cbecimat26
26° Congresso Brasileiro de Engenharia e Ciência dos Materiais
22 a 26 de novembro de 2026
Costão do Santinho
Florianópolis-SC

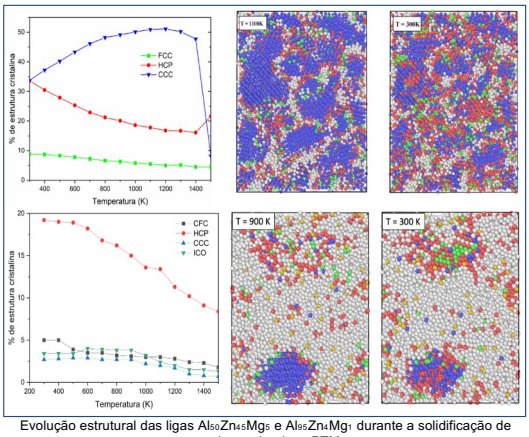
Predição Computacional de Propriedades Estruturais de Ligas Nanocristalinas do Sistema Al-Zn-Mg

Henrique de Souza Iunes, Ivan Napoleão Bastos, Matheus Henrique Silva Siqueira, Luis César R. Aliaga

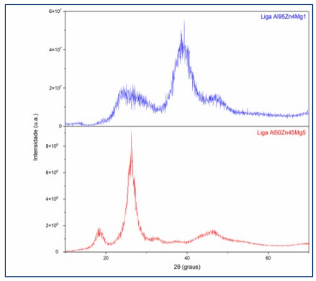
Instituto Politécnico, Universidade do Estado do Rio de Janeiro

Introdução

A crescente demanda por materiais estruturais leves e de alta resistência impulsiona o desenvolvimento de ligas de alumínio nanoestruturadas para aplicações automotivas e aeroespaciais. A redução drástica do tamanho de grão promove um aumento excepcional na dureza e resistência à tração em comparação com as ligas convencionais. Em ligas convencionais, o tamanho de grão micrométrico impõe um limite físico à resistência do material. Em contrapartida, de acordo com a relação de Hall-Petch, a redução do tamanho de grão promove um aumento na dureza e na resistência à tração em comparação com as ligas convencionais, devido à maior dificuldade de movimentação das discordâncias. Além disso, a elevada fração volumétrica de contornos de grão potencializa diversas propriedades térmicas e mecânicas do material em nanoescala. A previsão de composições capazes de formar microestruturas metaestáveis otimizadas representa um grande desafio na ciência dos materiais, especialmente na tentativa de evitar a formação de fases intermetálicas fragilizantes. Atuando como uma ponte entre a base teórica e o processamento prático, este trabalho investiga computacionalmente, via Dinâmica Molecular, a influência da composição química na evolução estrutural e termodinâmica das ligas fora de equilíbrio $Al_{95}Zn_4Mg_1$ e $Al_{50}Zn_{45}Mg_5$. O objetivo é fornecer diretrizes robustas em escala atômica para o design de novas ligas leves avançadas.

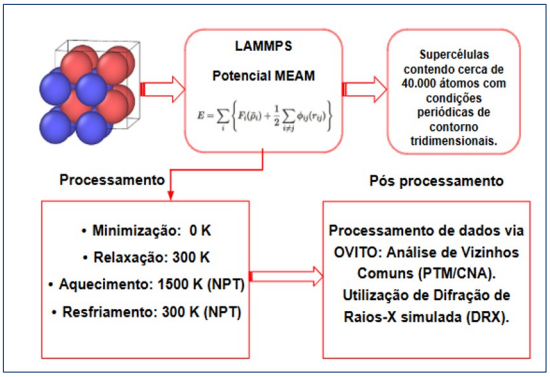


Evolução estrutural das ligas $Al_{50}Zn_{45}Mg_5$ e $Al_{95}Zn_4Mg_1$ durante a solidificação de acordo ao algoritmo PTM.

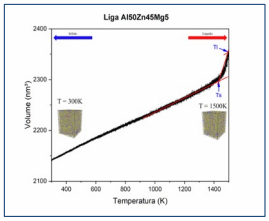


Difratogramas de raios-X das ligas $Al_{50}Zn_{45}Mg_5$ e $Al_{95}Zn_4Mg_1$ a 300 K. fonte de Cu, λ = 1,5417 Å.

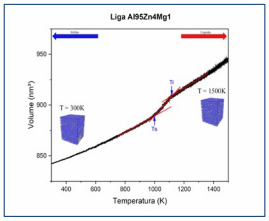
Metodologia Computacional



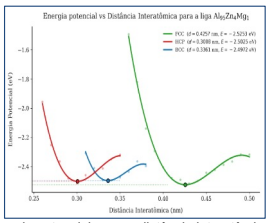
Resultados e Discussão



Curva de Volume vs. Temperatura da liga $Al_{50}Zn_{45}Mg_5$ obtida no resfriamento sob o controle pressão e temperatura NpT.



Curva de Volume vs. Temperatura da liga $Al_{95}Zn_4Mg_1$ obtida no resfriamento sob o controle do ensemble NpT.



Energia potencial versus distância interatômica a 0K, correspondentes à liga $Al_{95}Zn_4Mg_1$.

Composição	Fase	Energia Mínima (eV/átomo)	Distância de Separação Atômica (nm)
$Al_{95}Zn_4Mg_1$	BCC	-2,4972	0,3361
	FCC	-2,5253	0,4257
	HCP	-2,5025	0,3008
$Al_{50}Zn_{45}Mg_5$	BCC	-2,5116	0,3797
	FCC	-2,3691	0,3939
	HCP	-2,7895	0,3782

Energia potencial (coesão) das ligas sob diferentes estruturas cristalinas a 0K

A análise via algoritmo PTM revela caminhos distintos de solidificação. A liga rica em alumínio ($Al_{95}Zn_4Mg_1$) favorece intensamente a amorfização (atingindo 98,8% de matriz amorfa). O estado vítreo da liga $Al_{95}Zn_4Mg_1$ é estabilizado pela proliferação de clusters icosaédricos (ICO), que atuam como forte barreira cinética contra a cristalização convencional. Visualmente (snapshots 3D), confirma-se que a estequiometria atua como mecanismo fundamental de controle: o excesso de Zn e Mg converte o material em um autêntico compósito nanoestruturado "in-situ". O monitoramento das curvas de Volume versus Temperatura (V x T) durante o resfriamento (NPT) evidencia a ausência de descontinuidades. Os padrões de Difração de Raios-X (DRX) corroboram as análises termodinâmicas: o difratograma da liga $Al_{95}Zn_4Mg_1$ exibe predominantemente o halo difuso característico de sistemas com alta fração amorfa. abruptas, comprovando a eficácia da taxa de resfriamento em reter fases metaestáveis em ambas as ligas. O perfil de DRX da liga $Al_{50}Zn_{45}Mg_5$ apresenta um halo amorfo sobreposto a picos alargados e complexos.

Conclusões

- A estequiometria atua como um mecanismo de controle fundamental para a formação de estruturas fora do equilíbrio termodinâmico no sistema Al-Zn-Mg.
- A liga $Al_{95}Zn_4Mg_1$ exibe estabilidade vítrea excepcional, com matriz 98,8% amorfa. Essa estabilidade é atribuída à proliferação de clusters icosaédricos (ICO) que atuam como barreiras cinéticas contra a cristalização.
- Em contraste, o aumento da concentração de solutos na liga $Al_{50}Zn_{45}Mg_5$ promove a formação de um compósito nanoestruturado, retendo 82,5% de matriz amorfa com precipitação de fases nanocristalinas secundárias (HCP e CCC).
- A dinâmica molecular confirma que o ajuste estequiométrico é uma rota preditiva e promissora para o design de ligas leves, otimizando o balanço entre a ductilidade da matriz amorfa e a resistência mecânica fornecida pelos dispersóides.

Referências e Agradecimentos

[1] LEE, B.-J. et al. The modified embedded-atom method interatomic potentials and recent progress in atomistic simulations. Calphad, v. 34, n. 4, p. 510–522, dez. 2010.
[2] Alexander Stukowski, Visualization and analysis of atomistic simulation data with OVITO–the Open Visualization Tool Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering, 18(1), 015012, 2010.
[3] S GOWTHAMAN. A review on mechanical and material characterisation through molecular dynamics using large-scale atomic/molecular massively parallel simulator (LAMMPS). Functional Composites and Structures, v. 5, n. 1, p. 012005–012005, 1 mar. 2023.

Agradecimentos: Ao Instituto Politécnico (IPRJ/UERJ) e ao Laboratório de Corrosão (LabCor) pela infraestrutura computacional, a FAPERJ pela bolsa de Iniciação Científica concedida