



Produção e caracterização de Ligas de Alta Entropia Eutética do Sistema AlCoCrFeMnNi

Palavras-Chave: Ligas de Alta Entropia, Ligas Eutéticas, AlCoCrFeMnNi

Autores(as):

Vinícius De Freitas Da Silva, FEM – UNICAMP

Prof. Dr. Kaio Niitsu Campo, FEM - UNICAMP

INSTITUIÇÃO

1.Introdução

As ligas de alta entropia (High Entropy Alloys – HEAs) constituem uma classe recente de materiais metálicos, caracterizadas por conter cinco ou mais elementos em proporções próximas à equiatômica. Esse arranjo resulta em alta entropia de mistura, o que favorece a formação de fases simples, como soluções sólidas com estrutura cúbica de face centrada (CFC), cúbica de corpo centrado (CCC) ou hexagonal compacta (HC), ao invés de fases intermetálicas complexas.

A liga equiatômica CoCrFeMnNi, uma das mais estudadas, apresenta estrutura CFC, boa ductilidade e estabilidade térmica, mas baixa resistência mecânica. Por outro lado, ligas com estrutura CCC oferecem alta resistência, mas tendem a ser frágeis. A proposta de Lu et al. (2014) foi combinar essas fases em uma microestrutura eutética, com o objetivo de obter propriedades mecânicas equilibradas: resistência elevada e razoável ductilidade.

Nesse contexto, o presente projeto buscou explorar ligas eutéticas no sistema AlCoCrFeMnNi, utilizando simulações termodinâmicas para orientar a seleção das composições, seguidas por caracterização experimental das composições selecionadas.

2.Objetivos

O objetivo geral deste projeto foi produzir e caracterizar ligas de alta entropia eutéticas derivada do sistema AlCoCrFeMnNi.

Objetivos específicos:

- Realizar cálculos termodinâmicos para identificar composições eutéticas.
- Fundir as ligas por meio de forno a arco.
- Realizar a caracterização microestrutural (MEV e óptico), cristalográfica (DRX) e composicional (XRF e EDS).

3. Metodologia

As composições foram definidas com base em cálculos termodinâmicos realizados no software Thermo-Calc® com a base de dados TCHEA6. Foram avaliadas diferentes razões de Al e Ni para encontrar composições teóricas eutéticas

As ligas foram fundidas em forno a arco elétrico com atmosfera inerte de argônio. Após a solidificação, os lingotes foram cortados, embutidos em baquelite e submetidos a lixamento e polimento.

A caracterização incluiu: análise por fluorescência de raios X (XRF), espectroscopia por dispersão de energia (EDS), microscopia eletrônica de varredura (MEV), difração de raios X (DRX) e ensaio de dureza Vickers.

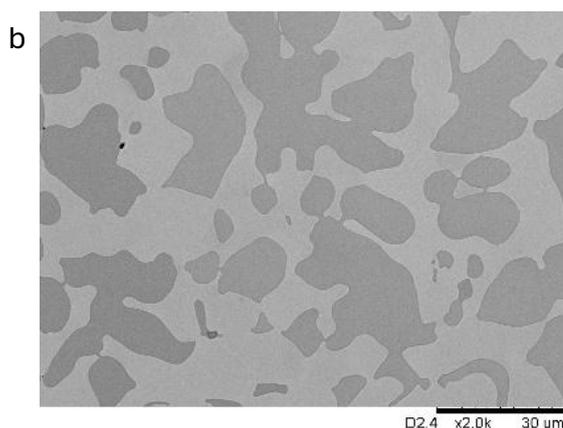
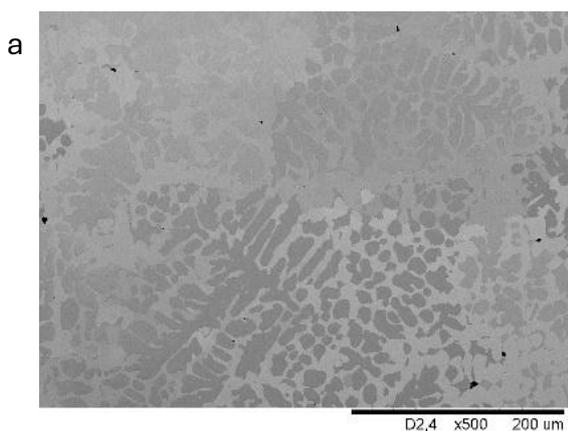
4. Resultados e discussão

A seleção das ligas eutéticas do sistema AlCoCrFeMnNi foi baseada na abordagem de Lu et al. (2017), que considera a entalpia de mistura entre os elementos. Elementos como Co, Cr, Fe, Mn e Ni tendem a formar soluções sólidas do tipo CFC, enquanto o alumínio (Al), ao formar ligações com Ni, favorece a formação da fase CCC/B2. Com base nisso, diagramas de fases pseudobinários foram construídos entre grupos A (CoCrFeMnNi) e B (NiAl), revelando composições potencialmente eutéticas. Foram dadas as simulações foram feitas 3 ligas com as seguintes composições atômicas: $\text{Al}_{6,75}\text{Co}_{15,84}\text{Cr}_{15,81}\text{Fe}_{15,82}\text{Mn}_{15,81}\text{Ni}_{30,12}$

$\text{Al}_9\text{Co}_{12,75}\text{Cr}_{12,75}\text{Fe}_{12,75}\text{Mn}_{12,75}\text{Ni}_{40}$ e $\text{Al}_{11,26}\text{Co}_{9,69}\text{Cr}_{9,68}\text{Fe}_{9,68}\text{Mn}_{9,69}\text{Ni}_{50}$

4.1 Microestrutura

Após todo o processo de preparação das amostras foi possível analisar e verificar o modelo teórico fornecido pelo Thermo-Calc, na Figura 1 temos a microestruturas das ligas do projeto



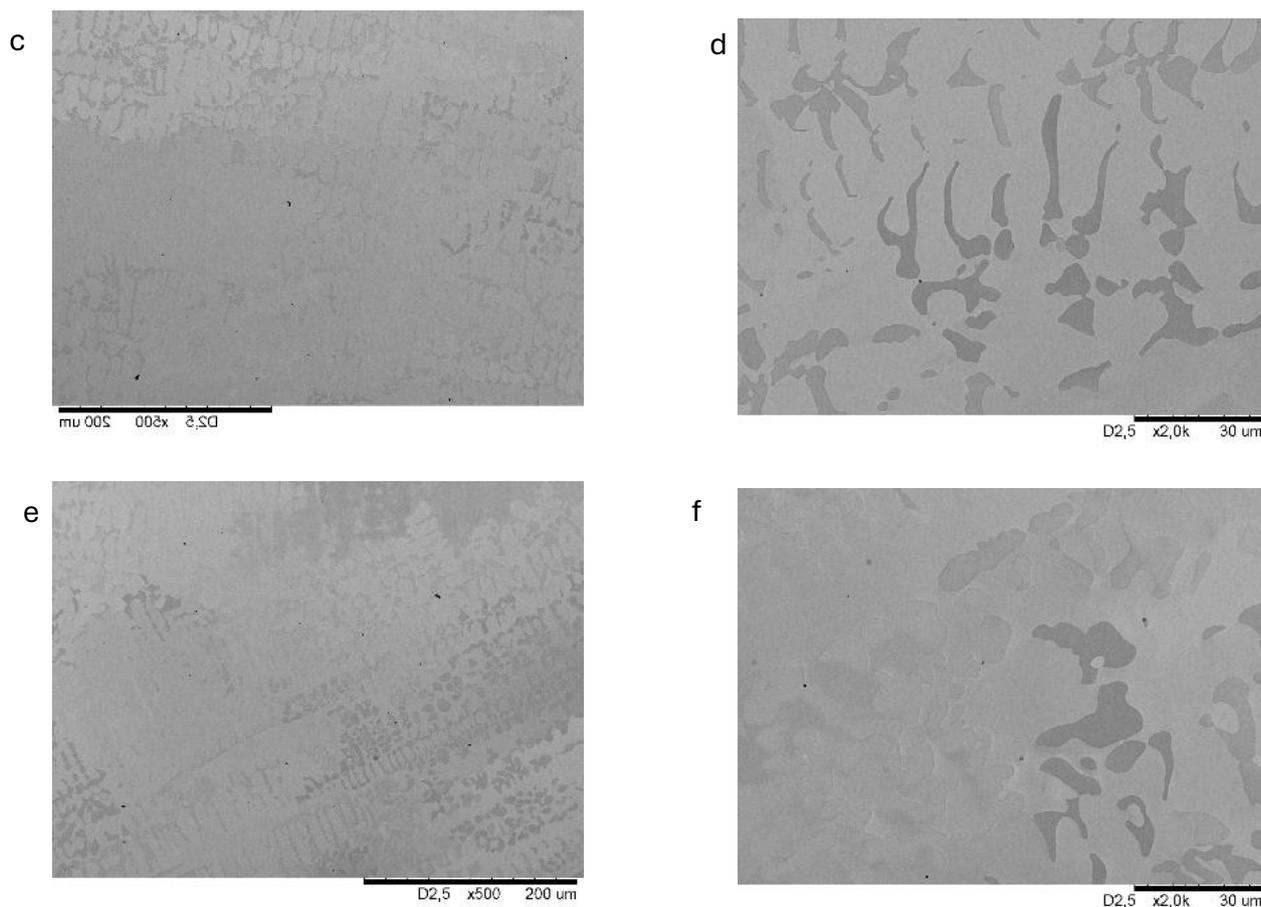


Figura 1: Microestrutura das ligas com ampliação de 500x, e 2000x respectivamente das ligas: (a),(b) $\text{Al}_{6,75}\text{Co}_{15,84}\text{Cr}_{15,81}\text{Fe}_{15,82}\text{Mn}_{15,81}\text{Ni}_{30,12}$, (c), (d) $\text{Al}_9\text{Co}_{12,75}\text{Cr}_{12,75}\text{Fe}_{12,75}\text{Mn}_{12,75}\text{Ni}_{40}$ (e),(f) $\text{Al}_{11,26}\text{Co}_{9,69}\text{Cr}_{9,68}\text{Fe}_{9,68}\text{Mn}_{9,69}\text{Ni}_{50}$

A análise das microestruturas revelou que as ligas produzidas não apresentaram crescimento cooperativo entre fases, característico de ligas eutéticas, mas sim morfologia dendrítica, indicando que a solidificação não ocorreu sob condições eutéticas. Essa discrepância entre os resultados experimentais e as simulações termodinâmicas evidencia limitações no modelo utilizado, possivelmente devido à base de dados incompleta ou à dificuldade de modelar interações complexas entre múltiplos elementos.

4.2 Difração de raios x (DRX) e Espectroscopia por Dispersão de Energia (EDS)

As análises por EDS e DRX foram utilizadas para identificar as fases presentes nas microestruturas das ligas. O EDS revelou maior concentração de alumínio nas regiões mais escuras, sugerindo a presença de uma fase CCC/B2. A DRX confirmou a existência de fases cúbica de corpo centrado (CCC) e cúbica de face centrada (CFC), além de picos associados ao ordenamento da fase B2. Apesar da compatibilidade como esperado de acordo com o Thermo-

Calc dessas fases com microestruturas eutéticas, a ausência de crescimento cooperativo observada nas imagens indica que a solidificação não ocorreu sob condições eutéticas.

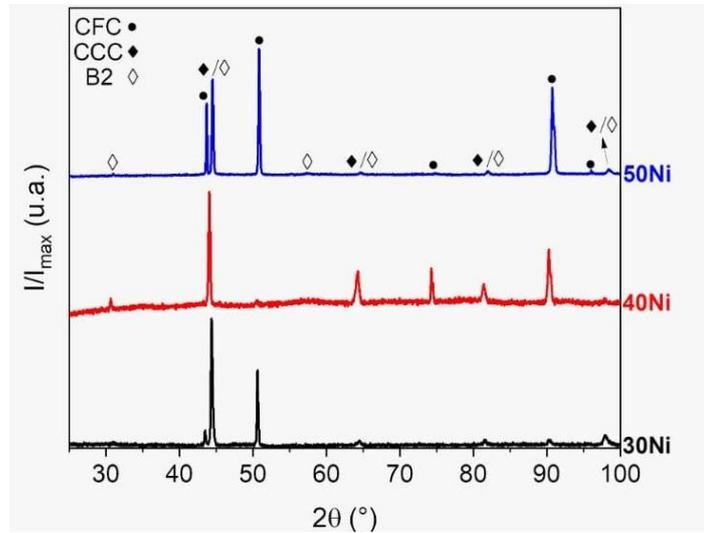


Figura 2: Difração de raios x das ligas $\text{Al}_{6,75}\text{Co}_{15,84}\text{Cr}_{15,81}\text{Fe}_{15,82}\text{Mn}_{15,81}\text{Ni}_{30,12}$, $\text{Al}_9\text{Co}_{12,75}\text{Cr}_{12,75}\text{Fe}_{12,75}\text{Mn}_{12,75}\text{Ni}_{40}$ e $\text{Al}_{11,26}\text{Co}_{9,69}\text{Cr}_{9,68}\text{Fe}_{9,68}\text{Mn}_{9,69}\text{Ni}_{50}$

4.3 Dureza Vickers

Foi realizada uma análise de dureza Vickers nas ligas produzidas para avaliar sua resistência mecânica. Os resultados mostraram que, embora todas apresentem as mesmas fases cristalinas (CFC e CCC/B2), a fração volumétrica dessas fases varia com a composição química, afetando a dureza. A liga com 30% de níquel apresentou a maior dureza, indicando maior proporção de fase CCC/B2, com maior resistência mecânica. Já a liga com 40% de níquel teve a menor dureza, associada a maior fração da fase CFC, menos resistente. Esses dados evidenciam a influência da composição na microestrutura e nas propriedades mecânicas finais das ligas.

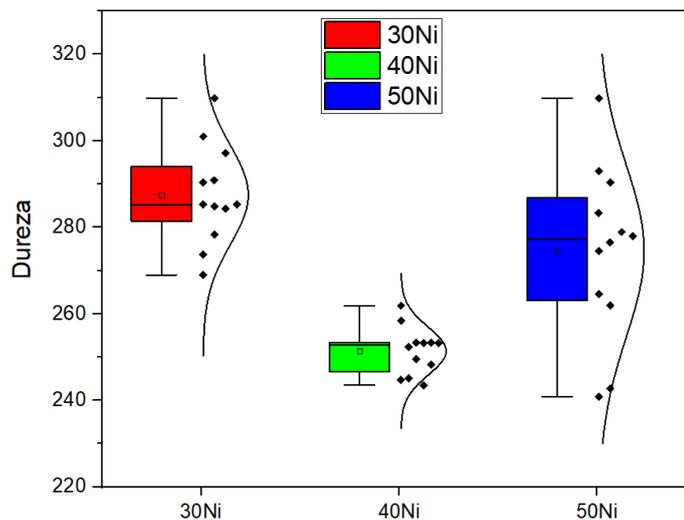


Figura 3: Dureza das ligas $\text{Al}_{6,75}\text{Co}_{15,84}\text{Cr}_{15,81}\text{Fe}_{15,82}\text{Mn}_{15,81}\text{Ni}_{30,12}$, $\text{Al}_9\text{Co}_{12,75}\text{Cr}_{12,75}\text{Fe}_{12,75}\text{Mn}_{12,75}\text{Ni}_{40}$ e $\text{Al}_{11,26}\text{Co}_{9,69}\text{Cr}_{9,68}\text{Fe}_{9,68}\text{Mn}_{9,69}\text{Ni}_{50}$.

5. Conclusão

O estudo utilizou simulações termodinâmicas para selecionar três ligas do sistema AlCoCrFeMnNi , que foram produzidas e caracterizadas experimentalmente. As microestruturas obtidas não apresentaram crescimento cooperativo, contrariando o esperado para ligas eutéticas, e foram compostas por fases CFC e CCC/B2 em regiões dendríticas. Entre as amostras, a liga com 30% de níquel apresentou a maior dureza, enquanto a com 40% teve a menor, evidenciando que a composição química afeta diretamente as propriedades mecânicas. Os resultados também destacaram limitações nos modelos de simulação utilizados.

Referências

- CALLISTER, W. Ciência e Engenharia de Materiais: Uma Introdução . Grupo Gen-LTC, 2000.
- CANTOR, B. et al. Microstructural development in equiatomic multicomponent alloys. *Materials Science and Engineering: A*, v. 375, p. 213-218, 2004.
- GARCIA, A. Solidificação: fundamentos e aplicações. editora da Unicamp, 2007.
- GAO, M.C. et al. (Ed.). High-entropy alloys: fundamentals and applications. Springer, 2016.
- LU, Y. et al. A promising new class of high-temperature alloys: eutectic high-entropy alloys. *Scientific Reports*, v. 4, n. 1, p. 6200, 2014.
- LU, Y. et al. A new strategy to design eutectic high-entropy alloys using mixing enthalpy. *Intermetallics*, v. 91, p. 124-128, 2017.
- MIRACLE, D.B.; SENKOV, O.N. A critical review of high entropy alloys and related concepts. *Acta Materialia*, v. 122, p. 448-511, 2017.
- OTTO, F. et al. Decomposition of the single-phase high-entropy alloy CrMnFeCoNi after prolonged anneals at intermediate temperatures. *Acta Materialia*, v. 112, p. 40-52, 2016.
- WU, M. et al. CALPHAD aided eutectic high-entropy alloy design. *Materials Letters*, v. 262, p. 127175, 2020.
- YE, Y.F. et al. High-entropy alloy: challenges and prospects. *Materials Today*, v. 19, n. 6, p. 349-362, 2016.
- ZHANG, Y. High entropy materials. Rijeka: IntechOpen, 2023.