Metallurgia fisica

Solido cristallino
esercitazione 2



Matlab primer online

https://www.mccormick.northwestern.edu/documents/students/undergraduate/introduction-to-matlab.pdf

Modellazione e simulazione numerica

Che differenza c'è tra modellazione e una simulazione?

Il modello



Situazione fisica



Modello

Il modello rappresenta erroneamente le distanze, ma e' preciso nell'indentificazione delle intersezioni tra linee della metro

Modeling and simulation

Che differenza c'è tra modellazione e simulazione?

• Modellazione numerica: descrizione matematica e fisica di un fenomeno. Differisce da una teoria in quanto idealizza il comportamento ad un certo livello di accuratezza, non tenta di catturarlo in toto.

• Simulazione numerica: procedura che consente di risolvere le equazioni del modello

Modelli utili

Essentially, all models are wrong, but some are useful.
G. Box

Un modello utile

- Omette o distorce ciò che è inessenziale per cogliere accuratamente la fisica **rilevante** del problema.

- Prevede il comportamento in condizioni che non sono state studiate in precedenza.

È compito del bravo ingegnere decidere cosa è inessenziale, cosa è rilevante e con quale grado di accuratezza si desidera modellizzare il problema in esame

I modelli in ingegneria

I modelli che vengono utizzati in ingegneria sono sempre modellii matematici. Nei casi più semplici questi modelli sono equazioni facilmente risolvibili in modo analitico.

Spesso si tratta di equazioni differenziali che devono soddisfare determinate condizioni al contorno. Molti di questi modelli matematici sono troppo complicati per essere risolti analiticamente, quindi ci si affida a modelli che vengono risolti per via numerica.

L'ingegneria dei materiali fa uso di vari modelli numerici che vanno dalla scala atomistica a quella macroscopica.

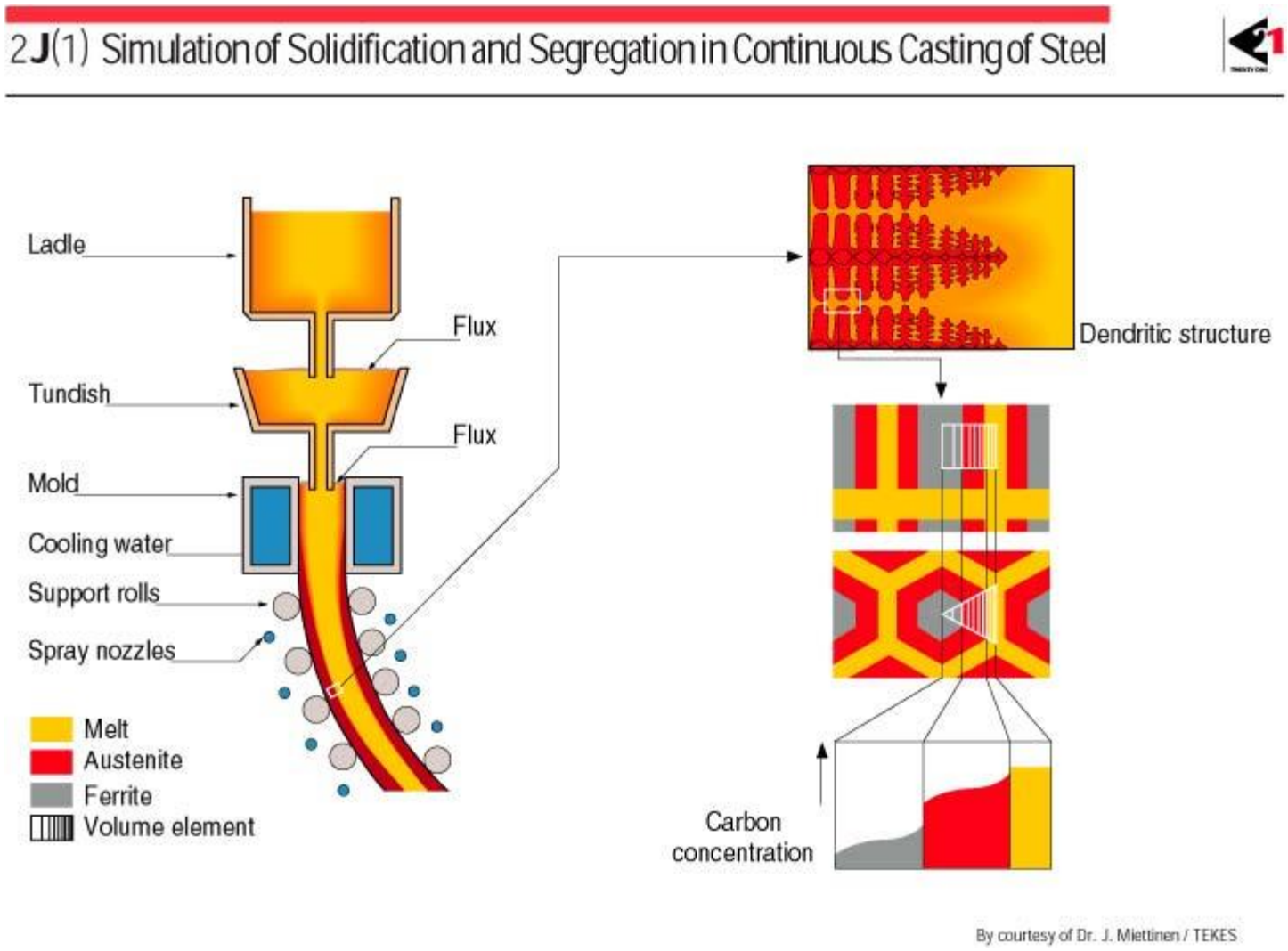
Esperimenti e simulazioni

Nella ricerca scientifica si utilizzano in modo sempre piu' sinergico esperimenti e simulazioni numeriche.

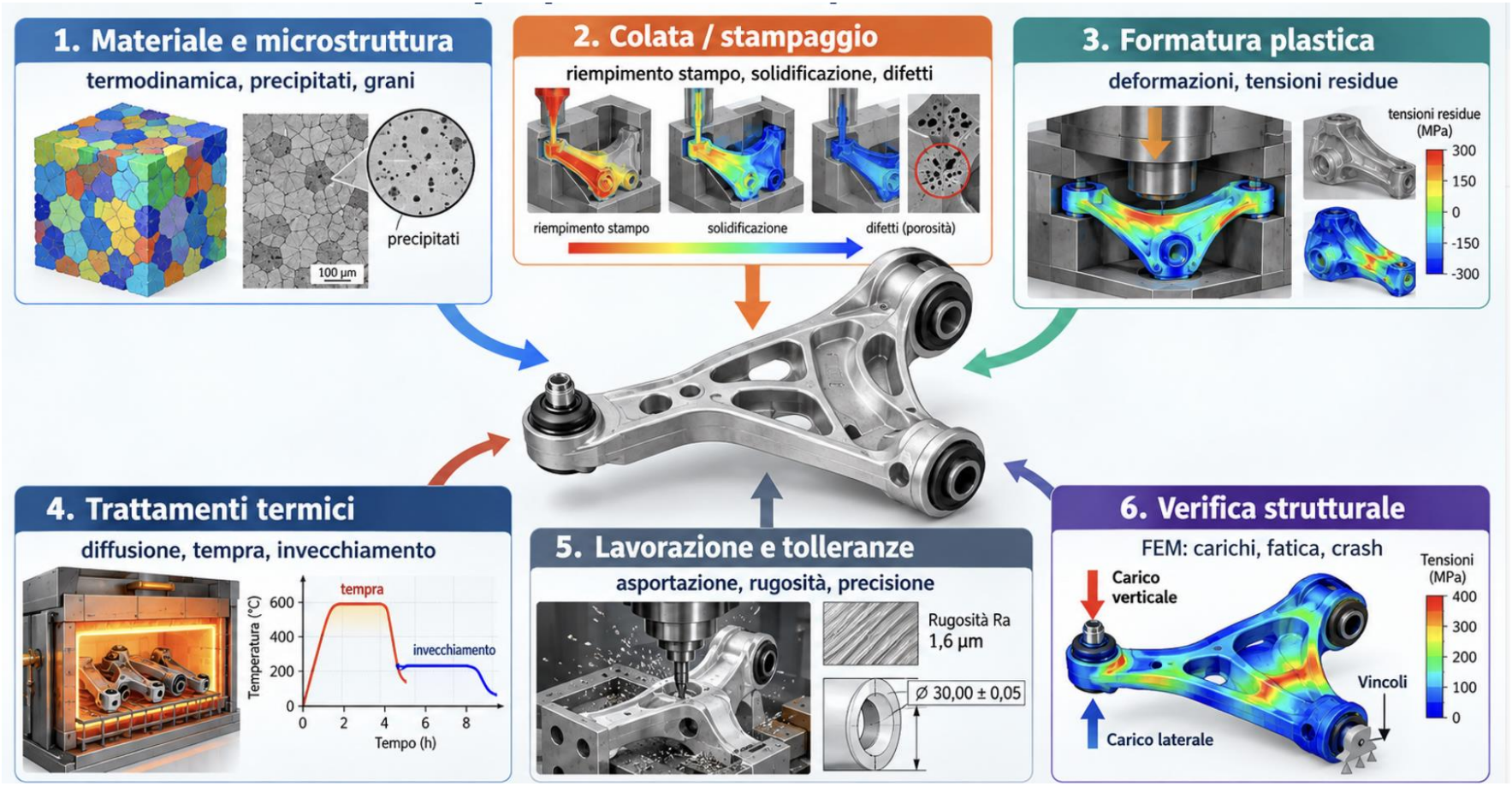
Vantaggi simulazioni:

- Consentono di analizzare un numero altissimo di situazioni
- Sono a costo quasi nullo
- Facilitano il riconoscimento delle cause e degli effetti perchè l'input e' controllato
- Costutuiscono degli esperimenti virtuali
- Vengono utilizzate per controllare i processi industriali

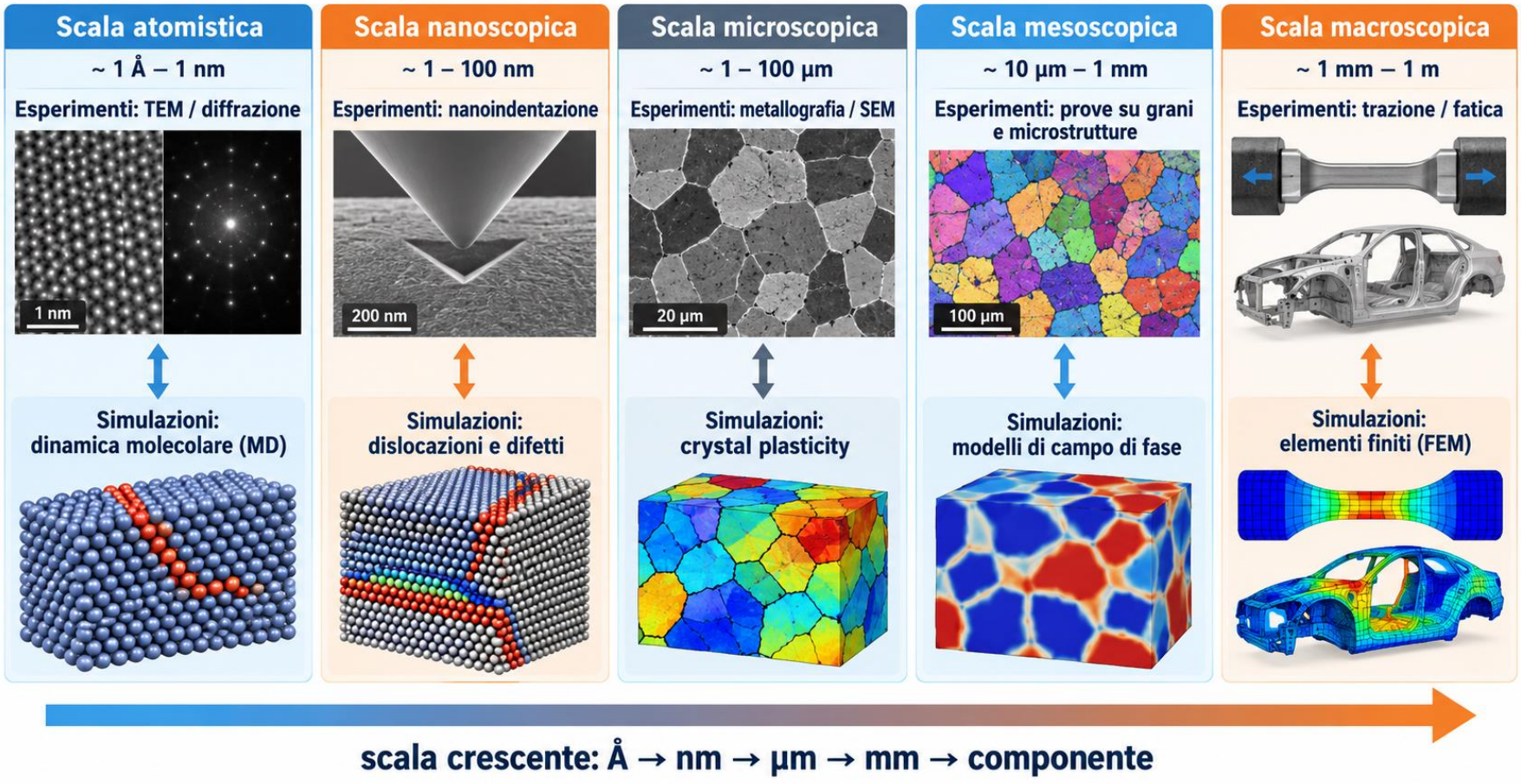
Kawasaki: modello di colata in continuo



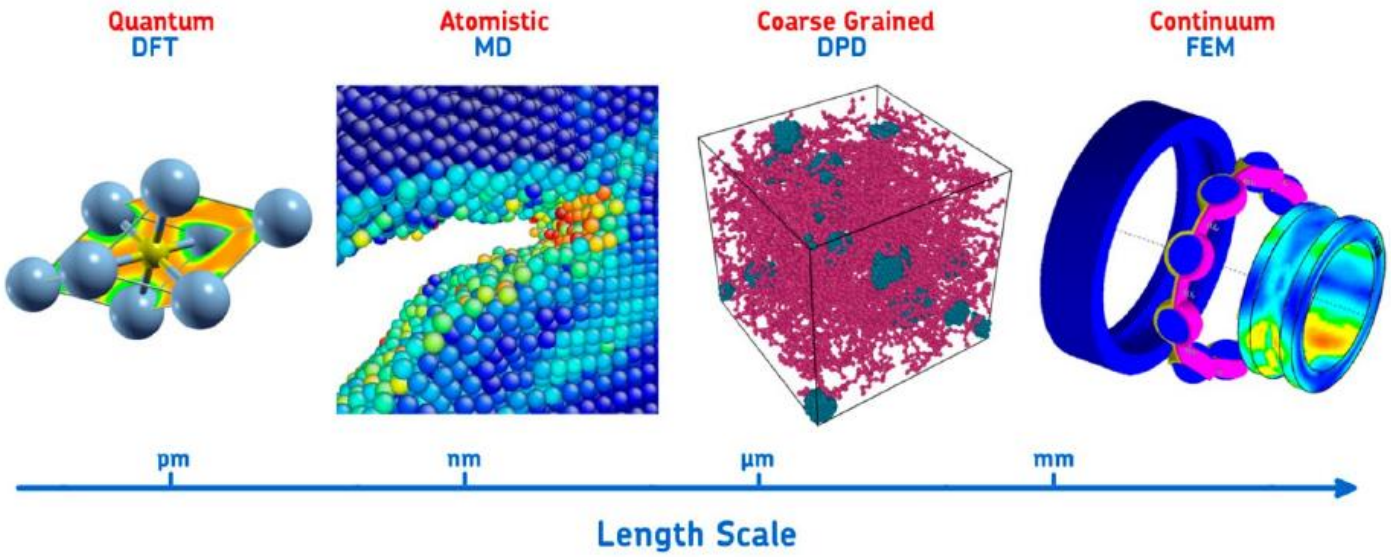
Analisi numerica: componente metallico



Esperimenti e simulazioni: scale diverse



SKF modeling research line



BEARING RESEARCH: GOING TO THE ATOMIC SCALE

TECHNOLOGY This article provides insight into the four main lines of research through modeling at SKF: bearing steel, fatigue mechanisms, polymer design and tribology.

AUTHOR:
SEBASTIÁN ECHEVERRI RESTREPO,
RESEARCHER, SKF ENGINEERING & RESEARCH CENTRE (ERC), SKF B.V., NIEUWEGEIN, THE NETHERLANDS

Tuesday 29 March 2016

Esercitazioni 2+3

Lo **scopo** di questa esercitazione e della prossima è quello di calcolare numericamente **l'energia di coesione** di un cristallo a 0K e determinare come quest'energia vari al variare della costante reticolare del cristallo.

Cos'è l'energia di coesione di un cristallo?

Esercitazioni 2+3

Lo **scopo** di questa esercitazione e della prossima è quello di calcolare numericamente **l'energia di coesione** di un cristallo a 0K e determinare come quest'energia vari al variare della costante reticolare del cristallo.

Cos'è l'energia di coesione di un cristallo?

Si definisce energia di coesione la differenza fra l'energia dei componenti separati di un cristallo (gli atomi) e quella del cristallo stesso. L'energia di coesione è positiva: è l'energia che va fornita al cristallo per dividerlo nelle sue componenti.

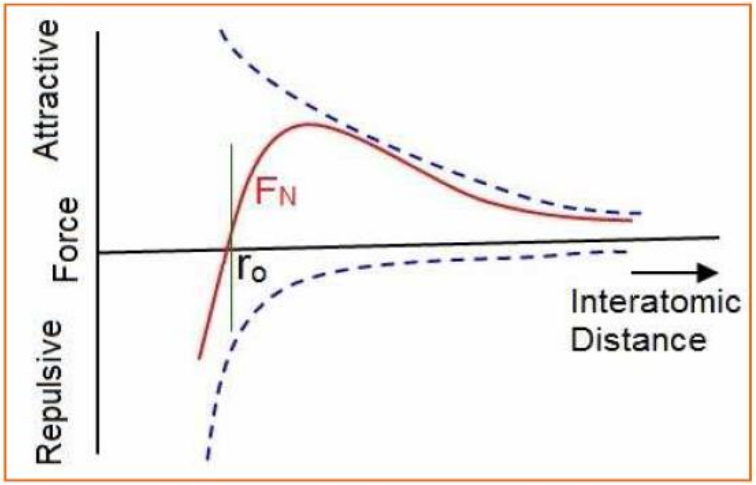
Come procediamo?

Quali sono le informazioni che ci interessano per calcolare l'energia coesiva?

Le interazioni atomiche

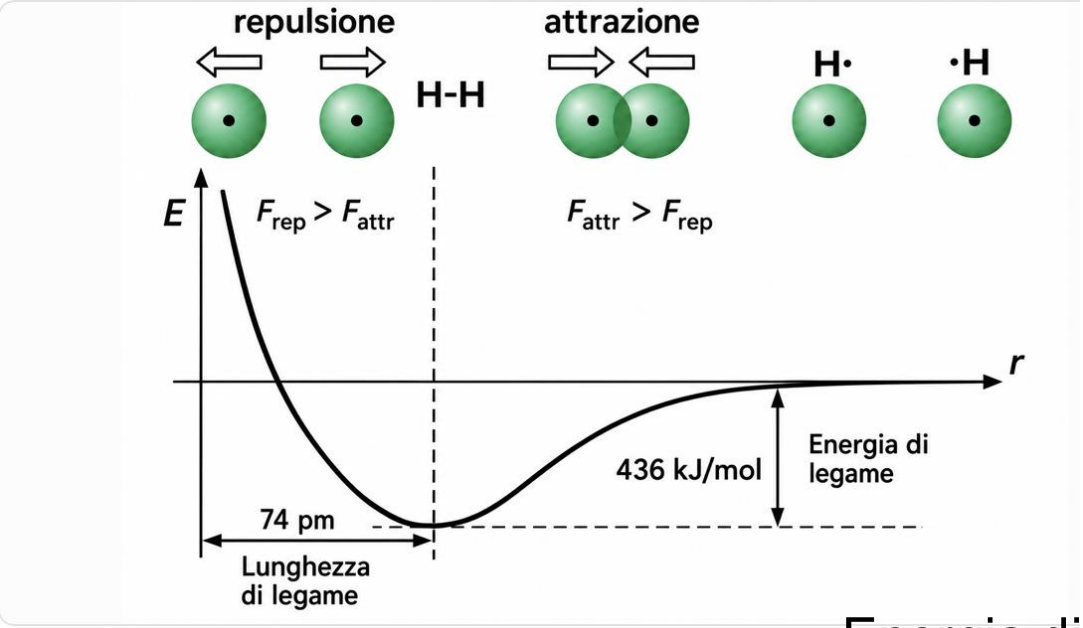
Cosa succede quando due atomi neutri si avvicinano?

- Sono sottoposti ad una forza attrattiva o repulsiva in base alla loro distanza
- La forza attrattiva è dovuta all'interazione tra gli elettroni di un atomo e il nucleo dell'altro
- La forza repulsiva è dovuta all'interazione tra elettroni e nuclei dei due atomi
- La distanza alla quale le due forze si equivalgono è la distanza interatomica.



Energia di legame

L'energia di legame varia al variare della **distanza** tra atomi,
Il minimo dell'energia di legame definisce la **lunghezza** del legame.



Energia di Lennard-Jones

$$V_{LJ}(r) = 4\epsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r}\right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r}\right)^{6} \right]$$

Come procediamo?

Quali sono le informazioni che ci interessano per calcolare l'energia coesiva?

1. Una legge che ci dica come varia l'energia al variare della distanza tra gli atomi

$$V_{LJ}(r) = 4\epsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r}\right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r}\right)^{6} \right]$$

2. Conoscere la distanza relativa e quindi la posizione degli atomi

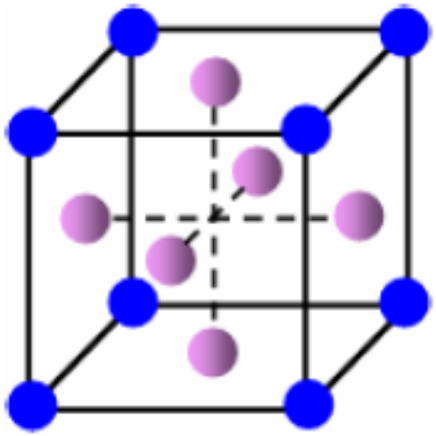
Consegna

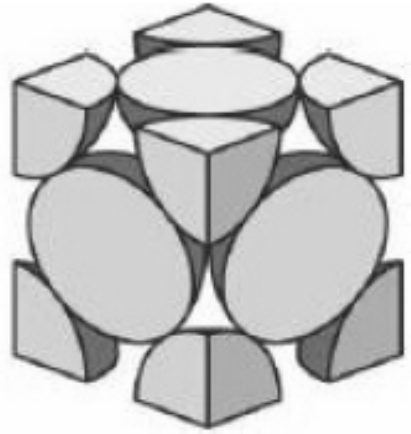
Si crei il **modello** di un monocristallo cubico di dimensioni finite, composto da N celle unitarie con struttura cristallina CFC.
Si crei inoltre un modello analogo per una struttura CCC.

Ciascun modello deve essere generico, quindi riferirsi ad un monocristallo CFC o CCC, senza rappresentare un elemento chimico specifico.

In questo modo il modello può poi essere applicato a qualsivoglia cristallo CFC o CCC.

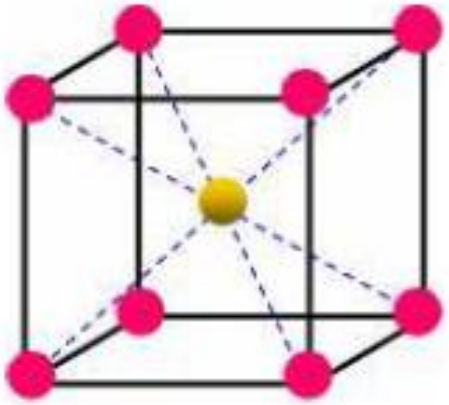
CFC e CCC

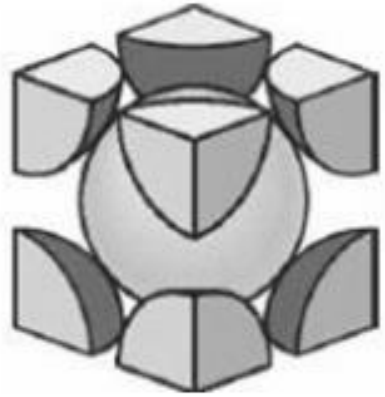




cubica a facce centrate

(Al, Cu, Ag, Au, austenite)



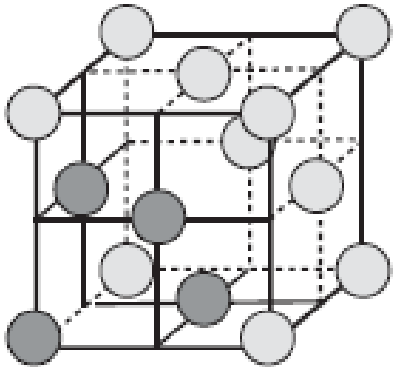


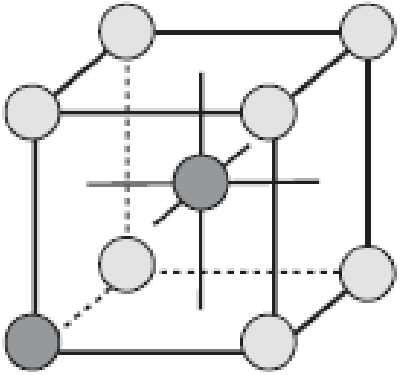
cubica a corpo centrato

(Cr, W, V, Mo, Ti, ferrite)

Qual è l'unità minima che si ripete in modo da generare il reticolo?

Cristalli CFC e CCC





CFC: solo 4 atomi nella cella minima che si ripete:

CCC: 2 atomi nella cella minima:

Esercitazione 1: il reticolo CFC

Scrivere una funzione MatLab che crei un monocristallo cubico a struttura CFC, contenente in ogni direzione un numero *nc* di celle unitarie.

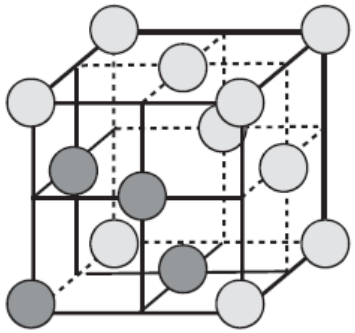
Suggerimento 1:

Definire input e output:

INPUT: il numero di celle **nc**
OUTPUT: le coordinate **s** di ogni atomo e il numero totale di atomi.

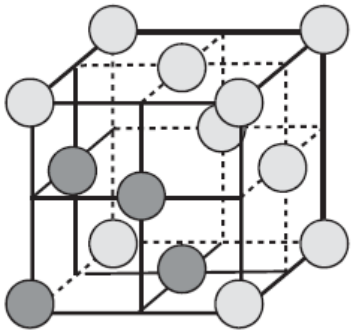
Suggerimento 2:

Le coordinate dei 4 atomi della cella più piccola sono note. Le scriviamo rispetto ad un sistema di riferimento che scegliamo comodo.



Suggerimento 3:

Le coordinate dei 4 atomi della cella più piccola sono note. Le scriviamo rispetto ad un sistema di riferimento che scegliamo comodo.
Sappiamo che sono frazioni del parametro reticolare che qui non consideriamo esplicitamente. Ci basterà a codice finito, inserire la costante reticolare come una variabile da modificare a nostro piacimento.



$$\vec{r}_1 = (0,0,0)$$

$$\vec{r}_2 = \left(\frac{1}{2},\frac{1}{2},0\right)$$

$$\vec{r}_3 = \left(\frac{1}{2},0,\frac{1}{2}\right)$$

$$\vec{r}_4 = \left(0,\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right)$$

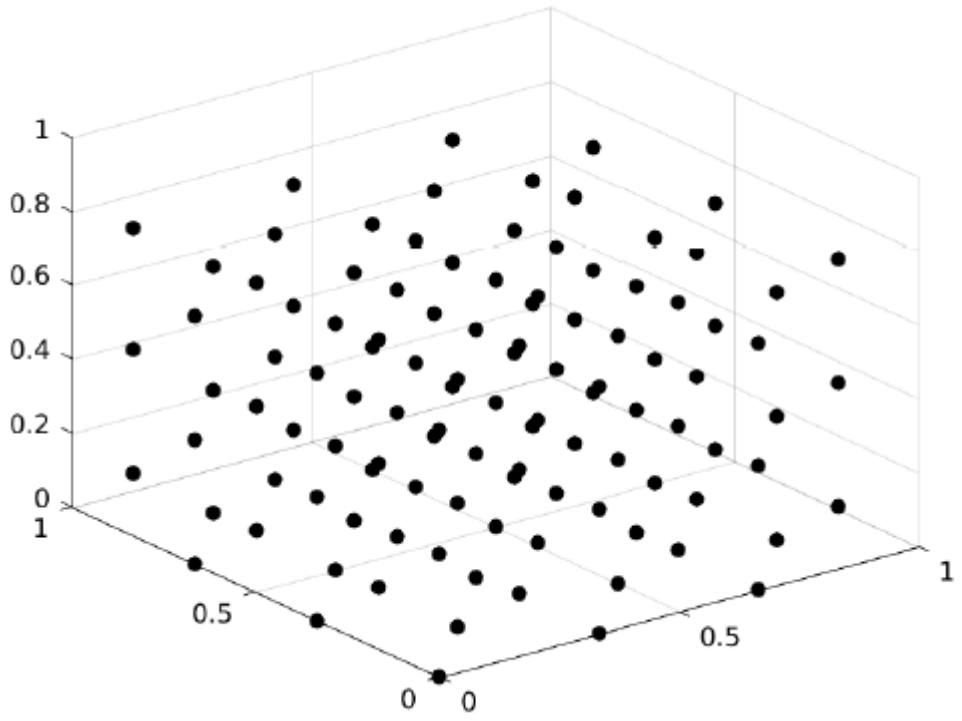
Suggerimento 4

Ora che abbiamo la cella unitaria, la possiamo replicare nello spazio per creare il cristallo.
Visto che dobbiamo ottenere un cubo è saggio considerare lo stesso numero di celle in direzione *x*, *y* e *z*.

Suggerimento 5

Visualizzare il cristallo creato utilizzando il commando **scatter3**

Cristallo FCC



fccmke.m

```
function[s,i1]= fccmke(nc)
n=4; % number of atoms in a unit cell
%nc=2; % cells in each-direction, if fccmke is run independently of latsum
na=n*nc^3; %number of atoms in the simulation
r=[0 0 0;.5 .5 0;0 .5 .5;.5 0 .5]
i1=0; % initialize the total number of atoms
s=zeros(n*nc^3,3);  % s(atoms, coordinates)
for k=1:nc
    for l = 1:nc
        for m = 1:nc
           for i = 1:4
                i1=i1+1;
                s(i1,1) = (r(i,1) + k-1)/nc;
                s(i1,2) = (r(i,2) + l-1)/nc;
               s(i1,3) = (r(i,3) + m-1)/nc;
            end
        end
    end
end
scatter3(s(1:na,1),s(1:na,2),s(1:na,3),'filled'); % visualize all atoms in the unit
cell
```

s è una matrice NX3, contiene le coordinate degli N atomi

Assunzioni

Abbiamo descritto gli atomi come dei punti nel reticolo cristallino, aventi quindi dimensioni nulle. Di interesse sono le loro coordinate e posizioni relative nello spazio.
Abbiamo quindi deciso di considerare non essenziale:

1. Dimensioni atomiche
2. Distribuzione elettronica

Nulle le vibrazioni atomiche (T=0K)