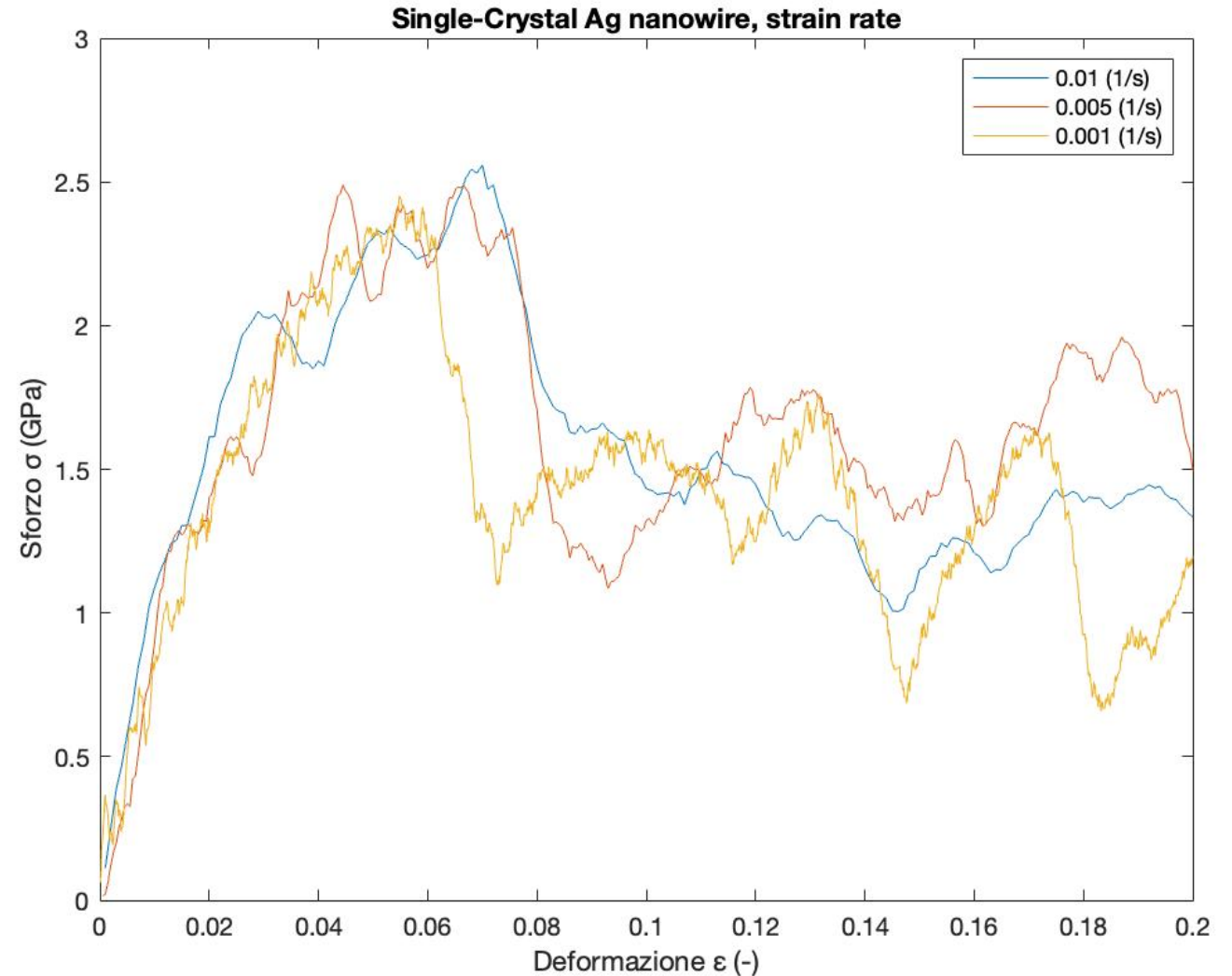
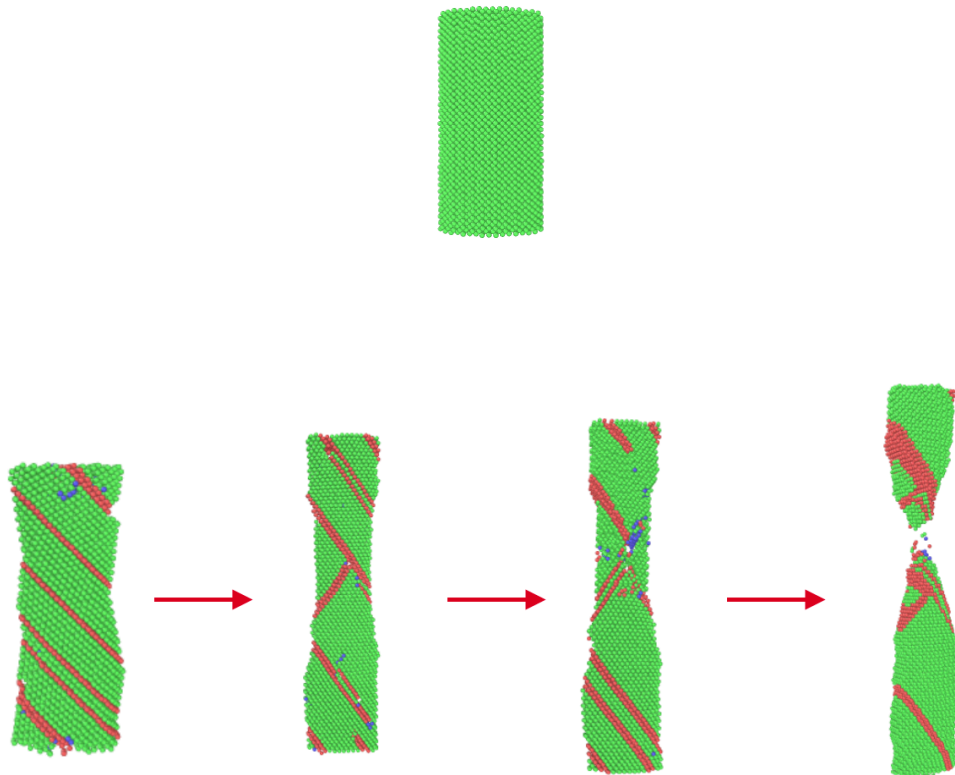
Coefficiente di Poisson $\nu = 0.37$

- ▶ Le proprietà elastiche dipendono dall'orientazione a causa della struttura FCC del cristallo.

Nanowire single-crystal

Orientazione $x[10-1]$ $y[010]$ $z[101]$

$d=5.2\text{nm}$



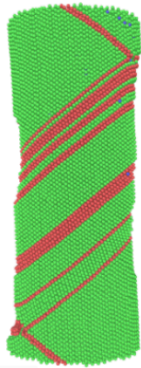
Size-effect

Velocità di deformazione - 0.001 1/s

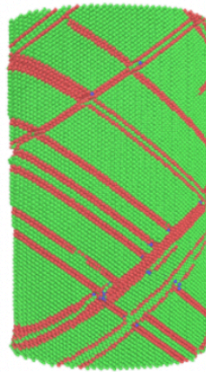
Diametri più piccoli → Resistenza maggiore



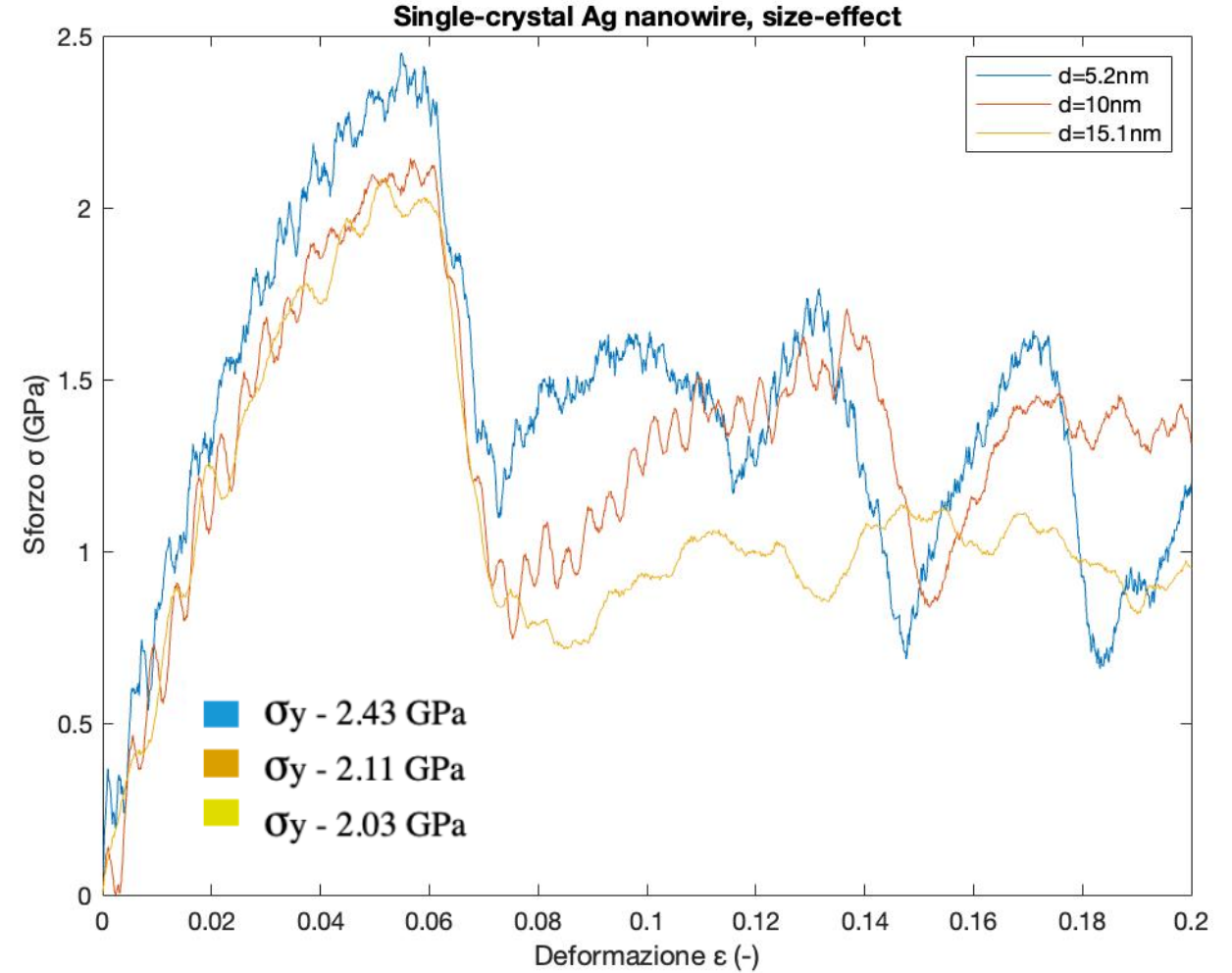
d=5.2nm



d=10nm

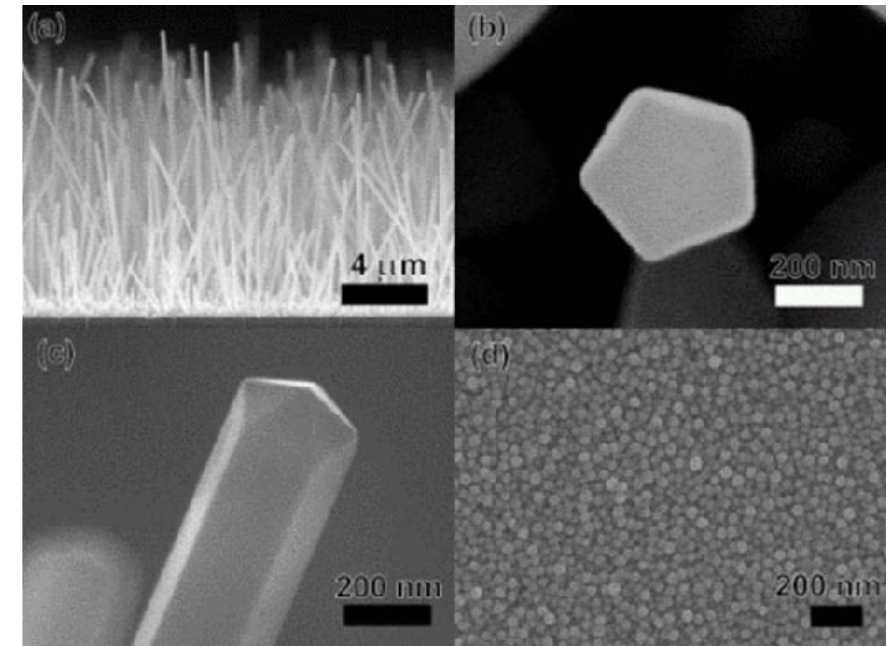
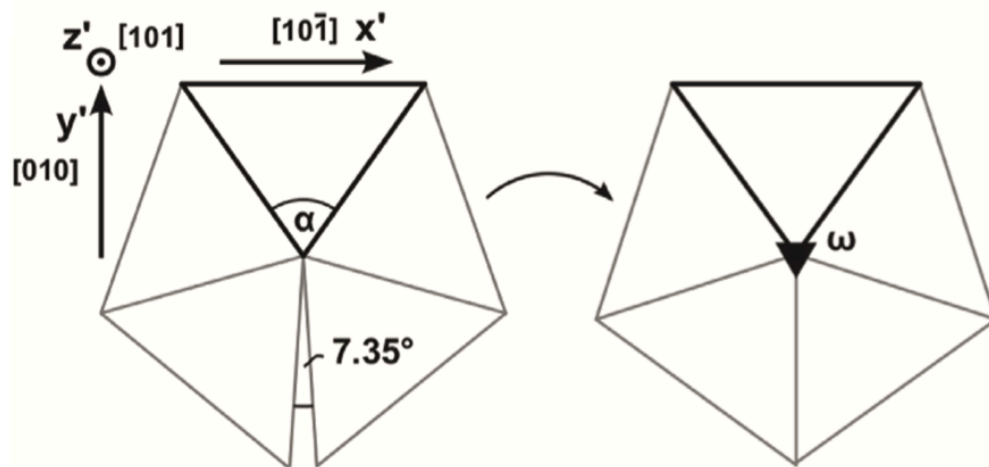
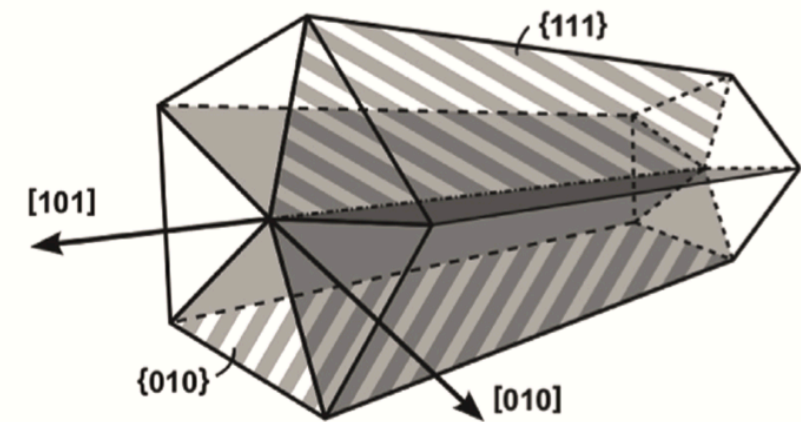


d=15.1nm



Forma del nanowire pentatwinned

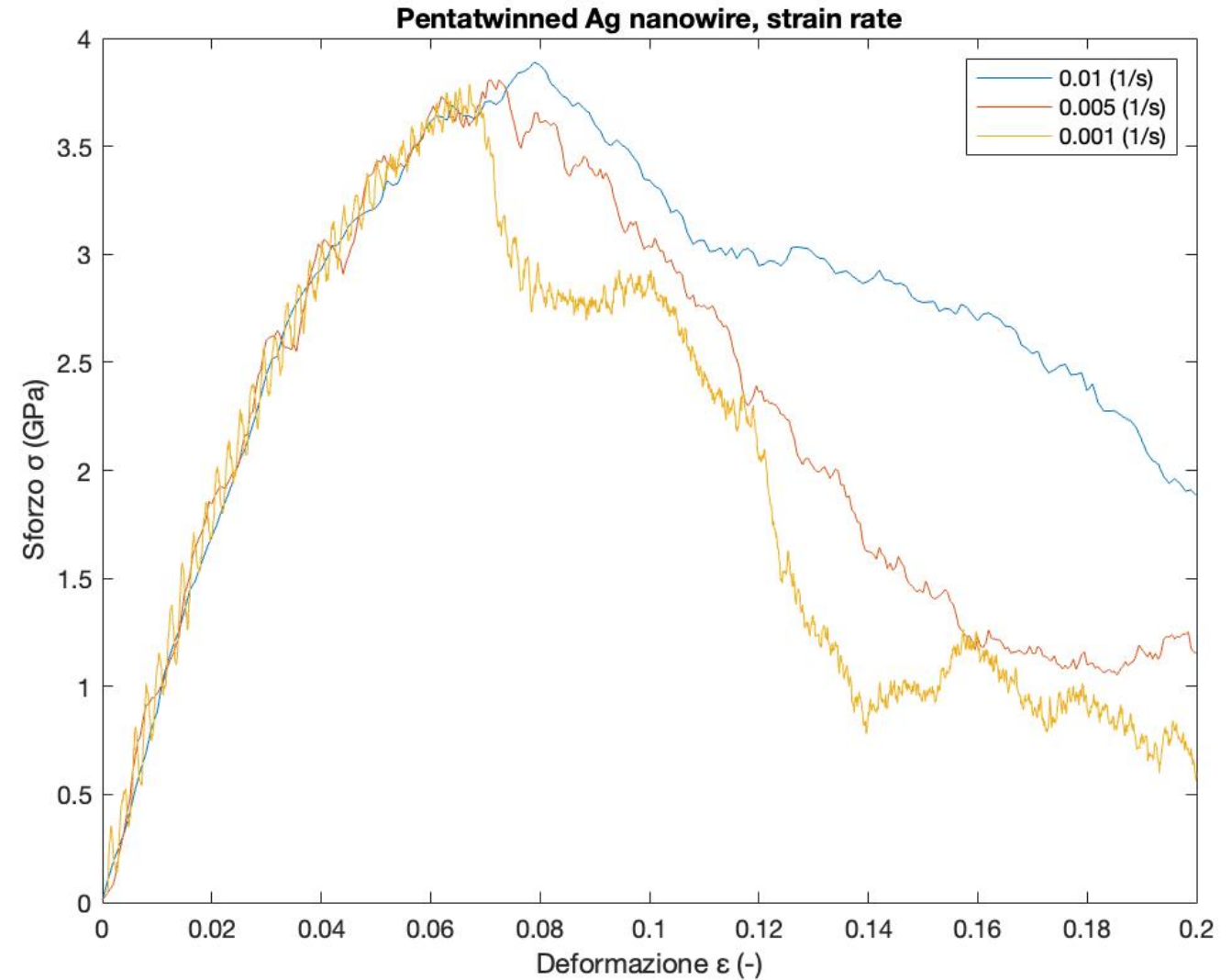
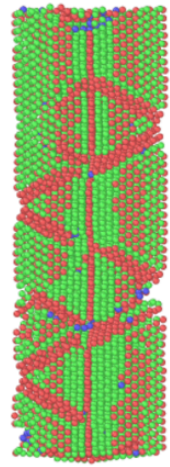
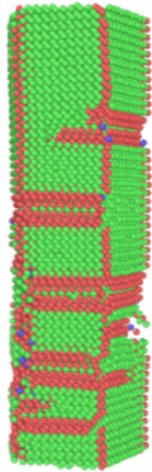
- Generazione di cinque pezzi triangolari che vengono ruotati per creare la forma pentagonale
- Presenza di una disclinazione centrale



Nanowire pentatwinned

Orientazione $x[10-1]$ $y[010]$ $z[101]$

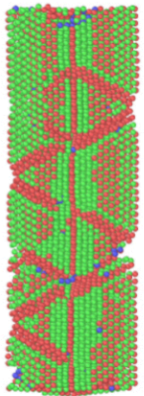
$d=5.2\text{nm}$



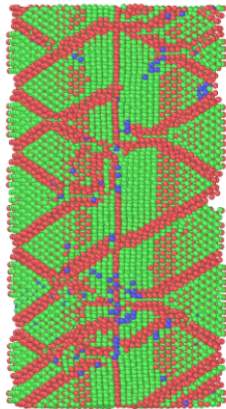
Size-effect

Velocità di deformazione - 0.001 1/s

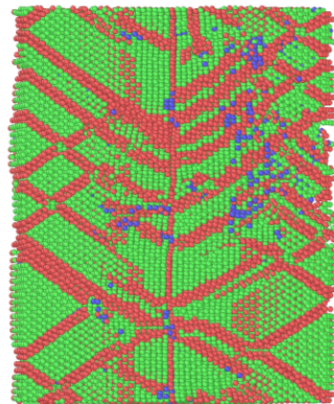
Diametri più piccoli → Resistenza maggiore



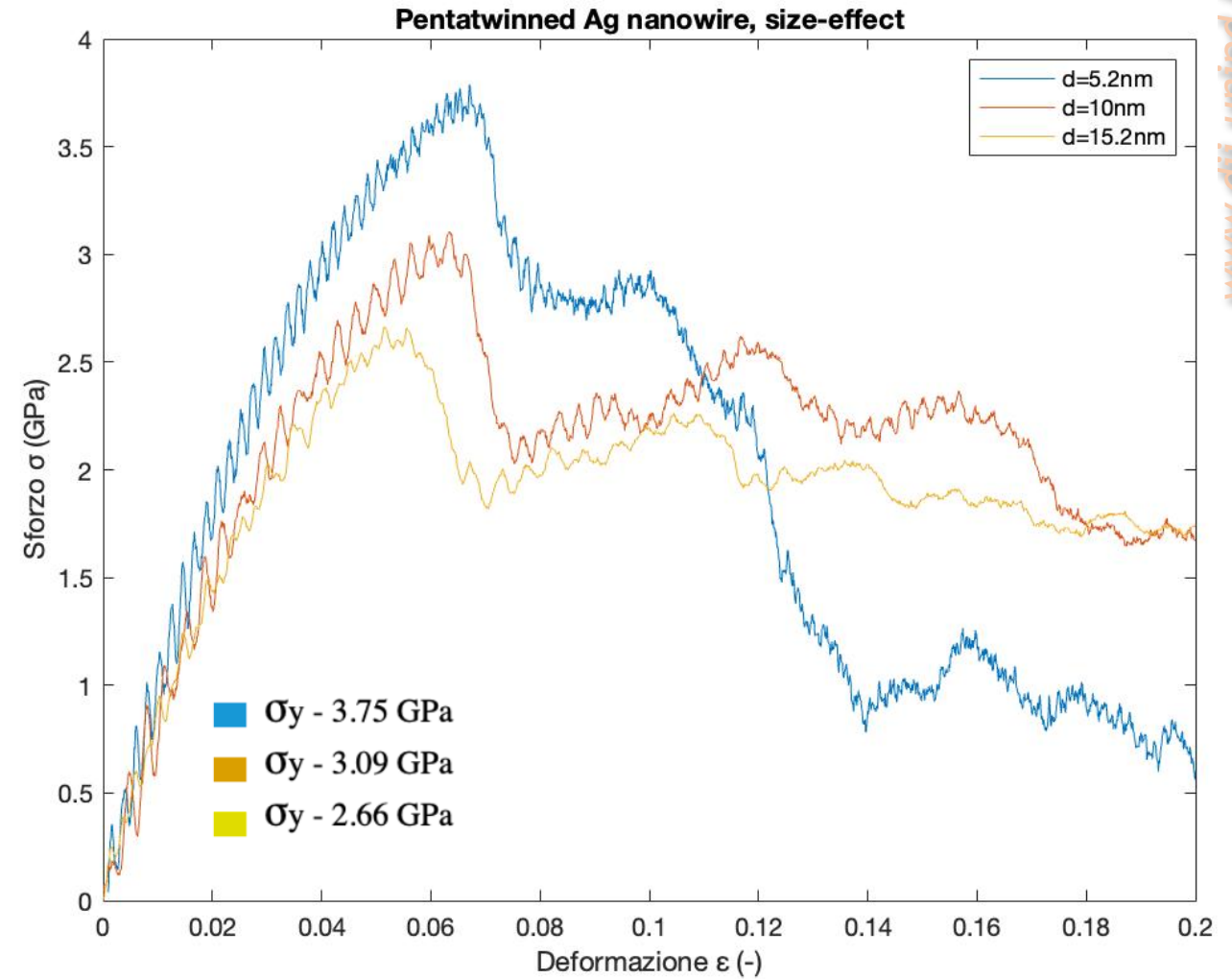
d=5.2nm

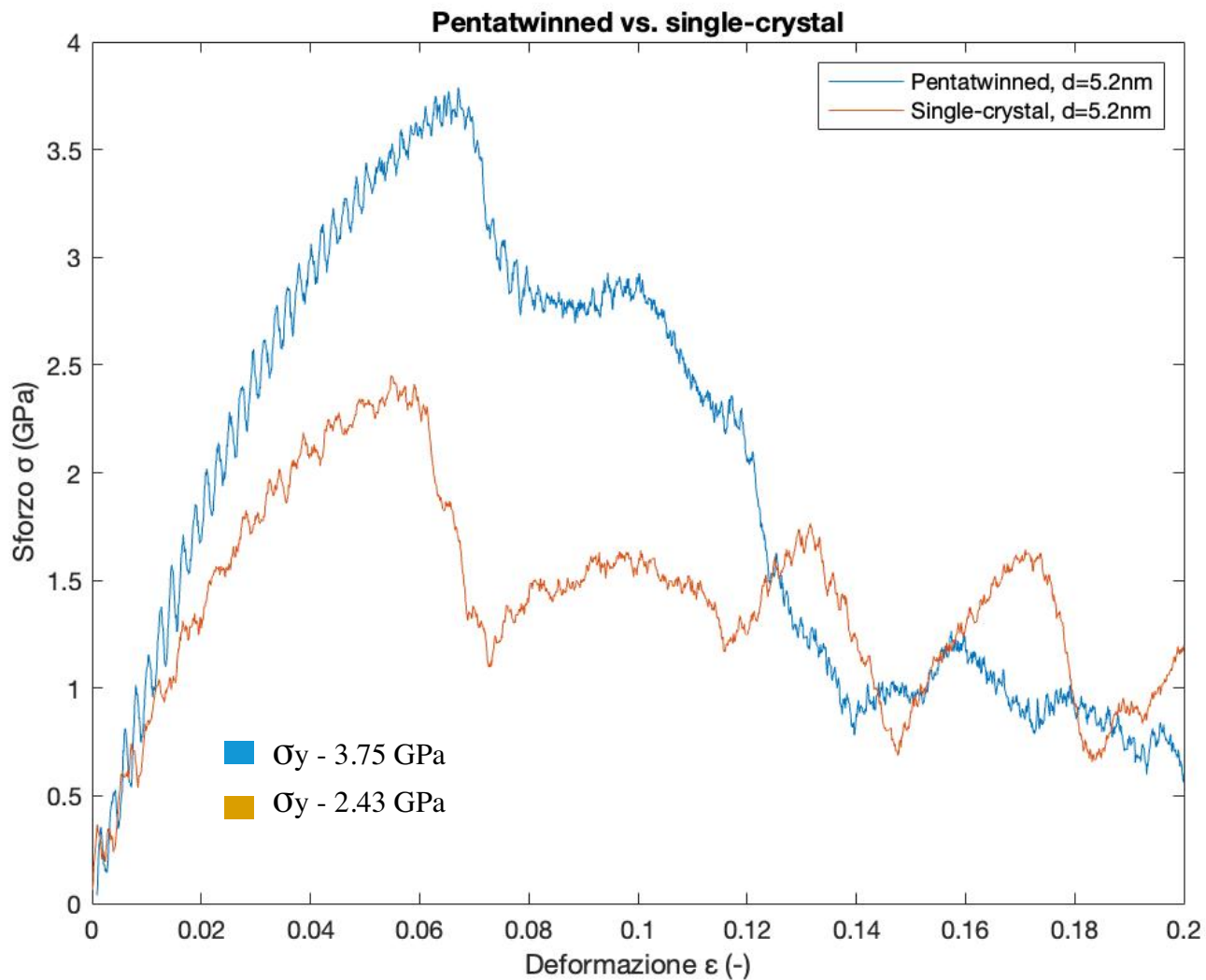


d=10nm

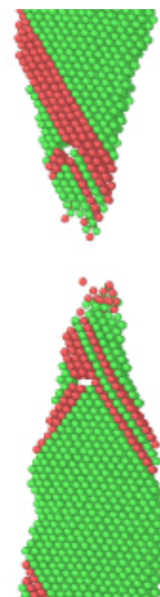


d=15.2nm

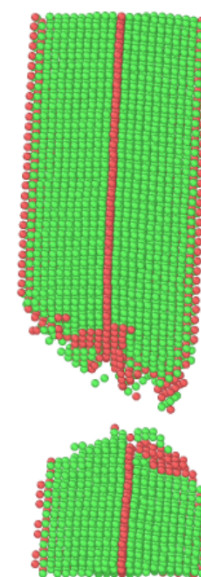




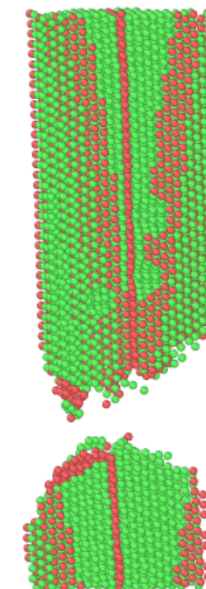
Frattura



Single-crystal
d=5.2nm



Pentatwinned
d=5.2nm



- ▶ La struttura pentatwinned ha influenzato il comportamento meccanico del nanowire in modo significativo.
- ▶ Ha mostrato una maggiore resistenza e sforzo di snervamento rispetto al single-crystal
- ▶ Entrambe le morfologie hanno dimostrato di avere lo stesso andamento al variare dei diametri