

PREVISÃO DAS FASES PRESENTES EM FERROS FUNDIDOS USANDO O DICTRA[®]

Renata Caroline Mota Santos¹, Rodrigo Magnabosco¹

¹ Engenharia de Materiais, Centro Universitário FEI

renata_cms@hotmail.com; rodrmag@fei.edu.br

Resumo: Neste trabalho estudou-se a influência da taxa de resfriamento e do teor de silício na formação do ferro fundido branco e cinzento por intermédio de simulação computacional de cinética de transformação de fase utilizando o DICTRA[®]. Simulações foram realizadas variando o teor de silício de 0 a 3% em massa para diversas taxas de resfriamento. Os resultados indicaram que o *software* é sensível à presença de silício e que as bases de dados ainda não são adequadas para a liga estudada.

1. Introdução

Atualmente, define-se ferro fundido (FF) como um sistema constituído basicamente de ferro, carbono e silício, em que o teor de carbono é acima de 2% aproximadamente. A variação de composição de silício altera significativamente a microestrutura do material provocando diferentes propriedades e, conseqüentemente, aplicações distintas.

Ao estudar o processo de fundição, o resfriamento do material também provoca mudanças expressivas em seu desempenho. Assim, considerando o processo de solidificação, o equilíbrio termodinâmico estável (FF cinzento) ou metaestável (FF branco) do sistema Fe-C-Si pode ser respeitado. No primeiro caso a formação de grafita é preferencial, enquanto no segundo a cementita é favorecida [1].

Dessa maneira, é de suma importância saber como o teor de silício e a taxa de resfriamento controlam a formação de cementita e de grafita posto que provocam diferentes condições no material alterando suas aplicações.

Analisando o elemento químico de maior relevância para a determinação das propriedades dos ferros fundidos, tem-se que o silício em maior quantidade promove a formação de grafita [1].

Já no que se refere à taxa de resfriamento, quanto mais lento é o processo, maior a probabilidade de formação de grafita. Conforme o aumento da taxa de resfriamento é feito, o sistema segue a solidificação metaestável e a cementita é privilegiada [1].

Ao associar as duas variáveis, Stefanescu (2005) conseguiu prever a formação do ferro fundido cinzento, branco e mesclado (junção entre os dois anteriores) para um material de composição Fe-3,6%C alterando a taxa de resfriamento da peça e o teor de silício [2]. O estudo revelou a importância do controle dos parâmetros que mais influenciam a formação de diferentes tipos de ferro fundido, posto que possuem propriedades distintas, e ter conhecimento sobre quais fases se formaram é fundamental.

Softwares de simulação computacional podem auxiliar no estudo de formação dos ferros fundidos.

Alterando taxas de resfriamento e porcentagem de silício para composições diversas, o presente trabalho busca entender modelos de formação das fases com tais alterações utilizando simulações computacionais.

2. Metodologia

O presente projeto busca entender o comportamento dos ferros fundidos ao variar sua taxa de resfriamento e teor de silício por intermédio dos *softwares* ThermoCalc[®] e DICTRA[®], sendo que o primeiro foi utilizado para simulações de equilíbrio do sistema e o segundo para realização de simulações difusivas.

A liga Fe-3,6%C estudada por Stefanescu (2005) foi simulada no presente trabalho nas bases de dados TCFE9 e MOBFE4 com variações de 0 a 3% em massa de silício para as taxas de 0,1°C/s, 0,5°C/s, 1°C/s, 2°C/s, 10°C/s e 50°C/s, sendo a célula computacional no formato plano com formação de fases nas duas extremidades. A região esquerda com transformação da fase líquida para austenita enquanto na direita o *software* decide se há formação de cementita ou grafita a partir do líquido.

Ademais, estudou-se a variação da dimensão da célula computacional e do potencial termodinâmico para que haja melhor adequação do modelo computacional aos experimentos.

3. Resultados

As simulações de equilíbrio foram realizadas para nortear as simulações difusivas, definindo temperaturas para a existência de determinadas fases. Na sequência, realizaram-se as simulações em DICTRA[®]. Por exemplo, para a liga Fe-3,6%C-0,1%Si com taxa de resfriamento de 0,5°C/s obteve-se 24,9% em volume de grafita e ausência de cementita após a solidificação.

Assim, reuniu-se os dados obtidos para as ligas Fe-3,6%C e Fe-3,6%C-0,1%Si para diversas taxas de resfriamento (Fig. 1). A partir do resultado, pode-se perceber que na ausência de silício, baixas taxas de resfriamento (até 1,0°C/s) promovem a formação de grafita e maiores resfriamentos (acima de 10°C/s) tendem a presença de ferro fundido branco.

Já quando o silício é presente, até mesmo em menor teor (0,1%Si) e para elevadas taxa de resfriamento (10°C/s), há a formação de ferro fundido cinzento. Para demais porcentagens de silício o resultado apresentou a mesma porcentagem de grafita e cementita nas diversas condições estudadas, mostrando alta sensibilidade do *software* para o silício, já que pequenas porcentagens induzem a formação de grafita, respeitando-se o equilíbrio estável do sistema Fe-C-Si.

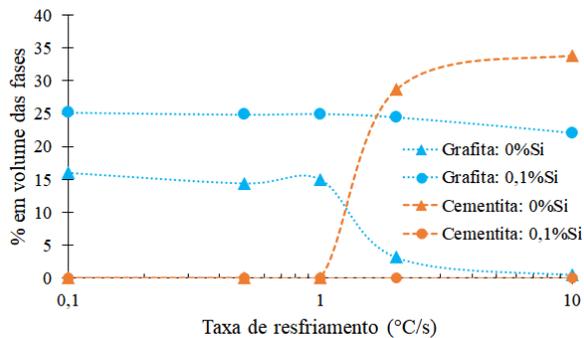


Figura 1 – Porcentagem em volume das fases grafita e cementita em função da taxa de resfriamento para as ligas Fe-3,6%C e Fe-3,6%C-0,1%Si

Além disso, com os resultados, pôde-se perceber que a grafita formada para todas as ligas estudadas não é composta exclusivamente por carbono, sendo um grave erro do DICTRA® que pode alterar significativamente os resultados das simulações. A possível causa para o resultado é que as bases de dados utilizadas não possuem dados suficientes para a realização dos cálculos.

Apesar desta inconsistência, estudou-se a variação do potencial termodinâmico e tamanho da célula com o objetivo de refinar os dados a serem estudados, verificando se estes fatores estariam afetando o resultado das simulações.

Diversos potenciais termodinâmicos foram simulados para a liga Fe-3,6%C-0,5%Si e não houve diferença significativa do teor de grafita para potenciais termodinâmicos inferiores a 10^{-3} .RT, mostrando que os valores convergem e podem ser utilizados sem necessidade de calibração deste parâmetro, não influenciando na % grafita formada em cada taxa de resfriamento testada.

A figura 2 indica a influência do tamanho da célula computacional em micrometros na quantidade de grafita formada para a liga com 0,5% Si. Diferentemente do que houve com o potencial termodinâmico, não houve convergência dos tamanhos de célula computacional, revelando sensibilidade do *software* a este parâmetro também e a necessidade de calibração.

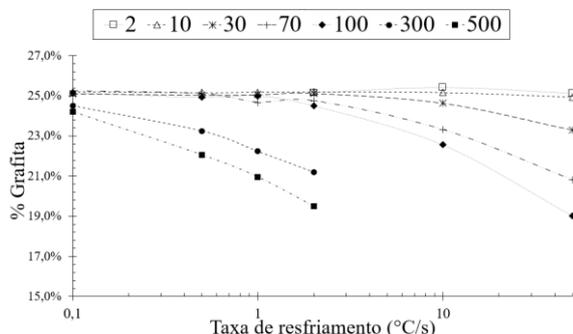


Figura 2 – Porcentagem de grafita para a liga Fe-3,6%C-0,5%Si para diferentes tamanhos de célula. Valores da legenda em micrometros

Os resultados, expostos por marcadores, foram comparados com o trabalho de Stefanescu (2005),

regiões coloridas no gráfico, para o potencial de 10^{-5} .RT e célula de $100\mu\text{m}$ (Fig. 3). Os marcadores em verde indicam a formação de ferro fundido cinzento, se a cor é azul representa o FF mesclado, já se o marcador é vermelho se trata do FF branco conforme os resultados das simulações. Concluiu-se que os valores obtidos na simulação não são similares ao artigo, o *software* se mostrou com alta sensibilidade à presença de silício, posto que materiais sem este elemento químico apresentaram resultados mais condizentes com Stefanescu (2005) e sua adição permitiu a formação exclusiva de FF cinzento para todas as taxas de resfriamento e teores de silício estudados.

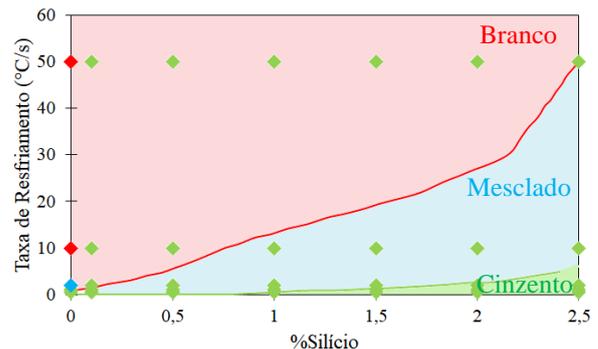


Figura 3 – Transição de ferro fundido cinzento-branco com influência na taxa de resfriamento e no teor de silício conforme Stefanescu (2005) e resultados das simulações computacionais

Os resultados não foram compatíveis com o experimento realizado no artigo, mostrando que a utilização do DICTRA® ainda não é viável para a previsão das fases presentes em microestrutura bruta de fusão de ferros fundidos.

4. Conclusões

O *software* e as bases de dados são altamente sensíveis ao silício na liga. Além disso, a célula computacional precisa ser ajustada caso a simulação seja realizada.

A utilização do DICTRA® para determinação de transformações de fase em microestrutura bruta de fusão de ferros fundidos com silício ainda não se mostra viável, pois os resultados pouco se aderem aos experimentos disponíveis na literatura.

5. Referências

- [1] H. Colpaert, Metalografia dos produtos siderúrgicos comuns, 4ed., 2008.
- [2] D. M. Stefanescu, Solidification and modeling of cast iron – A short history of the defining moments, *Materials Science and Engineering*, p. 322-333, 2005.

Agradecimentos

Ao Centro Universitário FEI pela disponibilização do *software* que permitiu o desenvolvimento do trabalho, e pela concessão da bolsa de IC à aluna.

¹ Aluna de IC do Centro Universitário FEI. Projeto com vigência de 12/19 a 11/20.