

# SIMULAÇÃO COMPUTACIONAL DA FORMAÇÃO DE FASE SIGMA EM AÇOS INOXIDÁVEIS DÚPLEX

Giovani Della Rosa Chbane, Rodrigo Magnabosco

Engenharia Mecânica, Centro Universitário FEI

giovaniidrc@gmail.com, rodrmagm@gmail.com

**Resumo:** Este projeto objetiva simular a formação de fase sigma ( $\sigma$ ) no aço UNS S31803 através de simulações computacionais e comparar os resultados obtidos com aqueles descobertos experimentalmente por Magnabosco (2009). Os volumes de controle escolhidos foram planar e esférico, chegando-se a conclusão de que o modelo esférico com sigma ativa entre as duas fases preponderantes existentes (ferrita  $\alpha$  e austenita  $\gamma$ ) com  $\gamma$  no centro e  $\alpha$  na “casca” é aquele que melhor corresponde à cinética de formação de sigma.

## 1. Introdução

Um aço inoxidável do tipo dúplex, como é o caso do UNS S31803, desempenha funções nas quais são precisas resistências mecânica e a corrosão consideráveis. Contudo, em diversos processos fabris, como a soldagem entre 700 e 900°C, ocorre a formação de fase sigma, que, por ser frágil e empobrecer as fases adjacentes em cromo (MAGNABOSCO, 2009), comprometendo as qualidades do material.

Sigma é rica em cromo e molibdênio e se forma primordialmente nos contornos de grão de  $\alpha/\alpha$  e  $\alpha/\gamma$ , regiões de alta energia livre de Gibbs (NILSSON, 1992).

Há uma tendência de sigma se formar primeiro em regiões ferríticas e depois em regiões austeníticas devido a diferente capacidade de difusão destes elementos substitucionais (Cr e Mo) nas fases. Isso ocorre, pois, a matriz cristalográfica da  $\alpha$  (Cúbica de Corpo Centrado com 8 átomos vizinhos) é menos compacta do que a da  $\gamma$  (Cúbica de Face Centrada com 12 átomos vizinhos) (SANTOS, 2010).

A cinética de formação de  $\sigma$  pode ser descrita pela equação de Jonhson-Mehl-Avrami-Kolmogorov (JMAK) (1) e (2), onde  $n$  é o expoente de Avrami, que com valores entre 0,5 a 2,5, é assumido crescimento controlado por difusão e entre 1 a 4 é assumido como controlado por transformações de interface,  $t$  é o tempo de transformação,  $f$  é a fração de fase formada ( $0 \leq f \leq 1$ ),  $k$  depende da taxa de nucleação de crescimento de grão,  $T$  é a temperatura absoluta,  $k_0$  é a constante pré-exponencial,  $Q_\sigma$  é a energia de ativação de sigma e  $R$  é a constante universal dos gases (8314 J/mol.K) (MELO E.A.; MAGNABOSCO R, 2007; MAGNABOSCO, 2009).

$$f = 1 - e^{(-k \cdot t^n)} \quad (1)$$

$$k = k_0 \cdot \exp\left(\frac{-Q_\sigma}{R \cdot T}\right) \quad (2)$$

O trabalho de Magnabosco (2009) é tomado como base nesta pesquisa, pois nele foi prevista experimentalmente sigma para uma faixa de temperaturas de 700 a 900°C (conforme mostra a equação 3) e tais dados foram comparados com o modelo matemático de Avrami, desta maneira, essa comparação foi tomada como meta para as simulações realizadas.

$$f = 1 - e^{-1,6 \cdot 10^9 \cdot t^{0,915} e^{\left(\frac{-18510^3}{8,31T}\right)}} \quad (3)$$

## 2. Metodologia

O software escolhido para desempenhar a tarefa de simular sigma na faixa de temperaturas de 700 a 900°C foi Thermo-Calc com a base de dados TCFE8: Steels/Fe-Alloys v8.1 e Diffusion Module (DICTRA) com base de dados MOBFE3: Steels/Fe-Alloys Mobility v3.0.

Foram escolhidas duas geometrias a serem testadas, a planar, onde a difusão ocorre somente em uma única direção e a esférica, onde a mesma ocorre na direção do raio. Manteve-se a fração mássica, descrita por Magnabosco (2009), de ferrita e austenita antes de sigma se formar, de respectivamente 0,409 e 0,591, sendo modificados os comprimentos dessas duas fases. No caso no modelo esférico, a ordem na qual as fases estão dispostas também foi um fator determinante. Em outras palavras, para esse último, simulou-se:  $\alpha$  no centro e  $\gamma$  na “casca”, com  $\sigma$  entre as duas, e  $\gamma$  no centro e  $\alpha$  na “casca”, também com  $\sigma$  entre as duas.

Além de tais mudanças entre as simulações, sigma foi tomada tanto como ativa como inativa no volume de controle, o que significa que quando ativa, ela foi considerada desprezível, porém já existente antes do tratamento térmico, e quando inativa, foi considerada como inexistente, porém possível de surgir durante o tratamento através da interface ferrítica, que é a fase que melhor “auxilia” na formação de sigma.

## 3. Resultados e Discussões

Os modelos planares testados, como o da Figura 1, resultaram em praticamente nenhuma

aderência aos resultados retratados por Magnabosco (2009). Já o modelo radial retratou a importância de ressaltar que o dúplex UNS S31803 é uma matriz ferrítica com linhas de austenita, ou seja, para que isso fosse adotado como correto, o modelo computacional esférico deveria ser com austenita no centro, ferrita na “casca” e sigma entre as duas, como mostra a Figura 2.

De fato, essa teoria foi confirmada. Os resultados de maior aderência ocorreram sob essas condições, com tratamento térmico sendo previsto por até 7h (das 1032h estudadas). Isso pode ser visto na Figura 3, que retrata o caso de 700°C, sendo o que os modelos geométricos usados nessa situação são os mesmos descritos pelas Figuras 1 e 2.

Outro fator de grande importância a se considerar, é que quando Magnabosco (2009) realizou seus experimentos, foi escolhida a Microscopia Óptica (M.O.) ao invés do Microscópio Eletrônico de Varredura (M.E.V.) como método de análise, sendo assim, com base no trabalho de Paschoal, Roman e Magnabosco (2015), se M.E.V. tivesse sido escolhido, provavelmente os resultados obtidos pelo DICTRA teriam sido mais condizentes com os experimentais.

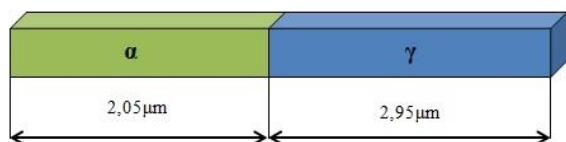


Figura 1. Modelo planar testado nesta pesquisa.

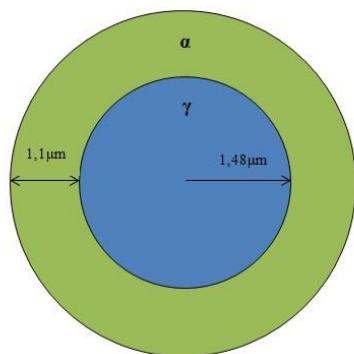


Figura 2. Modelo esférico de melhor resultado testado.

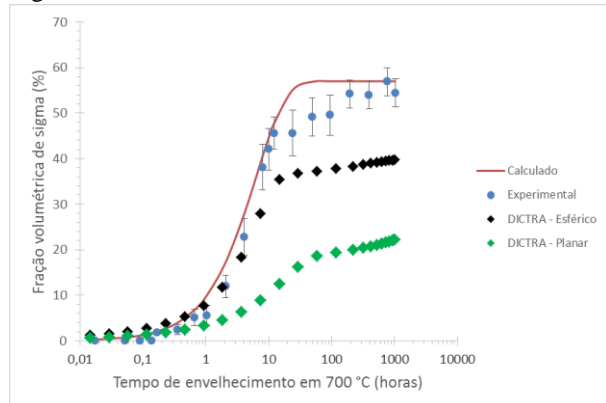


Figura 3. Comparação a 700°C entre o modelo esférico (γ no centro com 1,48μm, α na “casca” com 1,1μm e σ

ativa, porém desprezível, entre ambas com 0,01μm) – “DICTRA - Esférico”, o modelo planar (α com 2,05μm e γ com 2,95μm) – “DICTRA - Planar”, os dados obtidos Magnabosco (2009) – “Experimental” e o modelo matemático de JMAK – “Calculado”.

#### 4. Conclusões

Esta pesquisa mostrou que o modelo planar de difusão não é a melhor forma para simular a formação de fase σ no envelhecimento de aços inoxidáveis dúplex, sendo mais bem retratado pelo modelo radial, com γ no centro da esfera, α na “casca” e σ ativa entre elas com espessura desprezível, descrevendo uma matriz ferrítica com ilhas de austenita.

#### 5. Referências

MAGNABOSCO R. Kinetics of Sigma Phase Formation In a Duplex Stainless Steel. **Materials Research**, v. 12, n. 3, p. 321-327, Jan. 2009.

NILSSON JO. Super Duplex Stainless Steel. **Materials Science and Technology**. v. 8, p. 686, Mai. 1992.

SANTOS D. Estudo da Formação de Sigma e sua Influência no Potencial de Pite em Solução 0,6M Cloreto de Sódio do aço UNS S31803 envelhecido a 850 e 900°C. 250 f. Dissertação de Mestrado (Mestrado em Engenharia Mecânica). Centro Universitário FEI. São Bernardo do Campo. 2010.

MELO EA; MAGNABOSCO R. Influence of the Heterogeneous Nucleation Sites on the Kinetics of Intermetallic Phase Formation in Aged Duplex Stainless Steel. **Metallurgical and Materials Transactions: A Physical Metallurgy and Materials Science**. São Bernardo do Campo, v. 48, n. 1. p. 1-14. 5 de Set. 2007.

PASCHOAL M B; ROMANA R; MAGNABOSCO R. QUANTIFICAÇÃO DE FASES INTERMETÁLICAS EM AÇO INOXIDÁVEL SUPERDÚPLEX POR ESTEREOLOGIA QUANTITATIVA – EFEITO DE DIFERENTES FONTES DE IMAGENS. **Tecnol. Metal. Mater. Miner**, São Paulo, v. 12, n. 4, p. 310-317, out./dez. 2015.

#### Agradecimentos

Ao Centro Universitário FEI pelos equipamentos utilizados e a Rodrigo Magnabosco, pela orientação e conselhos.