

Simulação de dinâmica molecular de liga a base de Cu com efeito de memória de forma

Pesquisador: **Luis Otávio Zaparoli Falsetti**

Orientador: **Prof. Dr. Piter Gargarella**

*Departamento de Engenharia de Materiais, Universidade Federal de São Carlos,
Rod. Washington Luís Km 235, 13565-905, São Carlos, Brasil*

As ligas com memória de forma possuem a característica de recuperar a forma inicial depois de sofrer deformação plástica, através de transformação estrutural (martensítica) quando aquecida acima de uma temperatura crítica. Embora os mecanismos da transformação martensítica de diversas ligas com memória de forma já terem sido propostos, eles são difíceis de se visualizar experimentalmente devido, principalmente, a rápida cinética de transformação. Muitas questões relacionadas com o processo de nucleação e crescimento da fase martensítica ainda não são completamente entendidos, por exemplo, se esse processo ocorre nos contornos de grão ou em outros defeitos da estrutura cristalina, e os efeitos da ciclagem térmica e mecânica.

Uma forma de verificar esses mecanismos seria através de simulação por dinâmica molecular, onde a posição e velocidade de todos os átomos envolvidos no sistema são traçados pela resolução numérica das equações do movimento de Newton. O presente trabalho tem como objetivo verificar a adequação de potenciais disponíveis para a simulação da liga com memória de forma Cu₇₇Al₂₃at. As simulações foram realizadas no supercomputador da EESC-USP, com cerca de 100.000 átomos, taxas de aquecimento de 5K/ps e de cisalhamento de 1/ns. Os resultados mostraram que o potencial EAM (embedded-atom method) desenvolvido pelos Profs. J. Cai e Y.Y. Ye, é o mais adequado para descrever a liga, prevendo as estruturas β_1 e β' , e a ocorrência da transformação martensítica por ciclo térmico. Foi observada pequena diferença entre propriedades físicas simuladas e experimentais.