MmeMss06-001

Influência composicional nas transformações de fases martensíticas de ligas Ni-Ti por dinâmica molecular

Aliaga, L.R.(1); Bastos, I.N.(1); Barboza, A.M.(1); De Souza, P.H.P.(1);
(1) IPRJ-UERJ;

Durante as últimas décadas, diversos sistemas de ligas com propriedades avançadas vêm sendo desenvolvidas. Atualmente, podem-se encontrar ligas refratárias de alta entropia com memória de forma (MF). O sistema de ligas Ni-Ti apresenta comportamento de MF e superelasticidade devido às transformações de fases martensíticas. Deste modo, é útil considerar que as ligas nitinol sejam a base para novos sistemas de ligas de média e alta entropia que apresentem o comportamento de MF, ampliando suas aplicações funcionais. Neste contexto, este trabalho tem por objetivo determinar, via simulações atomísticas, a faixa composicional das ligas Ni-Ti que apresentem as transformações martensíticas e sirvam no desenvolvimento de ligas de média e alta entropias. Amostras virtuais de composição nominal Ni(100-x)Tix (45 < x < 55) foram produzidas utilizando-se o software LAMMPS, num sistema composto de 2000 átomos que interagiram sob a ação do potencial interatômico modified embedded atom method (MEAM). A evolução estrutural e as transformações de fases, que fornecem o efeito de MF, foram analisadas mediante a aplicação de aquecimento e resfriamento às taxas de 5 e 1 K/ps, respectivamente. Os resultados mostram que a faixa composicional, em porcentagem atômica, para as transformações martensíticas é de 47,5 a 52,5 % de níquel. Menores teores de níquel permitem a transformação de fase polimórfica sem o efeito de MF. O efeito de MF é observado mediante a histerese térmica nas curvas de energia potencial versus temperatura das fases B2 e B19´. Contudo, também foi possível obter a formação da fase metaestável R. A caracterização estrutural foi realizada computacionalmente por meio de ensaios de difração de raios-X e de elétrons. Ambas as ligas Ni45Ti55 e Ni47,5Ti52,5 apresentaram somente transformações polimórficas B2 - Tetragonal. Entretanto, observou-se na liga Ni47,5Ti52,5 a presença de histerese térmica característica do efeito de MF. A liga Ni50Ti50 apresentou histerese térmica com formação da fase R somente no resfriamento, enquanto que a liga Ni52,5Ti47,5 apresentou transformações martensíticas em duas etapas B2?R?B19´, com histerese térmica bem definida tanto no aquecimento quanto no resfriamento. A liga Ni55Ti45 apresentou um comportamento atípico e complexo, com mudança de fases na etapa de aquecimento à taxa de 5 K/ps que não foi observado à taxa de 1 K/ps.