

## FORMAÇÃO DE FASE AMORFA NA LIGA $\text{Cu}_{60}\text{Zr}_{32,5}\text{Ti}_{7,5}$ POR DINÂMICA MOLECULAR

C. S. Schmidt\*, L. V. Lima, I. N. Bastos, L. C. R. Aliaga  
Instituto Politécnico, Departamento de Materiais, Universidade do Estado do Rio de Janeiro, Rua Bonfim 25, Vila Amélia, 28.625-570, Nova Friburgo, RJ – Brasil.

\* [camilaschmidt17@gmail.com](mailto:camilaschmidt17@gmail.com)

### Resumo

*Este artigo apresenta resultados de simulação de dinâmica molecular da liga  $\text{Cu}_{60}\text{Zr}_{32,5}\text{Ti}_{7,5}$  através do código livre LAMMPS. Amostras amorfas foram produzidas pelo resfriamento do metal fundido a 2300K para 200K com taxas de 50, 5 e 0,5K/ps. Funções de distribuição de pares do líquido e sólido foram calculadas e comparadas em diferentes temperaturas. A topologia de ordem de curto alcance foi analisada usando o método de Voronoi que determinou a presença de clusters icosaedrais centrados no cobre como prevaletentes no estado amorfo a 300K, além disso, foram realizados ensaios de tração uniaxiais com taxa de deformação de  $10\text{ps}^{-1}$ , para investigar a deformação mecânica. O resultado da curva tensão-deformação mostra que a deformação entra no regime plástico, entretanto, bandas de cisalhamento, típicas em ensaios experimentais não foram observadas. Também foi determinada a evolução da viscosidade e a fragilidade do líquido super-resfriado. Temperaturas solidus e líquidus foram determinadas e comparadas as obtidas em dados experimentais.*

**Palavras chave:** Vidros metálicos, ligas amorfas, tendência à formação do amorfo, dinâmica molecular.

### INTRODUÇÃO

Quando um metal líquido é resfriado em taxas baixas, o líquido solidifica e forma um sólido cristalino ao atingir a temperatura de fusão ( $T_m$ ). Em  $T_m$  o líquido sofre uma transição de fase de primeira ordem, que é evidenciado por uma grande diferença em alguma das propriedades termodinâmicas extensivas (1). A fase líquida possui uma energia maior do que a fase sólida, e o sistema libera o calor latente para atingir o estado cristalino altamente ordenado. Por outro lado, por resfriamento rápido é possível obter um material que persiste como um líquido ainda abaixo de  $T_m$ , conhecido como líquido super-resfriado. Conforme a temperatura diminui e atinge a temperatura de transição vítrea ( $T_g$ ), o material formado torna-se um sólido com estrutura semelhante ao líquido e é conhecido como sólido amorfo ou vidro metálico, o qual se encontra num estado metaestável (2).

Atualmente pode-se distinguir dois tipos de materiais amorfos. A primeira classe corresponde aos amorfos ordinários, onde no aquecimento, não apresentam  $T_g$ , já a segunda classe a  $T_g$ , é claramente definida. Em ambas as classes de amorfos a cristalização para estados mais estáveis é dada na temperatura  $T_x$ .

Durante as últimas décadas, o estudo dos vidros metálicos ganhou grande interesse industrial e científico devido a suas propriedades superiores como alta resistência à corrosão e mecânica (3). No entanto, a obtenção de um material com tamanho suficiente para aplicações tecnológicas estruturais não é tarefa fácil. Isso ocorre devido a que as ligas metálicas geralmente formam uma estrutura cristalina, que correspondem a fases mais estáveis à temperatura ambiente.

Nas últimas décadas o estudo de vidros metálicos é realizado por diferentes frentes tais como experimental, teórica e simulação computacional. Esta última técnica pode ser considerada como uma ferramenta de laboratório virtual (4) e permite obter diversas propriedades físicas e estruturais que não são possíveis obter a partir de estudos experimentais. Além disso, vários modelos semi-empíricos e de primeiros princípios têm sido propostos para explicar a estrutura ao nível de clusters (5) e sua relação com a tendência à formação de amorfo (TFA). No entanto, ainda não existe uma abordagem amplamente aceita para descrever todos os sistemas de vidros metálicos. Todavia, estudos baseados em dinâmica molecular (DM) foram aplicados para analisar vários sistemas de ligas. Esses estudos mostram boa correlação entre os tipos de clusters presentes nas ligas amorfas e algumas propriedades físicas dos vidros metálicos.

Neste trabalho, se faz uso do o código livre LAMMPS (6) para a simulação computacional em DM da liga  $\text{Cu}_{60}\text{Zr}_{32,5}\text{Ti}_{7,5}$ , a fim de se obter detalhes das propriedades termofísicas e da TFA em função da ordem atômica de curto alcance na qual dados experimentais tornam-se limitados.

## DETALHES EXPERIMENTAIS E COMPUTACIONAIS

Experimentalmente, lingotes da liga foram processados por forno a arco sob atmosfera de Ar e *getter* de Ti a partir de elementos de alta pureza. Posteriormente o lingote foi refundido em cadinhos de quartzo e fitas amorfas foram obtidas por *melt-spinning*. As fitas obtidas foram caracterizadas por difração de raios-x (DRX) e calorimetria diferencial de varredura (DSC).

A simulação de DM foi realizada usando o potencial de Finis-Sinclair (FS-EAM) (7) através do programa LAMMPS. O sistema simulado consistiu de 32.000 átomos partindo da estrutura B2 com condições de contorno periódicas. Átomos de Cu e Zr foram substituídos por átomos de Ti de acordo com a porcentagem atômica definida pela estequiometria da liga sob estudo. Inicialmente, a liga foi minimizada a 0K e relaxada a 300K por 10ns, em seguida aquecida até 2300K à taxa de 5K/ps, e mantida a essa temperatura por 10ns para estabilizar o líquido. Posteriormente, o sistema foi resfriado até 200K sob três taxas diferentes: 50, 5 e 0,5K/ps. O controle de temperatura foi feito através do ensemble isotérmico–isobárico (NPT). O tempo de integração na simulação foi de 2fs. A evolução estrutural do sistema foi avaliada através das curvas Energia Total–Temperatura (ET-T), função de distribuição radial total (FDRT) e a viscosidade. A ordem atômica de curto alcance (SRO) foi analisado a três temperaturas diferentes de 800, 700 e 300K usando o método de Voronoi.

## RESULTADOS E DISCUSSÃO

As fitas amorfas obtidas apresentaram largura média de 3mm, espessura de 30 $\mu$ m e alguns metros de comprimento. A Figura 1(a) mostra a curva de DSC da fita amorfa realizada à taxa de aquecimento de 0,67K/s. O termograma mostra um claro pico endotérmico, característico da transição vítrea ( $T_g = 715$ K), seguido por um evento exotérmico à temperatura de  $T_x = 762$ K correspondente à transição de cristalização; a região de líquido super-resfriado ( $\Delta T_x$ ) correspondente é de 47K. A Figura 1(b) apresenta o padrão de DRX da fita amorfa; observa-se um halo largo sem evidência de picos de possíveis fases cristalinas. O centro do halo de DRX esta localizado em  $2\theta = 40,40$  graus.

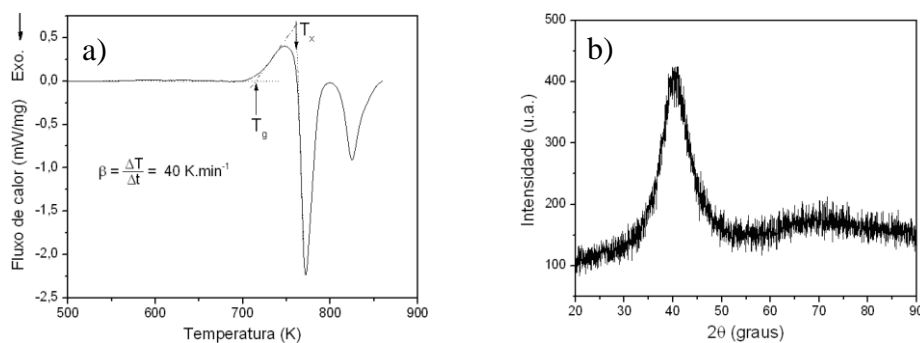


Figure 1. a) Termograma de DSC, da fita, obtido à taxa de aquecimento de 0,67K/s. b) padrão de DRX para a mesma liga.

Os resultados experimentais, mostram que a liga estudada é completamente amorfa e para obter uma melhor compreensão sobre sua TFA, a simulação foi realizada a diferentes taxas de resfriamento. Altas taxas de resfriamento produzem essencialmente a mesma estrutura vítrea. É possível perceber que as principais diferenças são a quantidade de volume livre (8) e a quantidade de clusters (9) que conduzem a estados energéticos diferentes.

A Figura 2a exibe as estruturas cristalina e amorfa a 300K. A Figura 2b apresenta as curvas Volume-Temperatura durante as etapas de aquecimento e resfriamento para determinar as diferentes temperaturas das transições de fase: as temperaturas  $T_L$  e  $T_S$ , durante o aquecimento e, a  $T_g$  durante o resfriamento.

Durante o aquecimento, a temperatura aumenta de 300 para 2300K, a taxa constante. O volume aumenta linearmente até o início da transição de fase sólido-líquido em  $T_S$ , onde há uma abrupta mudança no volume até  $T_L$ , posteriormente essa relação torna-se novamente linear. Os valores de 1498K e 1565K foram obtidos para  $T_S$  e  $T_L$ .

Apesar dos valores das temperaturas  $T_S$  e  $T_L$  encontrados não serem os mesmos, a DM foi capaz de modelar de forma apropriada o comportamento deste material. A  $T_L$  obtida é superior à experimental ( $T_L = 1220$  K) por quase 300 K, esta diferença deve-se a simulação ser feita com base num cristal perfeito, sem defeitos ou efeitos de superfície. Em condições de contorno periódicas, o sistema pode ser superaquecido até temperaturas superiores ao ponto de fusão de equilíbrio.

Por outro lado, durante o resfriamento, o volume do sistema diminui continuamente em função da temperatura, suprimindo a ocorrência de nucleação de fases cristalinas. Na temperatura de transição vítrea, o material torna-se rígido e se comporta como um sólido, preservando o arranjo atômico amorfo.  $T_g$  foi determinada como a interseção de duas linhas retas com ângulo de inclinação diferente. Este fato é semelhante à transição de fases de segunda ordem termodinâmica, no entanto, é fortemente dependente da cinética. Portanto, quanto maior a taxa de resfriamento, menor o valor de  $T_g$ , como mostrado na Figura 2. A mudança da  $T_g$ , como resultado das diferentes taxas de resfriamento não excede 10K. Para a taxa de resfriamento de 0,5K/ps, o valor de  $T_g$  obtido por esse método foi 705K.

De acordo com a teoria do volume livre (10), o volume livre (VL) em excesso no líquido ficará preso no estado vítreo quando esse for resfriado até o sólido. A quantidade de VL depende da taxa de resfriamento. A amostra resfriada a 0,5K/ps

mostra energia total relativamente menor, o que indica uma forma mais compacta da estrutura amorfa final. Quanto maior a taxa de resfriamento, maior será a quantidade de volume livre no vidro metálico. Por outro lado, taxas de resfriamento mais lentas permitem um maior tempo para o equilíbrio, e uma maior quantidade de volume livre é aniquilado.

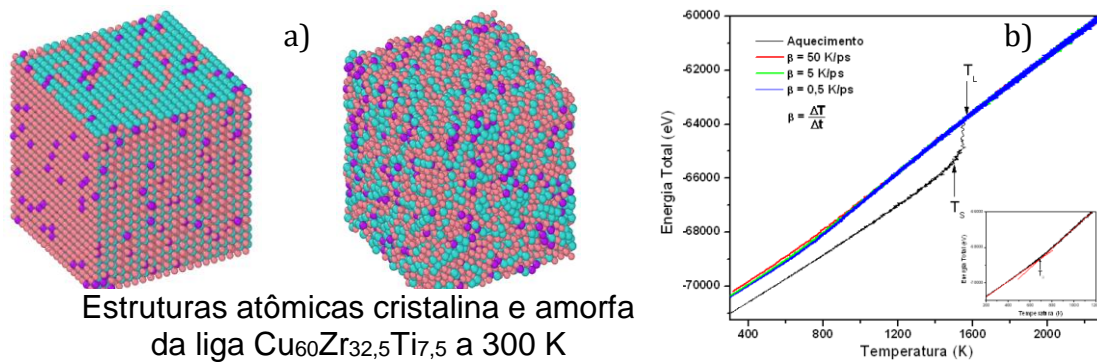


Figure 2. a) Estruturas cristalina e amorfa a 300 K. Cu: esferas rosas, Zr: esferas azuis e, Ti: esferas violetas. b) Curvas de ET vs. T obtidas à taxa de aquecimento de 5K/ps e às taxas de resfriamento de 50, 5 e 0,5 K/ps respectivamente. No *inset* parte da curva de resfriamento a 5K/ps.

Em vários casos é necessário determinar um parâmetro através de métodos diferentes para garantir um resultado mais confiável. Uma comparação entre os valores de  $T_g$  obtidos experimentalmente e em DM, através da curva ET vs. T, nos mostra valores diferentes: 715K encontrado no experimental e 705K na DM. Tais diferenças conduzem a determinar  $T_g$  através o parâmetro de Wendt-Abraham (WA) ( $WA = g_{min}/g_{max}$ ) (11). Nesta relação,  $g_{min}$  representa o primeiro mínimo de  $g(r)$  e  $g_{max}$  o primeiro máximo da FDRT ou curva  $g(r)$ .

A Figura 3a mostra as curvas de FDRT vs  $r(A)$  para diferentes temperaturas. O primeiro pico indica a distância média em que encontramos o vizinho mais próximo entre átomos distintos, neste caso o par Cu-Zr. Além disso, a altura do primeiro pico de  $g(r)$  aumenta quando o líquido é resfriado de 2300 a 200K, que é uma evidência do aumento no SRO na primeira camada de coordenação do líquido super-resfriado. A Figura 3b exibe o parâmetro WA vs. temperatura. A  $T_g$  foi determinada como o ponto de interseção de duas linhas retas. O parâmetro WA enfatiza o caráter local de  $g(r)$  (12), portanto, é muito útil para comparações entre estruturas, visto que

informa uma estimativa precisa da  $T_g$ . Neste estudo, a taxa de resfriamento de 5K/ps foi escolhida para determinar  $T_g$ , pois se apresenta menos difícil para análise em comparação com os dados obtidos em 0,5K/ps que é mais próxima da taxa experimental. O valor obtido para o  $T_g$  foi  $660 \pm 50$ K. Esse alto valor na incerteza é devido a dificuldade para escolher uma linha adequada entre as faixas das temperaturas analisadas, porém seu valor é obtido em boa concordância com os outros valores. A Tabela 1 lista os diferentes parâmetros térmicos, tais como  $T_g$ ,  $T_S$ ,  $T_L$ ,  $T_{rg}$ , ( $T_{rg} = T_g/T_L$ ) e  $\Delta T_x$ .

**Tabela 1.** Parâmetros térmicos obtidos usando diferentes métodos e comparação com dados experimentais

	$T_g(K)$	$T_x(K)$	$\Delta T_x(K)$	$T_{rg}$	$T_L(K)$
Exp	715	762	47	0,59	1220
DM	660	-	-	0,42	1565

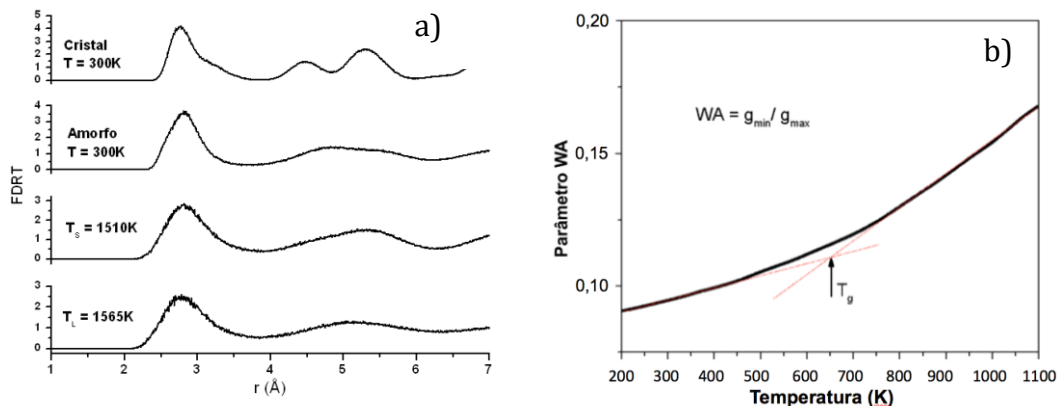


Figure 3. a) Curvas de FDRT obtidas durante o aquecimento para determinar  $T_L$  e  $T_S$  e durante o resfriamento à taxa de 5K/ps. b) Parâmetro WA vs T.

Estudos mostram que o comportamento do líquido super-resfriado como função do SRO é responsável pela TFA dos vidros metálicos (13). Foi proposto que a TFA está relacionada com a concentração de poliedros icosaedrais (14), no entanto, essa afirmação não é totalmente verdadeira, pois a fração de poliedros icosaedrais no líquido super-resfriado e a fase amorfa dependem de sua composição química. A Figura 4 mostra a curva de Viscosidade-Temperatura, na faixa de temperaturas de 1350 a 800K. No líquido, observa-se um leve aumento na viscosidade quando é resfriado de 1350K até  $T_L$ . Posteriormente, no líquido super-resfriado, a viscosidade aumenta rapidamente com a diminuição da temperatura até atingir  $T_g$ . Neste

trabalho, a viscosidade ( $\eta$ ) foi calculada usando o método de Green-Kubo (GK) (15) em temperaturas acima de  $T_g$  a partir de dados obtidos durante o resfriamento à taxa de 5K/ps. As viscosidades determinadas em temperaturas acima da  $T_g$  foram ajustadas através da relação de Vogel-Fulcher-Tamman (VFT) (16). É importante ressaltar que a fragilidade foi determinada utilizando a equação (A).

$$m = \left. \frac{d(\log h)}{d\left(\frac{T_g}{T}\right)} \right|_{T=T_g} \quad (\text{A})$$

De acordo com o conceito proposto em (17), os líquidos podem ser classificados como "fortes" e "frágeis", usando  $T_g$  como um parâmetro de escala (18). A fragilidade é uma descrição quantitativa da diversidade do comportamento cinético e quantifica a dependência da viscosidade em função da temperatura, nesta liga o valor encontrado foi 8,05 que representa o comportamento de líquido forte.

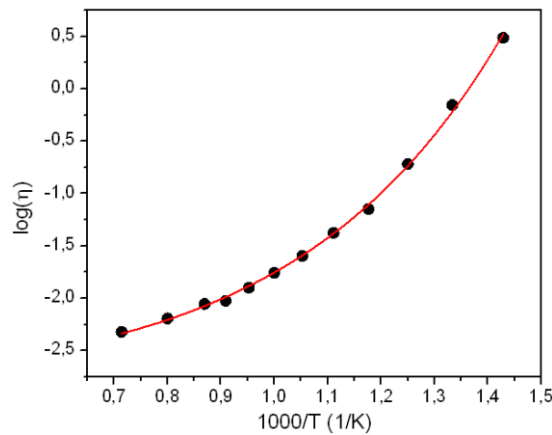


Figure 4. curva do  $\log(\eta)$  vs  $1000/T$ . O ajuste foi realizado através da equação VFT.

Para estabelecer a relação entre a estrutura atômica e a viscosidade, analisamos a SRO e sua evolução durante o resfriamento. No método de Voronoi, os índices  $\langle N_3, N_4, N_5, N_6 \rangle$  são utilizados, em que  $N_i$  representa o número de lados do polígono ( $i = 3, 4, 5, 6, \dots$ ) que compõem um poliedro de Voronoi (19 -21). De acordo com esse método, o índice  $\langle 0, 0, 12, 0 \rangle$  representa clusters icosaedrais perfeitos (Icos), e os índices  $\langle 0, 2, 8, 2 \rangle$ ,  $\langle 0, 2, 8, 1 \rangle$ ,  $\langle 0, 3, 6, 3 \rangle$ ,  $\langle 0, 1, 10, 2 \rangle$ ,  $\langle 1, 0, 9, 3 \rangle$ ,  $\langle 0, 3, 6, 2 \rangle$ ,  $\langle 0, 4, 4, 3 \rangle$  e  $\langle 0, 4, 4, 4 \rangle$  são característicos dos poliedros icosaedrais distorcidos (Dicos);  $\langle 0, 3, 6, 4 \rangle$ ,  $\langle 0, 3, 6, 5 \rangle$ ,  $\langle 0, 4, 4, 6 \rangle$  e  $\langle 0, 4, 4, 7 \rangle$  estão associados com poliedros CFC (cúbica de face centrada) distorcidos, enquanto que  $\langle 0, 12, 0, 0 \rangle$  corresponde à CFC perfeita. Por sua vez, os índices  $\langle 0, 6, 0, 8 \rangle$ ,  $\langle 0, 3, 6, 1 \rangle$ ,  $\langle 0, 2, 8, 4 \rangle$  e  $\langle 0, 5, 4, 4 \rangle$  correspondem a clusters CCC (cúbica de corpo centrado) (21, 22).

Foram calculados os índices de Voronoi centrados em Cu, Zr e Ti em temperaturas de aproximadamente 50K acima e abaixo da  $T_g$  (determinada pela curva ETxT), e a 300K. A Figura 5 mostra a distribuição dos 15 principais tipos de clusters presentes na liga em 800, 700 e 300K. É possível observar que em 800K, quando o material está no estado de líquido super-resfriado, apenas uma pequena porcentagem dos átomos (33%) constituem poliedros de Voronoi, estando os clusters icosaedrais centrados em Cu presentes em 2%; não foi observada a presença de poliedros centrados em Zr e Ti (Fig. 5(a)). Em temperaturas inferiores a  $T_g$ , o material é um sólido amorfo e altera fortemente sua configuração atômica, com 54% dos átomos formando poliedros de Voronoi (Fig. 5(b)), onde a fração de Dicos é predominante, além disso, a quantidade de poliedros Icos aumentou 1%. A evolução dos clusters continua até atingir a temperatura ambiente, onde a fração de poliedros Dicos aumentou um pouco mais e a quantidade de Icos alcança um máximo de 4% do total dos poliedros de Voronoi (ver Fig.5(c)).

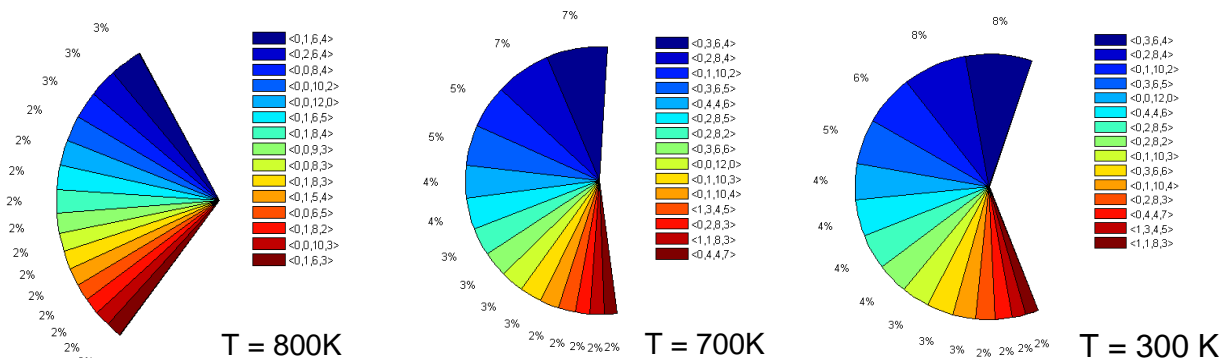


Figura 5. Representação esquemática da evolução de clusters na liga  $\text{Cu}_{60}\text{Zr}_{32,5}\text{Ti}_{7,5}$ .

A partir da análise anterior foi possível observar a evolução de clusters durante o resfriamento. No entanto, para obter uma melhor compreensão sobre a estrutura amorfa, considerou-se não só a evolução quantitativa de poliedros, mas também sua distribuição na amostra. Para esta análise, considerou-se as 3 categorias mais representativas, nomeadas como poliedros Icos, Dicos e FCC. A Figura 6 mostra o átomo central desses poliedros distribuídos no sólido amorfo a 300K. Observa-se que os poliedros Icos apresentam uma distribuição homogênea, com uma grande fração centrados em Cu seguido por uma menor quantidade centrados em Zr e, não é possível observar poliedros Icos centrados em Ti. Há uma grande quantidade de poliedros Dicos centrados em Zr, com uma menor fração centrados em Cu e uma fração muito pequena centrados em Ti. Por outro lado, a quantidade de poliedros



FCC centrado em Cu é elevada em comparação com os poliedros Dicos e Icos, também há uma grande fração destes poliedros centrados no Ti.

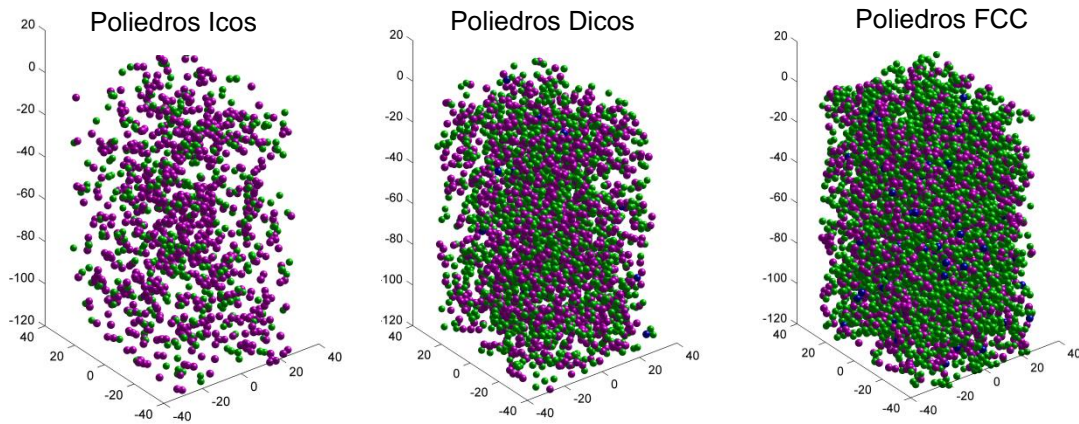


Figura 6. Distribuição de poliedros Icos , Dicos e FCC no sólido amorfo  $\text{Cu}_{60}\text{Zr}_{32,5}\text{Ti}_{7,5}$  a 300 K. Cu: esferas roxas, Zr: esferas verdes e, Ti: esferas azuis.

A Figura 7 mostra os ensaios de tração realizados à taxa de deformação de  $1\text{ns}^{-1}$  às temperaturas de 300 e 400K. Observou-se que não há forte influência da temperatura no comportamento da deformação. Em ambas as curvas a tensão aumenta linearmente com a deformação, no intervalo de 0 a 0,05 indicando o comportamento elástico da liga. O módulo de Young derivado da inclinação da curva  $\sigma - \varepsilon$  na região elástica é  $48,61 \pm 0,18\text{GPa}$  e, manteve-se constante em ambas temperaturas. Além disso, observa-se uma tensão de escoamento de estado estacionário em aproximadamente 1,5GPa em ambas as temperaturas.

A evolução da SRO foi analisada durante a deformação em especial a evolução dos poliedros Icos e Dicos. Observou-se que à medida que a tensão aumenta, no intervalo da deformação elástica, não há mudança na fração de poliedros Icos e, posteriormente no regime plástico a mudança é mínima, resultado oposto ao encontrado por Agrawal (23) quem reportou uma diminuição na quantidade de poliedros Icos na liga  $\text{Cu}_{60}\text{Zr}_{35}\text{Ti}_5$ . Por outro lado, de acordo ao perfil da curva  $\sigma - \varepsilon$ , a deformação entra no regime plástico, todavia, não se observa queda da tensão devido à geração de bandas de cisalhamento. Pode-se dizer que a deformação ocorre de forma homogênea (24). É importante lembrar que as bandas de cisalhamento estão presentes nos ensaios experimentais dos vidros metálicos, no entanto, sua presença depende dos fatores: taxa de deformação e temperatura.

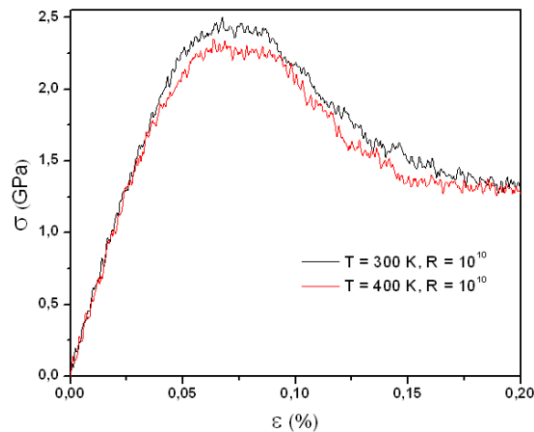


Figura 7. Curvas tensão-deformação obtidas sob diferentes temperaturas na liga  $\text{Cu}_{60}\text{Zr}_{32,5}\text{Ti}_{7,5}$ .

Por outro lado, sabe-se que a deformação homogênea não mostra qualquer deformação além da escala atômica. Seguindo o modelo de Spaepen, o vidro metálico pode ser deformado homogênea à temperatura ambiente sob uma taxa muito lenta (25). No entanto, trabalhos recentes observaram deformação homogênea à temperatura ambiente sob elevadas tensões (26).

## CONCLUSÕES

No estudo atual, os processos de aquecimento e resfriamento foram simulados para produzir estrutura amorfa usando DM em diferentes taxas de resfriamento. Diferenças de uma ordem de grandeza na taxa de resfriamento não apresenta forte discrepância na SRO do estado amorfo final na liga  $\text{Cu}_{60}\text{Zr}_{32,5}\text{Ti}_{7,5}$ . Taxas menores conduzem a um maior empacotamento, menor volume e energia potencial, enquanto que taxas maiores podem capturar mais volume livre na estrutura amorfa obtida.

A análise de Voronoi, mostra que as estruturas icosaedrais são mais propensas a se formar em torno de átomos de Cu e Zr. As estruturas consideradas icosaedrais distorcidas melhoram a TFA, formando clusters mais densos e mais estáveis.

A simulação das curva tensão–deformação em 300 e 400K, mostram que o material se deforma homogênea entrando no regime plástico, entretanto não foi possível observar as bandas de cisalhamento típicas na deformação de ligas amorfas, além disso o módulo de Young permanece invariável em função da temperatura.

## REFERÊNCIAS

- (1) HILLERT, M., **Phase equilibria, phase diagrams and phase transformations: Their thermodynamics basis**, 2<sup>nd</sup> Ed. Cambridge (2007).
- (2) DUWEZ, P., **A typical example of metastability: Metallic glasses**, J. of Vac. Sci & Tech. B 1 (1983) 218 - 221.
- (3) CHENG, YQ., MA, E., **Atomic-level structure and structure--property relationship in metallic glasses**, Progress in Materials Science 56 (2011) 379-473.
- (4) MARX, D., **Theoretical chemistry in the 21st century: The “virtual lab”**, in Proceedings of the “Idea--Finding Symposium: Frankfurt Institute for Advanced Studies (2003) 139 - 153.
- (5) SHENG, HW., **Atomic packing and short-to-medium-range order in metallic glasses**, Nature 439 (2006) 419 - 425.
- (6) PLIMPTON, S., **Fast parallel algorithms for short-range molecular dynamics**, Journal of computational physics 117 (1995) 1 - 19.
- (7) FINNIS, MW., SINCLAIR, JE., **A simple empirical N-body potential for transition metals**, Philosophical Magazine A 50 (1984) 45 - 55.
- (8) LI, Q. K., LI, M., **Free volume evolution in metallic glasses subjected to mechanical deformation**, Materials Transactions, 48, (2007) 1816 – 1821.
- (9) WARD, L., **Structural evolution and kinetics in Cu-Zr Metallic Liquids**, <https://arxiv.org/pdf/1305.2084.pdf>.
- (10) SPAEPEN, F., **A microscopic mechanism for steady state inhomogeneous flow in metallic glasses**, Acta Metallurgica 25 (1997) 407 – 415.
- (11) WENDT, H. R., ABRAHAM, F. F., **Empirical criterion for the glass transition region based on Monte Carlo simulations**. Physical Review Letters 41 (1978) 1244 - 1246.
- (12) SHRIVASTAVA, A., et al., **Molecular dynamics study of the structural and dynamical properties of binary Cu<sub>50</sub>Zr<sub>50</sub> bulk metallic glass**, Advances in Applied Science Research 6(7) (2015) 74 – 80.
- (13) WANG, S. G., et al., **Short- and medium-range order in amorphous Zr<sub>2</sub>Ni metallic alloy**, Phys. Rev. B 81 (2010) 094118.

- (14) WEN, D. D., **Correlation of the heredity of icosahedral clusters with the glass forming ability of rapidly solidified  $\text{Cu}_x\text{Zr}_{100-x}$  alloys**, Journal of Non-Crystalline Solids 427 (2015) 199–207
- (15) KUBO, R., **Statistical-mechanical theory of irreversible processes. I. General theory and simple applications to magnetic and conduction problems**, Journal of the Physical Society of Japan 12 (1957) 570 - 586.
- (16) TAMMANN, G., HESSE, W., **Die Abhängigkeit der Viscosität von der Temperatur bei unterkühlten Flüssigkeiten**, Z. Anorg. Allg. Chem. 156 (1926) 245.
- (17) ANGELL, C. A. **Formation of glasses from liquids and biopolymers**, Science 267 (1995) 1924 - 1935.
- (18) WENDT, H.R., ABRAHAM, F.F., **Empirical criterion for the glass transition region based on Monte Carlo simulations**, Physical Review Letters 41 (1978) 1244.
- (19) BÖHMER, R., **Non-exponential relaxations in strong and fragile glass formers**, The Journal of chemical physics, 99 (1993) 4201 - 4209.
- (20) GREEN, M. S., **Markoff random processes and the statistical mechanics of time-dependent phenomena. II. Irreversible processes in fluids**, The Journal of Chemical Physics 22, (1954) 398 - 413.
- (21) FINNEY, J.L., **Random packings and the structure of simple liquids. I. The geometry of random close packing**, in Proceedings of the Royal Society of London A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences 319 (1970) 479 - 493.
- (22) ANGELL, C. A., **Perspective on the glass transition**, Journal of Physics and Chemistry of Solids 49 (1988) 863 - 871.
- (23) AGRAWAL, A., **Computational Study of Vanadate and Bulk Metallic Glasses**, The Ohio State University, Ph.D. dissertation 2012.
- (24) HAJLAOUI, K., **Strain rate effect on deformation of zrbased metallic glass: in-situ tensile deformation in sem analysis**, Rev. Adv. Mater. Sci. 18 (2008) 23 – 26.
- (25) LOUZGUINE-LUZGIN, D. V., **Mechanical properties and deformation behavior of bulk metallic glasses**, Metals 3 (2013) 1 - 22.
- (26) KAWAMURA, Y., **Superplastic deformation of  $\text{Zr}_{65}\text{Al}_{10}\text{Ni}_{10}\text{Cu}_{15}$  metallic glass**, Scripta Materialia, 37 (1997) 431 - 436.

## **STUDY OF THE GLASS FORMING ABILITY OF $\text{Cu}_{60}\text{Zr}_{32,5}\text{Ti}_{7,5}$ ALLOY BY MOLECULAR DYNAMICS**

### **ABSTRACT**

This article presents the results of molecular dynamics simulation of  $\text{Cu}_{60}\text{Zr}_{32,5}\text{Ti}_{7,5}$  alloy through the open source code LAMMPS. Amorphous samples were produced by quenching the metallic molten from 2300K to 200K at cooling rates of 50, 5 and 0.5K/ps. The pair distribution functions of both the liquid and solid were calculated and compared at different temperatures. The topology of short-range order was analyzed using the Voronoi tessellation method, which determined the presence of Cu-centered icosahedral clusters as the prevailing in the amorphous state at 300K. Moreover, the sample was submitted to uniaxial tensile tests at strain rate of  $10\text{ps}^{-1}$ , in order to investigate the mechanical behavior of the metallic glass. The result of the stress-strain curve showed that applied loads lead to the plastic regime. However, the presences of shear bands, typical in the experimental testing, were not observed. Moreover, the evolution of the viscosity above the glass transition temperature and the fragility of the alloy were determined. The solidus and liquidus temperatures were determined and a good agreement with experimental data was found.

**Keywords:** Metallic glasses, amorphous alloys, glass forming ability, molecular dynamics.