



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_{58,0}Zr_{31,5}Ti_{10,5} e Cu₅₄Zr₃₀Ti₁₆ 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 Cu₅₄Zr₃₀Ti₁₆ influencia o arranjo atômico e a viscosidade da liga e, deste modo, a Tendência à Formação de Amorfo (TFA). Assim, a TFA da liga Cu₅₄Zr₃₀Ti₁₆ é maior que a da Cu_{58,0}Zr_{31,5}Ti_{10,5}.