

Università degli Studi di Padova – Dipartimento di Ingegneria Industriale

Corso di Laurea in Ingegneria chimica e dei materiali

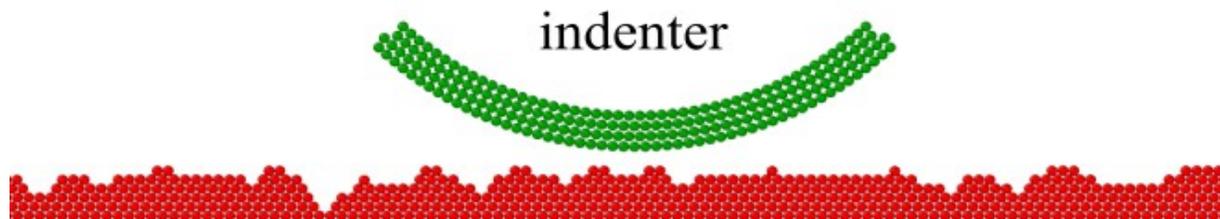
Relazione per la prova finale
**«Modellazione numerica:
modello bi-scala per contatti metallici»**

Tutor universitario: Prof. Lucia Nicola

Laureando: *Luca Avanzi 1222847*

Padova, 19/09/2022

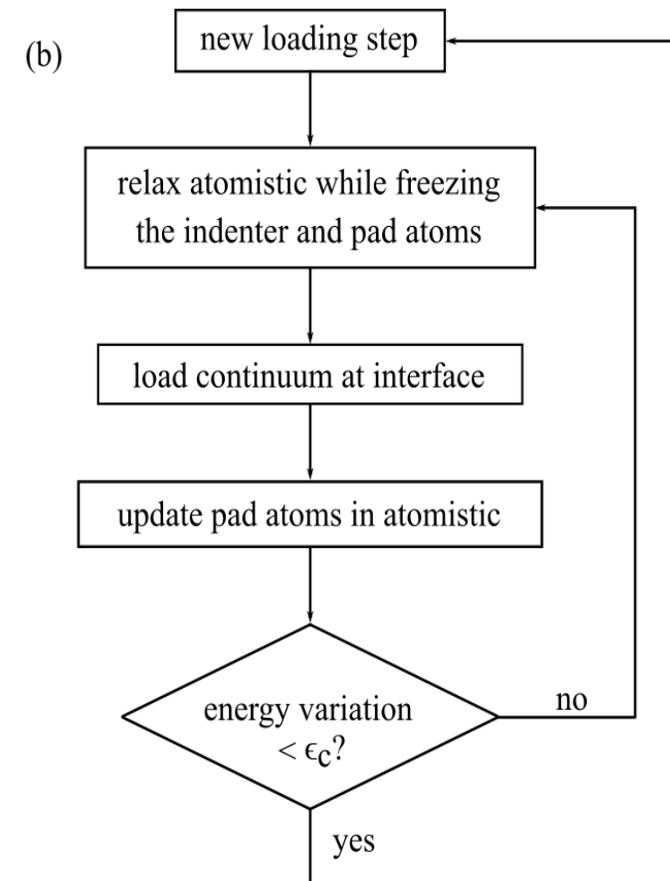
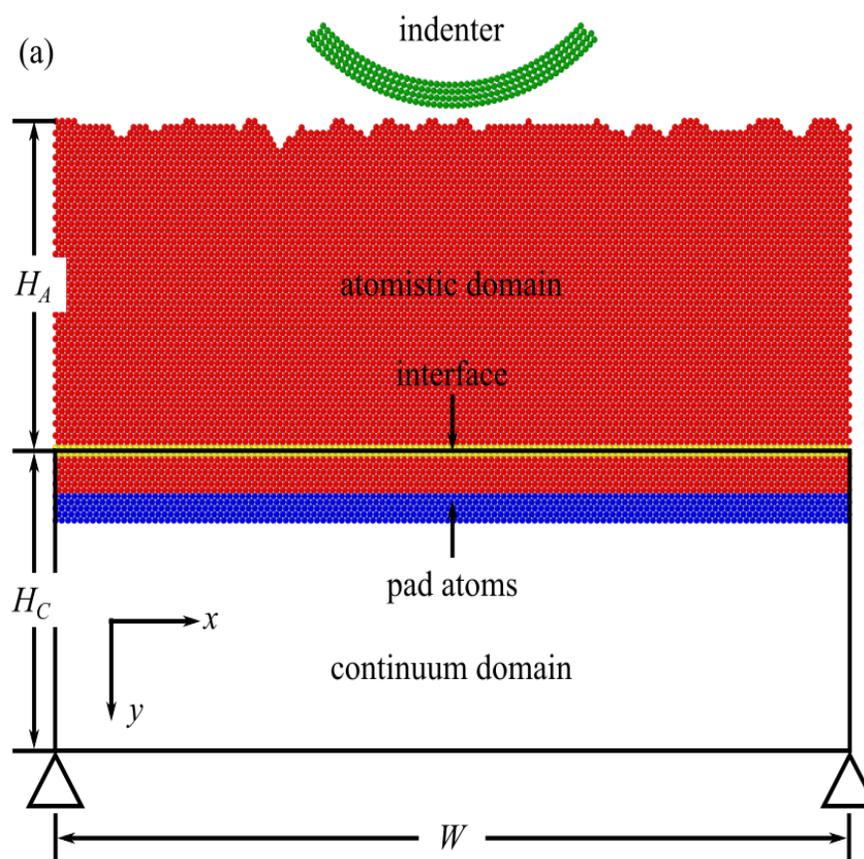
Il problema di contatto a scala micrometrica può essere studiato con modelli numerici. È stato sviluppato un metodo bi-scala basato su una descrizione nanometrica della zona di contatto e micrometrica nel resto del corpo.

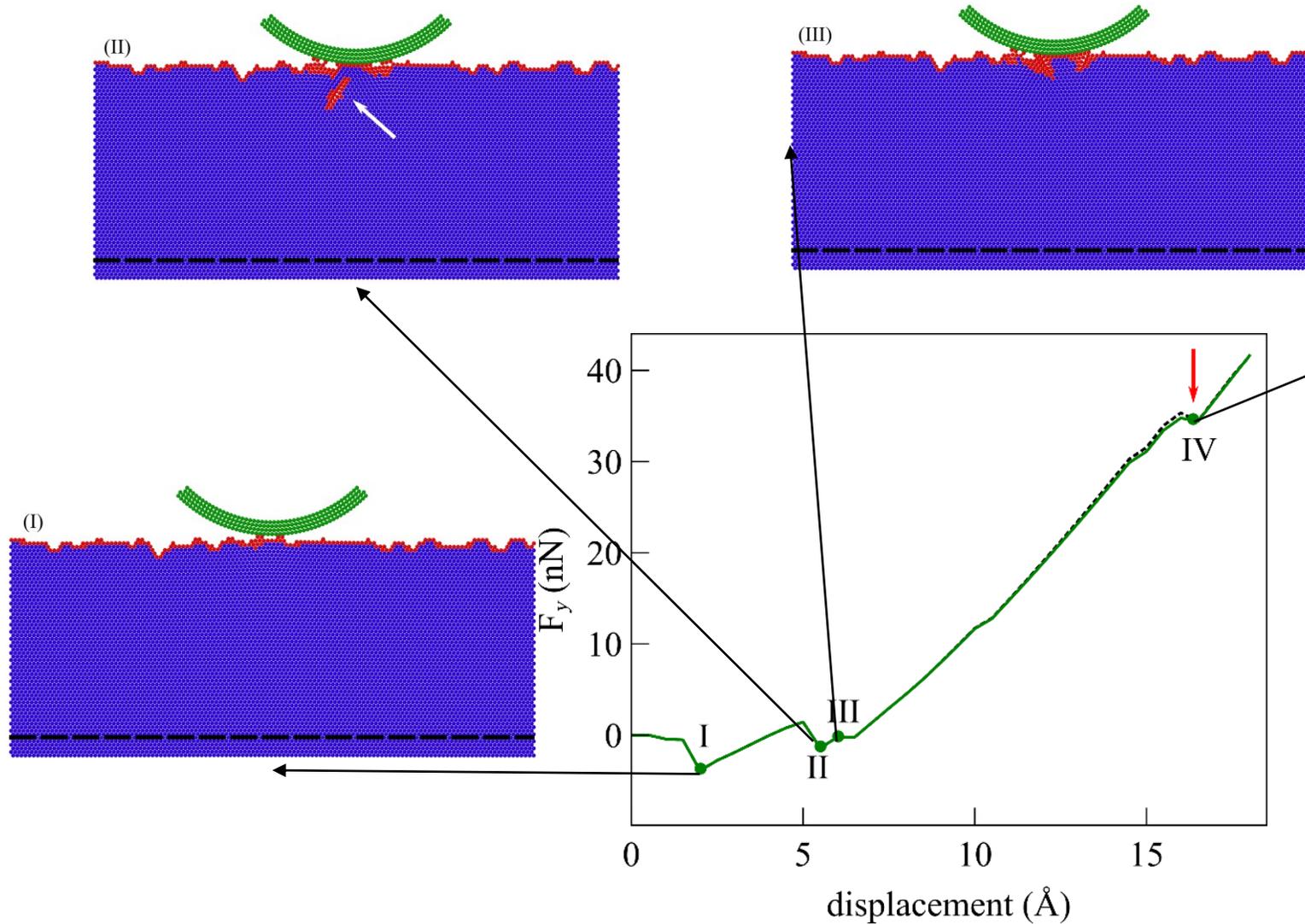


Gli obiettivi del tirocinio sono due:

- determinare la dimensione minima della zona atomistica
- analizzare l'effetto della forma del potenziale interatomico.

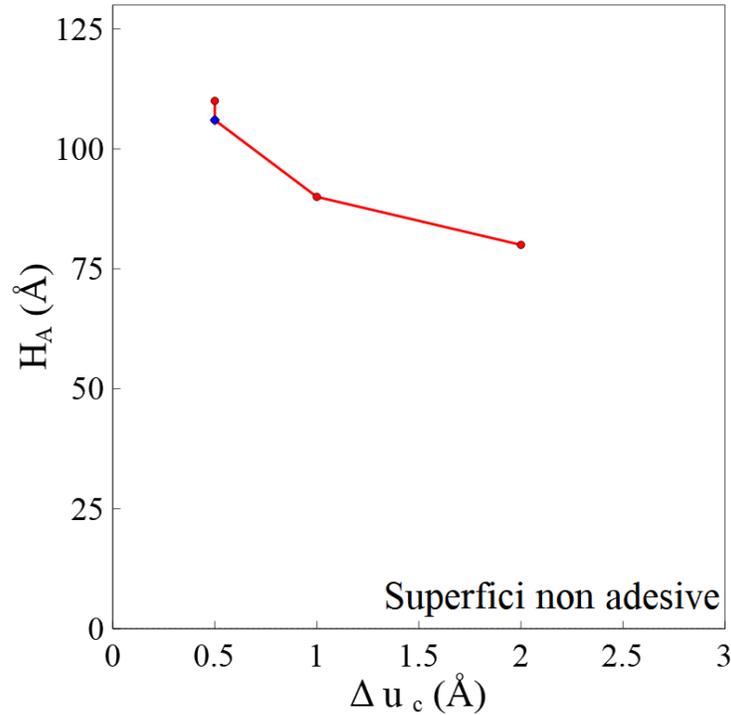
- Periodicità in direzione x
- Coordinazione esagonale (111)



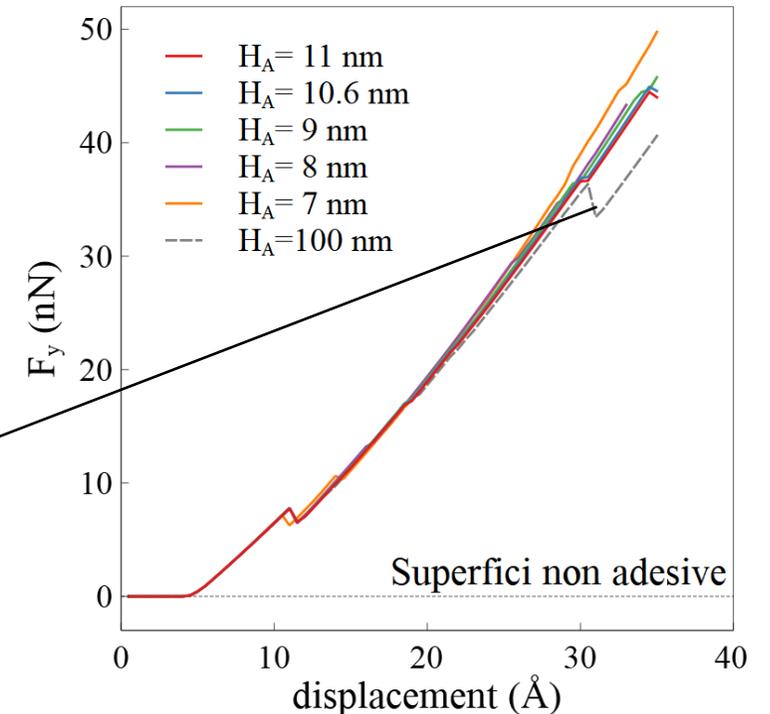
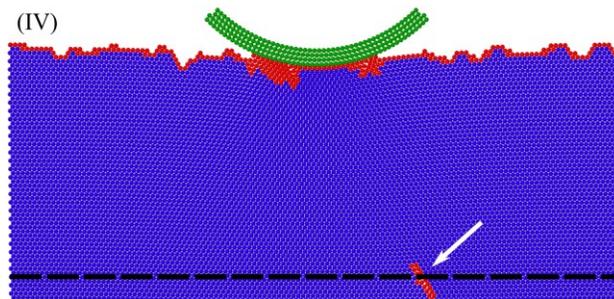


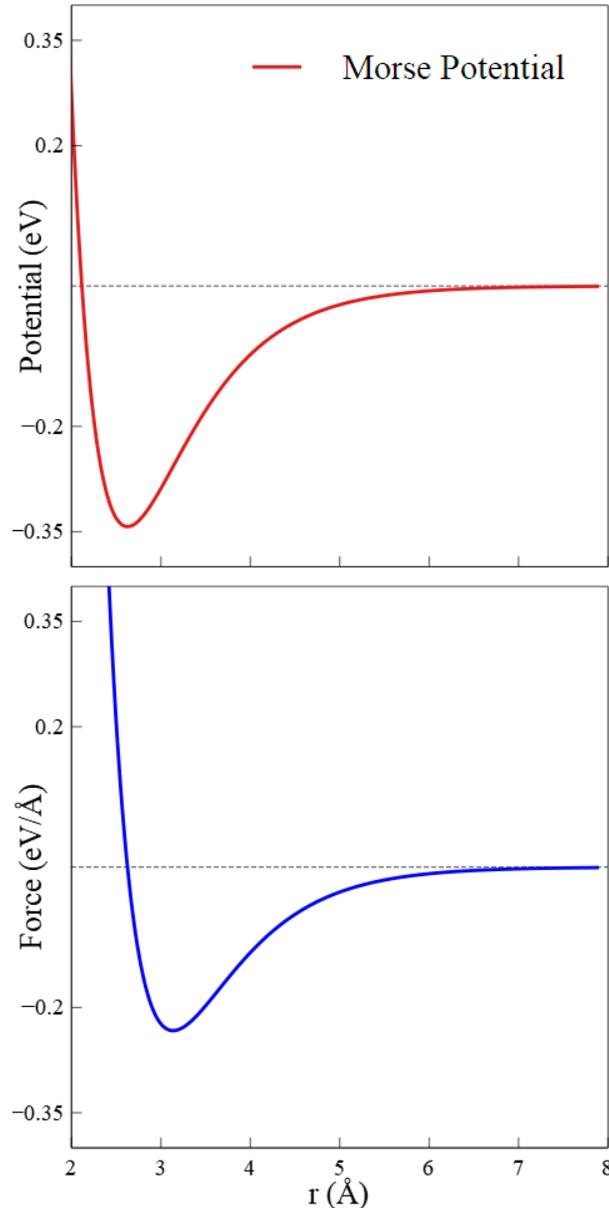
- Confronto con simulazioni atomistiche: cristalli della stessa dimensione
- Ottimo accordo finché la dislocazione non raggiunge l'interfaccia
- Per visualizzare i difetti si usa la CNA

- Δu_c è la differenza di profondità di indentazione tra la nucleazione della dislocazione nel modello bi-scala e atomistico



- Spessore minimo del dominio atomistico $H_A = 106 \text{ \AA}$





- Il potenziale di Morse determina le interazioni tra gli atomi del cristallo

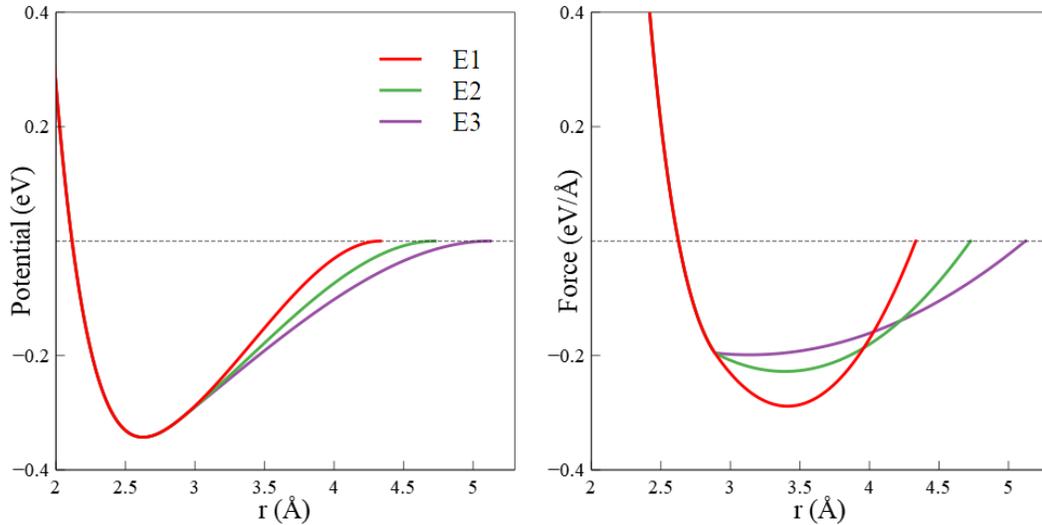
$$\frac{V(r)}{\varepsilon} = (1 - e^{-a(r-r_0)})^2 - 1$$

a Ampiezza del potenziale $a = \sqrt{\frac{k_e}{2\varepsilon}}$

k_e Costante di forza al minimo dell'energia del potenziale

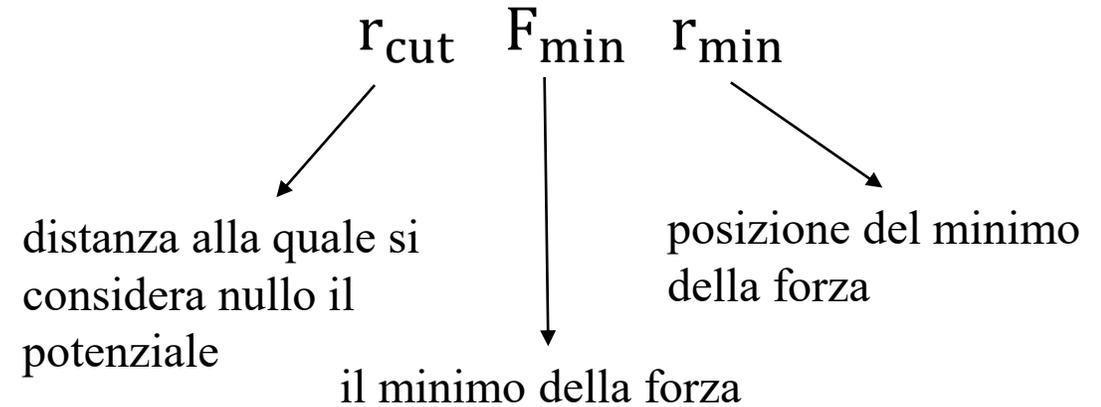
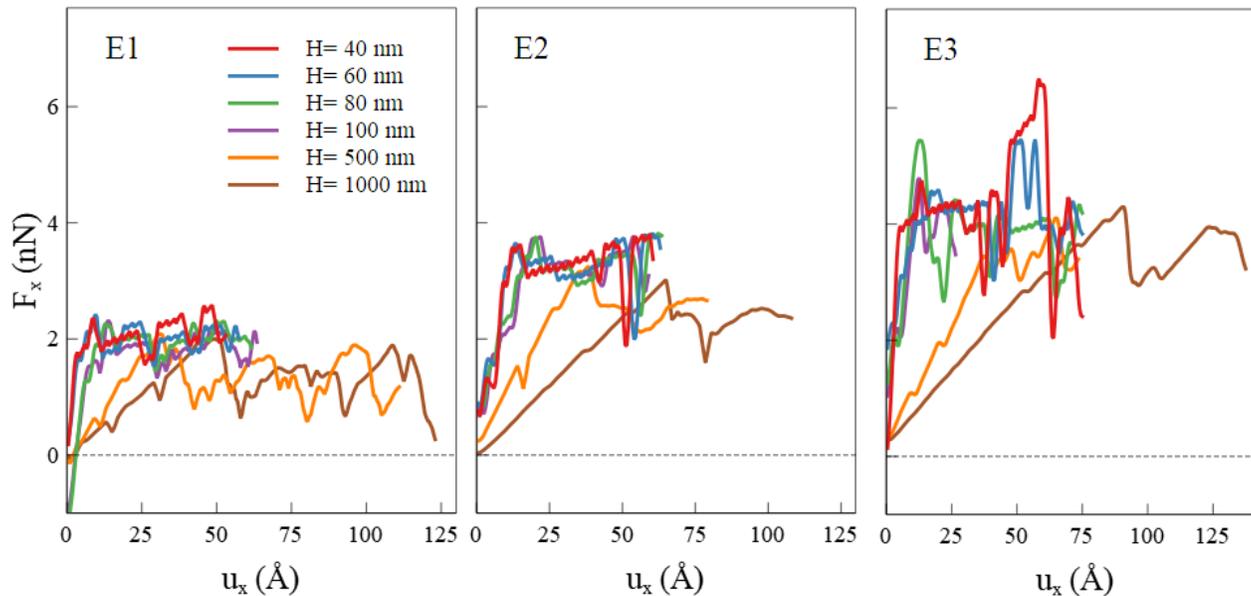
r_0 Distanza alla quale la forza di interazione è nulla

ε Profondità del potenziale alla distanza di equilibrio



$$\begin{cases} E = \varepsilon [e^{-2a(r-r_0)} - 2e^{-a(r-r_0)}] & r < 1.1r_0 \\ E = c_1 \frac{r^6}{3} + c_2 \frac{r^2}{2} + c_3 r + c_4 & 1.1r_0 \leq r \leq r_{cut} \end{cases}$$

- Non si possono variare indipendentemente i tre parametri che definiscono il potenziale

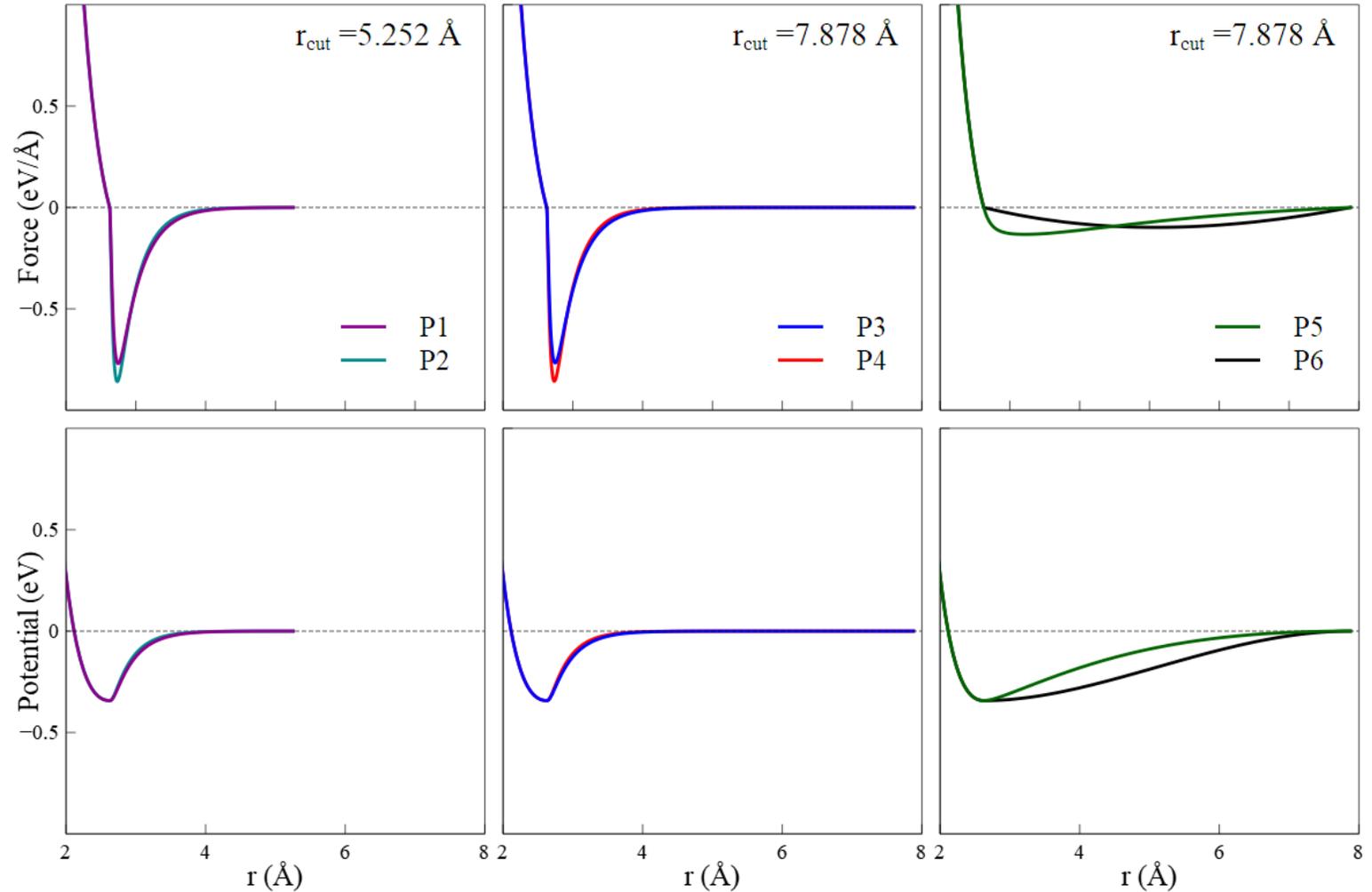


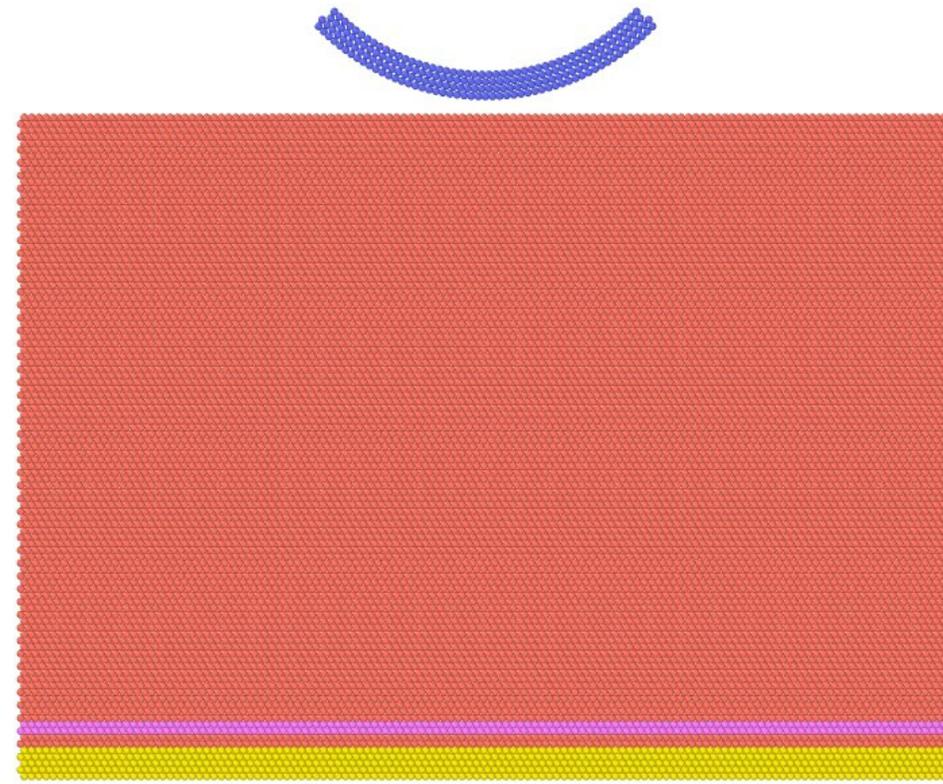
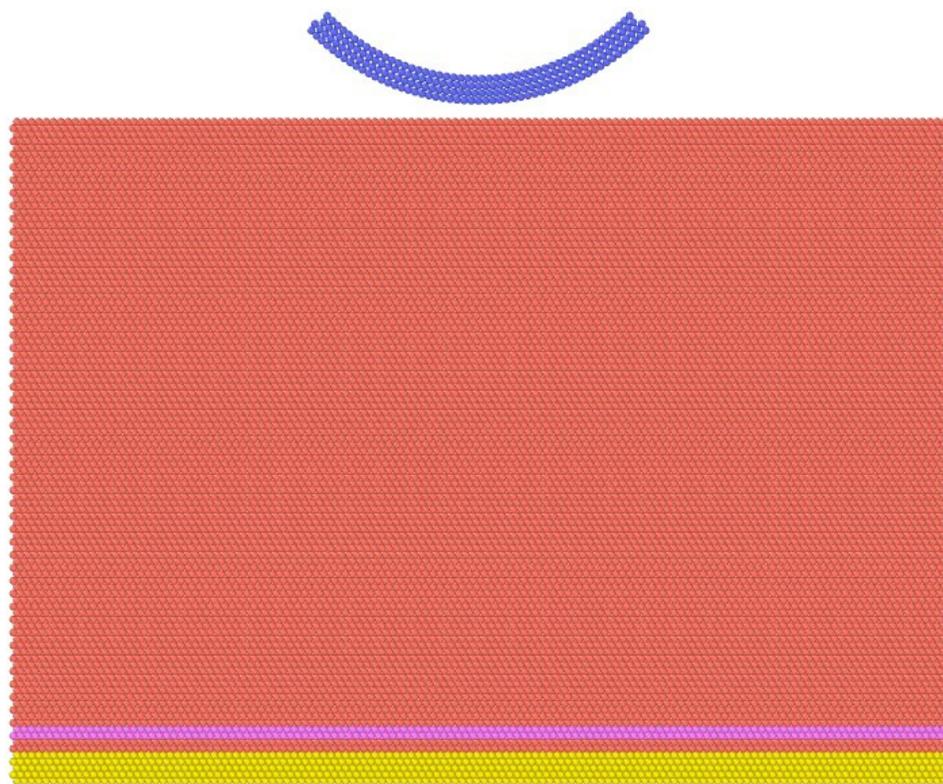
- Il valore di F_x durante le prove di graffio non è influenzato dall'altezza H

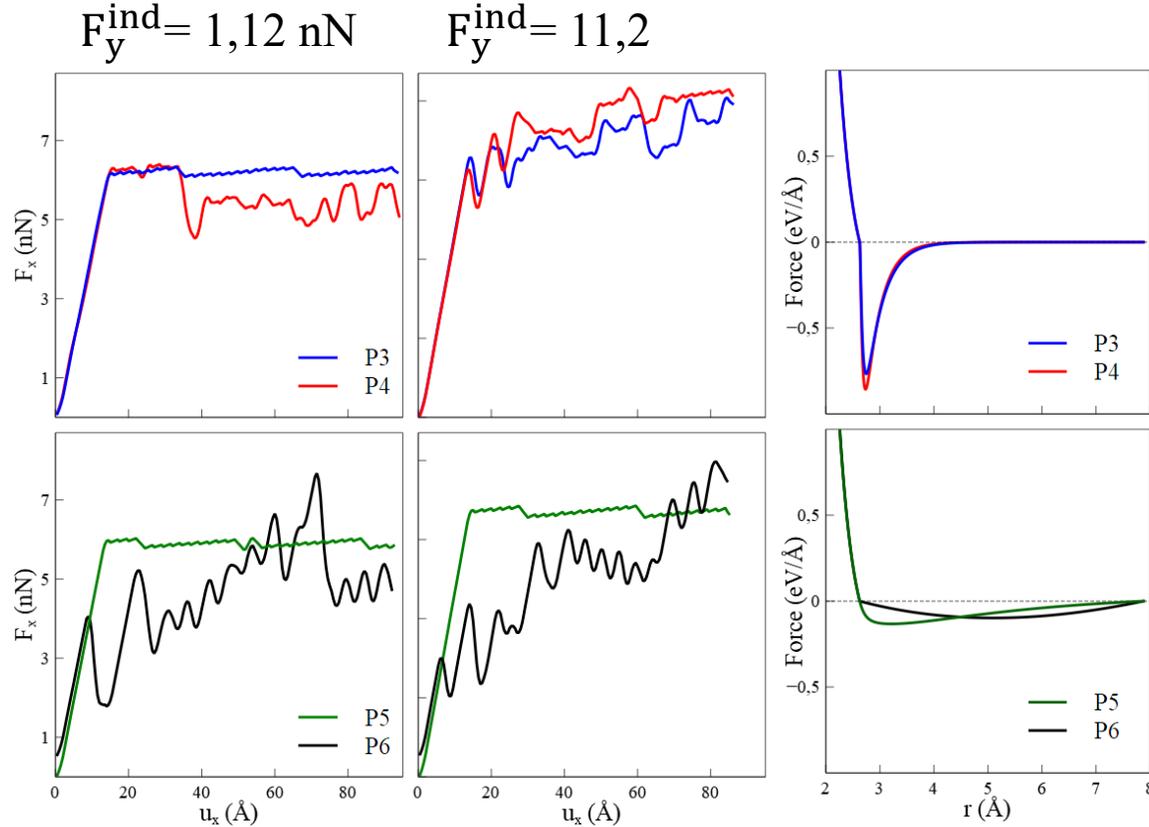
$$\begin{cases} E = \varepsilon[e^{-2a(r-r_0)} - 2e^{-a(r-r_0)}] & r < r_0 \\ E = \sum_{i=1}^5 c_i e^{-\alpha_i(r-r_0)} & r_0 \leq r \leq r_{\text{cut}} \end{cases}$$

$$\alpha_i = \frac{\alpha_1}{f^{i-1}} \quad f > 0$$

- Si può variare indipendentemente r_{cut} , F_{min} e r_{min}
- La funzione è di classe C^2







- Effetto del minimo della forza
- Effetto della forza di indentazione
- Effetto dello spostamento del minimo della forza

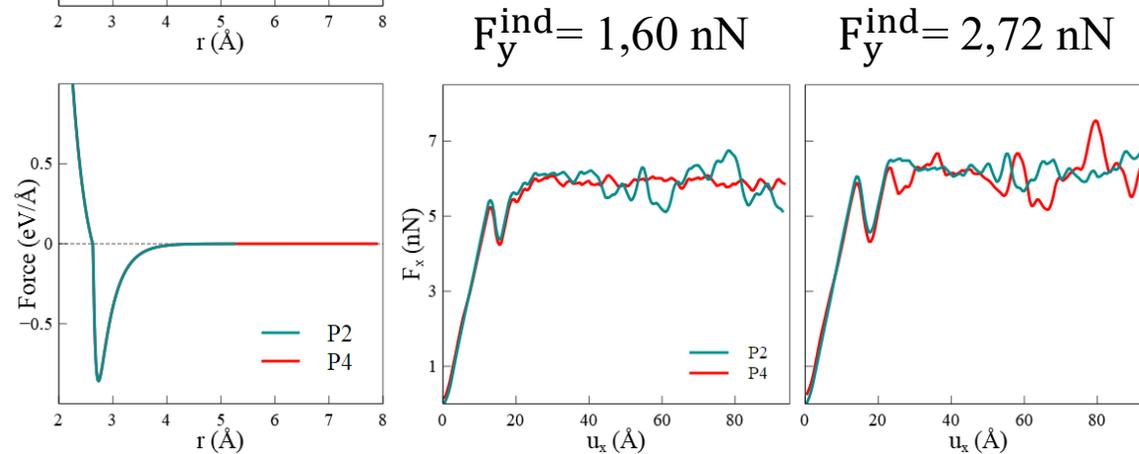
F_{min}

F_y^{ind}

r_{min}

- Effetto della distanza di cut off

r_{cut}



- Il modello dual scale è in perfetto accordo con le simulazioni completamente atomistiche se la dislocazione non raggiunge l'interfaccia, quindi per valori di forza normale non troppo elevati
- 4 parametri che influenzano in maniera differente la risposta al contatto, determinando se e quando si verifica usura a livello atomistico

