



MmeMss06-004

Estudo Computacional da Formação de Fase Amorfa nas Ligas Ti53Cu39Ni8 e Ti50Cu42Ni8.

Silva, N.P.(1); Oliveira, V.B.(1); Aliaga, L.R.(1);
(1) IPRJ-UERJ;

Estudo Computacional da Formação de Fase Amorfa nas Ligas Ti53Cu39Ni8 e Ti50Cu42Ni8. Nayara Pinel Silva¹, Verona Biancardi Oliveira², Luis César Rodríguez Aliaga². ¹ Programa de pós-graduação em tecnologia e ciência de materiais, Instituto Politécnico (IPRJ), Universidade do Estado do Rio de Janeiro (UERJ) ² Instituto Politécnico (IPRJ), Universidade do Estado do Rio de Janeiro (UERJ) Ligas amorfas à base de titânio apresentam alto potencial de aplicações biomédicas devido possuírem alta resistência mecânica, baixo módulo de elasticidade, boa resistência à corrosão e aceitável biocompatibilidade. Com a finalidade de estudar a formação de fase amorfa, neste trabalho, simulações de dinâmica molecular nas ligas Ti53Cu39Ni8 e Ti50Cu39Ni8 foram realizadas utilizando o software LAMMPS em sistemas atomísticos que interagem sob a ação do potencial híbrido formado pelo potencial do átomo imerso modificado (MEAM) e o potencial Lennard-Jones (LJ). A dependência composicional das propriedades estruturais foram analisadas utilizando difração de raios-X, funções de distribuição de pares e, poliedros de Voronoi. Ademais a variação da viscosidade na faixa de temperaturas do líquido superesfriado, durante o resfriamento, foi determinada aplicando o método do Green-Kubo. As temperaturas liquidus (Tl) e solidus (Ts) das ligas foram determinadas mediante curvas de Volume vs. Temperatura, durante o aquecimento à taxa de 1 K/ps. As temperaturas de transição vítrea (Tg) foram obtidas mediante curvas do resfriamento à mesma taxa. Os resultados de DRX mostram que ambas as ligas são totalmente amorfas, e as temperaturas Tl, Ts e Tg são relativamente superiores na medida que o teor de titânio aumenta. Ademais, as temperaturas de transição vítrea reduzida ($T_g - T_l$), foram de 0,437 para a liga Ti53Cu39Ni8 e de 0,430 para a liga Ti50Cu42Ni8. Os valores da viscosidade indicam uma maior mudança na liga Ti50Cu42Ni8 mostrando maior estabilidade térmica do líquido super-resfriado ao atingir Tg. Essa mudança está relacionada à maior quantidade de clusters icosaedrais formados à medida que a temperatura diminui atingindo a fração volumétrica de 8 % a 300 K. Palavras chave: dinâmica molecular, fase amorfa, viscosidade, difração de raios-X