



**III23-001**

**Estudo de autodifusão e arranjo atômico de curto alcance em ligas vítreas do sistema Cu-Zr-Ti via simulação computacional de dinâmica molecular**

Aliaga, L.R.(1); Schmidt, C.S.(1); Bastos, I.N.(1);

(1) IPRJ-UERJ;

O processamento de vidros metálicos em geral é realizado por resfriamento rápido do estado líquido. Neste processo, é importante entender a dinâmica atômica no estado do líquido super-resfriado (LSR), sendo o coeficiente de difusão atômica um parâmetro que afeta seu comportamento. A formação de fase vítrea em ligas metálicas é limitada a algumas composições, que geralmente são formadas por componentes com diferentes características físicas e químicas. Neste trabalho, a simulação computacional por dinâmica molecular foi utilizada para avaliar a autodifusão atômica no estado do LSR das ligas Cu<sub>58,0</sub>Zr<sub>31,5</sub>Ti<sub>10,5</sub> e Cu<sub>54</sub>Zr<sub>30</sub>Ti<sub>16</sub> e ainda correlacionar a movimentação atômica com o arranjo atômico de curta distância. As simulações foram realizadas nas mesmas condições empregando-se o potencial Embedded Atom Method na versão de Finnis-Sinclair (EAM-FS). Foi determinado que a autodifusão atômica depende levemente da composição da liga, mas fortemente do tamanho atômico. A movimentação dos átomos de maior tamanho é menos dependente da composição, evidenciado pela semelhança dos valores da energia de ativação. A maior energia de ativação dos átomos de cobre da liga Cu<sub>54</sub>Zr<sub>30</sub>Ti<sub>16</sub> influencia o arranjo atômico e a viscosidade da liga e, deste modo, a Tendência à Formação de Amorfo (TFA). Assim, a TFA da liga Cu<sub>54</sub>Zr<sub>30</sub>Ti<sub>16</sub> é maior que a da Cu<sub>58,0</sub>Zr<sub>31,5</sub>Ti<sub>10,5</sub>.