

SIMULAÇÃO DA NUCLEAÇÃO E CRESCIMENTO DA FASE CuZr E COMPARAÇÃO COM A TEORIA CLÁSSICA

MAZO, J. H.¹; OLIVEIRA, M. F.¹

Universidade de São Paulo - EESC – Departamento de Engenharia de Materiais¹
joaoenriquemazo@usp.br

Introdução e objetivo

Variáveis relacionadas à nucleação e crescimento de cristais em vidros metálicos são importantes para evitar que o material se torne cristalino durante seu processamento. Por essa razão, é importante a existência de um banco de dados com taxa de nucleação e velocidade de crescimento de grãos nas ligas para que os parâmetros de processamento sejam adequados de forma a se preservar a estrutura amorfada inerente a esse tipo de material.

A obtenção dessas variáveis experimentalmente é custosa e difícil, o que faz com que métodos computacionais que simulem a realidade, por meio de cálculos matemáticos e aproximações, sejam alternativa muito mais barata, rápida e viável para a obtenção de estimativas valiosas de dados que ainda não foram determinados experimentalmente.

O objetivo desse trabalho foi estudar o vidro metálico Cu₅₀Zr₅₀ por meio de simulações da dinâmica molecular clássica. Sendo assim, por meio dessa técnica buscou-se determinar a taxa de nucleação homogênea e a velocidade de crescimento da fase CuZr imersa em matriz amorfada por métodos diretos e por meio da teoria clássica da nucleação (CNT), sendo o objetivo final analisar os resultados e verificar se a CNT se ajusta bem aos dados obtidos nas simulações.

Métodos e Procedimentos

Todas as simulações foram realizadas utilizando o software aberto LAMMPS (LAMMPS, 2021) com o auxílio de uma workstation (processo FAPESP 2014/14396-6) e do cluster aguia4 da Universidade de São Paulo.

Foi utilizado um potencial interatômico do tipo EAM (*Embedded Atom Method*) criado pelo professor Howard Sheng da universidade de George Mason (SHENG, 2011).

Todas as variáveis necessárias para se calcular a taxa de nucleação homogênea pela CNT foram obtidas diretamente de simulações da dinâmica molecular clássica, sendo a nucleação homogênea escolhida por se tratar de um caso mais geral e independente de variáveis difíceis de serem determinadas por simulação, como por exemplo o ângulo de molhamento. Após a obtenção das variáveis, foi possível montar a curva referente a taxa de nucleação e verificar a viabilidade da obtenção direta da taxa de nucleação por simulação.

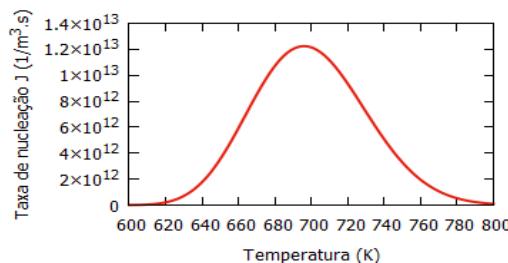
Para a velocidade de crescimento, núcleos esféricos de diversos raios foram inseridos em uma matriz amorfada em diferentes temperaturas por um grande período de tempo (nanossegundos). Após isso, as posições atômicas iniciais e finais foram comparadas por meio dos parâmetros de ordenamento q4 e q6 (LECHNER, 2008), onde o número de átomos na fase sólida foi obtido em cada instante e consequentemente a quantidade de átomos adicionada ao núcleo no intervalo simulado. Inicialmente a velocidade é dependente do raio do núcleo, mas a velocidade utilizada para os cálculos é a velocidade após a estabilização e, consequentemente, independente do raio. Com a posterior obtenção direta da velocidade, verificou-se se os dados puderam ser adequados à equação da CNT.

Resultados

Com a obtenção de todas as variáveis relacionadas a taxa de nucleação, foi possível obter a curva para a taxa de nucleação em função da temperatura. Pela Figura 1 nota-se que as taxas máximas de nucleação estão em torno de 1,2x10¹³ (1/m³.s), que é uma taxa bem menor do que aquela normalmente observada em ligas tradicionais, que possuem taxas de nucleação em torno de 10³⁴-10³⁵ (1/m³.s) (MAHATA, 2018)

A baixa taxa de nucleação encontrada impossibilita a simulação direta da nucleação devido ao alto período de tempo necessário ou a um elevado número de átomos necessários e explica, em parte, o porquê da possuir alta tendência de formação de vidro (TFV). Pois se taxas tão elevadas como aquelas observadas para ligas tradicionais tivessem sido obtidas, seriam necessárias taxas de remoção de calor impraticáveis para evitar a nucleação de cristais, e, consequentemente não deveria ser possível a produção de amostras amorfas com essa liga. O que corrobora as observações experimentais já que essa liga binária permite a produção de pequenas peças amorfas (1 a 2 mm de espessura) (TANG, 2004).

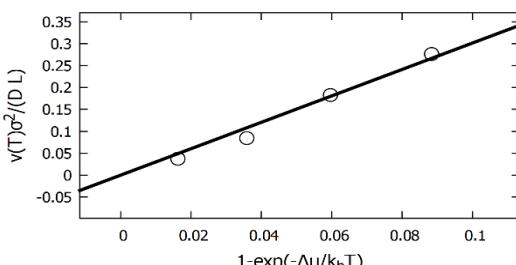
Figura 1: Taxa de nucleação obtida pela CNT para o sistema Cu₅₀Zr₅₀



Fonte: Próprios Autores.

A equação de velocidade foi manipulada de forma a produzir uma reta com coeficiente angular C, na Figura 2 é possível notar que os dados se adequaram com sucesso a ela, possibilitando a obtenção da constante $C = 3,01 \pm 0,24$ com um intervalo de 90% de confiança. As velocidades obtidas são da ordem de 10^{-1} m/s, duas ordens de grandeza menores que a velocidade de crescimento de metais puros, que pode chegar na ordem de 10^1 m/s (SUN, 2018).

Figura 2: Velocidade de crescimento reduzida, a linha descreve a reta adequada e os círculos os dados obtidos diretamente por simulação.



Fonte: Próprios Autores.

Conclusões

A taxa de nucleação obtida se mostra coerente, por ser várias ordens de grandeza inferior a taxas de

ligas convencionais o que vai ao encontro das observações experimentais de produção de vidro com essa liga. Entretanto, devido a essa baixa taxa, se torna impossível verificar diretamente a adequação ou não da CNT da liga pois os recursos computacionais necessários seriam impraticáveis. Nota-se que a previsão pela teoria clássica de que os dados relacionados à velocidade da Figura 2 se ajustariam a uma reta de fato ocorreu, indicando que a liga Cu₅₀Zr₅₀ segue satisfatoriamente a teoria clássica da nucleação e crescimento. As velocidades encontradas são consideravelmente menores do que de ligas convencionais, o que, mais uma vez, corrobora a observação experimental da alta TFV da liga.

Agradecimentos e apoios

Os autores gostariam de agradecer à FAPESP pelo apoio financeiro e a Universidade de São Paulo pela disponibilização do cluster aguia4 durante o projeto.

Responsabilidade pelas informações

Os autores são os únicos responsáveis pelas informações incluídas neste trabalho.

Referências Bibliográficas

- LECHNER, W. Accurate Determination of Crystal Structures based on averaged local bond order parameters. *Chem. Phys.*, Netherlands, 129, August 2008.
- TANG, C. Anomalously slow crystal growth of the glass-forming alloy CuZr. *Nature Materials*. United Kingdom. April 2013.
- LAMMPS. Molecular Dynamics Simulator. Disponível em: <<https://www.lammps.org/>>. 2021.
- SHENG, H. Cu-Zr Interatomic Potential. Disponível em: <<https://sites.google.com/site/eampotentials/Home/CuZr>>. 2011.
- MAHATA, A. et al. Understanding homogeneous nucleation in solidification of aluminum by molecular dynamics simulations. *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*. 2018.
- SUN, G. et al. The mechanism of the ultrafast growth of pure metals from their melts. *Nature Materials*. 2018.
- TANG, M.B et al. Binary bulk metallic glasses. *Chinese Physics Letters*. 2004.