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

Explorando Ligas de Alta Entropia Multifásicas: Abordagens Experimentais e Computacionais para Estudo de Estabilidade de Fases e Propriedades Interfaciais

Flávio F. Assis*[1]; Gustavo Bertoli[1]; Pedro H. F. Oliveira[1]; Pedro A. F. P. Moreira[2]; Francisco G. Coury[1]

1.Departamento de engenharia de materiais (DEMa), Universidade Federal de São Carlos (UFSCar), São Carlos, SP, Brasil; 2. Departamento de física (DF), Universidade Federal de São Carlos (UFSCar), São Carlos, SP, Brasil

*flaviofavaro@estudante.ufscar.br

Introdução

Motivação

Obter valores de energias interfaciais entre fases $L1_2$ e CFC na liga $Cr_{12.5}Al_{2.5}Ti_{5.0}Nb_{2.5}Fe_{20.0}Ni_{57.5}$

Desafios

E. I. é um parâmetro dificilmente acessado experimentalmente. **Necessidade de combinação com técnicas de simulação.**

Objetivos

Combinar DFT, análises de dilatometria em SITU e método CALPHAD para **estimar E. I.s entre fases CFC e $L1_2$**

Metodologia



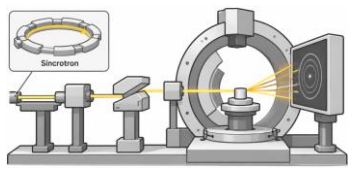
Cálculos termodinâmicos de alto desempenho (HTC)



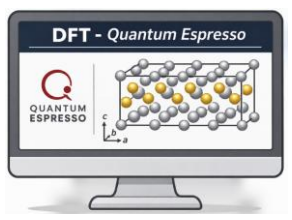
Forno de indução a vácuo (VIM)



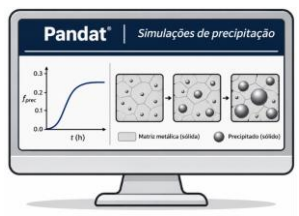
Tratamentos térmicos de precipitação



Difração de raios X por luz síncrotron



Cálculos de DFT (teoria do funcional da densidade)



CALPHAD – Cálculos de precipitação de $L1_2$ em CFC

Resultados e Discussão

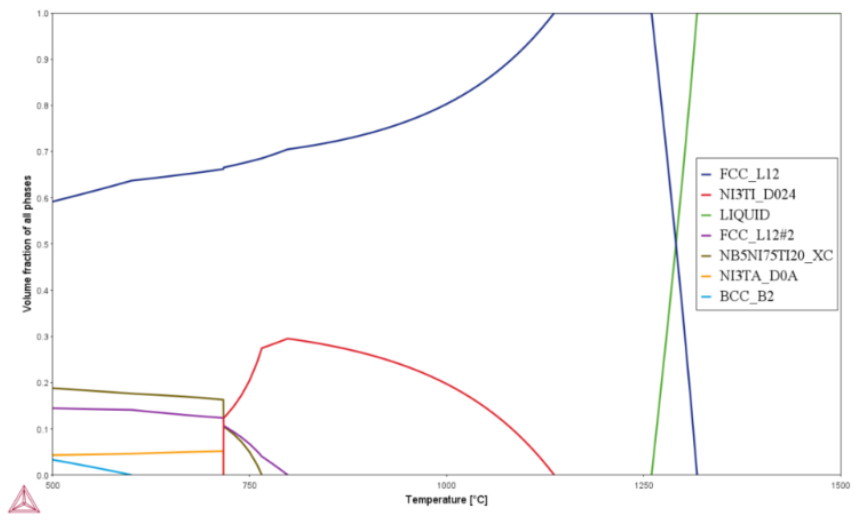
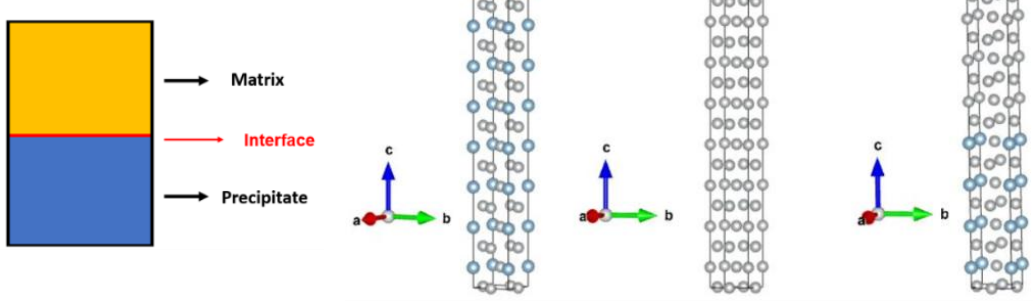


Figura 1. Cálculo de fração de fases em função da temperatura para a composição $Cr_{12.5}Al_{2.5}Ti_{5.0}Nb_{2.5}Fe_{20.0}Ni_{57.5}$ obtida previamente por cálculos computacionais de alto rendimento (HTC)



$$E_{int} = \frac{E_{Ni+Ni3Al} - 4N\,E^{Bulk}_{Strained,Ni} - 4M\,E^{Bulk}_{Ni3Al}}{2A}$$

Figura 2. Esquema de cálculos de DFT usados para estimar as energias interfaciais entre matriz e precipitado e equação usada para o cálculo numérico de energia. Houve dificuldade para atingir a convergência dos valores de energia interfacial ao passo que o tamanho da supercélula aumentava.

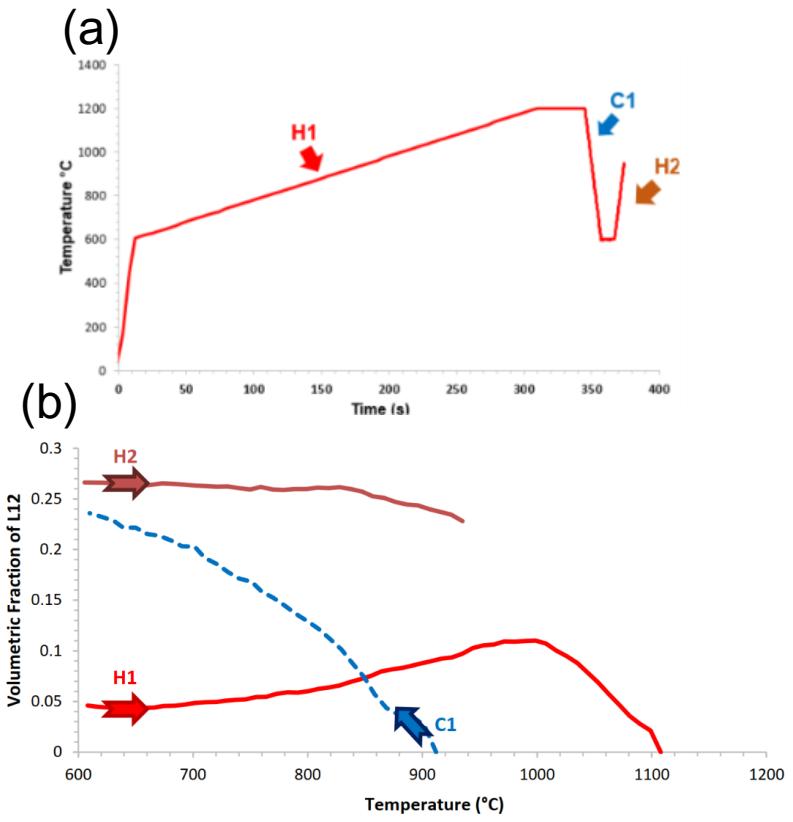


Figura 3. (a) Ciclos de aquecimento e resfriamento usados na dilatometria em situ. (b) Frações volumétricas do precipitado $L1_2$ em função da temperatura

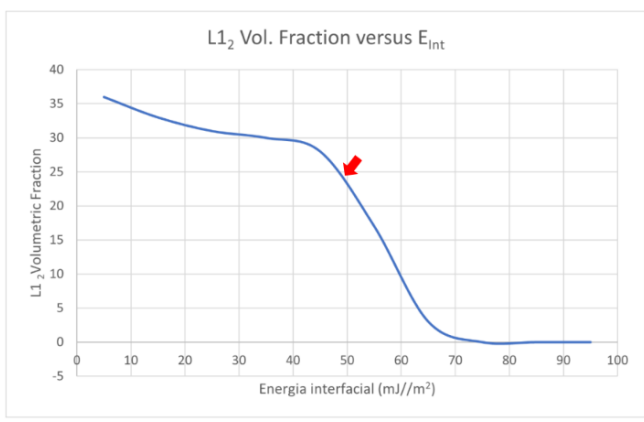


Figura 4. Mudança na fração volumétrica do precipitado em função da energia interfacial

Conclusões

Produziu-se uma HEA com fases CFC e $L1_2$ cuja composição foi escolhida via cálculos HTC. Investigou-se o valor da energia interfacial entre as duas fases por DFT e por uma combinação de análise de dados de dilatometria em situ (Sincrotron) e simulações de precipitação via CALPHAD. Os cálculos de DFT revelam perspectivas animadoras para esse tipo de simulação ao passo que a abordagem semiempírica mostrou clara dependência entre a fração volumétrica dos precipitados e a energia interfacial, permitindo estimar seu valor em torno de 50 mJ/m^2

Referências e Agradecimentos

[1] Coury, Francisco et.al. MultiPrincipal Element Alloys from the CrCoNi Family: Outlook and Perspectives.Journal of materials research and technology 15 (2021)
[2] Cheng, Chun-Yang et al. - Physical Metallurgy of Concentrated Solid Solutions from Low-Entropy to High-Entropy Alloys. Current opinion in solid state & materials science 21.6 (2017).
[3] CANTOR, B. et al. Microstructural development in equiatomic multicomponent alloys. Materials Science and Engineering A, v. 375, p. 213–218, 2004.

FAPESP ufscar DEMa LCE CAPES