

# MODELAMENTO COMPUTACIONAL DA SOLUBILIZAÇÃO DE UM AÇO INOXIDÁVEL SUPERDÚPLEX

Mariana Tortella Merli Fiorante, Rodrigo Magnabosco  
Engenharia de Materiais, Centro Universitário FEI  
ma\_fiorante@hotmail.com, rodrmag@fei.edu.br

**Resumo:** O presente trabalho visa o modelamento matemático das transformações de fases durante o aquecimento do aço inoxidável superdúplex UNS S32750 por até 3h a 1250°C, a partir da condição inicial na qual se tem 50% de ferrita e 50% de austenita, por meio dos softwares Thermo-Calc e DICTRA. Obteve-se a evolução da fração de ferrita para diferentes modelos, atingindo até 74% da fase e estabilização entre 100 e 1000s, validados experimentalmente em laboratório.

## 1. Introdução

Os aços inoxidáveis superdúplex são caracterizados por possuírem quantidades suficientes de Cr, Mo, Ni e N em sua composição para produzir uma resistência equivalente a pite (PREN) superior a 40, o que aumenta a resistência à corrosão do material por formação de uma película passiva, proporcionando nobres aplicações como em setores petrolíferos e aeronáuticos [1].

Recebem a denominação dúplex por terem em sua estrutura 50% de ferrita ( $\alpha$ ) e 50% de austenita ( $\gamma$ ), através de um tratamento térmico de solubilização definido em função da composição química e temperatura, seguido de um rápido resfriamento [2].

O objetivo do trabalho consiste na simulação computacional do equilíbrio e da cinética de transformação de fases de um aço inoxidável superdúplex e sua validação experimental, a fim de avaliar a evolução da fração de ferrita e os perfis de composição dos elementos químicos nestas fases para três modelos de simulação, e compará-los entre si e com os resultados de validação experimental.

## 2. Metodologia

Realizou-se a simulação computacional do aço UNS S32750 (laminado a quente e solubilizado a 1120 °C por 1h30 min), utilizando-se os softwares Thermo-Calc e DICTRA e obtendo-se resultados para três diferentes modelos:

1 – Composição química reduzida (Tabela I) e base de dados TCFE8/MOBFE3;

2 – Composição química completa (Tabela II) e base de dados TCFE8/MOBFE3;

3 – Composição química completa (Tabela II) e base de dados SSOL4/MOB2.

TCFE8 e SSOL4 são as bases de dados termodinâmicas do Thermo-Calc e MOBFE3 e MOB2 são as bases de dados de mobilidade atômica empregadas pelo DICTRA.

Tabela I. Composição química reduzida (% em massa) do aço em estudo.

Cr	Ni	Mo	N	Fe
25,17	6,88	3,61	0,25	Bal.

Tabela II. Composição química completa (% em massa) do aço em estudo.

Cr	Ni	Mo	N	C	W	Fe
25,17	6,88	3,61	0,25	0,01	0,69	Bal.

Na composição química reduzida utilizaram-se somente os principais elementos de interesse e na composição química completa excluiu-se o Cu e o Si, pois sua presença impossibilita a simulação com as bases de dados utilizadas.

## 3. Resultados e Discussões

Através da simulação de equilíbrio de fases do Thermo-Calc, foram obtidas as temperaturas de solubilização onde coexistem simultaneamente 50% de ferrita e 50% de austenita para os três modelos, sendo estas: 1084 °C para o modelo 1, 1115 °C para o modelo 2 e 1064 °C para o modelo 3.

A fim de avaliar a evolução da fração volumétrica de ferrita durante o aquecimento até a temperatura escolhida de 1250 °C a partir das temperaturas de solubilização acima expostas, obteve-se o gráfico da figura 1 com auxílio do DICTRA, comparando-as em função do tempo de solubilização a 1250 °C.

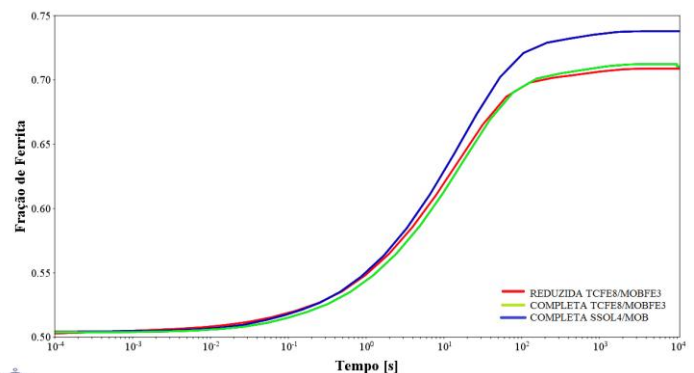


Figura 1 – Comparação da evolução da fração volumétrica de ferrita entre os três modelos.

Percebe-se que a diferença na fração volumétrica de ferrita obtida entre os modelos é desprezível, já que atinge entre 70% e 74% da fase após a estabilização, que se dá entre 100s e 1000s de tratamento.

A comparação entre a simulação computacional e a validação experimental por meio de estereologia quantitativa e ferritoscopia pode ser vista na Figura 2. Nota-se por estereologia quantitativa, que há uma tendência de evolução da ferrita com o aumento do tempo de tratamento térmico, encerrando a transformação de fase após 30 min, por atingir valores

próximos ou superiores a 70%. Ao passo que na análise por ferritoscópio, a fração volumétrica de ferrita obtida não ultrapassou 55%, indicando equilíbrio de composição entre as fases para qualquer tempo de tratamento térmico. Isto mostra a inabilidade do ferritoscópio em descrever o aumento da fração de ferrita esperado pelas simulações de equilíbrio e cinéticas, e mensurado pela estereologia quantitativa.

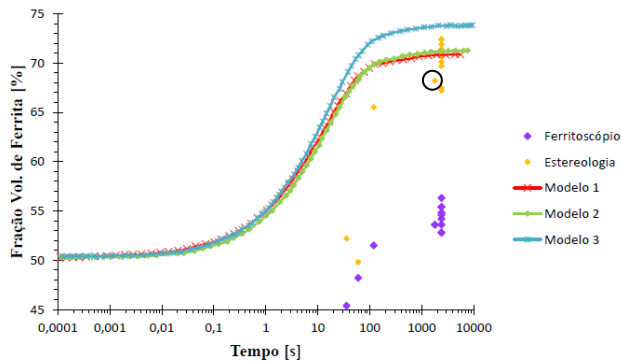


Figura 2 – Comparação da simulação computacional com a validação experimental.

Ainda, as informações anteriormente discutidas são confirmadas pelas micrografias obtidas com ataque químico por Behara modificado, que descrevem nitidamente as frações das fases e tamanhos de grãos, vide exemplo da Figura 3, para a amostra circulada na Figura 2, tratada termicamente por 1800 s, na qual há maior fração volumétrica de ferrita (cor escura) em relação à austenita (cor clara).

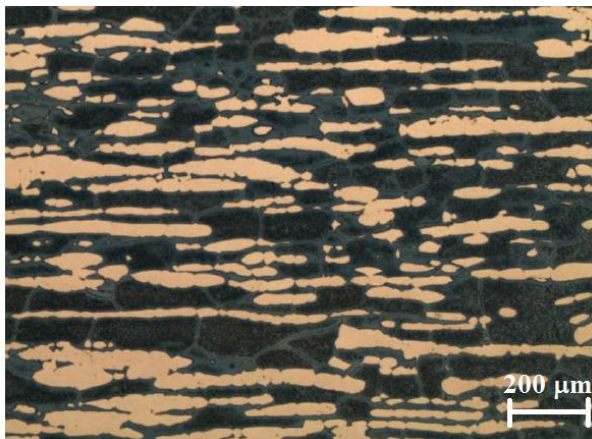


Figura 3 – Micrografia da amostra tratada a 1250 °C por 1800 s, 100x de aumento.

Nota-se que os valores obtidos por ambos os métodos apresentam diferenças expressivas entre si e com a simulação computacional. Por conta disso, uma nova simulação foi proposta, com a finalidade de aproximar-se dos resultados reais obtidos em laboratório, através de alteração da geometria do modelo para esférica.

Comparando-se os resultados dos três modelos de simulações entre si, percebe-se que as diferenças são mínimas mesmo alterando-se a composição química e as bases de dados, de modo que para simular, basta

considerar os principais elementos (para o AISD em questão, Fe, Cr, Ni, Mo, N), economizando tempo de simulação, conforme pode ser visto na Figura 4, comparando o modelo planar e geométrico apenas para o modelo 1 de simulação.

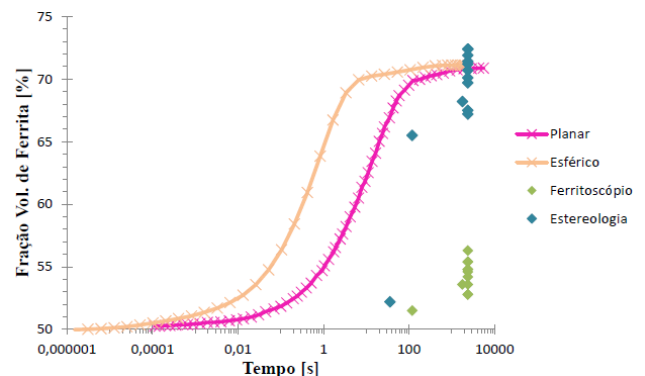


Figura 4 – Comparação da simulação computacional entre os modelos geométricos planar e esférico com a validação experimental.

Nenhum dos dois modelos geométricos de simulação computacional descreve os resultados experimentais obtidos, exceto após 1800 s quando se atinge o equilíbrio entre as fases. Porém, o modelo planar é o que mais se aproxima dos resultados reais, devendo ser o escolhido para fazer-se o modelamento.

#### 4. Conclusões

A validação da fração volumétrica de ferrita em função da temperatura mostrou que até 1800 s há considerável aumento de ferrita, até que em 2400 s ocorre reequilíbrio das fases, confirmado pelas micrografias obtidas para cada tempo.

Por meio dos resultados obtidos por estereologia quantitativa e ferritoscopia, conclui-se que a simulação computacional de geometrias planar e esférica não descrevem os resultados obtidos em laboratório da quantificação da porcentagem de ferrita, sendo necessários outros estudos para melhorar a resposta da simulação às observações experimentais ou então utilizar o modelo planar como aproximação.

#### 5. Referências

- [1] Nilsson, J. O. Superduplex Stainless Steel, 1992.
- [2] Solomon, H. D. Corrosion, 1982.

#### Agradecimentos

Ao Centro Universitário FEI pela bolsa-auxílio PBIC 058-17 concedida para o desenvolvimento deste trabalho e ao Prof. Dr. Rodrigo Magnabosco pela confiança e orientação. Aluna de IC – FEI.