

# SIMULAÇÃO COMPUTACIONAL DA FORMAÇÃO DE FASE SIGMA EM AÇO INOXIDÁVEL DÚPLEX

Rayanne Araujo Andrade<sup>1</sup>, Rodrigo Magnabosco<sup>1</sup>  
<sup>1</sup> Departamento de Materiais, Centro Universitário FEI  
 rayanneaa@hotmail.com; rodrmag@fei.edu.br

**Resumo:** O presente trabalho tem como objetivo estudar a formação da fase sigma no aço inoxidável dúplex durante o resfriamento contínuo usando simulação computacional. Para isso foram desenvolvidas curvas de Transformação sob Resfriamento Contínuo (TRC) no *software* DICTRA<sup>®</sup>. Os resultados mostraram que o DICTRA<sup>®</sup> é capaz de simular curvas TRC.

## 1. Introdução

Os aços inoxidáveis dúplex (AID) apresentam uma microestrutura bifásica constituída de proporções iguais das fases ferrita ( $\alpha$ ) e austenita ( $\gamma$ ), e esta microestrutura balanceada oferece uma combinação de alta tenacidade, soldabilidade, resistência mecânica e à corrosão [1], sendo largamente utilizados nas indústrias de petróleo e gás [2]. Contudo, suas propriedades são suscetíveis a fases deletérias, geralmente formadas em temperaturas entre 650°C e 950°C [2]. Em particular a fase sigma é uma das fases intermetálicas mais prejudiciais devido à sua elevada concentração de Cr e Mo na composição química. Mesmo em pequenas quantidades a fase sigma degrada as propriedades dos AID [3]. Desta forma, entender o comportamento termodinâmico e cinético da formação da fase sigma é de extrema importância para evitar a precipitação de sigma nos AID.

Os diagramas de Tempo-Temperatura-Transformação (TTT), fornecem informações fundamentais da cinética de transformação de fase durante condições isotérmicas [3]. Todavia, diagramas TTT não são de grande utilidade como referência para práticas de fundição, laminação a quente e soldagem, onde a transformação de fase ocorre durante o resfriamento [3]. Assim, o ideal seriam curvas de Transformação sob Resfriamento Contínuo (TRC).

Normalmente a obtenção de curvas TRC experimentais é possível a partir de análises térmicas como a dilatométrica, e a quantificação das fases por métodos como o EBDS, ou seja, elevando o custo em equipamentos e mão de obra técnica para tal desenvolvimento [3]. Uma solução é utilizar o DICTRA<sup>®</sup>, um *software* de simulação de transformação de fase controlado por difusão que utiliza modelamentos matemáticos em base de dados termodinâmicos e cinéticas, baseado na metodologia CALPHAD [4]. Estudos como de Morais e Magnabosco [4], mostraram que o DICTRA<sup>®</sup> apresentou convergência com os resultados experimentais para diagramas TTT, principalmente para o início da precipitação de sigma [4]. Desta forma, o DICTRA<sup>®</sup> se mostrou uma alternativa para o desenvolvimento de curvas TRC.

## 2. Metodologia

O material em estudo é um AID UNS S31803, sua composição química se encontra na Tabela I.

Tabela I: Composição química do UNS S31803

%Cr	%Mo	Ni	N
22,0	3,0	5,0	0,17

Para a construção do diagrama TRC foram realizados os cálculos termodinâmicos no Termo-Calc<sup>®</sup>, versão 2020b, na base de dados TCFE9 para determinação da temperatura em que a microestrutura apresenta 50% $\gamma$  e 50% $\alpha$ , ou seja, temperatura de solubilização, obtendo 1041°C, e a composição química de cada fase na temperatura de solubilização

As simulações de cinética foram realizadas no *software* DICTRA<sup>®</sup> na versão 2020b, com a base de dados TCFE9 e MOBFE4 para mobilidade. O modelo para a simulação é planar, constituído de uma célula de austenita ao lado de uma célula de ferrita, ambas com 50 $\mu$ m de largura e 50 pontos por fase. A distribuição dos pontos é geométrica com proporção de 0,95 para a austenita e 1,1 para a ferrita, com a fase sigma precipitando na interface  $\gamma/\alpha$  [4], se o potencial termodinâmico mínimo para a precipitação de sigma de  $10^{-5}$  R.T. fosse atingido. A Figura 1 representa o modelo simulado.

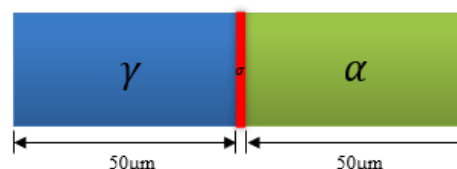


Figura 1: Representação do modelo simulado no DICTRA<sup>®</sup>

As simulações foram realizadas sob as taxas de resfriamento de 0,001°C/s a 100°C/s, com o início do resfriamento na temperatura de 1041°C até 741°C.

Foram extraídos dados de temperatura e fração de sigma em função do tempo do *software* e interpolados linearmente na porcentagem desejada.

## 3. Resultados e Discussão

O diagrama TRC para 0,11% de sigma, porcentagem que se mostrou pequena suficiente para o início da precipitação e existente no intervalo das taxas de resfriamento simuladas, se encontra na Figura 2. Nota-se que a máxima cinética de precipitação ocorre na temperatura de 860°C, valor corresponde ao da literatura [1,3], e a taxa crítica para a formação de 0,11% $\sigma$  foi de 100°C/s.

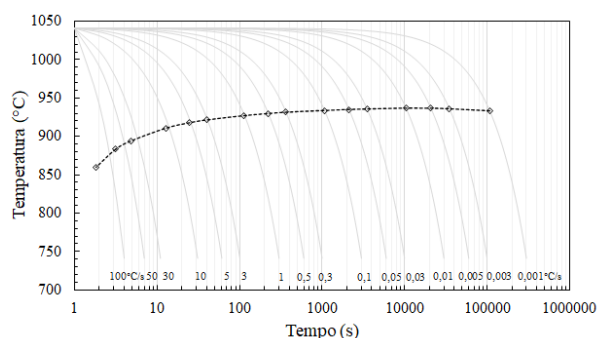


Figura 2: Diagrama TRC para 0,11% $\sigma$

A Figura 2 mostra que o DICTRA<sup>®</sup> é capaz de desenvolver curvas TRC. A partir disto é interessante aplicar a metodologia para o desenvolvimento de curvas TRC com dados experimentais existentes na literatura e compará-los, para observar se há convergência dos resultados.

A Figura 3 apresenta o diagrama TRC com os dados que os autores [1] e [3] disponibilizaram em seus trabalhos. Foi extraído a composição química e a temperatura de solubilização, o tamanho de célula foi quantificado pelo analisador de imagens ImageJ<sup>®</sup> nas micrografias dos trabalhos, já que os autores não informaram o tamanho de grão na temperatura de solubilização. No caso de Ferro e Bonollo [1] há a menção de uma tamanho de grão de 20 $\mu\text{m}$  como valor de calibração do modelamento matemático, que também foi considerando como parâmetro para a simulação.

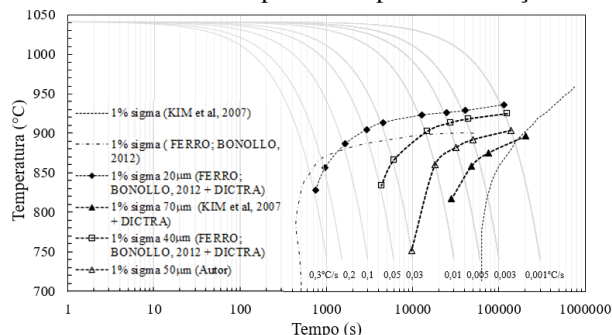


Figura 3: Diagrama com a sobreposição das curvas 1% $\sigma$  calculadas pelo DICTRA<sup>®</sup> com os autores [1] e [3]

A Figura 3 mostra que ao adicionar os parâmetros do sistema no *software* é possível desenvolver curvas específicas, e nota-se o quanto as curvas com os dados dos autores [1] e [3] se aproximaram das curvas dos trabalhos originais, respectivamente. Contudo, é necessário entender a influência das variáveis. Nota-se que o tamanho de célula influencia drasticamente na curva TRC, Figura 4. Quanto menor a célula, maior é o gradiente de concentração, o que aumenta a cinética de precipitação de sigma. No caso dos autores [1], os valores que eles atribuíram de 20 $\mu\text{m}$  aderiu muito melhor do que o valor de 40 $\mu\text{m}$  obtido no ImageJ<sup>®</sup>. No entanto, a curva com os dados dos autores [3] apresentou boa convergência, com uma variação de 0,005°C/s para 0,01°C/s na taxa crítica.

O ideal seria obter dados experimentais, para saber de fato como pode-se trabalhar com o tamanho de célula em simulações sob resfriamento no DICTRA<sup>®</sup>.

Já no caso do potencial termodinâmico, Figura 5, adotado inicialmente de 10<sup>-5</sup> R.T. se mostrou estável, não havendo variações significativas em um intervalo de 10<sup>-5</sup> a 10<sup>-2</sup> R.T., mostrando que há uma grande faixa de segurança para trabalhar com esta variável.

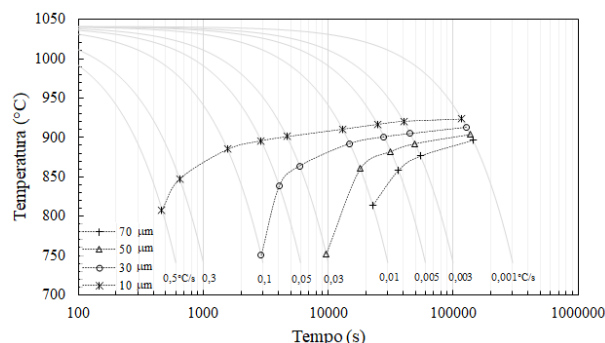


Figura 4: Influência do tamanho de célula no diagrama TRC com 1% $\sigma$  (dados do autor)

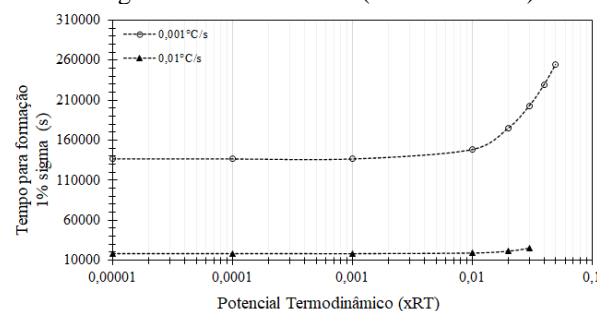


Figura 5: Influência do potencial termodinâmico no tempo de formação de 1% $\sigma$  (dados do autor)

#### 4. Conclusões

O DICTRA<sup>®</sup> mostrou-se viável no desenvolvimento de curvas TRC. O potencial termodinâmico mostra uma faixa estável para estudos de precipitação de sigma. Contudo, o tamanho de célula mostrou grande influência nas curvas TRC, e seria interessante para melhores conclusões validações do modelo.

#### 5. Referências

- [1] P. Ferro; F. Bonollo A Semiempirical Model for Sigma-Phase Precipitation in Duplex and Superduplex Stainless Steels. *Metallurgical and Materials Transactions A*. **43A** (2012) 1109-1116.
- [2] E. A. Melo; R. Magnabosco. Influence of the heterogeneous nucleation sites on the kinetics of intermetallic phase formation. *Metallurgical and Materials Transactions A*. **48** (2017) 5273 – 5284
- [3] Y. L. Kim; S. Chumbley; B. Gleeson. Continuous Cooling Transformation in Cast Duplex Stainless Steels CD3MN and CD3MWCuN. *Journal of Materials Engineering and Performance*. **17** (2007) 234-239
- [4] C. L. Moraes; R. Magnabosco. Experimental investigations and DICTRA<sup>®</sup> simulation of sigma phase formation in a duplex stainless steel. *Calphad*. **58** (2017) 214-218

#### Agradecimentos

À instituição Centro universitário FEI pelo suporte técnico fornecido. <sup>1</sup> Aluna de IC do Centro Universitário FEI. Projeto com vigência de 12/19 a 11/20.