

Università degli Studi di Padova – Dipartimento di Ingegneria Industriale

Corso di Laurea in Ingegneria chimica e dei materiali

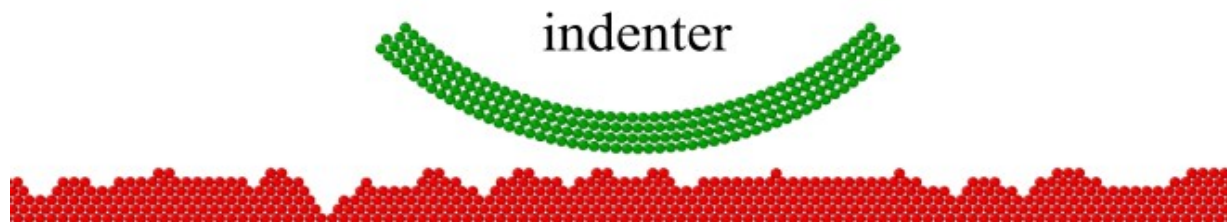
***Relazione per la prova finale***  
**«Modellazione numerica:  
modello bi-scala per contatti metallici»**

Tutor universitario: Prof. Lucia Nicola

Laureando: *Luca Avanzi 1222847*

Padova, 19/09/2022

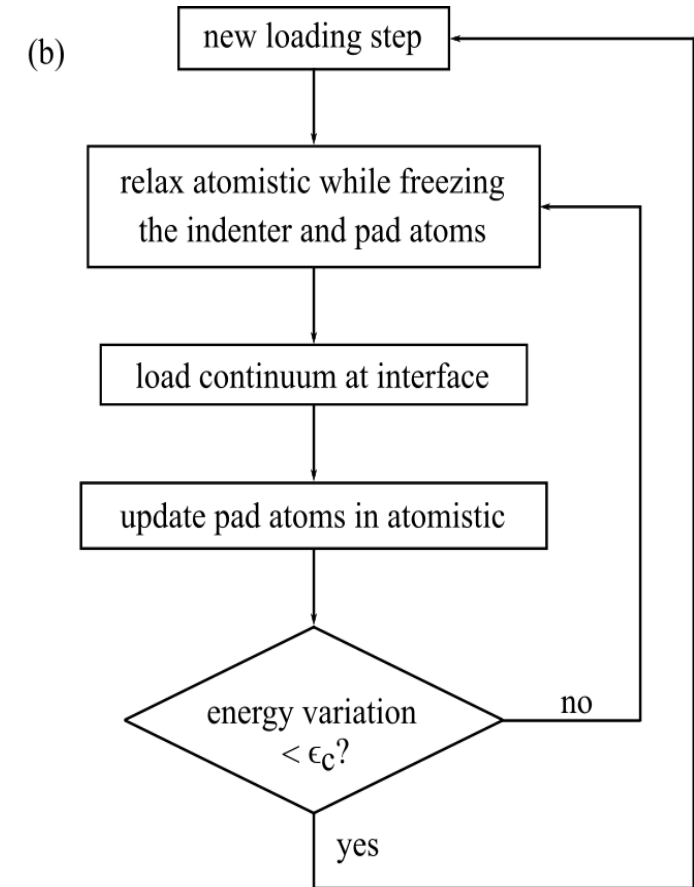
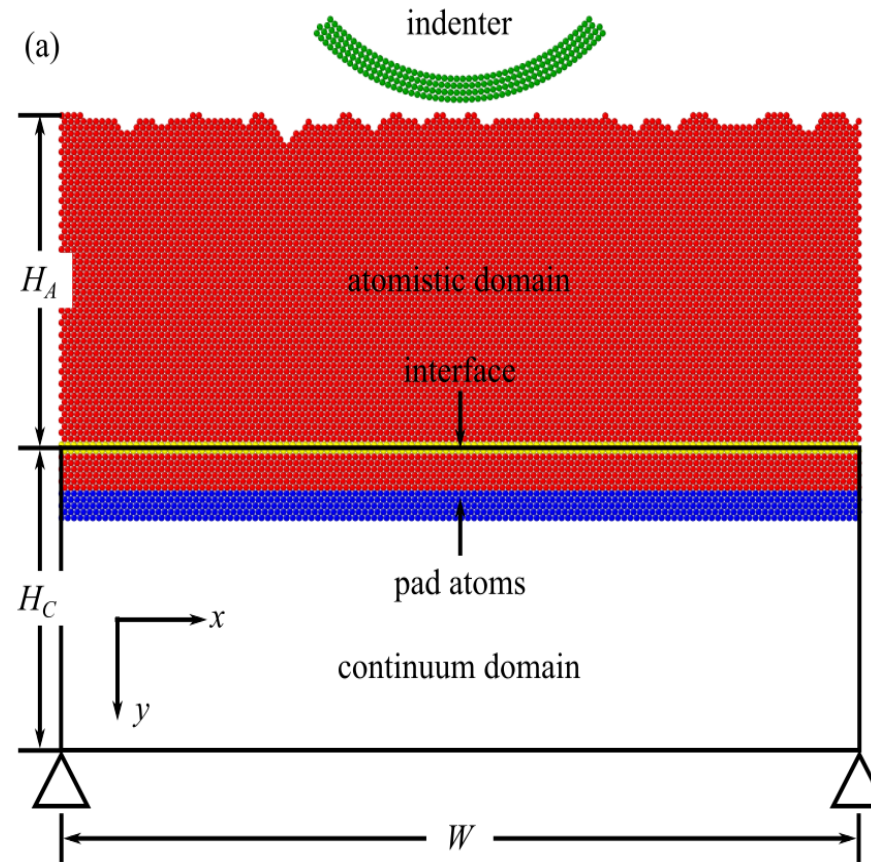
Il problema di contatto a scala micrometrica può essere studiato con modelli numerici. È stato sviluppato un metodo bi-scala basato su una descrizione nanometrica della zona di contatto e micrometrica nel resto del corpo.

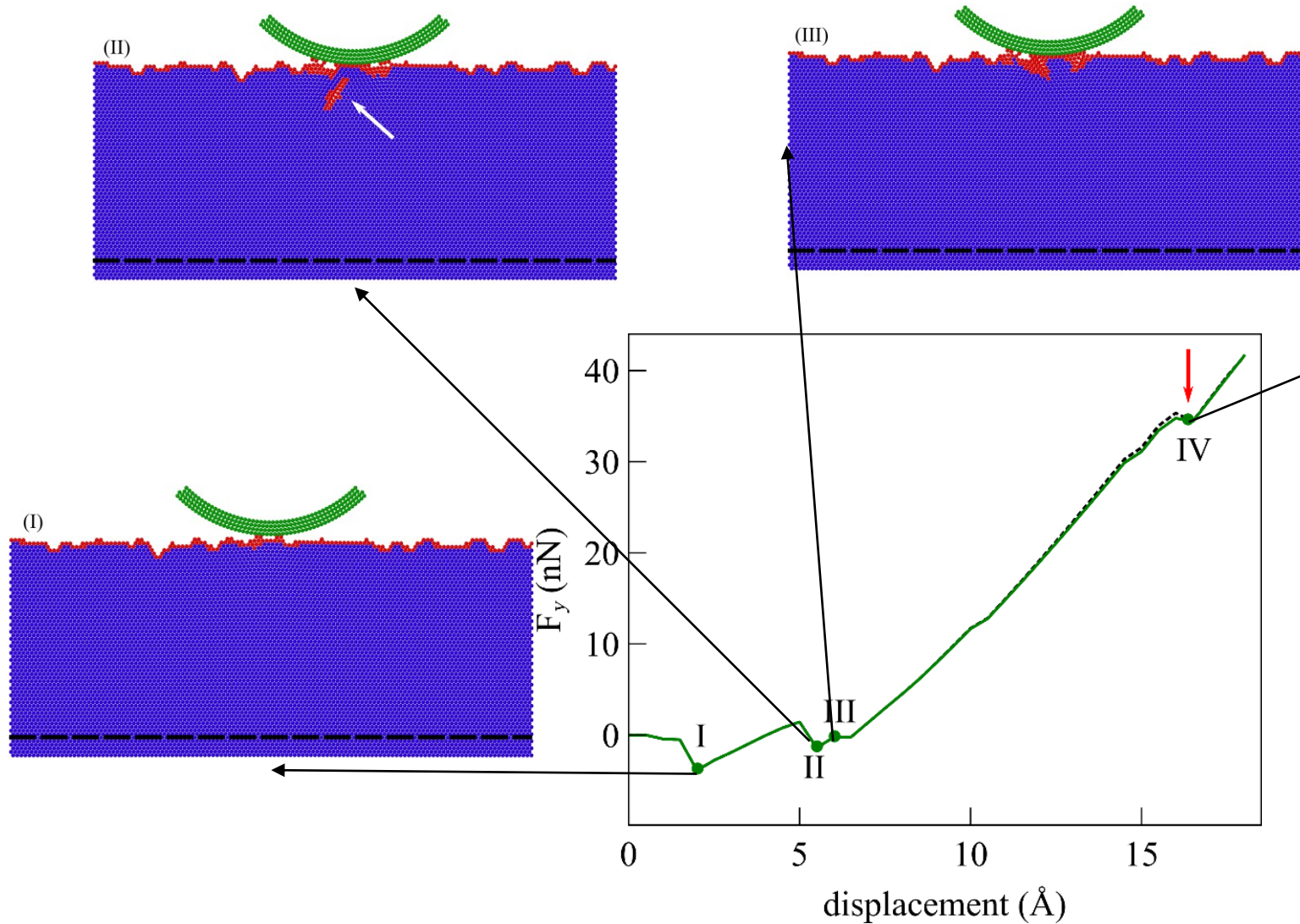


Gli obiettivi del tirocinio sono due:

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

- Periodicità in direzione x
- Coordinazione esagonale (111)

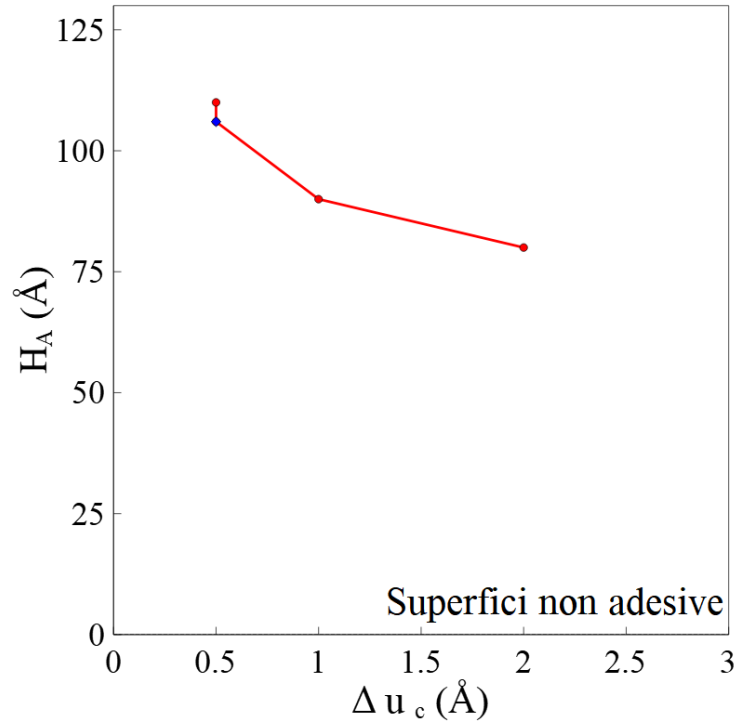




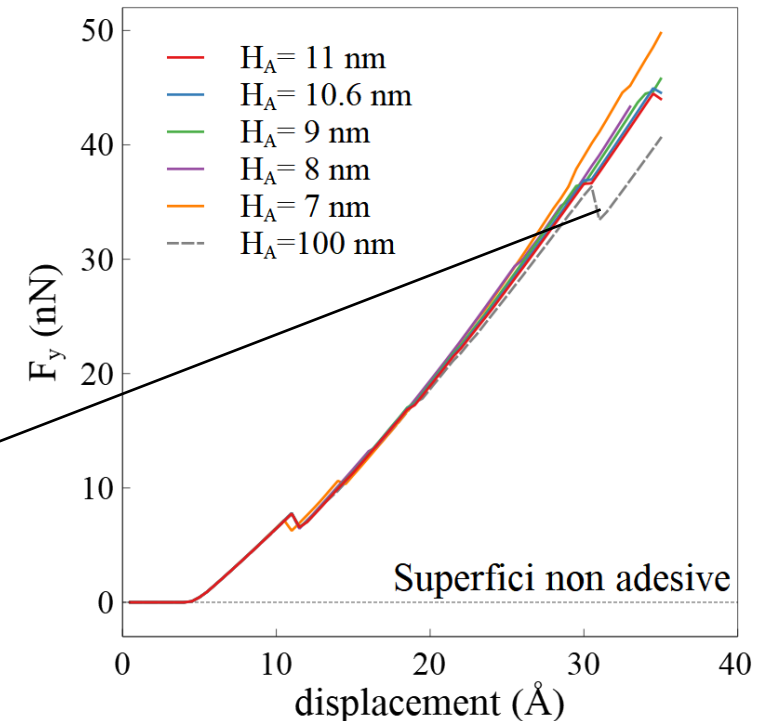
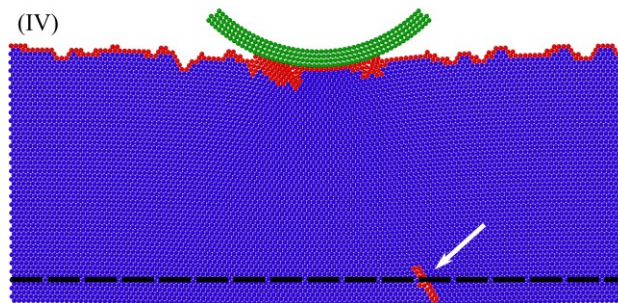
- Confronto con simulazioni atomistiche: cristalli della stessa dimensione
- Ottimo accordo finché la dislocazione non raggiunge l'interfaccia
- Per visualizzare i difetti si usa la CNA

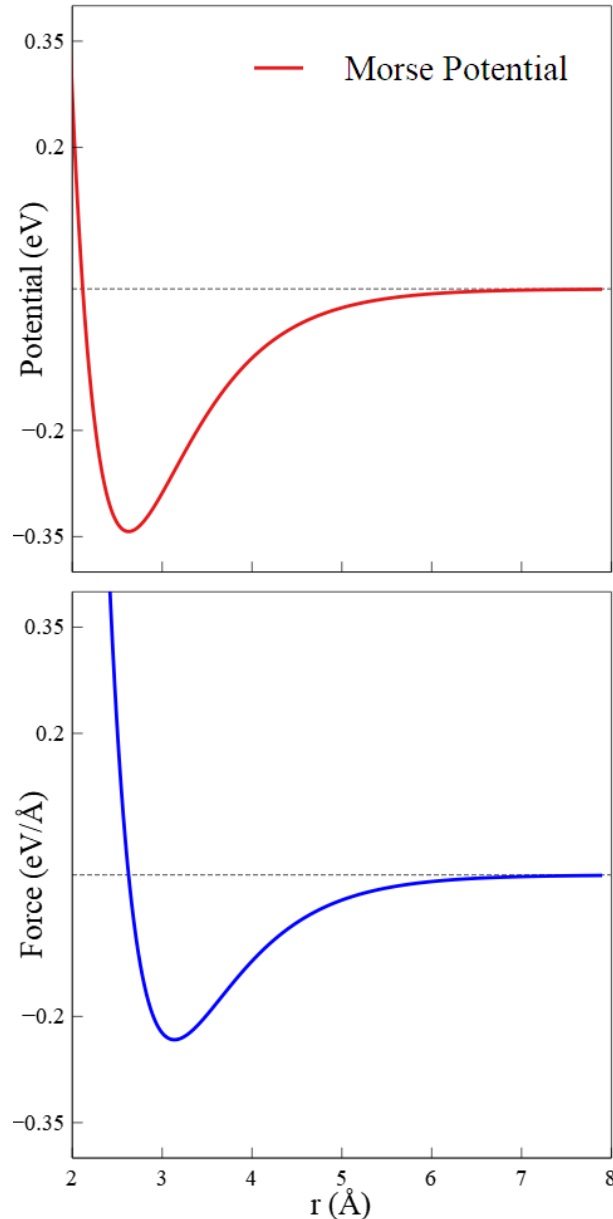


- $\Delta u_c$  è la differenza di profondità di indentazione tra la nucleazione della dislocazione nel modello bi-scala e atomistico



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





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

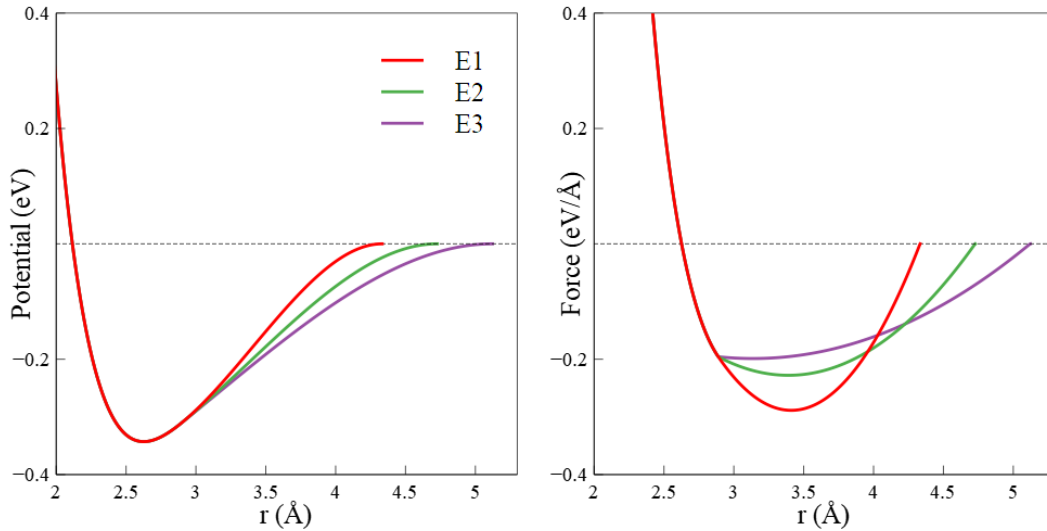
$$\frac{V(r)}{\varepsilon} = (1 - e^{-a(r-r_0)})^2 - 1$$

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

$k_e$  Costante di forza al minimo dell'energia del potenziale

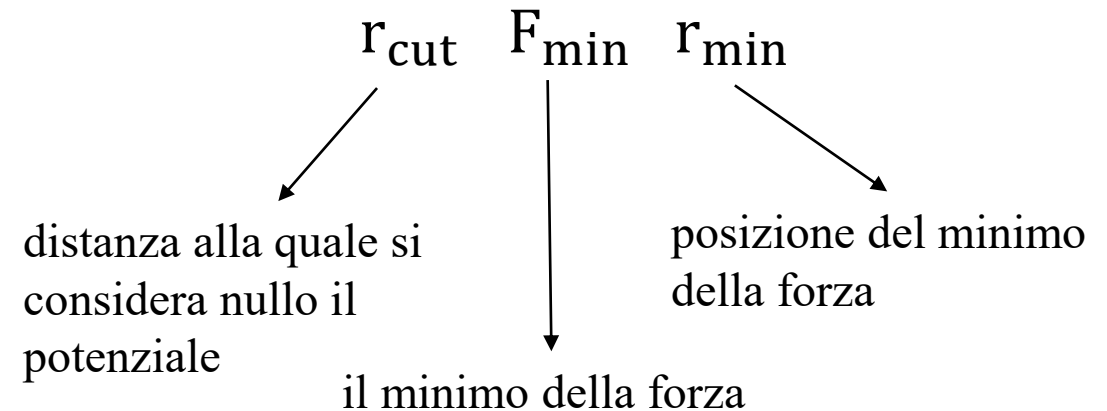
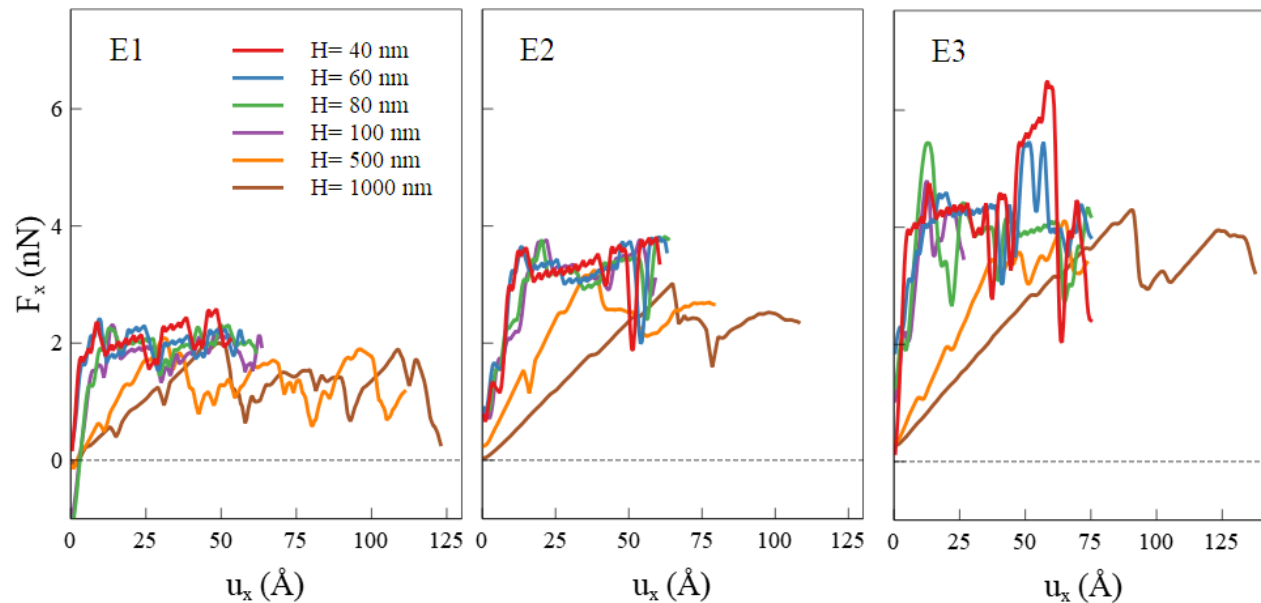
$r_0$  Distanza alla quale la forza di interazione è nulla

$\varepsilon$  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

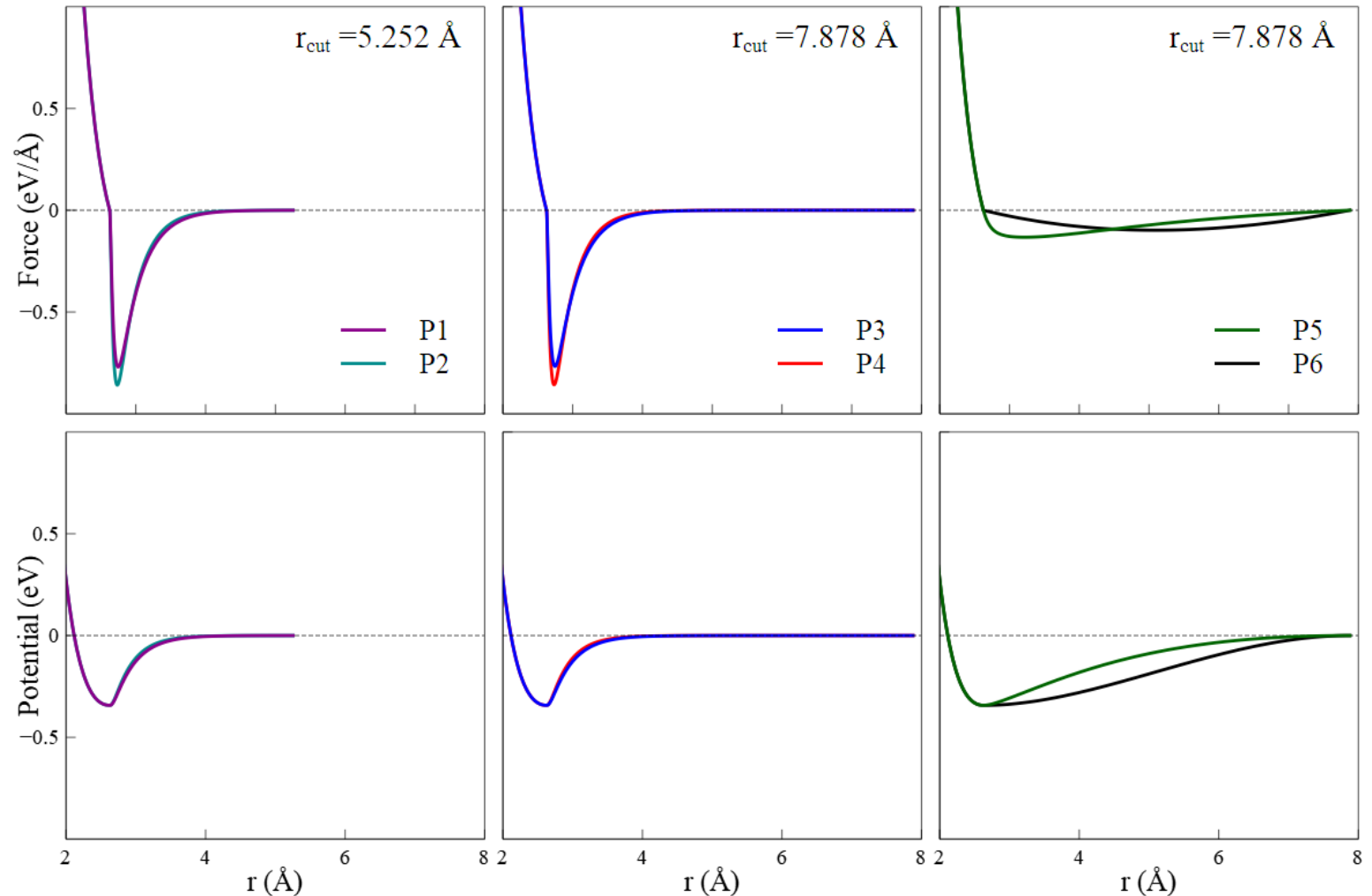


- Il valore di  $F_x$  durante le prove di graffio non è influenzato dall'altezza  $H$

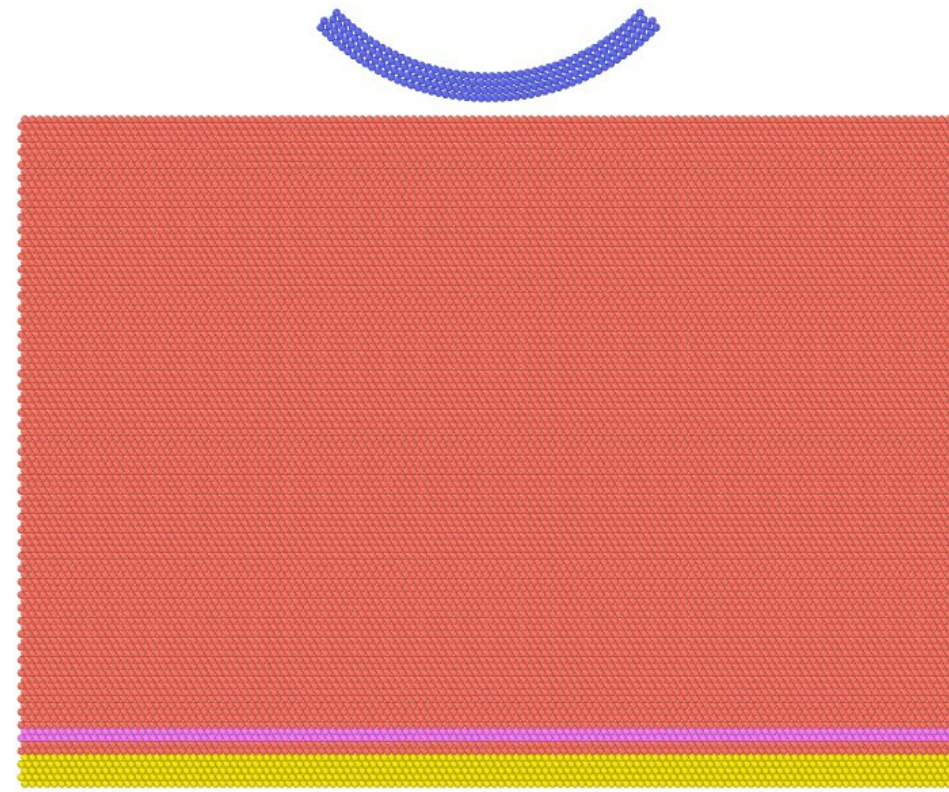
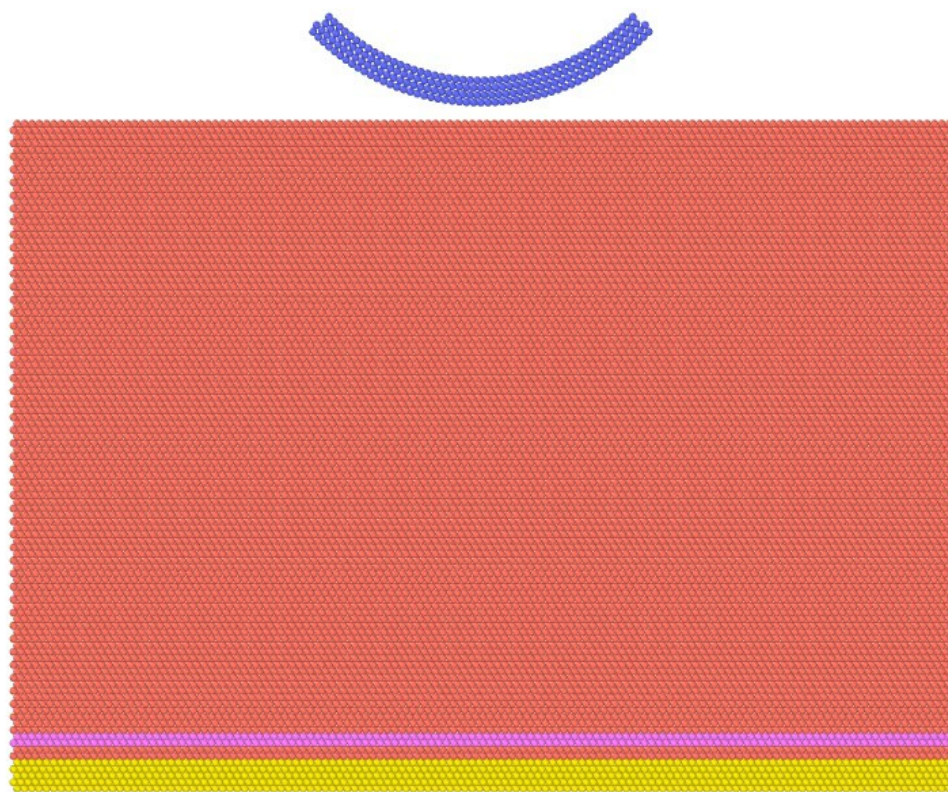
$$\begin{cases} E = \varepsilon[e^{-2a(r-r_0)} - 2e^{-a(r-r_0)}] & r < r_0 \\ E = \sum_{i=1}^5 c_i e^{-\alpha_i(r-r_0)} & r_0 \leq r \leq r_{\text{cut}} \end{cases}$$

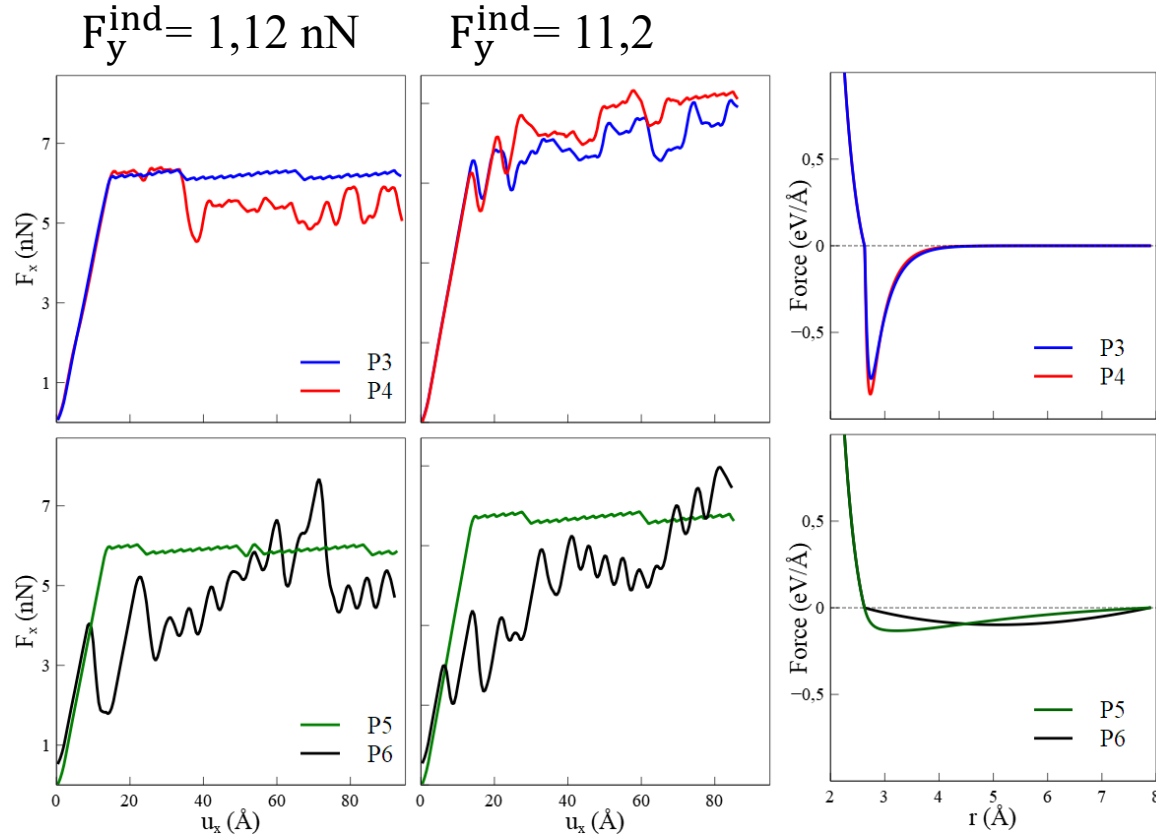
$$\alpha_i = \frac{\alpha_1}{f^{i-1}} \quad f > 0$$

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









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

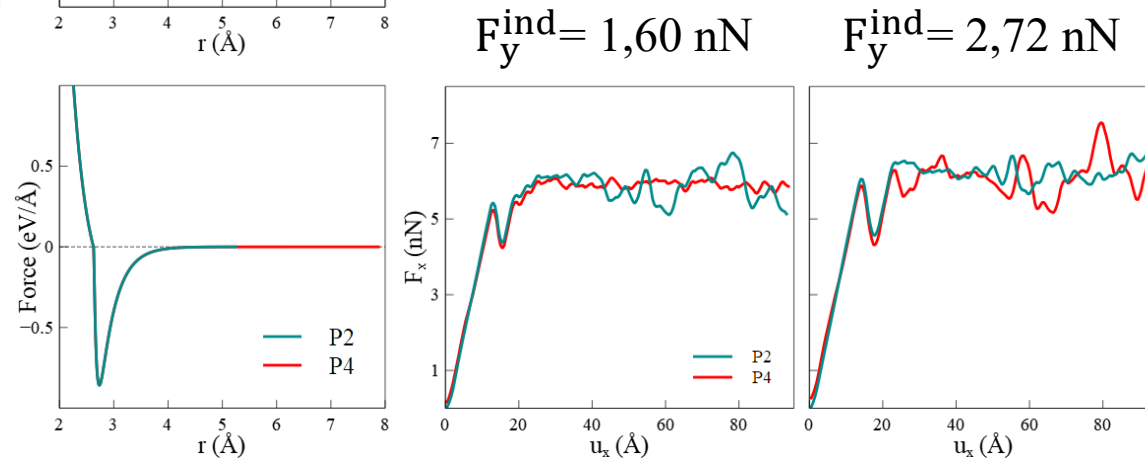
$F_{\text{min}}$

$F_y^{\text{ind}}$

$r_{\text{min}}$

- Effetto della distanza di cut off

$r_{\text{cut}}$



- 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

