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

Estudo do Comportamento Estrutural e Mecânico da Liga de Alta Entropia $Ti_{25}Ni_{25}Mo_{25}Fe_{25}$ por Dinâmica Molecular

Davi Barreto Vianna[1]*; Verona Biancardi Aguiar[1]; Ivan Napoleão Bastos[1]; Luis César R. Aliaga[1]

1. Instituto Politécnico (IPRJ), Universidade do Estado do Rio de Janeiro (UERJ), Nova Friburgo – RJ, Brasil

***davi.vianna@grad.iprj.uerj.br | verona@iprj.uerj.br | inbastos@iprj.uerj.br | aliaga@iprj.uerj.br**

Introdução

As Ligas de Alta Entropia (LAEs) são materiais metálicos multielementares compostos por cinco ou mais elementos principais em proporções equiatômicas ou próximas. Seu pilar termodinâmico é a maximização da entropia configuracional, $\Delta S_{conf} = R.\ln(n)$, que reduz a energia livre de Gibbs e estabiliza soluções sólidas simples com estruturas CCC, CFC ou HCP, em detrimento de fases intermetálicas.

No sistema **$Ti_{25}Ni_{25}Mo_{25}Fe_{25}$**, a combinação de metais refratários de maior raio atômico (Ti e Mo) com metais de transição (Ni e Fe) induz forte desajuste topológico e distorção de rede. A redução da Concentração de Elétrons de Valência (VEC) pelos refratários favorece a estrutura CCC, atuando como barreira de curto alcance à mobilidade de discordâncias.

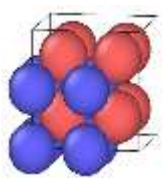
A simulação de Dinâmica Molecular (DM) acoplada ao potencial interatômico EAM (*Embedded-Atom Method*) contabiliza a densidade eletrônica local e o efeito de muitos corpos (*many-body effect*), elucidando mecanismos transientes de deformação plástica em escala atômica.

Objetivos

Investigar as propriedades estruturais, térmicas e mecânicas da liga equiatômica **$Ti_{25}Ni_{25}Mo_{25}Fe_{25}$** por simulações de Dinâmica Molecular:

- **Estabilidade Estrutural (0 K):** Determinar a fase cristalina de menor energia potencial entre as redes CCC, CFC e HCP;
- **Comportamento Térmico:** Mapear a estabilidade no estado sólido e estimar as temperaturas solidus e liquidus sob aquecimento;
- **Anisotropia e Plasticidade:** Avaliar a tração uniaxial nas direções [001], [110] e [111] e identificar os mecanismos de deformação.

Metodologia



Rede Cristalina Ocupação Estocástica

Software LAMMPS
Potencial EAM

$$E_{tot} = \sum_i F_i\left(\sum_{j\neq i}\rho_j(r_{ij})\right) + \frac{1}{2}\sum_{i\neq j}\varphi_{ij}(r_{ij})$$

- **Verlet:** passo Δt = 1 fs
- **Contorno:** periódicas
- **Interação:** muitos corpos

Domínios Virtuais
$Ti_{25}Ni_{25}Mo_{25}Fe_{25}$

- **16.000 átomos:** CFC, CCC e HCP
- **32.000 átomos:** Rede CCC (Aquecimento)
- **314.960 átomos:** Monocristal CCC (Tração)

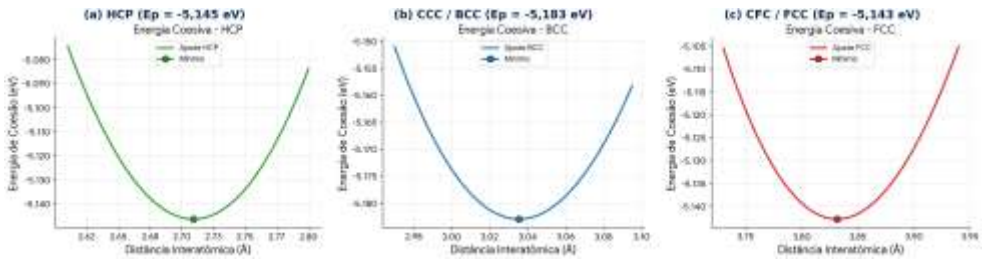
Processamento

- **Minimização (0 K):** Gradiente Conjugado (relaxação de posições e volume em CFC, CCC e HCP).
- **Aquecimento:** Taxa de 1 K/ps no ensemble NPT (P = 0) até a fusão completa.
- **Relaxação (300 K):** Estabilização térmica NPT para eliminar tensões internas.
- **Tração Uniaxial:** Direções [001], [110] e [111] a 1 × 10^9 s^{-1} (transversais livres a P = 0, Efeito de Poisson).

Pós-processamento

- **Energia Coesiva:** Curvas Ep vs. distância interatômica de equilíbrio (R).
- **Análise Térmica:** Curvas Ep/Volume vs. T e Função de Distribuição Radial g(r).
- **Curvas σ × ε:** Avaliação do módulo elástico, tensão máxima ($\sigma_{máx}$) e anisotropia.
- **Análise no OVITO:** Algoritmos CNA (transições de fase locais) e DXA (vetores de Burgers, discordâncias, falhas de empilhamento e maclas).

Resultados e Discussão

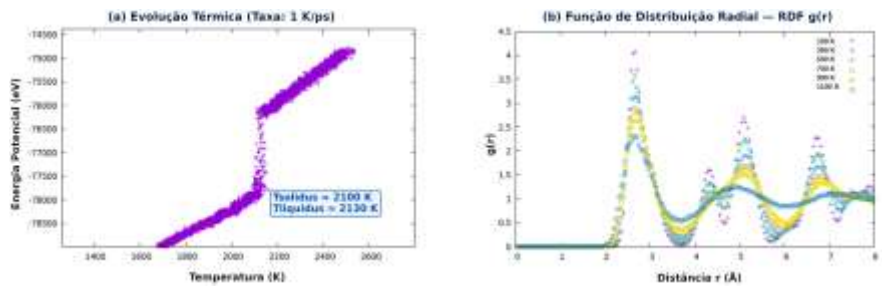


Curvas de energia de coesão (Ep vs. r) a 0 K: (a) HCP, (b) CCC e (c) CFC.

Estrutura	Ep (eV)	R (Å)
CFC (FCC)	-5,143	3,84
HCP	-5,145	2,71
CCC (BCC)	**-5,183**	**3,04**

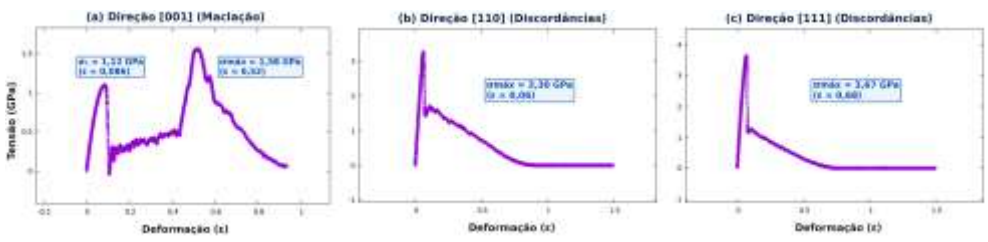
Tabela 1. Energia Ep e distância R.

Estabilidade Estrutural (0 K): A liga **$Ti_{25}Ni_{25}Mo_{25}Fe_{25}$** adota a rede **CCC** como configuração de menor energia potencial, apresentando poço de coesão mais profundo (**Ep = -5,183 eV; R = 3,04 Å**). Os elementos refratários (Ti e Mo) reduzem o VEC médio, estabilizando a fase CCC frente às redes CFC e HCP.



Evolução térmica CCC (1 K/ps): (a) Curva Ep vs. T e (b) RDF g(r).

Comportamento Térmico: Sob aquecimento a 1 K/ps (Fig. 2a), a estrutura CCC não exibiu descontinuidades ou transformações polimórficas no estado sólido. A fusão ocorre entre **Tsolidus ≈ 2100 K** e **Tliquidus ≈ 2130 K**, confirmada pelo colapso da ordem de longo alcance na RDF (Fig. 2b), atestando estabilidade para altas temperaturas.



Ensaios de tração (10^9 s^{-1}, 300 K): (a) [001], (b) [110] e (c) [111].

Resistência mecânica e mecanismos de deformação

Eixo	σmáx	ε	Mecanismo
[001]	1,12 / 1,58 GPa	0,086 / 0,52	Falhas empilh. + Maclas ⟨111⟩{112}
[110]	3,30 GPa	0,06	Discordâncias perfeitas (CCC)
[111]	3,67 GPa	0,68	Discordâncias perfeitas (CCC)

Anisotropia e Mecanismos:

A resposta mecânica reflete o fator de Schmid nos planos {110}. As direções **[110]** (3,30 GPa) e **[111]** (3,67 GPa) impõem forte restrição geométrica, deformando por deslizamento de discordâncias perfeitas sem transição de fase.

Na direção **[001]**, a alta taxa (10^9 s^{-1}) inibe o deslizamento térmico. Após o 1º pico (**1,12 GPa**), a oscilação de tensão decorre da nucleação de **falhas de empilhamento** precursoras de **maclas** ⟨111⟩{112}, endurecendo até **1,58 GPa** (ε = 0,52).

Conclusões

- **Estabilidade CCC e Robustez Térmica:** A entropia configuracional e os elementos refratários estabilizam a fase CCC (Ep = -5,183 eV; R = 3,04 Å), sem transições no estado sólido até a fusão (2100–2130 K).
- **Alta Resistência em [110] e [111]:** Atingiram 3,30 GPa (ε = 0,06) e 3,67 GPa (ε = 0,68), governadas pelo deslizamento convencional de discordâncias perfeitas preservando a matriz CCC.
- **Maclação Mecânica em [001]:** Exibiu escoamento inicial em 1,12 GPa (ε = 0,086) e endurecimento até 1,58 GPa (ε = 0,52), dominado por falhas de empilhamento e maclas ⟨111⟩{112}.
- **Controle de Textura:** O direcionamento cristalográfico permite otimizar a liga para máxima resistência estrutural ([110]/[111]) ou maior absorção de energia plástica via maclas ([001]).

Referências e Agradecimentos

Agradecimentos: Ao Instituto Politécnico (IPRJ/UERJ) e ao Laboratório de Corrosão (LabCor) pela infraestrutura computacional, e ao CNPq pelo fomento e bolsa de Iniciação Científica.

[1] OLIVEIRA, N. P. G. Caracterização estrutural e mecânica da liga de alta entropia FeNiCrCoCu por dinâmica molecular. TCC (Eng. Mecânica) – IPRJ/UERJ, 2023.
[2] YEH, J. W. et al. Nanostructured high-entropy alloys with multiple principal elements. Adv. Eng. Mater., v. 6, p. 299-303, 2004.
[3] PLIMPTON, S. Fast parallel algorithms for short-range molecular dynamics. J. Comput. Phys., v. 117, p. 1-19, 1995.
[4] DAW, M. S.; BASKES, M. I. Embedded-atom method: Derivation and application to impurities, surfaces, and other defects in metals. Phys. Rev. B, v. 29, p. 6443, 1984.
[5] STUKOWSKI, A. Visualization and analysis of atomistic simulation data with OVITO. Model. Simul. Mater. Sci. Eng., v. 18, 015012, 2010.
[6] FARKAS, D.; CARO, A. Model interatomic potentials and lattice strain in a high-entropy alloy. J. Mater. Res., v. 33, p. 3218-3225, 2018.