

DRIAGRAMA TTP DE FORMAÇÃO DE Cr_{23}C_6 NO AÇO INOXIDÁVEL DO TIPO 316 USANDO DICTRA[®]

Lucas Orquiza José, Rodrigo Magnabosco
Centro Universitário FEI
lucasorquiza@hotmail.com, rodrmag@fei.edu.br

Resumo: O objetivo deste trabalho é criar o digrama Tempo-Temperatura-Precipitação (TTP) dos carbonetos de cromo do tipo M_{23}C_6 no aço inoxidável austenítico 316 (UNS S31600) utilizando o Software DICTRA[®]. O software Thermo-Calc foi utilizado para a determinação de diferentes diagramas de equilíbrio para várias composições da liga. Posteriormente no DICTRA[®] foram feitas as simulações de difusão da fase M_{23}C_6 na austenita. Por fim as simulações foram validadas através de comparações com diagramas encontrados na literatura.

1. Introdução

São denominados aços inoxidáveis aqueles que possuem no mínimo 11% em massa de Cromo, sendo agente responsável pela película passiva que proporciona resistência a corrosão em diversos meios [1]. O aço inoxidável austenítico 316 é requisitado em situações que demandem alta resistência mecânica e a diversos tipos de corrosão, tendo assim aplicações na indústria marítima, química e de geração de energia [2,3].

Diversos processos de fabricação e condições de trabalho podem vir a fornecer energia em forma de calor para o material, gerando o fenômeno de sensitização do aço inoxidável, que se trata da formação do precipitado do tipo M_{23}C_6 nos contornos de grão, deixando o material sujeito a sofrer corrosão intergranular. O diagrama Tempo-Temperatura-Precipitação (TTP) deste carboneto tem como objetivo não só entender o comportamento do material, como também fornecer dados para que estes processos sejam feitos em condições a se evitar a formação do precipitado indesejado [3; 4].

A construção do diagrama TTP de forma experimental muitas vezes se torna inviável devido ao seu custo e tempo de execução. Portanto, o presente projeto tem o objetivo criar o diagrama TTP do carboneto de cromo do tipo M_{23}C_6 para o aço inoxidável austenítico 316 (UNS S31600) em suas faixas de composições, fazendo uso da simulação computacional da cinética de formação pelo software DICTRA[®], e por fim, confrontar os resultados das simulações com a literatura disponível.

2. Metodologia

Thermo-Calc é um software desenvolvido para cálculos termodinâmicos, especializados para ciência dos materiais. Possui diversas bases de cálculos termodinâmicos para atender a simulações de diversos tipos de materiais [5]. Utilizando a versão 2019a do software com a base de dados TCFE8 foram simuladas 26 variações na composição que partiram de três ligas base que são: Composição mínima, média e máxima permitida pela norma. Dentro destas ligas base foram

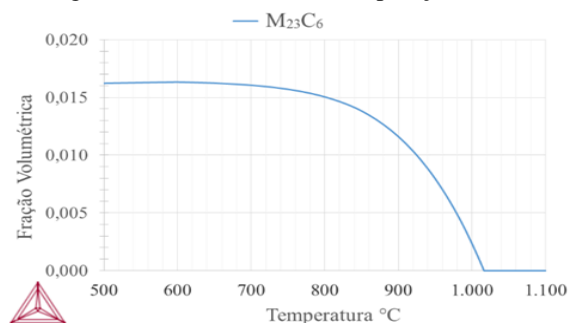
feitas variações dos elementos com o intuito de analisar a influência dos elementos no equilíbrio da liga, nas fases formadas, na quantidade e composição destas.

Posteriormente no DICTRA[®] foram utilizadas as bases de dados TCFE9 e MOBFE4 para simular a composição química Fe – 17%Cr – 12%Ni – 2,5%Mo – 2%Mn – 1%Si – 0,08%C [3], construindo assim o diagrama TTP da liga com composição média do aço inoxidável AISI 316. No diagrama foram representadas as curvas de porcentagem de formação da fase M_{23}C_6 de 10%, 15%, 20% e 30% em relação à máxima fração volumétrica determinada em suas simulações de equilíbrio. Com intuito de validar as simulações, os diagramas gerados foram comparados a literatura existente tendo como parâmetros a correspondência de pontos, levando em conta a resolução dos diagramas usados para comparação, e o comportamento característico dos diagramas desta liga, verificando assim a viabilidade do software na construção destes diagramas.

3. Resultados e Discussão

Para determinar o comportamento das fases em equilíbrio formadas no UNS S31600 foram gerados no Thermo-Calc gráficos da fração em massa em função da temperatura, de diversas composições, como a liga média, mostrado na Fig.1.

Figura 1 – Diagrama de equilíbrio da fase M_{23}C_6 para a liga UNS S31600 em sua composição média.



Fonte: Autor.

Dentre todas as variações feitas foi possível reafirmar a literatura com relação a influência de certos elementos na formação das fases da liga, como o níquel, que é um elemento estabilizador da fase austenita, logo, quanto maior sua quantidade, maior a faixa de temperatura de equilíbrio da fase austenita [3]. Com relação a fase M_{23}C_6 , que manteve sua composição química sem alterações por ser um composto estequiométrico, obteve-se a informação da fração volumétrica formada para cada composição de liga, informação de grande relevância [1].

Utilizando o software DICTRA[®] na simulação do processo de difusão na liga estudada para a formação e crescimento da fase $M_{23}C_6$, foi utilizado o modelo geométrico linear com difusão unidirecional e interface plana, onde o carboneto de Cromo nucleia na lateral esquerda da região da austenita. Em cada simulação foram obtidos gráficos da fração volumétrica da fase, em função do tempo para uma dada temperatura, como mostrado na Fig.2. Nestas simulações foram coletados os tempos para a formação de 10, 15, 20 e 30% com relação ao total de $M_{23}C_6$ formado nas simulações de equilíbrio do Thermo-Calc, e assim construindo o diagrama TTP da liga UNS S31600, mostrado na Fig.3.

Figura 2 – Fração de carboneto $M_{23}C_6$ em função do tempo de tratamento isotérmico a 700°C.

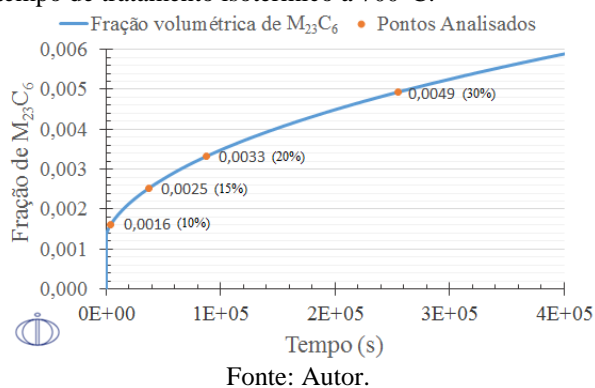
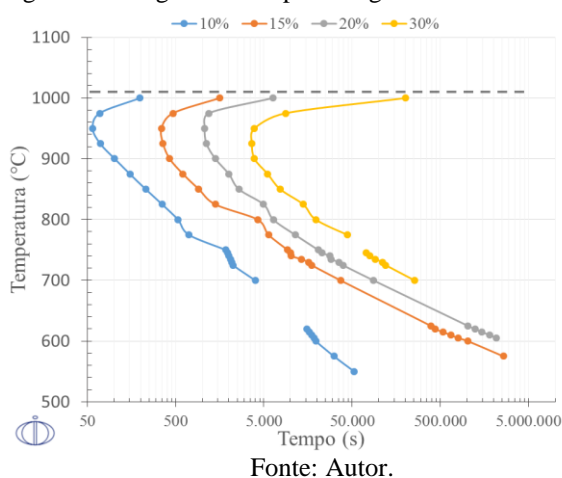


Figura 3 – Diagrama TTP para a liga UNS S31600.



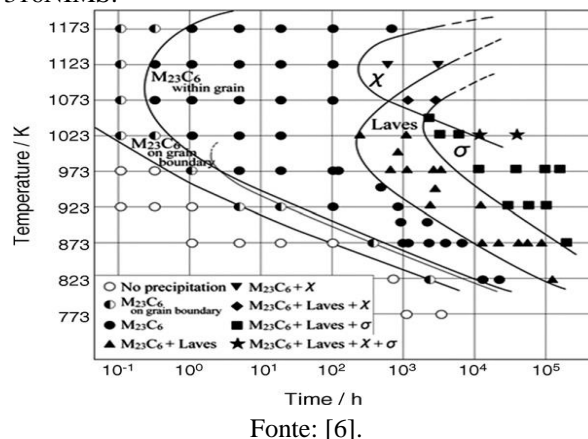
No diagrama TTP pode ser observado entre as temperaturas 625°C e 700°C uma área de descontinuidade dos pontos obtidos, isto se deve a erros do software, que não conseguiu concluir a simulação nesta faixa de temperaturas, mesmo com a atualização do software da versão A, referente ao primeiro semestre do ano, para a versão B, referente ao segundo semestre.

O comportamento da curva, formando um característico “C” fica claramente demarcado nas curvas de 10, 15, 20 e 30% na Fig.3, além do formato, é possível avaliar o aumento do tempo para formação em cada temperatura, demonstrando assim coerência com a literatura. Na Fig.4 é apresentado um diagrama TTP para o Aço Inoxidável 316, que foi obtido experimentalmente, e que traz informações não só da

fase $M_{23}C_6$ como de outras fases formadas no equilíbrio. Neste a fase $M_{23}C_6$ foi classificada entre a precipitada no contorno de grão, e a fase dentro do grão da matriz, sendo assim uma forma mais simplória de indicar o desenvolvimento dos precipitados formados.

Fazendo uso da resolução do gráfico da Fig.4, é possível correlacionar os pontos experimentais com os resultados obtidos na simulação do DICTRA[®], Fig.3, que mostram uma proximidade, porém, carecem de precisão devido ao fato de que os dados experimentais não informam com exatidão a quantidade formada do precipitado.

Figura 4 – Diagrama TTP Experimental da liga 316NIMS.



4. Conclusões

O fato de que o software não foi capaz de concluir as simulações em um dado intervalo de temperaturas não surtiu grande efeito no panorama geral do estudo, sendo possível seguir a tendência da curva, dando assim uma estimativa dos resultados não obtidos. Através dos resultados obtidos nas simulações utilizando o Thermo-Calc e o DICTRA[®], comparados tanto com dados experimentais, quanto com dados obtidos na literatura, tornando possível concluir que o método de simulação é uma ferramenta viável para o estudo de fenômenos gerados por difusão.

5. Referências

- [1] O'BRIEN; ANNETTE; GUZMAN; CARLOS. Welding Handbook. Miami: AWS 2011.
- [2] J. K. L. LAI. A Study of Precipitation in AISI Type 316 Stainless Steel. **Materials Science and Engineering**: Gt. Britain, Sep. 1982. p. 195-208.
- [3] SEDRIKS, A. John. Corrosion of stainless steels. 2. ed. New York: Wiley-Interscience, 1996.
- [4] MC GUIRE, MICHAEL F. Stainless Steels for Design Engineers. Ohio: ASM, 2008.
- [5] Thermo-Calc Software 2019. Disponível em: <<https://www.thermocalc.com/>>. Acesso em: 29 de Ago. 2019.
- [6] Metallic Materials Microstructure Database. National Institute for Materials Science (NIMS), Japão. Em: <<http://mits.nims.go.jp>>.

Agradecimentos

Ao Centro Universitário FEI pela infraestrutura oferecida, licença do software e bolsa de Iniciação científica.

¹ Aluno de IC do Centro Universitário FEI. Projeto com vigência de 10/2018 a 10/19.