VETOR

Determinação das características estruturais e mecânicas da liga de alta entropia Hf-Nb-Ta-Zr

Determination of the structural and mechanical characteristics of high entropy Hf-Nb-Ta-Zr alloy

Jhonatan Silva de Andrade[1,†], Ivan Napoleão Bastos[1], Luis César Rodríguez Aliaga[1]

[1]*Instituto Politécnico, Universidade do Estado do Rio de Janeiro, Nova Friburgo, Brasil*
[†]**Autor correspondente:** jhonatantrabalho7@gmail.com

Resumo

Neste artigo, os comportamentos estrutural e mecânico da liga equiatômica de alta entropia Hf-Nb-Ta-Zr foram estudados mediante simulações computacionais de dinâmica molecular. As simulações foram realizadas no código livre LAMMPS, em um sistema composto de 154.000 átomos que interagiram sob o potencial *Embedded Atom Method* (EAM). O estudo focou na estrutura cúbica de corpo centrado (CCC). Esta estrutura apresenta a maior estabilidade estrutural ou a menor energia potencial a 0 K. A liga foi submetida a ensaios de nanoindentação utilizando um penetrador virtual esférico de diâmetro de 40 Å. Ensaiou-se à temperatura de 10 K para eliminar as contribuições térmicas dos átomos, em três planos cristalográficos (001), (011) e (111), e identificar efeitos de anisotropia. A evolução estrutural da liga foi analisada mediante as *partial radial distribution function* (PRDF), *total radial distribution function* (TRDF) e também por difração de raios-X. As curvas de carregamento-descarregamento mostraram que a nanoindentação na superfície correspondente ao plano (011) requer a maior força de indentação, de cerca de 142 nN, enquanto que o plano (111) conduz à maior deformação elástica antes do início da deformação plástica.

Palavras-chave

Liga de alta entropia • Dinâmica molecular • Nanoindentação • Hf-Nb-Ta-Zr

Abstract

In this article, the structural and mechanical behavior of the high entropy equiatomic alloy Hf-Nb-Ta-Zr was studied by using molecular dynamics simulations. The simulations were carried out in the free code LAMMPS in a system composed of 154,000 atoms interacting under the Embedded Atom Method (EAM) potential. The study was mainly focused on the body-centered cubic structure (BCC). This structure shows the highest structural stability or the lowest potential energy at 0 K. The alloy was subjected to nanoindentation tests under a spherical virtual indenter with a diameter of 40 Å. All the indentation tests were carried out at a temperature of 10 K to eliminate the thermal contributions of atoms in three crystallographic planes (001), (011), and (111) to identify anisotropic effects. The structural evolution of the alloy was analyzed by using the partial radial distribution function (PRDF), total radial distribution function (TRDF), and X-ray diffraction. The loading-unloading curves showed that the nanoindentation on the surface corresponding to the (011) plane requires the largest indentation force, of about 142 nN, while the (111) plane leads to the most significant elastic deformation before the plastic deformation onset.

Keywords

High entropy alloy • Molecular dynamics • Nanoindentation • Hf-Nb-Ta-Zr

1 Introdução

Os metais e as ligas metálicas são essenciais para a civilização humana pois servem como material-base para o seu desenvolvimento [1]. A humanidade busca permanentemente melhorias nos materiais e nos processos metalúrgicos para suprir eficientemente as diversas necessidades tecnológicas. Tradicionalmente, a fabricação de ligas baseia-se em um metal principal (matriz) com a adição em menor quantidade de outros componentes, tendo como finalidade a melhoria das propriedades em relação ao metal puro [2]. Diante deste fato, e almejando evoluir as características das ligas metálicas tradicionais, diversos novos materiais vêm sendo desenvolvidos, dentre eles, as ligas de alta entropia (LAEs). Estas ligas constituídas de múltiplos elementos apresentam alta entropia aliada à forte distorção da rede cristalina o que lhes conferem propriedades mecânicas únicas [3].

Assim, o surgimento das LAEs quebra o paradigma das ligas convencionais formadas por diversos elementos e que apresentam microestrutura composta por duas ou mais fases. As LAEs, em geral, são estruturadas em uma única fase multielementos, cujos átomos espalham-se pela rede cristalina em alto grau de aleatoriedade, elevando a entropia configuracional do sistema [1, 3].

Uma das LAEs que vem sendo estudada atualmente é a Hf-Nb-Ta-Zr, devido às suas características refratárias [4], e mais recentemente, pelo potencial uso em armazenamento de hidrogênio para fins energéticos. Estas características únicas desta liga despertam grande interesse industrial. Entretanto, diversos estudos ainda devem ser realizados para se ter um entendimento satisfatório da estrutura e das propriedades mecânicas.

Por outro lado, tradicionalmente, o desenvolvimento de novos materiais possui como base a clássica técnica de tentativa e erro. Apesar de esta técnica ter gerado importantes materiais da engenharia moderna, ela é lenta e custosa, embora continue sendo amplamente utilizada. Todavia, nas últimas décadas, novas ferramentas têm sido desenvolvidas para encontrar novos materiais com mais baixo custo experimental e econômico. Neste contexto, as simulações computacionais permitem modelar, criar, recriar e prever inúmeros sistemas e processos físicos dos sistemas da matéria condensada, em suas diversas escalas; sendo capaz de substituir os custosos experimentos reais [5]. Alguns programas desenvolvidos utilizam a dinâmica molecular clássica, técnica que possui como base a Segunda Lei de Newton, na formulação de Newton ou de Hamilton, para simular os comportamentos físico e mecânico dos materiais. Como consequência, acelera-se a descoberta de novos materiais [6, 7] pois permite simular propriedades estruturais e mecânicas e selecionar as composições mais interessantes.

O presente artigo tem como objetivo realizar o estudo do comportamento estrutural e mecânico da liga de alta entropia Hf-Nb-Ta-Zr mediante ensaios de nanoindentação nos planos cristalográficos (001), (011) e (111) via dinâmica molecular sob o potencial interatômico *Embedded Atom Method (EAM).*

2 Materiais e Métodos

2.1 Metodologia Computacional

As simulações de dinâmica molecular (DM) foram realizadas com uso do código livre *Large Scale Atomic/Molecular Massively Parallel Simulator* (LAMMPS) [8]. Inicialmente foram geradas amostras compostas de 24.000 átomos de Hf com estruturas cristalinas CCC (cúbica de corpo centrado), CFC (cúbica de face centrada) e HCP (hexagonal compacta). O potencial interatômico *Embedded Atom Method* (*EAM*) parametrizado por Mishra et al. [9] foi utilizado para as interações eletrônicas.

A composição química da liga foi obtida substituindo-se crescentes frações atômicas de Hf por átomos de Nb, Ta e Zr até obter a composição equiatômica. As ligas foram sequencialmente submetidas à minimização de energia a 0 K com intuito de determinar o parâmetro de rede, a energia de coesão, e assim determinar a estrutura cristalina de equilíbrio da liga. Além disto, esta etapa permitiu obter a estrutura da liga mais estável. Na sequência, a liga foi aquecida, e posteriormente estabilizada à temperatura de 10 K por um nanosegundo, sob o ensemble isotérmico – isobárico (NPT) para zerar a pressão média externa. Nesta etapa, foram obtidas curvas das funções de distribuição radial parcial (*partial radial distribution function* - PRDF) e funções de distribuição radial total (*total radial distribution function* - TRDF) a fim de caracterizar a estrutura do material. A difração de raios-X (DRX) foi simulada com a incidência de radiação com comprimento $\lambda = 1{,}5418$ Å; correspondente ao comprimento de onda κ_α do anodo de cobre.

As simulações de nanoindentação utilizadas para determinar as propriedades mecânicas foram realizadas em três planos cristalográficos (001), (011) e (111) da estrutura CCC. Em todas as simulações de nanoindentação, foi utilizado um penetrador virtual esférico com diâmetro de 40 Å. Este penetrador foi classificado como virtual pois não foram analisadas a evolução da tensão/deformação da sua estrutura e ele nem mesmo é apresentado nas figuras, focando-se a análise apenas aos átomos da liga de alta entropia. As amostras em análise foram compostas de três regiões denominadas base, que é a região imóvel da caixa; uma região térmica, que é a região acima da base que simula a dissipação de calor e mantem a amostra à temperatura constante; e o restante do volume que representa a região a ser indentada. Vale salientar que na obtenção da estrutura e também na sua caracterização

estrutural, foram utilizadas condições de contorno periódicas, nas três direções cartesianas do sistema. Entretanto, nas simulações de nanoindentação, foram utilizadas condições de contorno periódicas somente no eixo z normal à superfície a ser indentada, enquanto que nos eixos do plano xy foram mantidas condições de contorno fixas. A penetração máxima foi de 36 Å, e subsequentemente foi realizado o descarregamento até a carga nula com a mesma taxa de deformação.

2.2 Análise pós-processamento

A evolução da simulação de nanoindentação foi monitorada utilizando-se o programa *Open Visualization Tool*, OVITO [10]. Este software de visualização tridimensional auxilia na análise, sendo projetado para o pós-processamento de dados atomísticos de simulações de dinâmica molecular. As figuras bidimensionais foram realizadas em Python empregando o pacote *Matplotlib*.

No mesmo programa OVITO utilizou-se das ferramentas *Common Neighbor Analysis* (CNA), para quantificar e classificar as estruturas que circundam um determinado átomo [11] e do *Dislocation Xtration Algorithm* (DXA), que permite a identificação de discordâncias do circuito de Burgers [12].

3 Resultados e Discussão

Nos estudos de DM, devem inicialmente ser conhecidos os parâmetros de rede de equilíbrio a 0 K e em alguma temperatura próxima, para se estimar o efeito de expansão térmica. A Figura 1 apresenta as curvas de energia potencial versus a distância de separação dos átomos (r), correspondentes às três estruturas cristalinas simuladas, à temperatura de 0 K. Pode-se observar que a liga com estrutura CCC possui o menor valor de energia potencial dentre as três estruturas, indicando que esta é a estrutura de equilíbrio da liga. Como é sabido, à medida que dois átomos se aproximam, energias atrativas e repulsivas são geradas, portanto, ao se atingir a distância de equilíbrio atômico, atinge-se o menor valor de energia potencial que corresponde à estrutura de equilíbrio da liga.

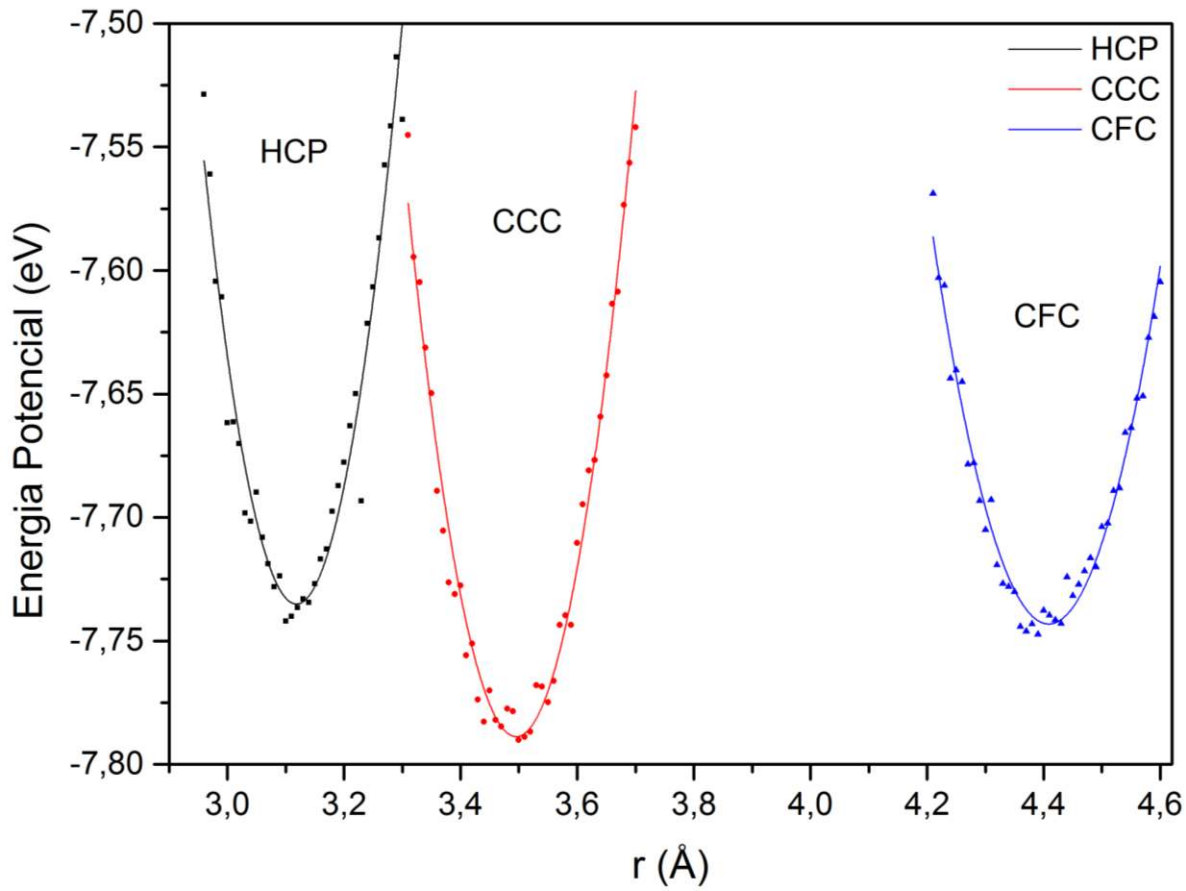


Figura 1: Curvas de energia potencial versus distância interatômica.

Para se determinar o parâmetro de rede de equilíbrio da liga, o parâmetro de rede foi variado em valores de 0,01 Å a partir de um valor inicial, dependendo da estrutura cristalina. Os dados obtidos foram ajustados a uma

função parabólica permitindo a localização do mínimo de energia e o parâmetro de rede de equilíbrio. De acordo com as curvas, pode-se observar que o menor valor de energia potencial corresponde à estrutura CCC, possuindo parâmetro de rede de 3,52 Å. A estrutura e o parâmetro de rede estão de acordo com os valores apresentados por Mishra et al. [9] que obtiveram uma estrutura CCC com parâmetro de rede de 3,54 Å para a mesma liga de composição equiatômica. Os valores determinados por simulação são um pouco superiores dos valores experimentais, entretanto, são próximos ao valor de 3,43 Å determinado por Maiti e Steurer [4] para a mesma liga, sintetizada por fusão a arco.

Determinada a estrutura estável da liga, no sistema composto por 24.000 átomos, com dimensões de 20×20×30 unidades de rede, e composição equiatômica, foi submetido novamente à minimização de energia com a finalidade de se obter um material com alguns defeitos estruturais, ou seja, mais próximo da situação real. Esta amostra foi então aquecida até 300 K, e após se atingir esta temperatura, o sistema foi submetido à estabilização da liga nesta temperatura para se obter o padrão de DRX da liga. A Fig. 2(a) apresenta a configuração atômica do sistema em 10 K, enquanto que a Fig. 2(b) mostra o padrão de DRX a 300 K. Pode-se observar apenas os picos de difração dos planos correspondentes à estrutura CCC, confirmando que a liga é composta por uma única fase.

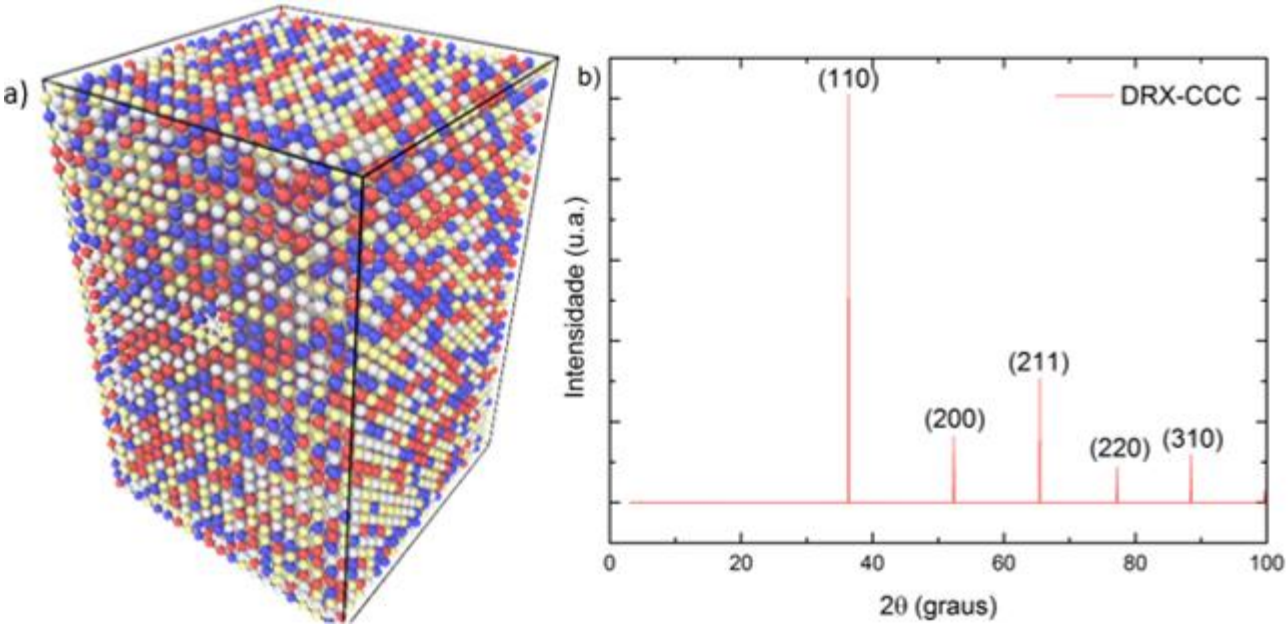


Figura 2: a) Configuração atômica da liga em 10 K e padrão de difração da liga à temperatura de 300 K. As cores dos átomos representam: vermelho (Hf), azul (Nb), amarelo (Ta) e branco (Zr). b) diagrama de difração de raio-x da LAE.

Ademais, pode-se observar que a liga apresenta uma estrutura com elevado grau de mistura dos seus componentes. Porém, há também alguma ordenação seletiva de grupos de átomos que pode estar associada à *chemical short-range order* (CSRO), como foi determinado recentemente por Huang et al. [13] em estudos de dinâmica molecular, utilizando um potencial EAM parametrizado especificamente para esta liga. Os autores mostraram que a liga apresenta alto grau de CSRO, cujos pares de átomos Hf-Zr e Nb-Ta formam ligações preferenciais na solução sólida.

O alto nível de mistura também pode ser observado na Fig. 3, assim como os deslocamentos das posições da rede perfeita a 10 K. Os deslocamentos de rede observados têm em média amplitude de 0,81 Å, representando distorções de rede de aproximadamente 0,76%. Estas distorções têm magnitude semelhante àquelas encontradas na liga Fe–Ni–Cr–Co–Mn usando cálculos de Primeiros Princípios [14] e mediante simulações de DM clássica [15] e, influenciam fortemente as propriedades mecânicas da liga.

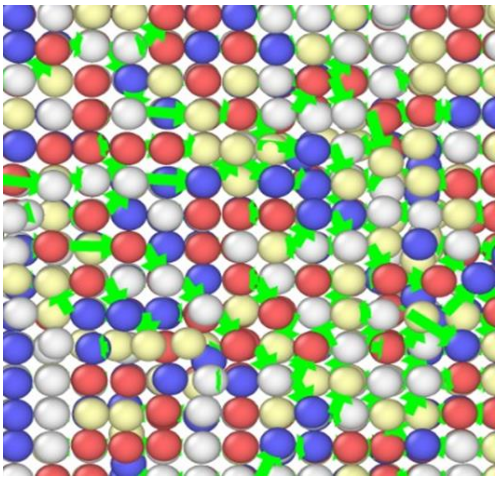


Figura 3: Distorções de rede com deslocamentos atômicos a partir das posições da rede perfeita CCC. As esferas vermelhas, azuis, amarelas e brancos representam os átomos de Hf, Nb, Ta e Zr, respectivamente.

Para melhor entender a estrutura da liga durante a etapa de estabilização, foram utilizadas as funções de distribuição radial ou de pares totais e parciais. Estas funções são ferramentas importantes para análise de estruturas em DM. A Figura 4 apresenta a curva de TRDF, g(r). A curva é formada por picos elevados e relativamente estreitos, característicos da estrutura cristalina, entretanto, pode ser observado que a largura dos picos se deve à distorção da rede gerada pela mistura de elementos com raios atômicos diferentes. Ademais, a curva ainda reforça o fato de a estrutura gerada ser uma CCC distorcida, cujo primeiro pico apresenta sua máxima intensidade com r inferior a 3,5 Å, e o número de coordenação superior a oito. Estes dados indicam que na estrutura CCC há um empacotamento atômico mais eficiente do que na estrutura CCC monoatômica do háfnio. Esta diferença é notada pelos dois picos bem próximos, pois trata-se de uma LAE formada pela mesma quantidade de átomos de diferentes metais que possuem raios atômicos distintos, ocasionando severa distorção da rede.

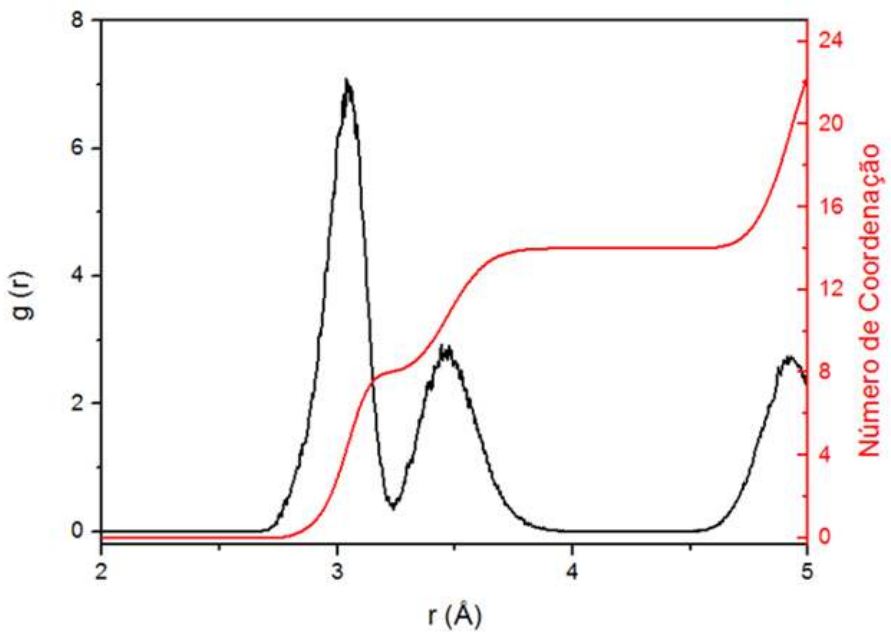


Figura 4: Função de distribuição radial total e número de coordenação em função da separação atômica.

A Figura 5 mostra as curvas PRDFs para os pares Hf-Hf, Hf-Nb, Hf-Ta, Hf-Zr, Nb-Nb, Nb-Ta, Nb-Zr, Ta-Ta, Ta-Zr e Zr-Zr gerados por dinâmica molecular. Pode-se observar que as curvas que correspondem aos elementos Hf e Zr apresentam intensidades mais altas que aquelas de Ta e Nb. As curvas do Nb são as de menor intensidade. Há uma tendência de os átomos de Nb distribuírem-se aleatoriamente, entretanto, os elementos Hf e Zr tendem a se agrupar em pares. Além disso, ao se analisar os inícios do aumento da intensidade das curvas PRDFs, pode-se observar que há dois grupos, em relação ao tipo de átomo tomado como referência. Para o caso do Hf, os pares do primeiro grupo são Hf-Nb e Hf-Ta, sendo que os pares do segundo grupo são Hf-Hf e Hf-Zr. Estes resultados estão

em bom acordo com os dados de tamanho atômico dos elementos envolvidos nestes pares atômicos. Esta tendência é seguida em todos os outros casos em que o átomo de referência é o Nb, Ta ou Zr, sendo que os pares de menor distância de separação são Nb-Nb, Ta-Ta e Nb-Ta ou Ta-Nb. Ademais, os distintos pares de átomos, A-B ou B-A, são equivalentes, como pode ser visto nas curvas PRDFs considerando-se os diversos átomos de referência.

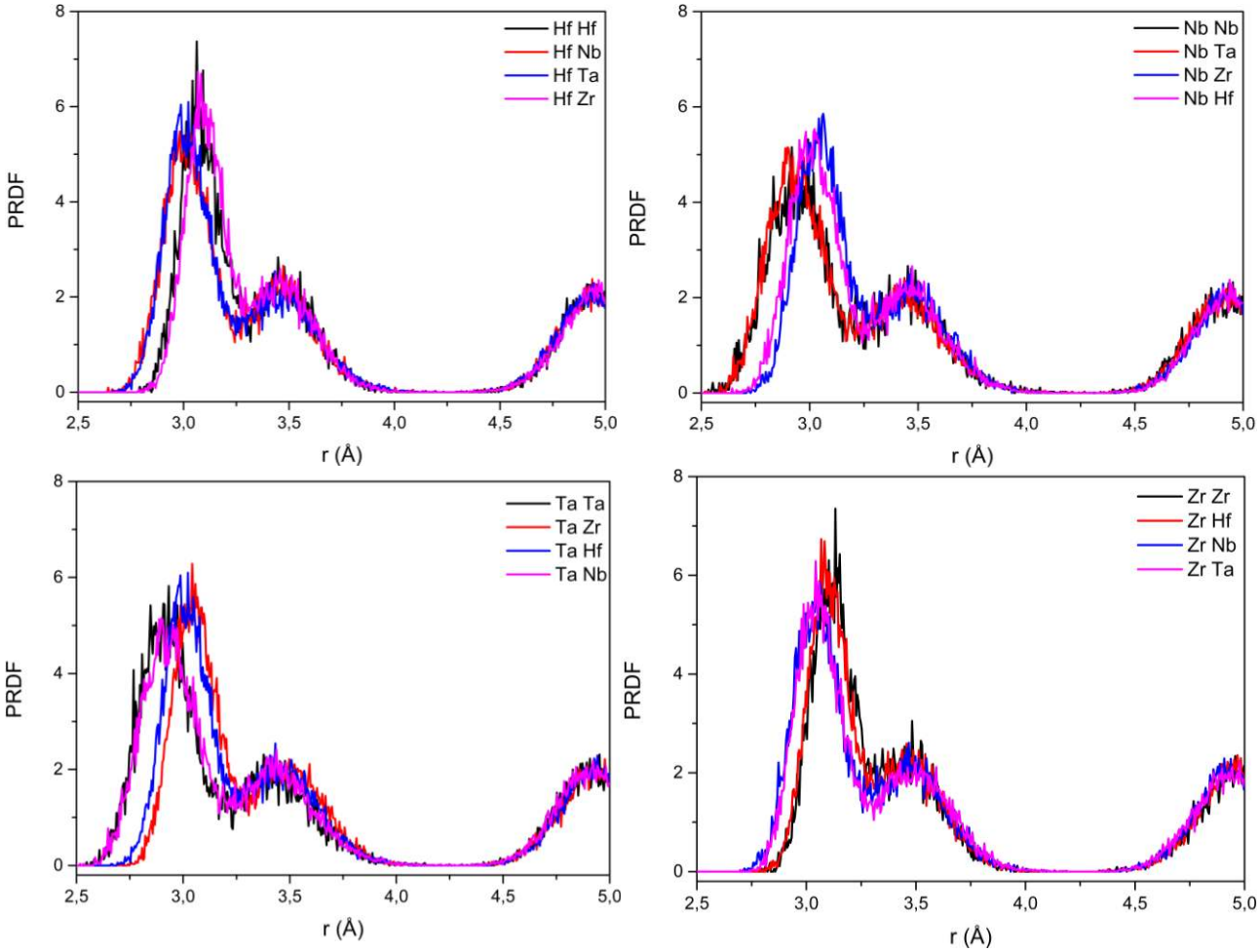


Figura 5: Funções de distribuição radial parcial dos elementos de liga tendo como referência Hf, Nb, Ta e Zr.

Após a caracterização estrutural da liga, o tamanho do sistema foi aumentado para 154.000 átomos mantendo a composição equiatômica, e os ensaios mecânicos de nanoindentação foram realizados. Nestes ensaios, a penetração ocorreu sob controle do deslocamento normal à superfície xy. O penetrador esférico com raio de 20 Å deslocou-se contra três planos cristalográficos (001), (011) e (111) da estrutura CCC da liga de alta entropia em ensaios diferentes. Deste modo, foram obtidas as curvas de carga versus deslocamento para os ciclos de carregamento e descarregamento.

A Figura 6 apresenta as vistas superior e em perspectiva da estrutura inicial da liga em que é mostrada a configuração cristalina dos átomos arranjados na face superior, segundo o plano (001), após a estabilização da estrutura a 10 K. Esta temperatura foi escolhida para eliminar, tanto quanto possível, os efeitos de vibrações atômicas, de modo a detectar as modificações estruturais durante a deformação causada pela indentação. A coloração dos átomos foi realizada em função do algoritmo de deformação atômica (*Atomic strain*) e não mais em função do tipo de átomo do sistema.

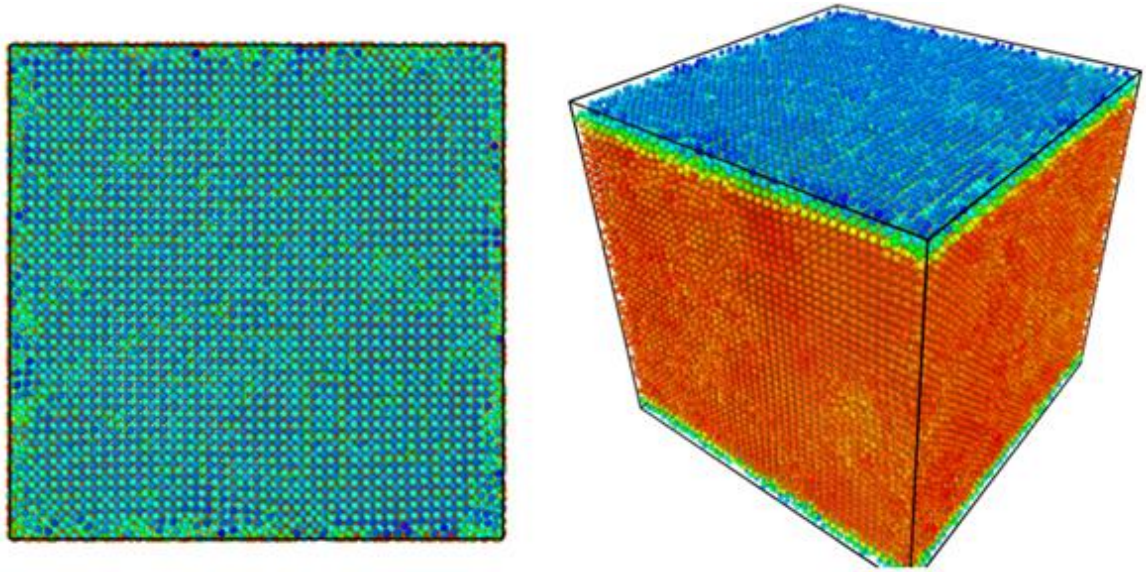


Figura 6: Vista superior e em perspectiva da estrutura não-deformada. Coloração da estrutura de acordo com o algoritmo *Atomic strain*.

Por sua vez, a Figura 7 mostra a estrutura da liga após a indentação. Pode-se observar que existe uma deformação local em torno da região indentada. Nesta figura, a coloração dos átomos também foi realizada em função da deformação atômica.

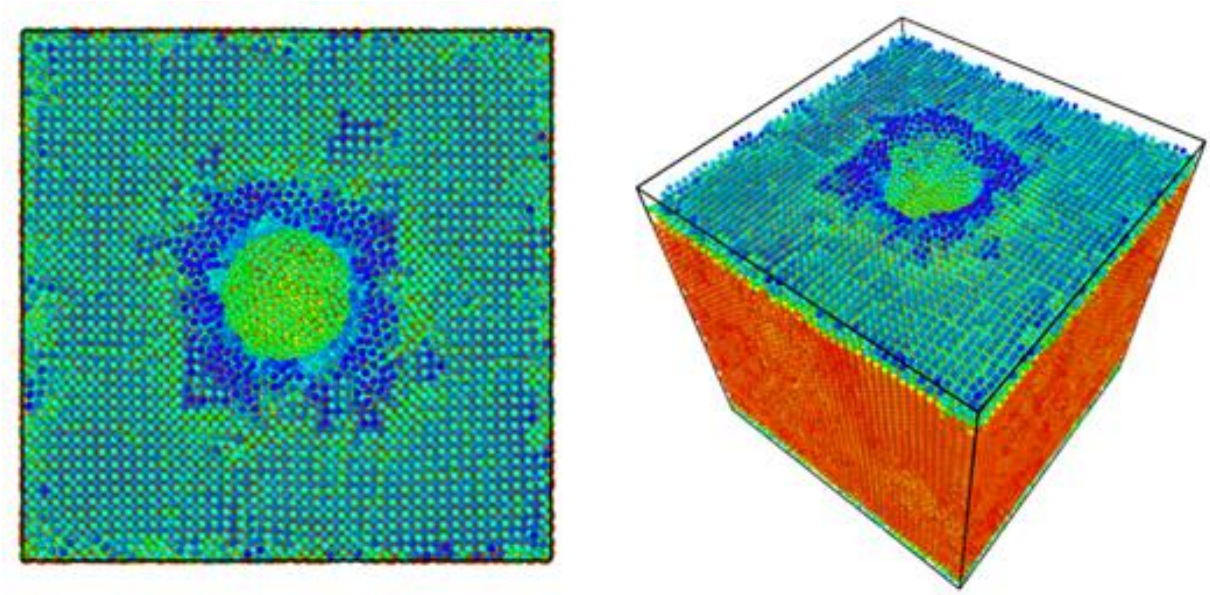


Figura 7: Vistas superior e em perspectiva da estrutura indentada no plano (001). Coloração da estrutura de acordo com o algoritmo *Atomic strain*.

A Figura 8 apresenta as curvas das fases de carregamento-descarregamento correspondentes à indentação contra a superfície dos planos (001), (011) e (111) da estrutura cúbica de corpo centrado. Nas curvas de carregamento pode-se observar, inicialmente, a correlação linear entre a carga versus a profundidade de penetração do indentador. Dependendo do plano indentado, é possível observar uma quebra na linearidade, sendo os deslocamentos de 0,4, 0,7 e 0,5 Å para as superfícies dos planos (001), (011) e (111), respectivamente. Essas regiões lineares estão associadas à deformação elástica. Com o aumento da carga de indentação, inicia-se a deformação plástica do material, e as curvas de carregamento afastam da linearidade, sendo possível observar diversos serrilhamentos em função do plano de indentação.

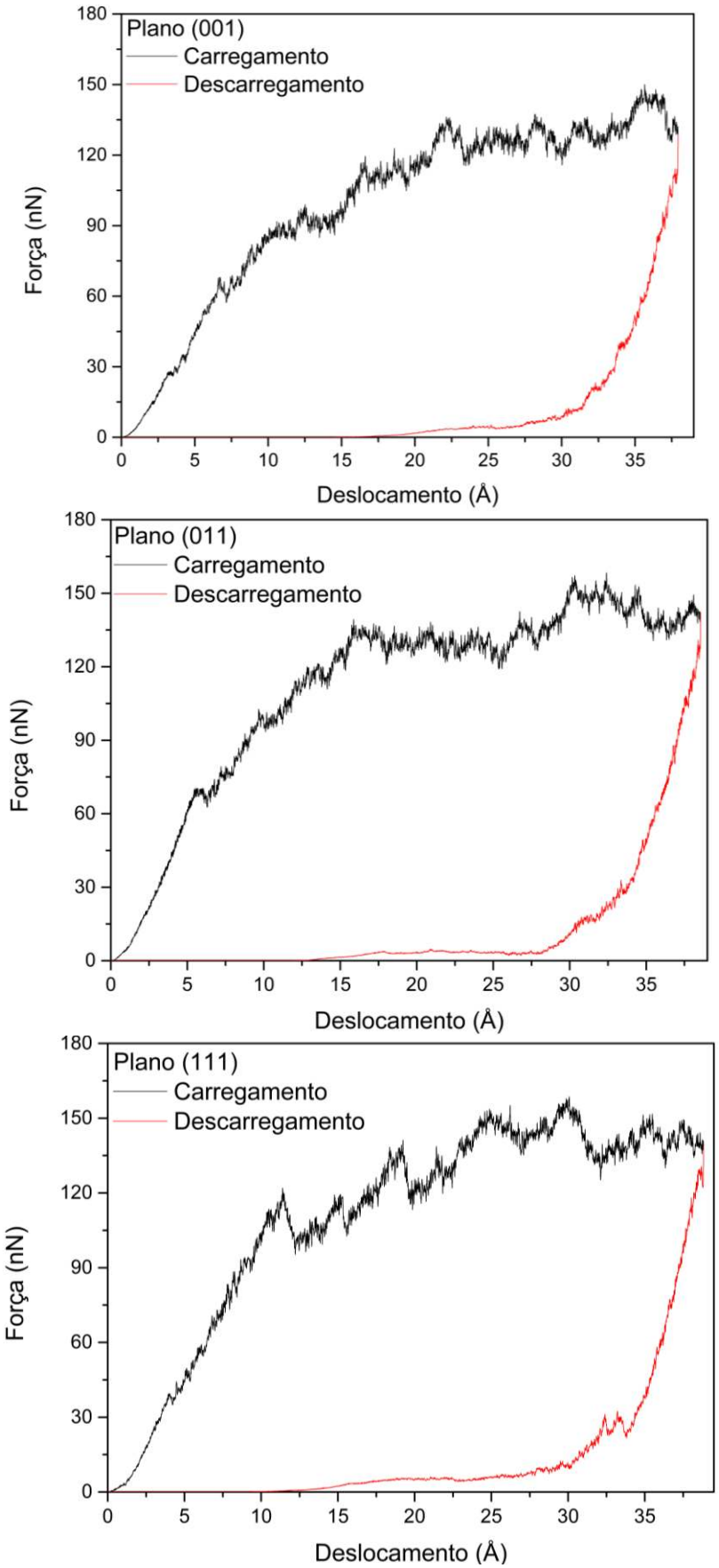


Figura 8: Curvas de força versus deslocamento do indentador durante as etapas de carregamento-descarregamento contra os planos cristalinos (001), (011) e (111).

As curvas de carregamento apresentam uma região de deformação elástica que depende fortemente do plano cristalográfico em que a carga foi aplicada. Além desta etapa, há uma redução da rigidez devido à deformação plástica evidenciada pela formação do serrilhamento, que em princípio, está associada à nucleação de discordâncias. Discordâncias são defeitos lineares dos cristais e sua movimentação depende dos sistemas de escorregamento ativos nos materiais, sendo o principal mecanismo de deformação plástica dos cristais. A análise de deformação, após a aplicação do algoritmo DXA para determinar a formação de discordâncias, não permitiu a detecção de discordâncias. Nos cristais CCC, os sistemas de escorregamento principais têm discordâncias com vetores de Burgers ½<111> que se deslocam nos planos de deslizamento da família {110} e, neste estudo, estas discordâncias deveriam ser detectadas. Contudo, não foi possível sua identificação, e deste modo os serrilhamentos observados nas curvas de carregamento, durante a indentação, foram associadas ao mecanismo de formação de maclas. É importante ressaltar que diversos estudos de deformação das LAEs relatam que os principais mecanismos de deformação plástica são as maclas, em vez do mecanismo de discordâncias, e que isto está relacionado à baixa energia de falha de empilhamento [16].

Após atingir a penetração de 36 Å, ocorreu o descarregamento, que ocorre com declividade semelhante ao do carregamento. As curvas de carregamento mostram maiores valores de força de indentação máxima para o plano de indentação (011) do que para os outros planos. Este fato é esperado, visto que as estruturas cristalinas CCC apresentam maior densidade atômica no plano (011), embora sem grande superioridade em relação a outros planos como (112) e (123). Além disso, a estrutura CCC não tem planos de máxima compactação, supercompactos, como existem nas estruturas CFC e HCP. A densidade atômica dos planos CCC para metais puros se reduzem na ordem 0,68 (011); 0,59 (001) e 0,57 (111). Entretanto, estes valores apresentam desvios para uma liga de alta entropia, mesmo com estrutura cúbica única, devido à distorção da rede, ocasionando algum efeito nas curvas de nanoindentação.

Por outro lado, a família de direções <111> da estrutura CCC apresenta maior densidade atômica linear, e é perpendicular ao plano de indentação (111). Neste caso, alguns planos da família {011} se interceptam, portanto, os planos da família {011} atuam como planos de maclas durante a deformação, permitindo maior deformação plástica e evidenciado nas discretas quedas de carga nas curvas de carregamento durante a indentação e que não são observadas nas indentações dos demais planos cristalográficos.

A partir da curva de descarregamento foram estimados o módulo de elasticidade e a dureza para cada plano. Os valores são apresentados na Tabela 1. A Tabela reporta resultados satisfatórios de módulo de elasticidade, mas elevada dureza. Estes resultados são corroborados pelos resultados de Senkov et al. [17], que pesquisarem LAEs constituídas por elementos refratários com baixa densidade específica (V, Zr, Cr, Nb e Ti). Nesta referência, foram obtidas elevadas dureza e resistência mecânica para as ligas estudadas. Tal comportamento foi creditado à desordem das fases CCC formadas devido ao elevado número de componentes, no caso, cinco.

Tabela 1: Valores estimados de dureza e módulo de elasticidade para os planos (001), (011) e (111).

Planos	H(GPa)	E (GPa)
(001)	16,2	52,6
(011)	18,3	55,4
(111)	18,1	55,5

4 Conclusões

A liga monofásica de alta entropia e composição equiatômica Hf-Nb-Ta-Zr foi estudada via dinâmica molecular para a determinação das características estruturais e mecânicas em nanoescala. Foram observados os efeitos da alta entropia e da distorção severa da rede no comportamento elástico e plástico durante a nanoindentação em termos de morfologia da superfície e carregamento mecânico. Não foi possível detectar a nucleação de discordâncias. Assim, o principal mecanismo de deformação plástica na liga de alta entropia equiatômica Hf-Nb-Ta-Zr à temperatura de 10 K foi atribuído à formação de maclas de deformação. Nesta temperatura, a liga se estrutura com maior estabilidade com a configuração cúbica de corpo centrada. A morfologia indicou que átomos adjacentes aos indentados sofrem deformação geralmente plástica com tendência de retorno à posição inicial devida à alta recuperação elástica após o descarregamento. A carga necessária para provocar deformação plástica não depende exclusivamente da profundidade de indentação e sim do plano cristalográfico indentado, indicando que a alta entropia e a distorção severa da rede são fatores importantes. A indentação no plano cristalino (011) apresentou o maior valor de força na indentação para o mesmo deslocamento, de cerca de 142 nN. Diferentes

curvas força versus deslocamento foram encontradas para os distintos planos cristalinos, revelando a esperada anisotropia das amostras monocristalinas. A análise das funções de distribuição radial parcial revelou uma afinidade de ligação entre átomos de Hf-Zr e Ta-Nb, com a tendência de formação de ordem química de curto alcance entre estes pares de átomos.

Agradecimentos

O presente trabalho foi realizado com apoio da Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior - Brasil (CAPES) - Código de Financiamento 001. Adicionalmente, houve o apoio financeiro da Faperj e do CNPq a esta pesquisa.

Referências

[1] J. W. Yeh, S. Chen, S.J. Lin, T.S. Chin, e T.T Shun, "Nanostructured high entropy alloys with multiple principal elements: novel alloy design concepts and outcomes", *Advanced Engineering Materials*, vol. 6, no. 5, pp. 299–303, 2004. Disponível em: https://doi.org/10.1002/adem.200300567

[2] M.C. Gao, J.-W. Yeh, P.K. Liaw, e Y. Zhang, *High-Entropy Alloys*, 1st ed. Londres, Inglaterra: Butterworth-Heinemann, 2014. Disponível em: https://doi.org/10.1007/978-3-319-27013-5

[3] B. Cantor, I.T.H. Chang, P. Knight, e A.J.B. Vincent, "Microstructural development in equiatomic multicomponent alloys", *Materials Science and Engineering: A,* vol. 375–377, no. 1, pp. 213–218, 2004. Disponível em: https://doi.org/10.1016/j.msea.2003.10.257

[4] S. Maiti e W. Steurer. "Structural-disorder and its effect on mechanical properties in single-phase TaNbHfZr high-entropy alloy", *Acta Materialia*, vol. 106, no. 1, pp. 87-97, 2016. Disponível em: https://doi.org/10.1016/j.actamat.2016.01.018

[5] C.S. Schimidt, C. S., J.C.G. Tedesco, L.V.P.C. Lima, I.N. Bastos, P. Gargarella, e L.C.R. Aliaga. "Efeito da taxa de resfriamento na liga Ni80Cu20 via dinâmica molecular", *Revista Matéria*, vol. 24, no. 1, pp. 1–11, 2019. Disponível em: http://dx.doi.org/10.1590/s1517-707620190001.0614

[6] A. Leach, *Molecular Modelling: Principles and Applications,* 2nd ed. Nova Jersey, EUA: Prentice Hall, 2001. ISBN: UOM:39015055733078.

[7] E. Paquet, e L.V. Herna, "Molecular dynamics, Monte Carlo simulations, and Langevin dynamics: A computational review", *BioMed Research International,* vol. 2015, no. 9, pp. 1–18, 2015. Disponível em: https://doi.org/10.1155/2015/183918

[8] S. Plimpton, "Fast parallel algorithms for short-range molecular dynamics", *Journal of Computational Physics*, vol. 117, no. 1, pp. 1–19, 1995. Disponível em: https://doi.org/10.1006/jcph.1995.1039

[9] S. Mishra, S. Maiti, D. Sridhar, e B. Rai, "Realistic microstructure evolution of complex Ta-Nb-Hf-Zr high-entropy alloys by simulation techniques", *Scientific Reports,* vol. 9, 2019. Disponível em: https://doi.org/10.1038/s41598-019-52170-0

[10] A. Stukowski, "Visualization and analysis of atomistic simulation data with OVITO-the Open Visualization Tool", *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*, vol. 18, no. 1, pp. 015012, 2009. Disponível em: http://dx.doi.org/10.1088/0965-0393/18/1/015012

[11] H. Tsuzuki, P.S. Branicio, e J.P. Rino, "Structural characterization of deformed crystals by analysis of common atomic neighborhood", *Computer Physics Communications*, vol. 177, no. 6, pp. 518–523, 2007. Disponível em: https://doi.org/10.1016/j.cpc.2007.05.018

[12] A. Stukowski, e K. Albe, "Extracting dislocations and non-dislocation crystal defects from atomistic simulation data", *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*, vol. 18, no. 8, pp. 1–13, 2010. Disponível em: https://doi.org/10.1088/0965-0393/18/8/085001

[13] X. Huang, L. Liu, X. Duan, W. Liao, J. Huang, H. Sun, e C. Yu. "Atomistic simulation of chemical short-range order in HfNbTaZr high entropy alloy based on a newly-developed interatomic potential*", Materials & Design*, vol. 202 no. 1, pp. 109560, 2021. Disponível em: https://doi.org/10.1016/j.matdes.2021.109560

[14] H.S. Oh, D. Ma, G.P. Leyson, B. Grabowski, E.S. Park, F. Kormann, e D. Raabe, "Lattice distortions in the FeCoNiCrMn high entropy alloy studied by theory and experiment", *Entropy*, vol. 18, no. 9, pp. 1–18, 2016. Disponível em: https://doi.org/10.3390/e18090321

[15] D. Farkas e A. Caro, "Model interatomic potentials and lattice strain in a high-entropy alloy", *Journal of Materials Research*, vol. 33, no. 19, pp. 3218–3225, 2018. Disponível em: https://doi.org/10.1557/jmr.2018.245

[16] J. Ding, Q. Yu, M. Asta, e R.O. Ritchie, "Tunable stacking fault energies by tailoring local chemical order in CrCoNi medium-entropy alloys", *Proceedings of the National Academy of Sciences*, vol. 115, no. 36, pp. 8919–8924, 2018. Disponível em: https://doi.org/10.1073/pnas.1808660115

[17] O.N Senkov, S.V. Senkova, C. Woodward e D.B. Miracle, "Low-density, refractory multi-principal element alloys of the Cr–Nb–Ti–V–Zr system: Microstructure and phase analysis", *Acta Materialia*, vol. 61, no. 5, pp. 1545–1557, 2013. Disponível em: http://dx.doi.org/10.1016/j.actamat.2012.11.032

[18] L.C.R. Aliaga, C.S. Schimidt, L.V.P.C. Lima, P. Gargarella, I.N. Bastos e W.J. Botta, "Study of glass forming on Cu60.0Zr32.5Ti7.5 alloy by molecular dynamics simulation", *Materials Research*, vol. 21, no. 2, pp. 20170555, 2017. Disponível em: https://doi.org/10.1590/1980-5373-mr-2017-0555

[19] L.C.R. Aliaga, L.V.P.C. Lima, G.M.B. Domingues, I.N. Bastos, e G.A. Evangelakis, "Experimental and molecular dynamics simulation study on the glass formation of Cu–Zr–Al alloys", *Materials Research Express*, vol. 6, no. 4, pp. 045202, 2019. Disponível em: https://doi.org/10.1088/2053-1591/aaf97e