

**301-022**

**SIMULAÇÃO DA DINÂMICA MOLECULAR APLICADA NA AVALIAÇÃO DA FORMAÇÃO DE VIDRO EM LIGAS Zr-Cu**

De Oliveira, M.F.(1); Pereira, A.L.(2); Evangelakis, G.(3);

Universidade de São Paulo, Escola de Engenharia de São Carlos(1); Universidade de São Paulo(2);

University of Ioannina(3);

Nesse trabalho a simulação da dinâmica molecular foi aplicada para avaliar a tendência à formação de vidro em ligas Zr-Cu. Existe uma conhecida relação entre o índice de fragilidade de um líquido,  $m$ , (segundo Angell) e sua tendência à vitrificação durante o resfriamento. O índice de fragilidade expressa como a viscosidade se comporta em função da temperatura em torno da transição vítrea, ou seja, quando a viscosidade de diferentes líquidos converge para aproximadamente  $10^{12}$  Pa.s. Assim como em baixas temperaturas a viscosidade dos metais e ligas também converge para um valor em altas temperaturas, cerca de  $10^{-5}$  Pa.s, permitindo a definição de um segundo índice de fragilidade,  $n$ , diretamente relacionado ao índice  $m$ . Como a viscosidade pode ser muito mais rapidamente calculada, por simulação da dinâmica molecular, quando se considera um líquido em alta temperatura pode-se aproveitar esse fato para determinar, de maneira indireta, a tendência à formação de vidro em ligas metálicas. Adotou-se, para isso, a simulação clássica da dinâmica molecular com o software LAMMPS (Large-scale Atomic/Molecular Massively Parallel Simulator) fazendo uso do método do átomo imerso (Embedded Atom Model, EAM) para descrever os potenciais interatômicos. Para o cálculo da viscosidade utilizou-se o método de Green-Kubo aplicado à condição de simulação em equilíbrio de um conjunto microcanônico (NVE) por 10 ps. Quatro diferentes temperaturas foram utilizadas para a determinação do índice de fragilidade,  $n$ , em alta temperatura considerando diferentes composições químicas de ligas Zr-Cu. Inicialmente definiu-se uma caixa de simulação ortogonal, com condições periódicas de contorno, composta de células unitárias CFC com 250.000 átomos de Cu que foram aleatoriamente substituídos por Zr conforme a composição química da liga. Essa caixa foi relaxada para a minimização da energia do conjunto. Depois disso a temperatura foi elevada acima da temperatura de fusão utilizando-se temperatura e volumes constantes (arranjo NVT) por 10 ps. Após a estabilização da temperatura a pressão foi reduzida a zero utilizando-se o arranjo NPT por 10 ps. Uma vez estabilizadas temperatura e pressão aplicou-se o arranjo NVE com o cálculo das autocorrelações das componentes não-diagonais do tensor de pressão e que são usadas no método de Green-Kubo. Os quatro pontos de viscosidade, em diferentes temperaturas, foram ajustados à equação de Vogel-Fulcher-Tammann para cada composição química permitindo assim a determinação dos índices de fragilidade. Os índices de fragilidade obtidos foram correlacionados com a tendência de formação de vidro em ligas Zr-Cu de acordo com o máximo diâmetro amorfo observado em experimentos e reportados pela literatura.