



IIIIs06-004

Determinação de parâmetros de rede de ligas CrCoNi por simulação computacional de teoria do funcional da densidade

De Assis, F.F.(1); Coury, F.(1);

(1) UFSCar;

Ligas de Alta Entropia (LAEs) ou multicomponentes são uma nova classe de materiais metálicos desenvolvida nas últimas décadas que possuem como característica principal não serem baseadas em um único elemento, e sim serem constituídas por misturas de diversos elementos. Dentre as LAEs já desenvolvidas, grande destaque é dado para composições CrCoNi, que possuem excelentes propriedades mecânicas, figurando dentre os materiais de maior tenacidade existentes. Dentre as razões das excelentes propriedades destas ligas, um importante motivo que deve ser destacado é alta componente de endurecimento por solução sólida, o que pode ser estimado usando diferentes modelos propostos na literatura. Entretanto, como estudos passados mostraram, estimar esta contribuição é muito susceptível aos raios (ou volumes) atômicos usados como input. No presente projeto foi usado o método de simulação computacional da teoria do funcional da densidade para prever os parâmetros de rede e de diferentes ligas CrCoNi. Estes valores foram usados para verificar desvios em relação à lei de Vegard para estas ligas metálicas, permitindo avaliar com mais precisão como se dá a relação entre a mudança dos parâmetros de rede destas ligas em função da variação composicional das mesmas. Neste trabalho, o cálculo dos parâmetros de rede das ligas do sistema CrCoNi envolveu o uso do método da teoria do funcional da densidade (DFT) aplicado a supercélulas que representam as ligas do sistema a serem analisadas, contemplando diferentes possibilidades de composição. Essas supercélulas foram construídas por meio de arquivos CIF (crystallographic information file), e foram preparados arquivos de cálculos para serem executados pelo Software Quantum ESPRESSO. Esses cálculos envolvem a relaxação de cada supercélula para encontrar o volume que corresponda à condição de menor energia, e assim, se possa obter o parâmetro de rede desejado. Serão apresentadas as regiões de maior concordância e maior divergência entre a lei de Vegard e os parâmetros de rede destas ligas, o efeito desta variação de volume atômico nos modelos de endurecimento por solução sólida será discutida e será mostrado como estas pequenas variações apresentam grandes impactos nas propriedades finais calculadas.