

CENTRO UNIVERSITÁRIO FEI  
GIOVANI DELLA ROSA CHBANE

SIMULAÇÃO COMPUTACIONAL DA FORMAÇÃO DE FASE SIGMA EM AÇOS  
INOXIDÁVEIS DÚPLEX

São Paulo

2018

SIMULAÇÃO COMPUTACIONAL DA FORMAÇÃO DE FASE SIGMA EM AÇOS  
INOXIDÁVEIS DÚPLEX

Relatório Final de Iniciação Científica  
apresentado ao Centro Universitário FEI, como  
parte dos requisitos do Programa PIBIC-FEI,  
orientado pelo Prof. Dr. Rodrigo Magnabosco.

São Paulo

2018

## RESUMO

Em um aço inoxidável dúplex do tipo UNS S31803 as fases preponderantes após tratamento térmico de solubilização e resfriamento rápido são ferrita e austenita, gerando uma matriz ferrítica com ilhas de austenita. Porém, para certa faixa de temperaturas usual em diversos processos fabris, como a soldagem, ocorre a formação de fases deletárias, sendo que a de maior influência é a fase sigma, que resulta em perda de resistência a corrosão e variações em propriedades mecânicas do material, tornando-o mais frágil. Dessa forma, a presente pesquisa toma como objeto de estudo um trabalho desde grupo de pesquisa que experimentalmente determinou a fração volumétrica de sigma em função do tempo de envelhecimento num aço inoxidável dúplex, e comparou-o com os resultados aqui simulados através do software DICTRA para os modelos geométricos planar e esférico com diversas dimensões de ferrita e austenita. Conclui-se deste trabalho que o modelo de simulação que melhor descreve a formação de fase  $\sigma$  é o esférico com  $\gamma$  no centro,  $\alpha$  na “casca” e  $\sigma$  ativa entre estas fases com espessura desprezível.

## LISTA DE FIGURAS

Figura 1 - Fração volumétrica de sigma calculada e experimental em função do tempo de envelhecimento em 700 °C (MAGNABOSCO, 2009).....	12
Figura 2 - Fração volumétrica de sigma calculada e experimental em função do tempo de envelhecimento em 750 °C (MAGNABOSCO, 2009).....	13
Figura 3 - Fração volumétrica de sigma calculada e experimental em função do tempo de envelhecimento em 800 °C (MAGNABOSCO, 2009).....	13
Figura 4 - Fração volumétrica de sigma calculada e experimental em função do tempo de envelhecimento em 850 °C (MAGNABOSCO, 2009).....	14
Figura 5 - Fração volumétrica de sigma calculada e experimental em função do tempo de envelhecimento em 900 °C (MAGNABOSCO, 2009).....	14
Figura 6 - Modelos lineares (a) e (b) usados no estudo de Morais e Magnabosco (2017).....	15
Figura 7 - Fração volumétrica de sigma (volume fraction of sigma) depois de diferentes tempos de envelhecimento em 940°C (aging time at 940°C), simulado pelo DICTRA e obtido experimentalmente (experimental) (MORAIS; MAGNABOSCO, 2017).....	16
Figura 8 - Exemplo de modelo de cálculo com difusão linear para três diferentes situações. (MAGNABOSCO 2015).....	16
Figura 9 - Fração volumétrica de sigma (volume fraction of sigma) após diferentes tempos de envelhecimento em 950°C (aging time at 950°C) simulado pelo DICTRA usando as bases de dados TCFE6 e MOB2 para os três modelos estudados (MAGNABOSCO, 2015).....	17
Figura 10 - Primeiro modelo testado nesta pesquisa.....	20
Figura 11 - Segundo modelo testado nesta pesquisa.....	21
Figura 12 - Terceiro modelo testado nesta pesquisa.....	21
Figura 13 - Quarto modelo testado nesta pesquisa.....	21
Figura 14 - Quinto modelo testado nesta pesquisa.....	22

Figura 15 - Sexto modelo testado nesta pesquisa.....	22
Figura 16 - Descrição das fases: ferrita (BCC_A2), austenita (FCC_A1), gás (GAS), líquido (LIQUID), sigma (SIGMA), $Cr_2N$ (HCP_A3#2) e chi (CHI_A12).....	23
Figura 17 - Fração volumétrica de sigma pelo DICTRA num modelo linear de difusão, calculada e experimental em função do tempo de envelhecimento em 700 °C (2,05µm de $\alpha$ e 2,95µm de $\gamma$ ).....	27
Figura 18 - Fração volumétrica de sigma pelo DICTRA num modelo linear de difusão, calculada e experimental em função do tempo de envelhecimento em 750 °C (2,05µm de $\alpha$ e 2,95µm de $\gamma$ ).....	27
Figura 19 - Fração volumétrica de sigma pelo DICTRA num modelo linear de difusão, calculada e experimental em função do tempo de envelhecimento em 800 °C (2,05µm de $\alpha$ e 2,95µm de $\gamma$ ).....	28
Figura 20 - Fração volumétrica de sigma pelo DICTRA num modelo linear de difusão, calculada e experimental em função do tempo de envelhecimento em 850 °C (2,05µm de $\alpha$ e 2,95µm de $\gamma$ ).....	28
Figura 21 - Fração volumétrica de sigma pelo DICTRA num modelo linear de difusão, calculada e experimental em função do tempo de envelhecimento em 900 °C (2,05µm de $\alpha$ e 2,95µm de $\gamma$ ).....	29
Figura 22 - Fração volumétrica de austenita em função do tempo de envelhecimento em 700°C (2,05µm de $\alpha$ e 2,95µm de $\gamma$ ) no modelo linear de difusão.....	29
Figura 23 - Fração volumétrica de austenita em função do tempo de envelhecimento em 750 °C (2,05µm de $\alpha$ e 2,95µm de $\gamma$ ) no modelo linear de difusão.....	30
Figura 24 - Fração volumétrica de austenita em função do tempo de envelhecimento em 800 °C (2,05µm de $\alpha$ e 2,95µm de $\gamma$ ) no modelo linear de difusão.....	30
Figura 25 - Fração volumétrica de austenita em função do tempo de envelhecimento em 850 °C (2,05µm de $\alpha$ e 2,95µm de $\gamma$ ) no modelo linear de difusão.....	31
Figura 26 - Fração volumétrica de austenita em função do tempo de envelhecimento em 900 °C (2,05µm de $\alpha$ e 2,95µm de $\gamma$ ) no modelo linear de difusão.....	31
Figura 27 - Fração volumétrica de ferrita em função do tempo de envelhecimento em 700 °C (2,05µm de $\alpha$ e 2,95µm de $\gamma$ ) no modelo linear de difusão.....	32
Figura 28 - Fração volumétrica de ferrita em função do tempo de envelhecimento em 750°C (2,05µm de $\alpha$ e 2,95µm de $\gamma$ ) no modelo linear de difusão.....	32

Figura 29 - Fração volumétrica de ferrita em função do tempo de envelhecimento em 800°C (2,05µm de $\alpha$ e 2,95µm de $\gamma$ ) no modelo linear de difusão.....	32
Figura 30 - Fração volumétrica de ferrita em função do tempo de envelhecimento em 850°C (2,05µm de $\alpha$ e 2,95µm de $\gamma$ ) no modelo linear de difusão.....	33
Figura 31 - Fração volumétrica de ferrita em função do tempo de envelhecimento em 900°C (2,05µm de $\alpha$ e 2,95µm de $\gamma$ ) no modelo linear de difusão.....	33
Figura 32 - Fração volumétrica sigma em função do tempo de envelhecimento a 800°C para um comprimento de ferrita de 5µm e austenita com 1,73µm no modelo esférico de difusão.	
Figura 33 - Posições de interfaces em função do tempo para 800°C com comprimento de ferrita de 5µm e austenita com 1,73µm no modelo esférico de difusão.....	35
Figura 34 - Fração volumétrica sigma em função do tempo de envelhecimento a 800°C para um comprimento de ferrita de 10µm e austenita com 3,47µm no modelo esférico de difusão.....	36
Figura 35 - Posições de interfaces em função do tempo para 800°C com comprimento de ferrita de 10µm e austenita com 3,47µm no modelo esférico de difusão.....	36
Figura 36 - Comparação entre o modelo de difusão linear com o esférico (ferrita com 5µm de comprimento no centro do volume de controle) utilizando o software DICTRA, e dados experimentais obtidos por Magnabosco em 2009.....	37
Figura 37 - Comparação entre o modelo de difusão linear com o esférico (ferrita com 10µm de comprimento no centro do volume de controle) utilizando o software DICTRA, e dados experimentais obtidos por Magnabosco em 2009.....	37
Figura 38 - Fração volumétrica de sigma pelo DICTRA num modelo linear de difusão, calculada e experimental em função do tempo de envelhecimento em 700 °C (1,025µm de $\alpha$ e 1,475µm de $\gamma$ ).....	39
Figura 39 - Fração volumétrica de sigma pelo DICTRA num modelo linear de difusão, calculada e experimental em função do tempo de envelhecimento em 750 °C (1,025µm de $\alpha$ e 1,475µm de $\gamma$ ).....	39
Figura 40 - Fração volumétrica de sigma pelo DICTRA num modelo linear de difusão, calculada e experimental em função do tempo de envelhecimento em 800 °C (1,025µm de $\alpha$ e 1,475µm de $\gamma$ ).....	40
Figura 41 - Fração volumétrica de sigma pelo DICTRA num modelo linear de difusão, calculada e experimental em função do tempo de envelhecimento em 850 °C (1,025µm de $\alpha$ e 1,475µm de $\gamma$ ).....	40

Figura 42 - Fração volumétrica de sigma pelo DICTRA num modelo linear de difusão, calculada e experimental em função do tempo de envelhecimento em 900 °C (1,025µm de $\alpha$ e 1,475µm de $\gamma$ ).....	41
Figura 43 - Comparação entre a 1ª tentativa usando o modelo planar (2,05µm de $\alpha$ e 2,95µm de $\gamma$ ) e a 2ª tentativa (1,025µm de $\alpha$ e 1,475µm de $\gamma$ ) a 700°C.....	41
Figura 44 - Comparação entre a 1ª tentativa usando o modelo planar (2,05µm de $\alpha$ e 2,95µm de $\gamma$ ) e a 2ª tentativa (1,025µm de $\alpha$ e 1,475µm de $\gamma$ ) a 850°C.....	42
Figura 45 - Fração volumétrica sigma em função do tempo de envelhecimento a 700°C para um comprimento de ferrita de 1,025µm e austenita com 1,4µm no modelo esférico de difusão.....	43
Figura 46 - Fração volumétrica sigma em função do tempo de envelhecimento a 750°C para um comprimento de ferrita de 1,025µm e austenita com 1,4µm no modelo esférico de difusão.....	43
Figura 47 - Fração volumétrica sigma em função do tempo de envelhecimento a 800°C para um comprimento de ferrita de 1,025µm e austenita com 1,4µm no modelo esférico de difusão.....	44
Figura 48 - Fração volumétrica sigma em função do tempo de envelhecimento a 850°C para um comprimento de ferrita de 1,025µm e austenita com 1,4µm no modelo esférico de difusão.....	44
Figura 49 - Fração volumétrica sigma em função do tempo de envelhecimento a 900°C para um comprimento de ferrita de 1,025µm e austenita com 1,4µm no modelo esférico de difusão.....	45
Figura 50 - Fração volumétrica sigma em função do tempo de envelhecimento a 700°C para um comprimento de ferrita de 1,1µm e austenita com 1,475µm no modelo esférico de difusão.....	47
Figura 51 - Fração volumétrica sigma em função do tempo de envelhecimento a 750°C para um comprimento de ferrita de 1,1µm e austenita com 1,475µm no modelo esférico de difusão.....	47
Figura 52 - Fração volumétrica sigma em função do tempo de envelhecimento a 800°C para um comprimento de ferrita de 1,1µm e austenita com 1,475µm no modelo esférico de difusão.....	48
Figura 53 - Fração volumétrica sigma em função do tempo de envelhecimento a 850°C para um comprimento de ferrita de 1,1µm e austenita com 1,475µm no modelo esférico de difusão.....	48

Figura 54 - Fração volumétrica sigma em função do tempo de envelhecimento a 900°C para um comprimento de ferrita de 1,1µm e austenita com 1,475µm no modelo esférico de difusão.....	49
Figura 55 - Fração volumétrica sigma em função do tempo de envelhecimento a 700°C para um comprimento de ferrita de 1,1µm e austenita com 1,475µm no modelo esférico de difusão com sigma inativa pela ferrita.....	51
Figura 56 - Fração volumétrica sigma em função do tempo de envelhecimento a 700°C para um comprimento de ferrita de 1,1µm e austenita com 1,475µm no modelo esférico de difusão com sigma inativa pela ferrita e pela austenita.....	51
Figura 57 - Fração volumétrica sigma em função do tempo de envelhecimento a 700°C para um comprimento de ferrita de 1,1µm e austenita com 1,475µm no modelo esférico de difusão com sigma inativa pela austenita.....	52
Figura 58 - Fração volumétrica sigma em função do tempo de envelhecimento a 750°C para um comprimento de ferrita de 1,1µm e austenita com 1,475µm no modelo esférico de difusão com sigma inativa pela ferrita.....	53
Figura 59 - Fração volumétrica sigma em função do tempo de envelhecimento a 800°C para um comprimento de ferrita de 1,1µm e austenita com 1,475µm no modelo esférico de difusão com sigma inativa pela ferrita.....	53
Figura 60 - Fração volumétrica sigma em função do tempo de envelhecimento a 850°C para um comprimento de ferrita de 1,1µm e austenita com 1,475µm no modelo esférico de difusão com sigma inativa pela ferrita.....	
Figura 61 - Fração volumétrica sigma em função do tempo de envelhecimento a 900°C para um comprimento de ferrita de 1,1µm e austenita com 1,475µm no modelo esférico de difusão com sigma inativa pela ferrita.....	54
Figura 62 - Comparação a 850°C entre as medições por M.O., M.E.V. de Paschoal, Roman e Magnabosco (2015) e modelo esférico com $\gamma$ (5 e 10µm) no centro, $\alpha$ na “casca” e $\sigma$ inativa pela ferrita.....	55



## LISTA DE TABELAS

Tabela 1. Descrição de todos os modelos testados nesta pesquisa.....	21
Tabela 2. Descrição do equilíbrio de fases para uma faixa de temperaturas de 700°C e 950°C.....	25
Tabela 3. Descrição do equilíbrio de fases para uma faixa de temperaturas de 988 °C a 1200 °C.....	26

## SUMÁRIO

<b>1</b>	<b>INTRODUÇÃO E OBJETIVO.....</b>	<b>11</b>
<b>2</b>	<b>REVISÃO DA LITERATURA.....</b>	<b>12</b>
<b>3</b>	<b>METODOLOGIA.....</b>	<b>19</b>
<b>4</b>	<b>RESULTADOS E DISCUSSÃO.....</b>	<b>25</b>
<b>5</b>	<b>CONCLUSÕES.....</b>	<b>57</b>
<b>6</b>	<b>SUGESTÃO PARA TRABALHOS FUTUROS.....</b>	<b>58</b>
<b>7</b>	<b>REFERÊNCIAS.....</b>	<b>59</b>

## 1 INTRODUÇÃO E OBJETIVO

Aços inoxidáveis são vastamente utilizados quando se deseja resistência à corrosão e boas propriedades mecânicas (LEFFLER, 1990). Tal resistência a corrosão está relacionada com a quantidade de cromo no material, de modo que para um aço ser considerado inoxidável, é preciso ter 12% ou mais de Cr na liga em solução sólida (SOLOMON DEVINE, 1982). No caso do aço dúplex existem duas fases preponderantes em sua microestrutura, sendo elas: cúbica de face centrada (CFC), denotada como austenita ( $\gamma$ ), e a outra, cúbica de corpo centrado (CCC), denotada como ferrita ( $\alpha$ ) (SOLOMON DEVINE, 1982). Porém, conforme a temperatura varia, ocorrem mudanças de fase na liga. Para tratamentos térmicos em uma faixa de 1000°C a 1200°C (solubilização) seguido de têmpera, são geradas quantidades próximas de ferrita e austenita, e assim tem-se a estrutura duplex característica.

Para tratamentos de 700°C a 900°C, ocorre precipitação heterogênea de fase sigma, que é rica em cromo e molibdênio (MAGNABOSCO, 2009). Sigma se torna um problema em aplicações práticas, pois além de ser frágil, também reduz a resistência a corrosão, devido ao empobrecimento em cromo nas fases adjacentes (MAGNABOSCO, 2009). Portanto, o presente projeto tem por objetivo a simulação computacional da cinética de formação de fase sigma num aço inoxidável dúplex utilizando o software DICTRA, verificando se esta é capaz de reproduzir os resultados de envelhecimento de um aço dúplex UNS S31803 entre 700°C e 900°C, previamente obtidos por este grupo de pesquisa.

## 2 REVISÃO DA LITERATURA

Sabe-se que a fase sigma é rica em cromo e molibdênio e se forma nos aços inoxidáveis dúplex (Duplex Stainless Steel – DSS) através de nucleação e crescimento. Sua precipitação ocorre em pontos triplos entre as fases ferrita e austenita e entre os contornos ferrita-ferrita, locais onde se tem alta energia livre de Gibbs (NILSSON, 1992).

Assim, tal formação ocorre de três maneiras: precipitação contínua ou descontínua a partir da ferrita ( $\alpha \rightarrow \sigma + \alpha_2$ ), decomposição eutetóide da ferrita ( $\alpha \rightarrow \sigma + \gamma_2$ ) e formação de sigma a partir da austenita ( $\gamma \rightarrow \sigma + \gamma_2$ ), sendo a mais comum a primeira, na qual a morfologia de sigma na ferrita pode ser lamelar ou maciça (SANTOS; MAGNABOSCO, 2016). A precipitação descontínua da ferrita gera elevada densidade de discordâncias, o que provavelmente pode ser atribuída à expansão volumétrica vinda da transformação de  $\alpha$  em  $\sigma$ , já que  $\sigma$  possui menor empacotamento atômico, por ser tetragonal (MELO, 2015).

Visto que molibdênio e cromo ajudam estabilizar  $\alpha$ , e manganês e níquel ajudam a estabilizar  $\gamma$  assim como carbono e nitrogênio, sigma está intimamente relacionada com o consumo de cromo e molibdênio a partir da ferrita, apesar de também existirem estes elementos na austenita, porém em menor quantidade (SOLOMON DEVINE, 1982).

Tal consumo de cromo e molibdênio presentes na ferrita para formar a fase sigma ( $\sigma$ ) de estrutura cristalina tetragonal de corpo centrado, se deve também à maior capacidade de difusão destes elementos na  $\alpha$ . Estes dois elementos são solutos substitucionais nas fases deste aço, e possuem maior capacidade de difusão na ferrita que é CCC, do que na austenita que é CFC, visto que o número de coordenação ou número de átomos vizinhos da  $\alpha$  é 8 e na  $\gamma$  é 12, ou seja, um elemento substitucional (como Cr e Mo nestas fases) se movimenta com maior facilidade na  $\alpha$  que é menos compacta quando comparada com a  $\gamma$  (SANTOS, 2010).

É plausível utilizar a equação de Jonhson-Mehl-Avrami-Kolmogorov (JMAK) para prever a formação de  $\sigma$  numa faixa de temperaturas entre 700°C a 900°C:

$$f = 1 - e^{(-k.t^n)}, \text{ na qual:}$$

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

onde  $n$  é o expoente de Avrami, que com valores entre 0,5 a 2,5, é assumido crescimento controlado por difusão e de 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 EA; MAGNABOSCO R., 2007; MAGNABOSCO, 2009). Segundo Magnabosco (2009), ao fazer uma comparação entre dados experimentais da fração volumétrica de sigma e os dados calculados pela equação de JMAK, e assumindo que a

formação máxima de sigma se dá quando  $f=1$  chegou-se a conclusão de que os coeficientes de correlação ( $R^2$ ) entre os resultados experimentais e a equação:

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

são próximos de um para as temperaturas entre 700 a 850 °C, o que pode ser visto nas Figuras 1 a 5.

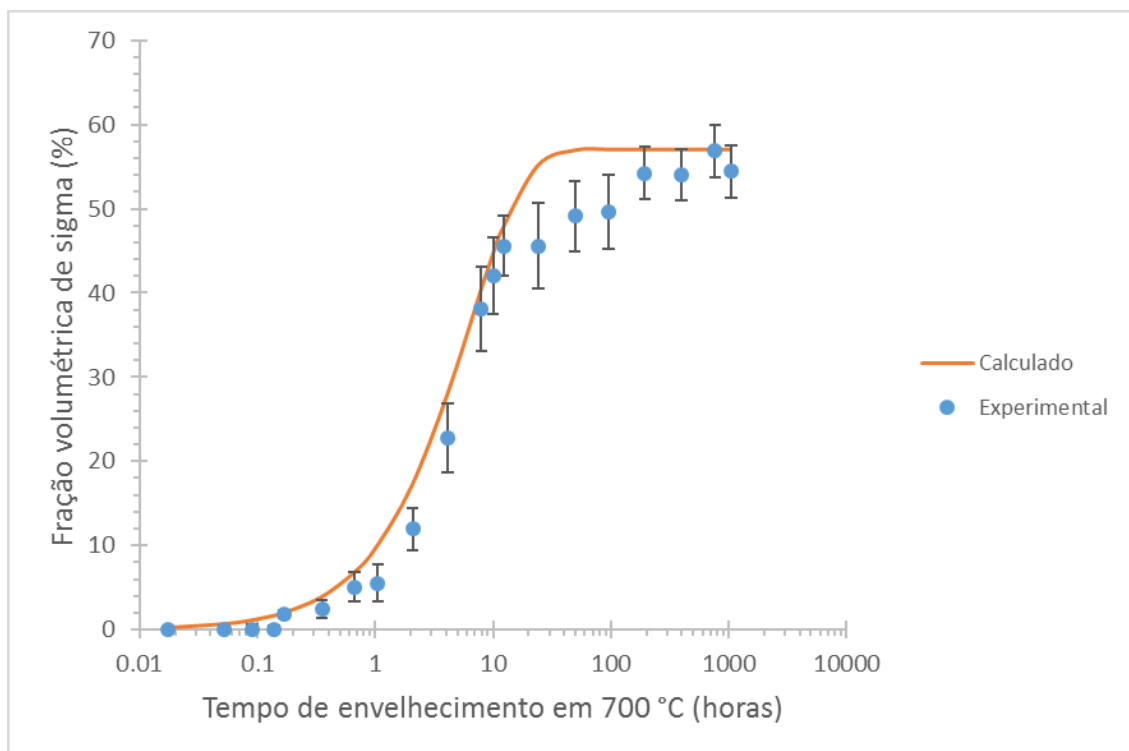


Figura 1. Fração volumétrica de sigma calculada e experimental em função do tempo de envelhecimento em 700 °C (MAGNABOSCO, 2009).

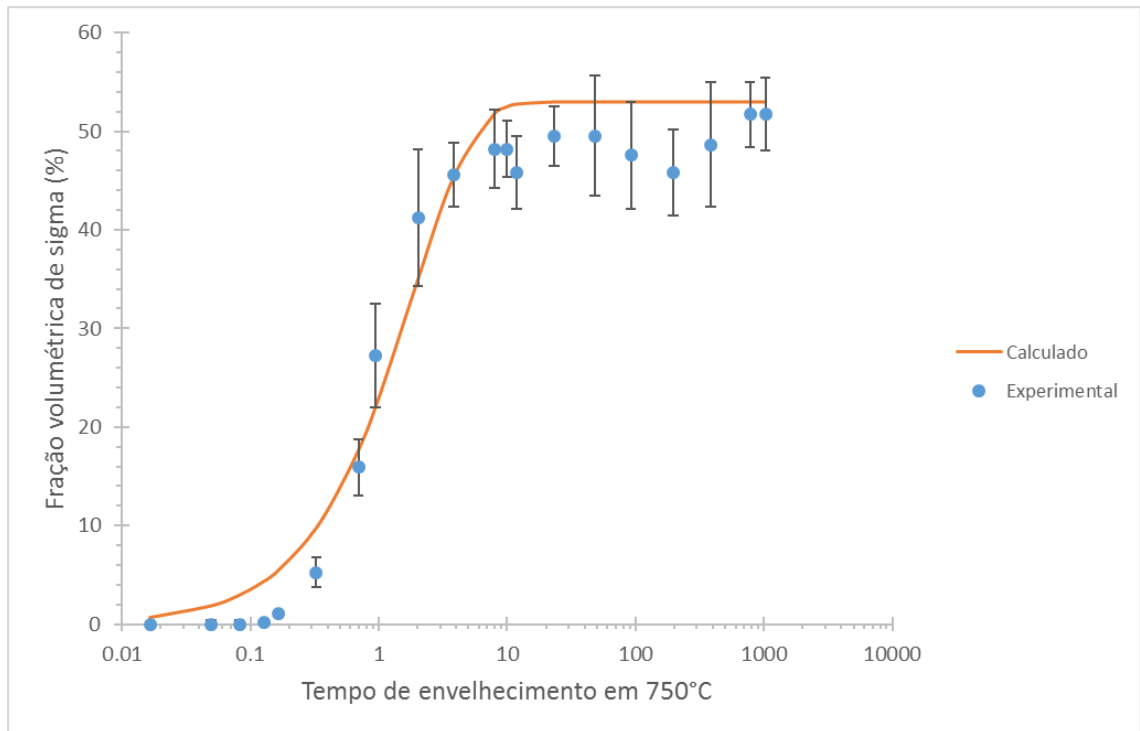


Figura 2. Fração volumétrica de sigma calculada e experimental em função do tempo de envelhecimento em 750 °C (MAGNABOSCO, 2009).

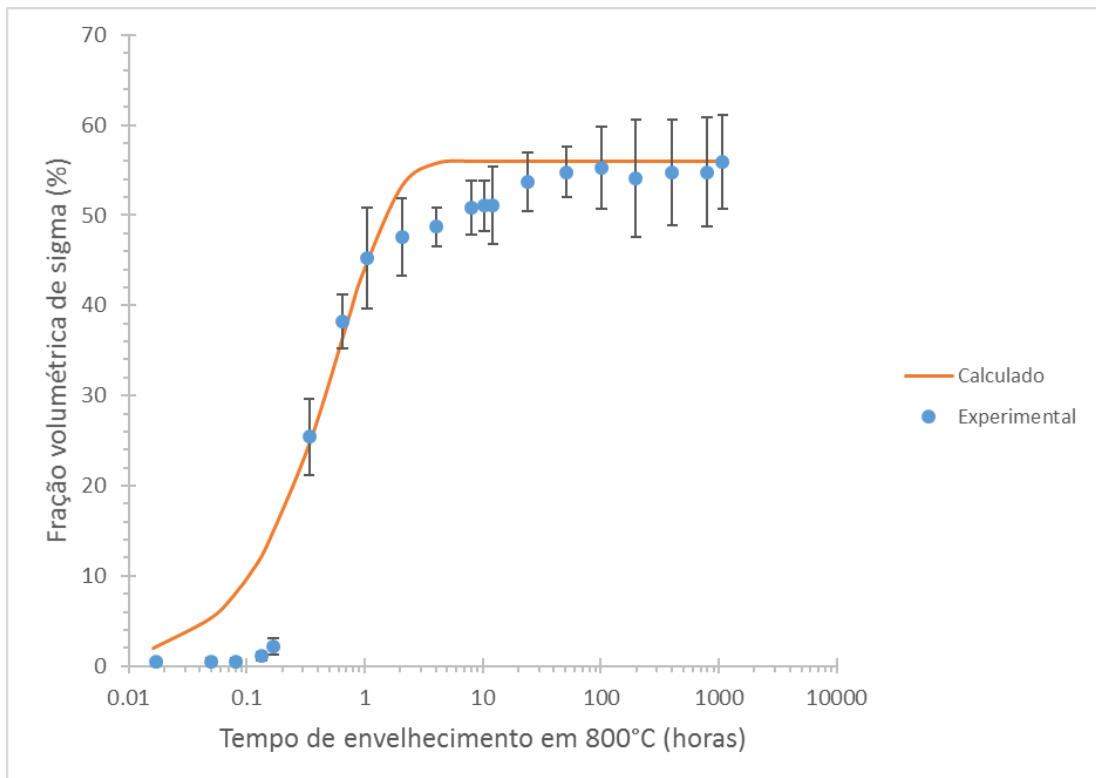


Figura 3. Fração volumétrica de sigma calculada e experimental em função do tempo de envelhecimento em 800 °C (MAGNABOSCO, 2009).

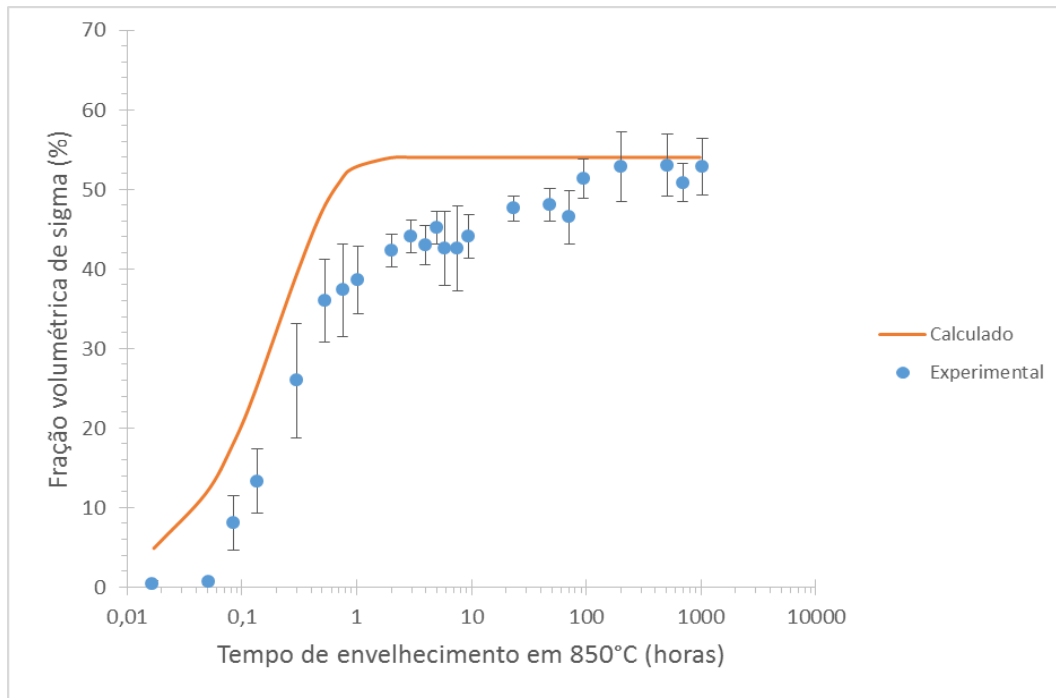


Figura 4. Fração volumétrica de sigma calculada e experimental em função do tempo de envelhecimento em 850 °C (MAGNABOSCO, 2009).

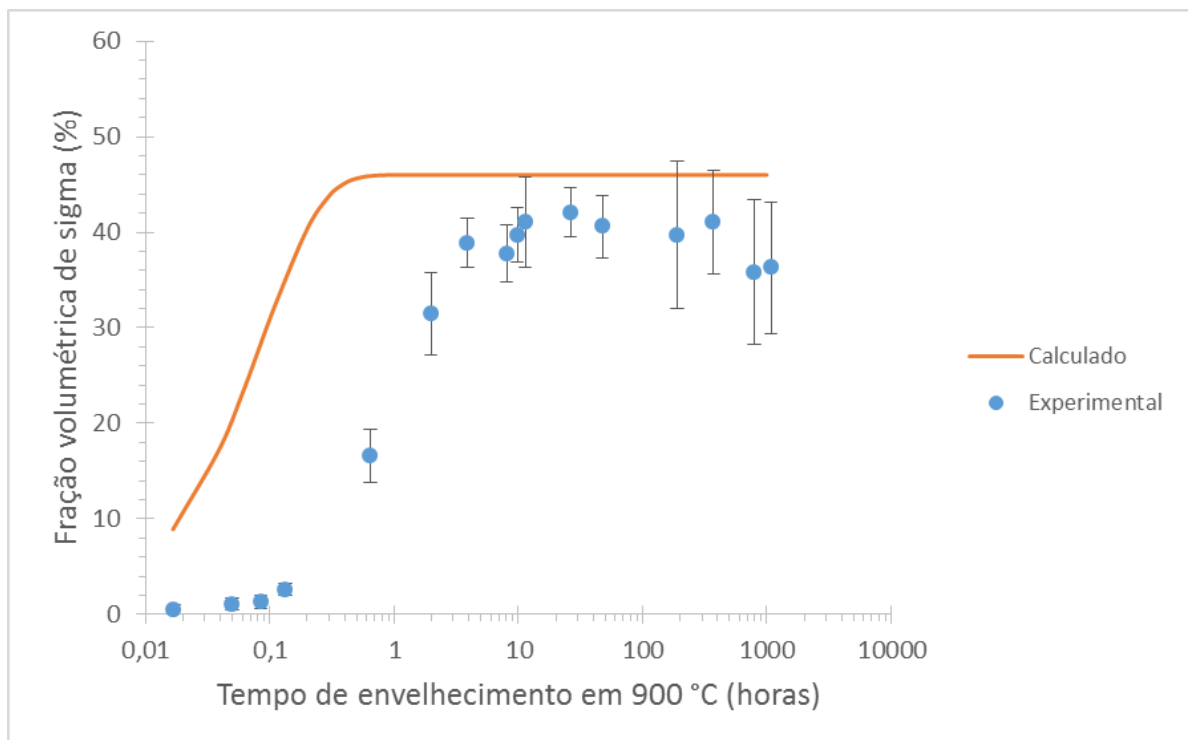


Figura 5. Fração volumétrica de sigma calculada e experimental em função do tempo de envelhecimento em 900 °C (MAGNABOSCO, 2009).

Os fatores de correlação ( $R^2$ ) entre os dados experimentais e a fração de sigma calculada segundo a equação de JMAK para as temperaturas de 700, 750, 800, 850 e 900 °C (Figuras 1 a 5) são respectivamente: 0,99; 0,98; 0,98; 0,93 e 0,58. Então, esse projeto visa melhores correspondências aos dados experimentais de simulações de cinética de formação de fase sigma usando os softwares Thermo-Calc/DICTRA, particularmente nas temperaturas de 850 e 900°C, onde a correlação entre a equação JMAK e os dados experimentais deixa a desejar.

Softwares como Thermo-Calc e DICTRA podem ser usados para melhor entendimento do material durante serviços e processos, auxiliar em estudos que apresentem dificuldades para serem feitos de maneira experimental e promover o desenvolvimento e a implementação de novos processos e materiais. De maneira simplista, Thermo-Calc é utilizado para diagramas de fase binários, ternários e multicomponentes, determinação de fases em equilíbrio numa composição de sistemas e temperatura, determinação de elementos em cada fase, equilíbrio de fase estável e meta-estável, entre outros. Já o DICTRA é utilizado para fazer simulações de transformações de fases controladas por difusão em sistemas de liga multicomponente, sendo exemplos de simulações: transformação de austenita em ferrita em aços e crescimento ou dissolução de carbonetos, nitretos e fases intermetálicas, como a sigma (J-O ANDERSSON; THOMAS HELANDER; LARS HDGHMD; PINGFANG SHI; BO SUNDMAN, 2002).

Visando confirmar os dados de fração volumétrica de sigma através de um modelo de difusão linear, foram tomados como base de comparação os dados obtidos no estudo de Morais e Magnabosco (2017), onde foi usada a base de dados termodinâmicos TCFE8 e a base de dados de difusão MOB2 dos softwares DICTRA e Thermo-Calc. Escolheram-se dois tipos de modelo linear (descritos nas Figuras 6 e 7), o modelo (a) (Model 1) descreve sigma como uma fase inicialmente inativa entre  $\alpha$  e  $\gamma$ , já o modelo (b) (Model 2) descreve sigma prestes a crescer do lado da  $\alpha$ . Os resultados obtidos pelo modelo (a) mostram que a fração volumétrica de sigma na simulação em DICTRA corresponde com dados experimentais em até 2h (7,2E+3s) de envelhecimento e o modelo (b) em até 24h (8,64E+4s) de envelhecimento.



Figura 6. Modelos lineares (a) e (b) usados no estudo de Morais e Magnabosco (2017)



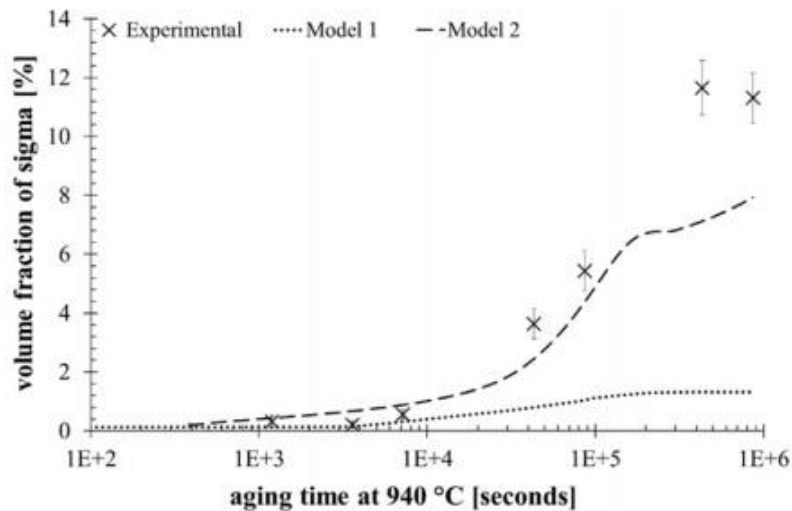


Figura 7. Fração volumétrica de sigma (volume fraction of sigma) depois de diferentes tempos de envelhecimento em 940°C (aging time at 940°C), simulado pelo DICTRA e obtido experimentalmente (experimental) (MORAIS; MAGNABOSCO, 2017).

Para que fique clara a ideia de cálculo de difusão com distribuição linear, toma-se como exemplo o estudo feito por Magnabosco 2015, onde foi usado o software DICTRA e as bases de dados TCFE7 e MOB2 para três modelos diferentes, comparando-os com dados experimentais (experimental) na Figura 9. O modelo 1 (Model 1) retrata tamanhos médios de grão para ferrita (ferrite) e austenita (austenite), com sigma de tamanho desprezível entre essas duas fases, o modelo 2 (Model 2) retrata a mesma situação do modelo 1, porém com a metade dos tamanhos de grão para  $\gamma$  e  $\alpha$ , e no modelo 3 (Model 3) os tamanhos de grão são iguais ao do modelo1, mas com sigma prestes a crescer ao lado da ferrita somente. Em todos os casos a difusão acontece em uma única direção, por se tratar de distribuição linear. É notável na Figura 9 que nenhum dos três modelos estudados consegue prever a evolução da fração volumétrica de sigma em relação ao aumento do tempo de envelhecimento na temperatura de 950°C.

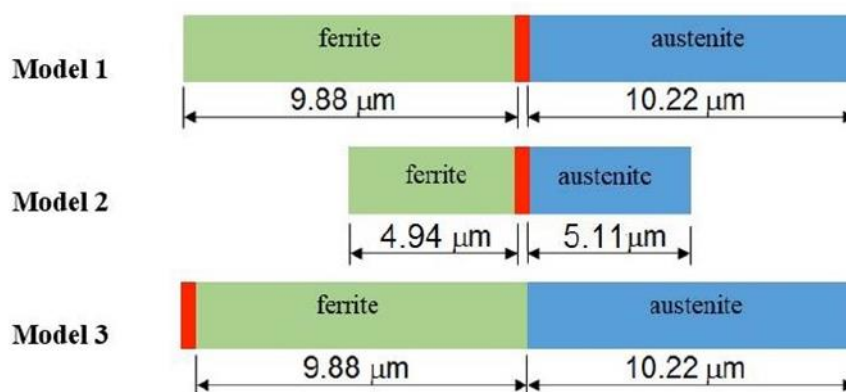


Figura 8. Exemplo de modelo de cálculo com difusão linear para três diferentes situações. (MAGNABOSCO 2015).

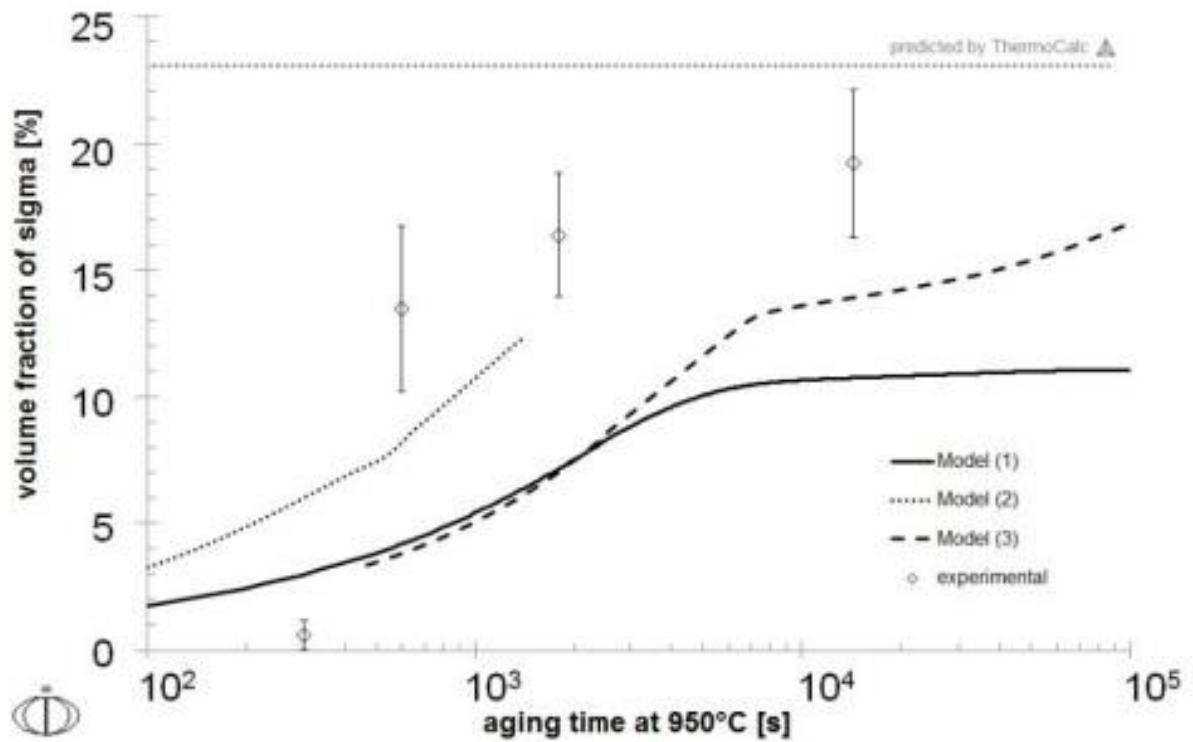


Figura 9. Fração volumétrica de sigma (volume fraction of sigma) após diferentes tempos de envelhecimento em 950°C (aging time at 950°C) simulado pelo DICTRA usando as bases de dados TCFE6 e MOB2 para os três modelos estudados (MAGNABOSCO, 2015).

Assim, torna-se necessário o aprofundamento sobre qual modelo de simulação computacional de DICTRA melhor pode descrever a formação de fase sigma nos aços inoxidáveis dúplex, justificando o presente trabalho.

### 3 METODOLOGIA

O primeiro passo do projeto consistiu em utilizar o software Thermo-Calc com a base de dados TCFE8: Steels/Fe-Alloys v8.1, considerando-se somente os elementos Fe, Cr, Ni, Mo e N (Fe-22,2%Cr-5,7%Ni-2,98%Mo-0,16%N) para descobrir a temperatura na qual ainda não se formam fases intermetálicas, e a determinação da composição química de ferrita e austenita na temperatura em que a fração mássica de ferrita é próxima de 0.409 e a de austenita 0.591, característico do aço inoxidável dúplex estudado por Magnabosco (2009), e cuja cinética de formação de sigma foi previamente descrita nas Figuras 1 a 5.

Ainda no Thermo-Calc foram achadas as porcentagens em massa dos elementos Cr, Ni, Mo e N que constituem sigma para as temperaturas: 700 °C, 750 °C, 800 °C, 850 °C e 900 °C, previamente estudadas por esse grupo de pesquisa.

Após as descobertas mencionadas acima, utilizou-se o software DICTRA com a base de dados MOBFE3: Steels/Fe-Alloys Mobility v3.0. Nesta base de dados, a definição de fase sigma não prevê a presença de N na estrutura da mesma, assim a simulação só é possível desconsiderando esse elemento. Com esta premissa imposta, fez-se o cálculo de difusão com distribuição linear dos elementos num modelo de comprimento total 5,01µm, sendo 2,05µm compostos de ferrita, 2,95µm compostos de austenita, e sigma entre as duas fases com espessura desprezível (0,01µm). Para tanto, considerou-se somente os elementos Fe, Cr, Ni e Mo achados nas temperaturas já estudadas para  $\sigma$  e os mesmos quatro elementos para  $\alpha$  e  $\gamma$ , porém na temperatura de 988 °C, que foi a temperatura onde se descobriu ser possível obter-se ferrita e austenita nas frações mássicas desejadas (0,409 e 0,591).

Com esse modelo, foram obtidos gráficos da fração volumétrica de  $\alpha$ ,  $\gamma$  e  $\sigma$  pelo tempo de envelhecimento em horas. Isso foi feito com o intuito de comparar o surgimento de sigma pelo DICTRA num modelo linear com os dados descritos por Magnabosco (2009), e cuja cinética de formação de sigma foi previamente descrita nas Figuras 1 a 5.

Utilizando a mesma base de dados no DICTRA (MOBFE3: Steels/Fe-Alloys Mobility v3.0) desenvolveu-se um modelo de cálculo de difusão com distribuição radial visando comparar os gráficos de fração volumétrica de sigma pelo tempo em horas com os resultados obtidos por Magnabosco (2009) para a temperatura de 800 °C, e cuja cinética de formação de sigma foi previamente descrita na Figura 3. Além disso, para auxiliar em tal tarefa, também foram produzidos gráficos que descrevam as mudanças de interface entre ferrita e sigma e entre sigma e austenita, pelo tempo em horas. Os mesmos ajudam na visualização das variações volumétricas das três fases em questão, pois as interfaces mostram onde começa e termina o volume de controle de cada fase, fornecendo uma visão do todo.

Visto que em tal estudo foi preciso considerar o formato de uma esfera, ou seja, com difusão ocorrendo radialmente,  $\alpha$  passou a se localizar no centro, seguida de  $\sigma$  e  $\gamma$ . Dessa forma, visando manter a proporção volumétrica de ferrita e austenita antes de sigma começar a crescer, de respectivamente 40,9% e 59,1%, fixou-se a temperatura de 800°C, alterando somente o comprimento de  $\alpha$  (do centro do volume de controle até  $\sigma$  com espessura

considerada desprezível de  $0,01\mu\text{m}$ ) e  $\gamma$  (de  $\sigma$  até a “casca” do volume de controle esférico). Assim, foram testadas a hipótese de ferrita com  $5\mu\text{m}$  e austenita com  $1,7\mu\text{m}$ , e  $\alpha$  de  $10\mu\text{m}$  e  $\gamma$  de  $3,5\mu\text{m}$ . Foi escolhido um valor superior de  $10\mu\text{m}$  para a ferrita, porque em escala micro estrutural, esse valor fica em torno dos valores de diâmetro de grão máximos observados por Magnabosco (2009), de aproximadamente  $20\mu\text{m}$ .

Na tentativa subsequente de tentar prever os resultados de fração volumétrica de sigma em função do tempo, previstos por Magnabosco (2009) e descritos nas Figuras 1 a 5, foi simulado no DICTRA novamente o modelo planar de difusão na base de dados MOBFE3: Steels/Fe-Alloys Mobility v3.0 para as temperaturas  $700^\circ\text{C}$ ,  $750^\circ\text{C}$ ,  $800^\circ\text{C}$ ,  $850^\circ\text{C}$  e  $900^\circ\text{C}$ , onde o objetivo foi utilizar um comprimento total de  $\alpha$  de  $1,025\mu\text{m}$  e de  $\gamma$  de  $1,475\mu\text{m}$ , com sigma de  $0,01\mu\text{m}$  de espessura (desprezível) entre as duas fases, ou seja, da primeira para a segunda tentativa no modelo planar, reduziu-se de um volume de controle de comprimento na direção de difusão de  $5,01\mu\text{m}$  para  $2,51\mu\text{m}$ .

Após tal simulação, voltou-se ao uso do modelo esférico na base de dados MOBFE3: Steels/Fe-Alloys Mobility v3.0 com duas novas propostas de volume de controle, um deles de comprimentos:  $\gamma - 1,48\mu\text{m}$  (centro),  $\alpha - 1,09\mu\text{m}$  (“casca”) e  $\sigma - 0,01\mu\text{m}$  (desprezível entre elas), e outro de comprimentos:  $\alpha - 1,03\mu\text{m}$  (centro),  $\gamma - 1,39\mu\text{m}$  (“casca”) e  $\sigma - 0,01\mu\text{m}$  (desprezível entre elas), assim com totais de respectivamente  $2,58\mu\text{m}$  e  $2,42\mu\text{m}$ . Então foram gerados gráficos de fração volumétrica de sigma pelo tempo de envelhecimento em horas para as temperaturas:  $700$ ,  $750$ ,  $800$ ,  $850$ ,  $900^\circ\text{C}$  para ambos modelos.

Com a suspeita de que sigma inativa entre  $\alpha$  e  $\gamma$  no modelo esférico pudesse tornar os resultados mais condizentes com os experimentais, simulou-se  $\gamma - 1,48\mu\text{m}$  (centro),  $\alpha - 1,09\mu\text{m}$  (“casca”) para a temperatura de  $700^\circ\text{C}$  com  $\sigma$  inativa só pela  $\alpha$ , pela  $\alpha$  e  $\gamma$  e só pela  $\gamma$ , depois foram gerados gráficos de fração volumétrica de  $\sigma$  em função do tempo de envelhecimento em horas para as temperaturas  $750$ ,  $800$ ,  $850$  e  $900^\circ\text{C}$  para  $\sigma$  inativa pela ferrita.

Visando confirmar a teoria de que MEV parece ser melhor do que MO para prever  $\sigma$ , tomou-se como ferramenta o trabalho de Paschoal, Romana e Magnabosco (2015), onde foi gerado um gráfico de fração volumétrica de  $\sigma$  pelo tempo de envelhecimento em horas para  $850^\circ\text{C}$ , assim, comparando o mesmo com os resultados obtidos pelo DICTRA com o modelo esférico de  $\gamma$  no centro,  $\alpha$  na “casca” e  $\sigma$  inativa pela ferrita para  $\gamma$  de comprimentos de  $5$  e  $10\mu\text{m}$ , mantendo as proporções de  $\gamma$  e  $\alpha$  usadas em tal trabalho (tratamento a  $1100^\circ\text{C}$  com resfriamento a água).

Para que fique clara a visualização de todos os modelos testados nesta pesquisa tem-se a Tabela 1 e as Figuras de 10 a 15, onde são descritas as características principais dos mesmos de maneira resumida e apresentadas exemplos visuais de parte dos modelos escolhidos.

Tabela 1. Descrição de todos os modelos testados nesta pesquisa.

Modelos Testados	1°	2°	3°	4°	5°	6°
Bases de Dados Termodinâmicos	TCFE8	TCFE8	TCFE8	TCFE8	TCFE8	TCFE8
Bases de Dados de Mobilidade Atômica	MOBFE3	MOBFE3	MOBFE3	MOBFE3	MOBFE3	MOBFE3
Faixa de Temperaturas Simulada	700 a 900°C	800°C	800°C	700 a 900°C	700 a 900°C	700 a 900°C
Geometria do Modelo	Planar	Esférico	Esférico	Planar	Esférico	Esférico
Comprimento de Ferrita	2,05 $\mu\text{m}$	5,00 $\mu\text{m}$	10,00 $\mu\text{m}$	1,03 $\mu\text{m}$	1,03 $\mu\text{m}$	1,10 $\mu\text{m}$
Comprimento de Austenita	2,95 $\mu\text{m}$	1,70 $\mu\text{m}$	3,50 $\mu\text{m}$	1,48 $\mu\text{m}$	1,40 $\mu\text{m}$	1,48 $\mu\text{m}$
Posição das Fases no Volume de Controle	/	$\alpha$ - centro $\gamma$ - casca	$\alpha$ - centro $\gamma$ - casca	/	$\alpha$ - centro $\gamma$ - casca	$\alpha$ - casca $\gamma$ - centro
Sigma ativa ou inativa?	Ativa	Ativa	Ativa	Ativa	Ativa	Ativa
Sigma inativa por que fronteira?	/	/	/	/	/	/
Fração mássica de $\alpha$ e $\gamma$ antes de $\sigma$ surgir	$\alpha$ - 0,409 $\gamma$ - 0,591	$\alpha$ - 0,409 $\gamma$ - 0,591	$\alpha$ - 0,409 $\gamma$ - 0,591	$\alpha$ - 0,409 $\gamma$ - 0,591	$\alpha$ - 0,409 $\gamma$ - 0,591	$\alpha$ - 0,409 $\gamma$ - 0,591

Tabela 1. Descrição de todos os modelos testados nesta pesquisa (continuação).

Modelos Testados	7°	8°	9°	10°	11°	12°
Bases de Dados Termodinâmicos	TCFE8	TCFE8	TCFE8	TCFE8	TCFE8	TCFE8
Bases de Dados de Mobilidade Atômica	MOBFE3	MOBFE3	MOBFE3	MOBFE3	MOBFE3	MOBFE3
Faixa de Temperaturas Simulada	700°C	700°C	700°C	750°C a 900°C	850°C	850°C
Geometria do Modelo	Esférico	Esférico	Esférico	Esférico	Esférico	Esférico
Comprimento de Ferrita	1,10 $\mu\text{m}$	1,10 $\mu\text{m}$	1,10 $\mu\text{m}$	1,10 $\mu\text{m}$	3,92 $\mu\text{m}$	7,84 $\mu\text{m}$
Comprimento de Austenita	1,48 $\mu\text{m}$	1,48 $\mu\text{m}$	1,48 $\mu\text{m}$	1,48 $\mu\text{m}$	5 $\mu\text{m}$	10 $\mu\text{m}$
Posição das Fases no Volume de Controle	$\alpha$ - casca $\gamma$ - centro	$\alpha$ - casca $\gamma$ - centro	$\alpha$ - casca $\gamma$ - centro	$\alpha$ - casca $\gamma$ - centro	$\alpha$ - casca $\gamma$ - centro	$\alpha$ - casca $\gamma$ - centro
Sigma ativa ou inativa?	Inativa	Inativa	Inativa	Inativa	Inativa	Inativa
Sigma inativa por que fronteira?	Por $\alpha$ e $\gamma$	Por $\gamma$	Por $\alpha$	Por $\alpha$	Por $\alpha$	Por $\alpha$
Fração mássica de $\alpha$ e $\gamma$ antes de $\sigma$ surgir	$\alpha$ - 0,409 $\gamma$ - 0,591	$\alpha$ - 0,409 $\gamma$ - 0,591	$\alpha$ - 0,409 $\gamma$ - 0,591	$\alpha$ - 0,409 $\gamma$ - 0,591	$\alpha$ - 0,482 $\gamma$ - 0,518	$\alpha$ - 0,482 $\gamma$ - 0,518

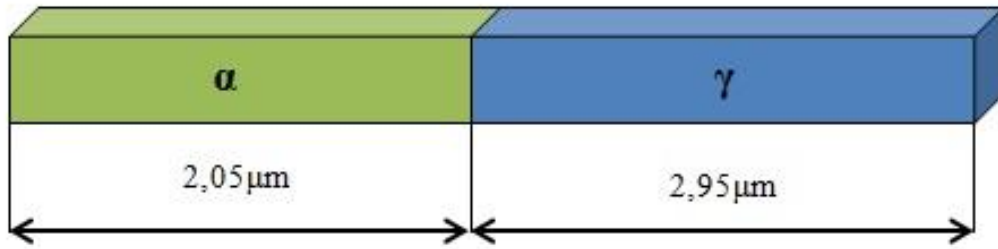


Figura 10. Primeiro modelo testado nesta pesquisa.

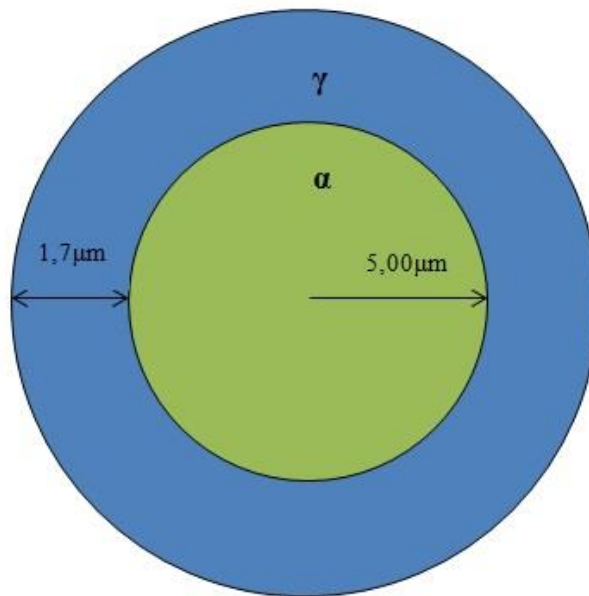


Figura 11. Segundo modelo testado nesta pesquisa.

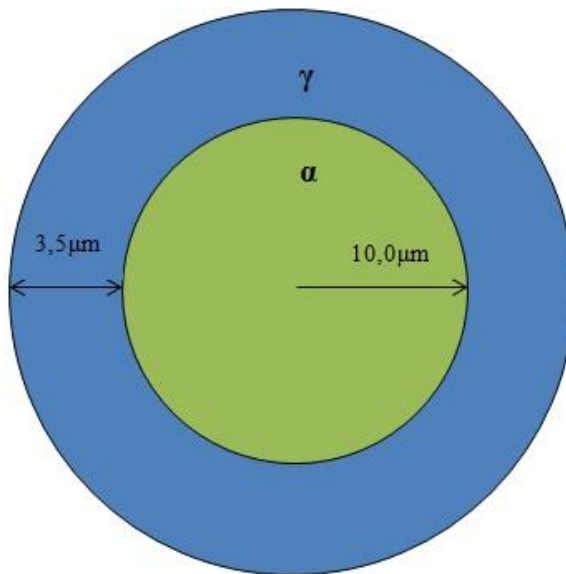


Figura 12. Terceiro modelo testado nesta pesquisa.

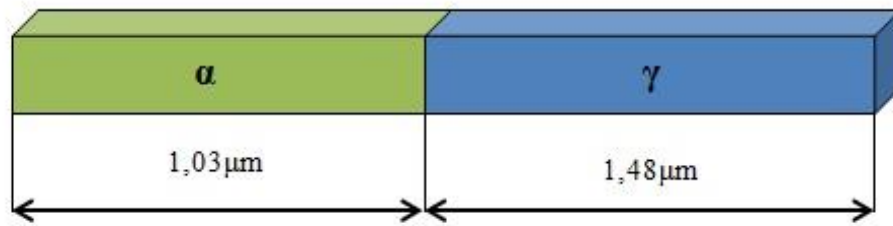


Figura 13. Quarto modelo testado nesta pesquisa.

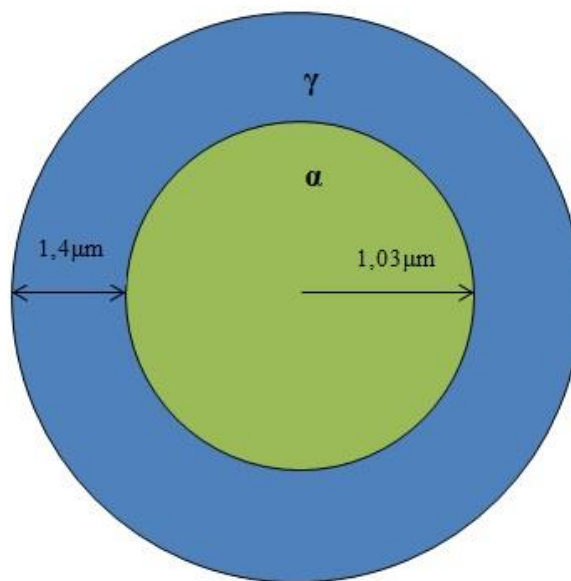


Figura 14. Quinto modelo testado nesta pesquisa.

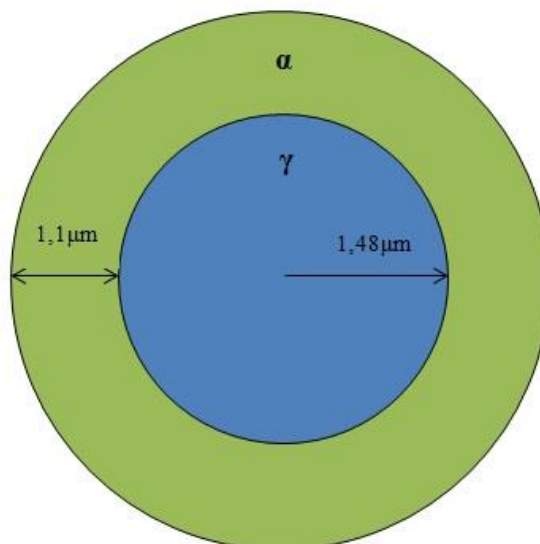


Figura 15. Sexto modelo testado nesta pesquisa.



## 4 RESULTADOS E DISCUSSÃO

Para trazer uma ideia geral sobre as fases em equilíbrio do UNS S31803 em função da temperatura foi feito no Thermo-Calc um gráfico da fração em massa de todas as fases em função da temperatura, mostrado na Figura 16.

Na faixa de 600°C a 1500°C, percebe-se que sigma, apesar de ser a fase que mais fragiliza o material, não é a única presente. Também nota-se a presença da fase chi ( $\chi$ ), vista como CHI\_A12 e os nitretos ( $Cr_2N$ ), visto como HCP\_A3#2.

Observa-se também que na temperatura de 988 °C é encontrada a fração mássica de ferrita em torno de 0,409 e de austenita de 0,591 (Figura 16), que é a distribuição inicial do aço estudado por Magnabosco (2009), ou seja, antes de surgir qualquer fase intermetálica.

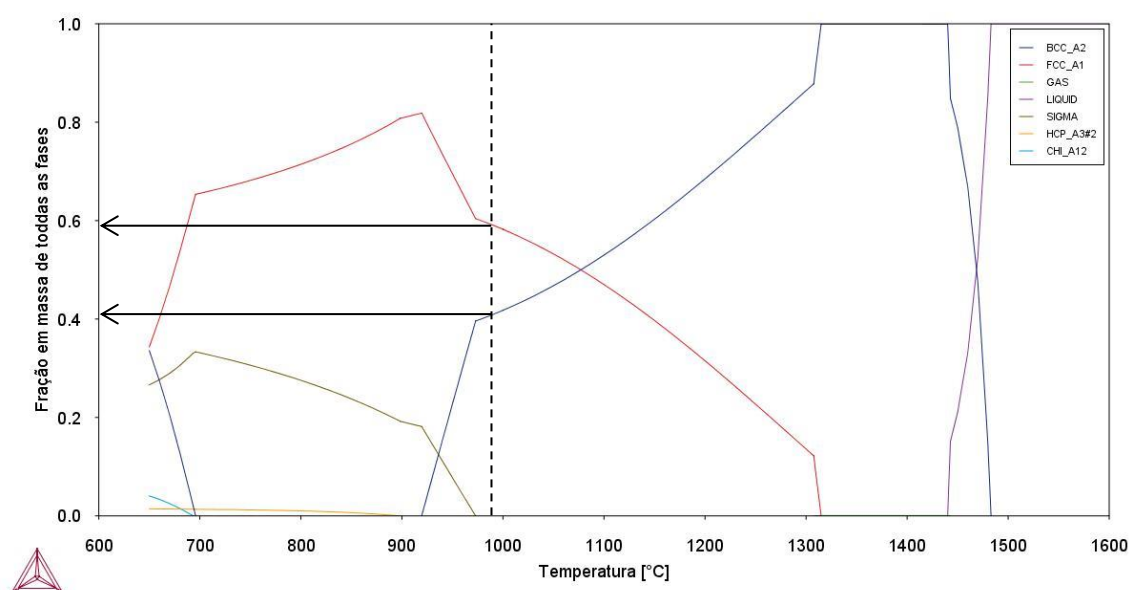


Figura 16. Descrição das fases: ferrita (BCC\_A2), austenita (FCC\_A1), gás (GAS), líquido (LIQUID), sigma (SIGMA),  $Cr_2N$  (HCP\_A3#2) e chi (CHI\_A12).

Com o intuito de confirmar a fração mássica de fases em temperaturas de interesse deste trabalho e a composição química das fases, foram feitas duas tabelas que retratam as fases presentes, a fração volumétrica de cada fase e os componentes químicos presentes em cada fase em fração mássica.

A Tabela 2 mostra uma faixa de temperaturas de 700 °C a 950 °C, que é onde a fração de sigma é diferente de zero e a Tabela 3 mostra uma faixa entre 988 °C a 1200 °C, onde sigma não existe. Em ambas, os dados foram extraídos do Thermo-Calc a cada 50°C.

A composição da liga em questão é: Fe-22,2%Cr-5,7%Ni-2,98%Mo-0,16%N-1,6%Mn-0,44%Si-0,07%V, porém, foram considerados somente os elementos: Cr, Mo, Ni e N para que não houvesse a formação de fases de menor importância nesse estudo, ou seja, a composição usada nas simulações foi: Fe-22,2%Cr-5,7%Ni-2,98%Mo-0,16%N.

Tabela 2. Descrição do equilíbrio de fases para uma faixa de temperaturas de 700°C e 950°C

Temperatura [°C]	Fases Presentes	Fração Volumétrica de Cada Fase [%]	Componente Químico de Cada Fase em Fração Mássica [%]			
			Cr	Mo	Ni	N
700	$\sigma$	32,3	34,3	7,0	2,5	0
	$\gamma$	65,3	14,9	0,8	7,5	0,02
	$\alpha$	0	0	0	0	0
	Cr <sub>2</sub> N	1,8	79,6	8,9	0,02	11,1
750	$\sigma$	30,4	33,8	7,2	2,5	0
	$\gamma$	68,2	16,0	1,0	7,2	0,04
	$\alpha$	0	0	0	0	0
	Cr <sub>2</sub> N	1,6	81,0	7,3	0,03	11,1
800	$\sigma$	27,2	33,3	7,5	2,6	0
	$\gamma$	71,4	17,1	1,2	7,0	0,1
	$\alpha$	0	0	0	0	0
	Cr <sub>2</sub> N	1,4	82,0	6,0	0,04	11,1
850	$\sigma$	23,4	32,9	8,0	2,6	0
	$\gamma$	75,7	18,3	1,4	6,7	0,1
	$\alpha$	0	0	0	0	0
	Cr <sub>2</sub> N	0,9	82,6	5,0	0,1	11,1
900	$\sigma$	18,8	32,4	8,6	2,6	0
	$\gamma$	81,2	19,8	1,6	6,4	0,2
	$\alpha$	0	0	0	0	0
	Cr <sub>2</sub> N	0	0	0	0	0
950	$\sigma$	7,5	31,5	9,8	2,8	0
	$\gamma$	69,5	20,3	2,1	6,7	0,2
	$\alpha$	22,9	25,0	3,4	3,6	0,01
	Cr <sub>2</sub> N	0	0	0	0	0

Tabela 3. Descrição do equilíbrio de fases para uma faixa de temperaturas de 988 °C a 1200 °C.

Temperatura [°C]	Fases Presentes	Fração Volumétrica de Cada Fase [%]	Componente Químico de Cada Fase em Fração Massica [%]			
			Cr	Mo	Ni	N
988	$\gamma$	58,9	20,5	2,4	6,9	0,3
	$\alpha$	41,1	24,7	3,8	3,90	0,02
1000	$\gamma$	58,1	20,5	2,4	6,9	0,3
	$\alpha$	41,9	24,6	3,8	3,9	0,02
1050	$\gamma$	53,1	20,4	2,3	7,0	0,3
	$\alpha$	46,9	24,2	3,7	4,2	0,02
1100	$\gamma$	46,9	20,4	2,3	7,1	0,3
	$\alpha$	53,1	23,8	3,6	4,4	0,03
1150	$\gamma$	39,6	20,5	2,2	7,2	0,3
	$\alpha$	60,4	23,4	3,5	4,7	0,04
1200	$\gamma$	31,4	20,5	2,2	7,3	0,4
	$\alpha$	68,6	23,0	3,4	5,0	0,06

Com o auxílio do DICTRA, através de um modelo de difusão linear, já utilizado por Magnabosco (2015) e mostrado nas figuras 8 e 9, ou seja, com difusão ocorrendo em uma única direção, foram produzidos gráficos da fração volumétrica pelo tempo de envelhecimento das fases  $\sigma$ ,  $\gamma$  e  $\alpha$ , para as temperaturas de 700, 750, 800, 850 e 900 °C. Para  $\sigma$  houve comparações dos dados experimentais de Magnabosco (2009) (previamente apresentados nas Figuras 1 a 5) e os aqui calculados.

Tal comparação é mostrada nas Figuras de 17 a 21, onde fica clara a diferença entre a formação de sigma para os dados experimentais, os calculados por JMAK e pelo DICTRA.

Na melhor das hipóteses, o modelo linear de difusão consegue se aproximar dos dados experimentais em até 0,1 h, daí em diante a diferença se torna maior, pois os experimentos retratados por Magnabosco (2009) mostram que sigma deveria possuir maior fração volumétrica ao longo do tempo, já o DICTRA mostra uma fração bem menor do que o experimental, sendo inclusive distante dos desvios padrão dos resultados experimentais.

As figuras que retratam a austenita são as de 22 a 26 e os que retratam ferrita são as de 27 a 31. Através delas pode-se perceber a correspondência com a dissertação de Santos (2010) quanto à capacidade de difusão do cromo na ferrita e na austenita, isso porque durante o decaimento da ferrita, a curva que mostra o decaimento da austenita é suave, o que significa

que o cromo e molibdênio utilizados na formação de sigma estão vindos primordialmente da  $\alpha$  até então, porém, após a estagnação do consumo da  $\alpha$ , a austenita passa a ser consumida. Tomam-se como exemplo os resultados de 800 °C (Figuras 24 e 29), nas quais  $\alpha$  começa a estabilizar logo após uma hora de tratamento térmico aproximadamente e  $\gamma$  começa a decair de maneira mais brusca também após uma hora.

Ao comparar os resultados obtidos por Morais e Magnabosco (2017) com aqueles descobertos na pesquisa presente, percebe-se que os mesmos não condizem com os dados aqui obtidos, pois para um modelo similar ao modelo (a) (descrito na figura 6 e com sigma prestes a crescer entre  $\alpha$  e  $\gamma$ ), os dados achados pelos programas condizem somente em até 0,1h de tratamento térmico. Provavelmente essa diferença acentuada se deve aos diferentes comprimentos escolhidos no DICTRA de  $\alpha$  e  $\gamma$  antes de  $\sigma$  começar a crescer.

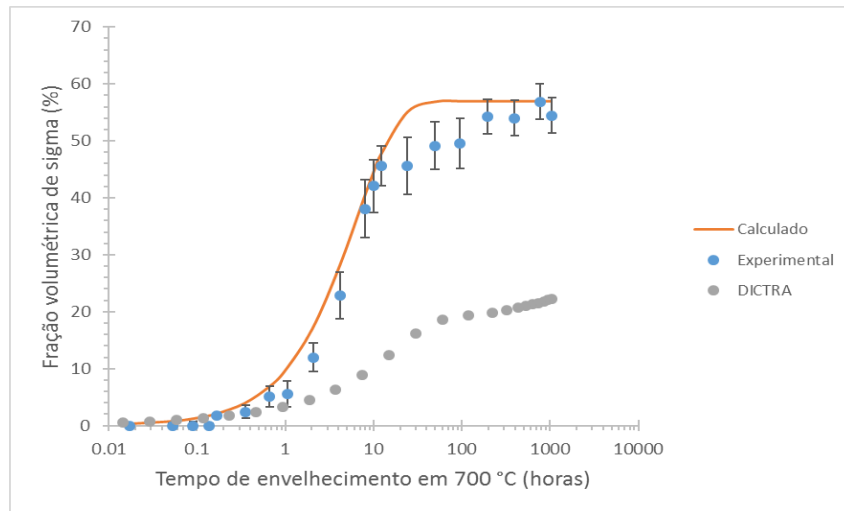


Figura 17. Fração volumétrica de sigma pelo DICTRA num modelo linear de difusão, calculada e experimental em função do tempo de envelhecimento em 700 °C (2,05 $\mu$ m de  $\alpha$  e 2,95 $\mu$ m de  $\gamma$ ).

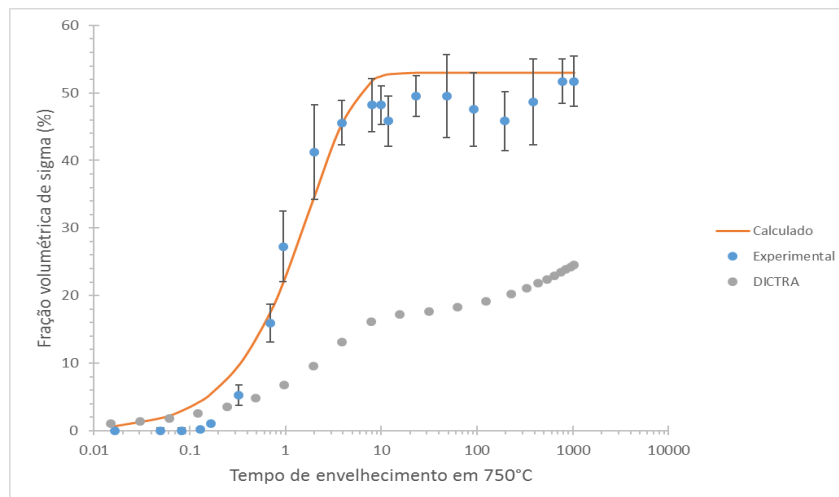


Figura 18. Fração volumétrica de sigma pelo DICTRA num modelo linear de difusão, calculada e experimental em função do tempo de envelhecimento em 750 °C (2,05 $\mu$ m de  $\alpha$  e 2,95 $\mu$ m de  $\gamma$ ).

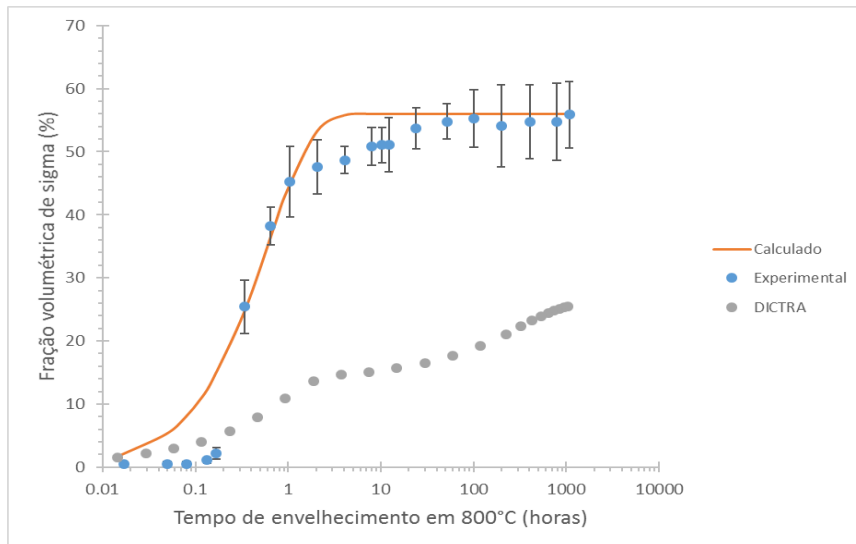


Figura 19. Fração volumétrica de sigma pelo DICTRA num modelo linear de difusão, calculada e experimental em função do tempo de envelhecimento em 800 °C (2,05 $\mu$ m de  $\alpha$  e 2,95 $\mu$ m de  $\gamma$ ).

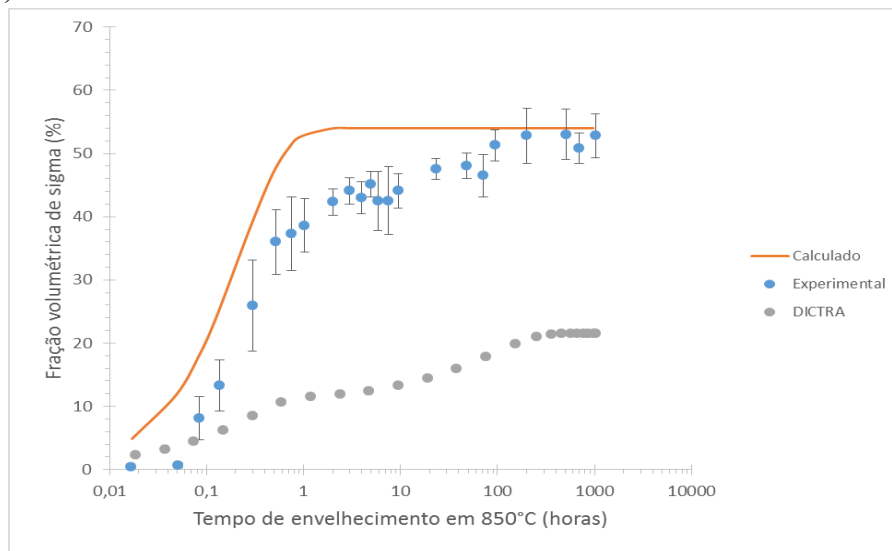


Figura 20. Fração volumétrica de sigma pelo DICTRA num modelo linear de difusão, calculada e experimental em função do tempo de envelhecimento em 850 °C (2,05 $\mu$ m de  $\alpha$  e 2,95 $\mu$ m de  $\gamma$ ).

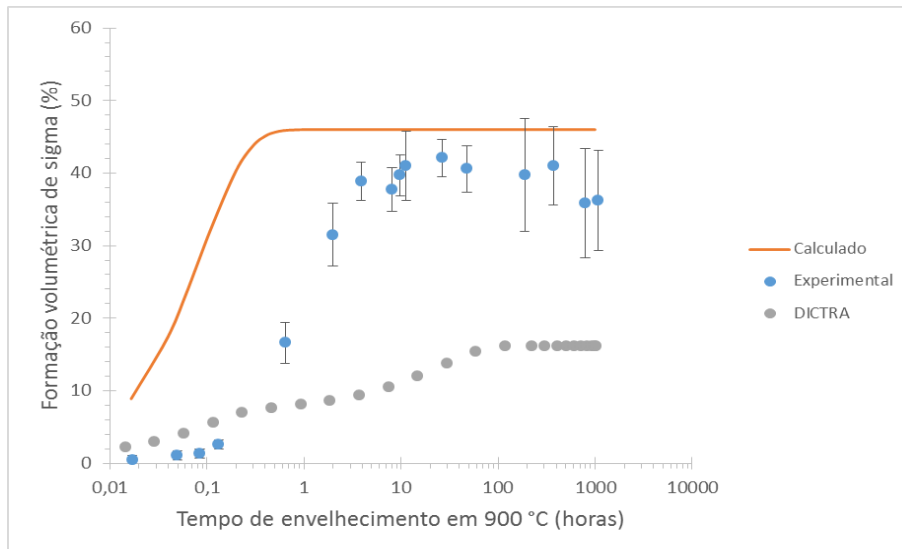


Figura 21. Fração volumétrica de sigma pelo DICTRA num modelo linear de difusão, calculada e experimental em função do tempo de envelhecimento em 900 °C (2,05 $\mu$ m de  $\alpha$  e 2,95 $\mu$ m de  $\gamma$ ).

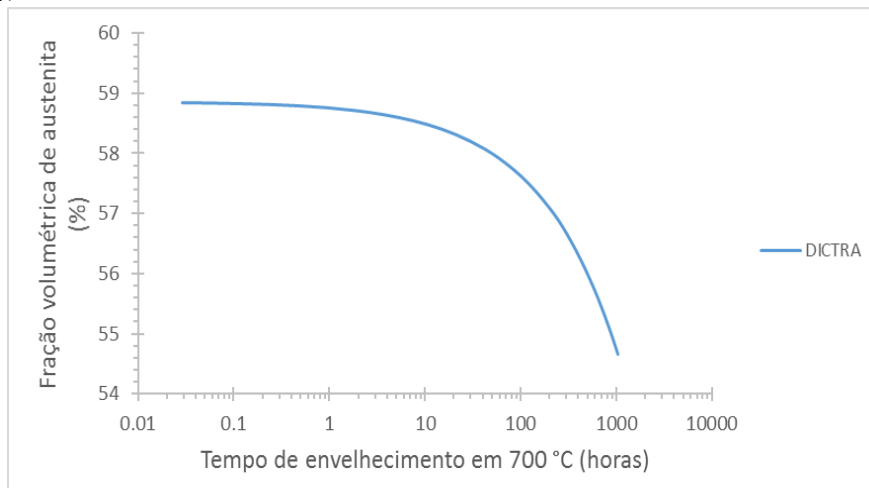


Figura 22. Fração volumétrica de austenita em função do tempo de envelhecimento em 700°C (2,05 $\mu$ m de  $\alpha$  e 2,95 $\mu$ m de  $\gamma$ ) no modelo linear de difusão.

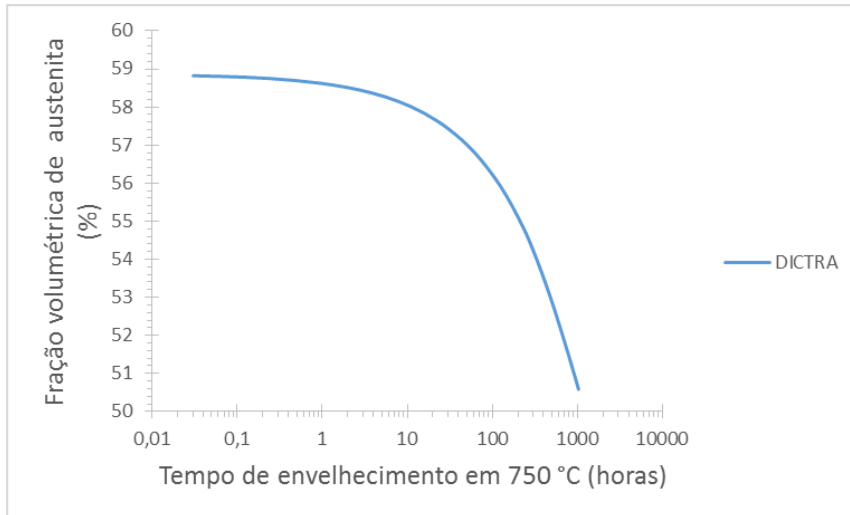


Figura 23. Fração volumétrica de austenita em função do tempo de envelhecimento em 750 °C (2,05 $\mu$ m de  $\alpha$  e 2,95 $\mu$ m de  $\gamma$ ) no modelo linear de difusão.

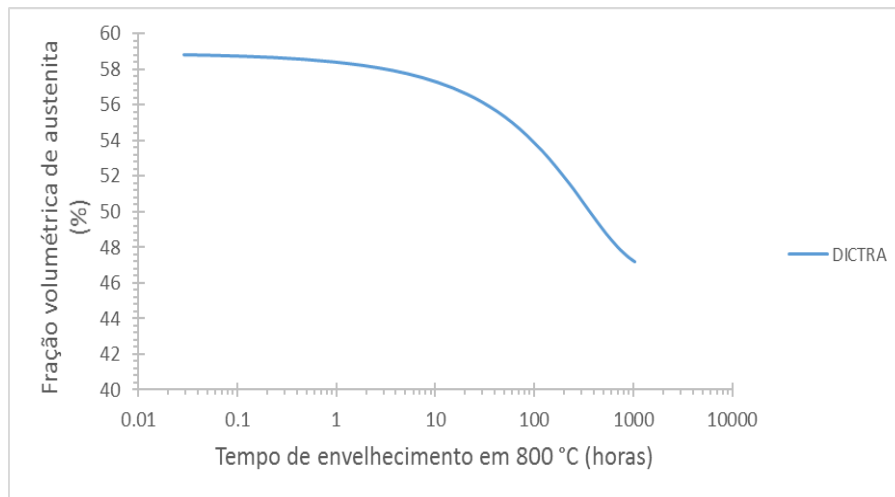


Figura 24. Fração volumétrica de austenita em função do tempo de envelhecimento em 800 °C (2,05 $\mu$ m de  $\alpha$  e 2,95 $\mu$ m de  $\gamma$ ) no modelo linear de difusão.



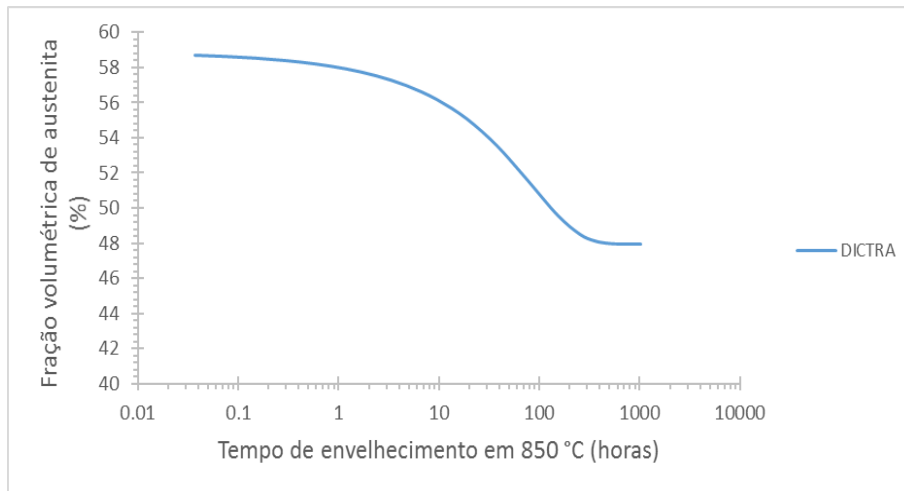


Figura 25. Fração volumétrica de austenita em função do tempo de envelhecimento em 850 °C (2,05 $\mu$ m de  $\alpha$  e 2,95 $\mu$ m de  $\gamma$ ) no modelo linear de difusão.

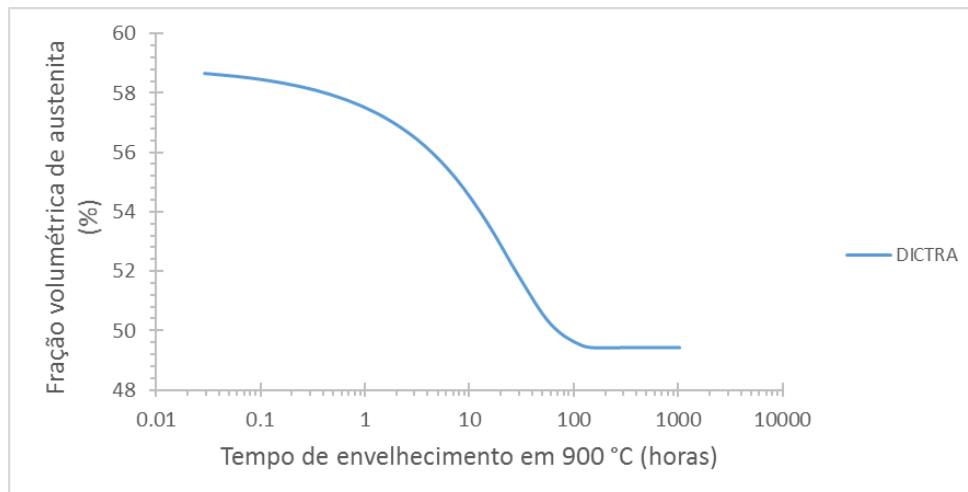


Figura 26. Fração volumétrica de austenita em função do tempo de envelhecimento em 900 °C (2,05 $\mu$ m de  $\alpha$  e 2,95 $\mu$ m de  $\gamma$ ) no modelo linear de difusão.

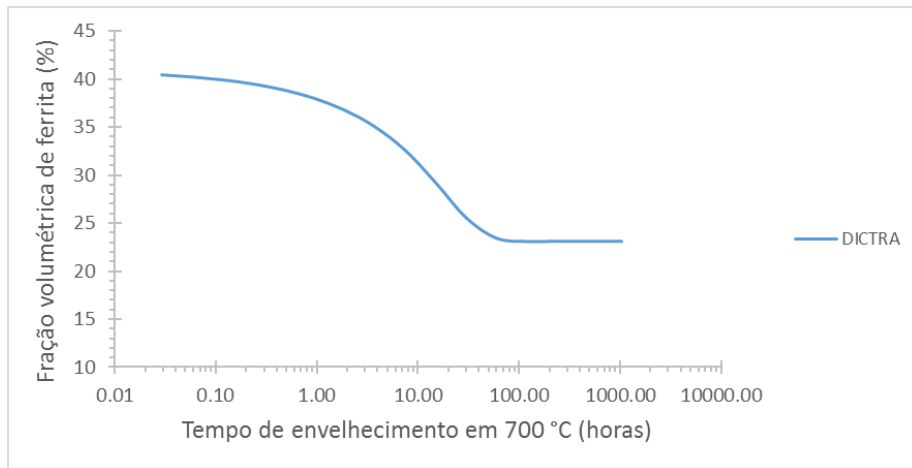


Figura 27. Fração volumétrica de ferrita em função do tempo de envelhecimento em 700 °C (2,05 $\mu$ m de  $\alpha$  e 2,95 $\mu$ m de  $\gamma$ ) no modelo linear de difusão.

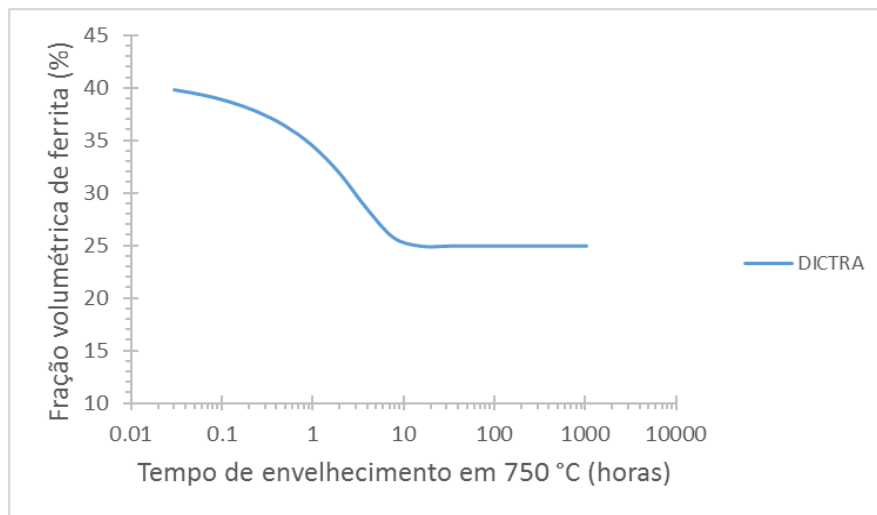


Figura 28. Fração volumétrica de ferrita em função do tempo de envelhecimento em 750°C (2,05 $\mu$ m de  $\alpha$  e 2,95 $\mu$ m de  $\gamma$ ) no modelo linear de difusão.

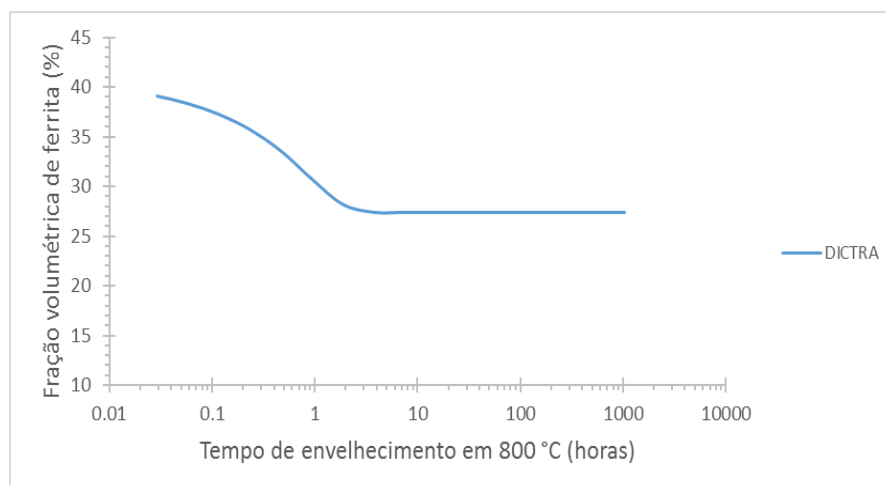


Figura 29. Fração volumétrica de ferrita em função do tempo de envelhecimento em 800°C (2,05 $\mu$ m de  $\alpha$  e 2,95 $\mu$ m de  $\gamma$ ) no modelo linear de difusão.

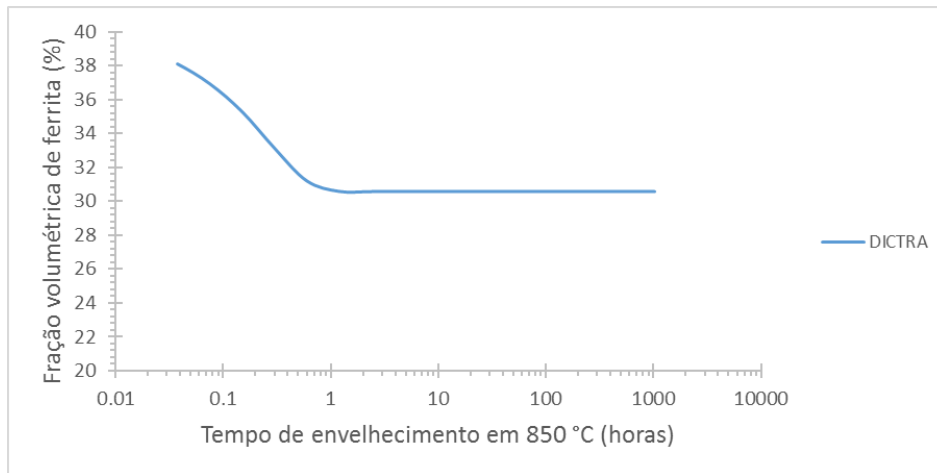


Figura 30. Fração volumétrica de ferrita em função do tempo de envelhecimento em 850°C (2,05µm de  $\alpha$  e 2,95µm de  $\gamma$ ) no modelo linear de difusão.

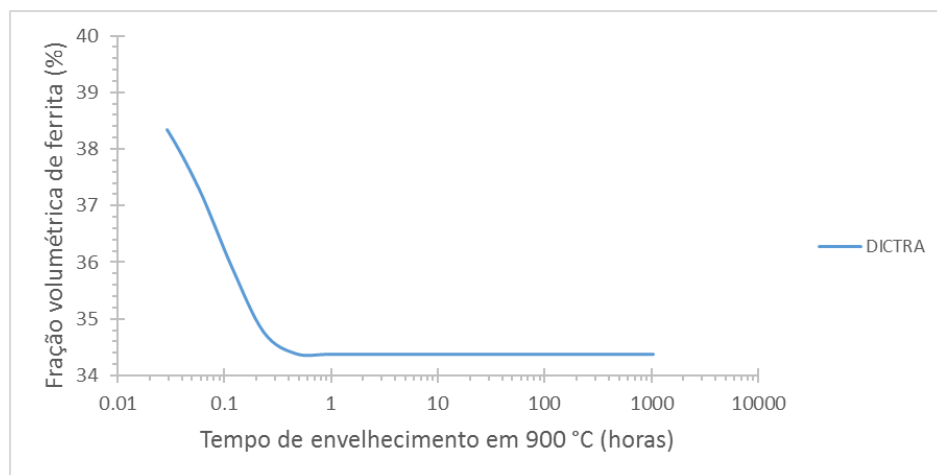


Figura 31. Fração volumétrica de ferrita em função do tempo de envelhecimento em 900°C (2,05µm de  $\alpha$  e 2,95µm de  $\gamma$ ) no modelo linear de difusão.

Devido aos resultados obtidos pelo DICTRA com o modelo de difusão linear, pouco condizentes com os resultados experimentais obtidos por Magnabosco (2009), cuja cinética de formação de sigma foi previamente descrita nas Figuras 1 a 5, tomou-se a iniciativa de simular outro modelo de difusão, o modelo de difusão esférico ou radial.

Com tal proposta de simulação, foram gerados gráficos da fração volumétrica de sigma pelo tempo de envelhecimento em horas (Figuras 32 e 34) e gráficos da posição de interface pelo tempo (Figuras 33 e 35) para a temperatura de 800°C, variando somente o comprimento da ferrita e austenita, assim foi mantida a fração volumétrica de cada fase antes de sigma começar a crescer, de respectivamente 0,409 e 0,591, característico de um aço UNS S31803, com  $\sigma$  de comprimento desprezível de 0,01µm na direção do raio. As Figuras 32 e 33 retratam

$\alpha$  com comprimento de  $5\mu\text{m}$  e  $\gamma$  com  $1,7\mu\text{m}$  e as Figuras 34 e 35 retratam  $\alpha$  com comprimento de  $10\mu\text{m}$  e  $\gamma$  com  $3,5\mu\text{m}$ . Foram escolhidos dois valores de ferrita diferentes visando entender qual é a quantidade de ferrita mais próxima do ideal para que num modelo esférico fosse consumido primeiro toda a  $\alpha$  disponível e depois ocorresse o consumo de  $\gamma$ , que é o que ocorre no fenômeno físico de difusão para esse aço, contudo, isso deve ocorrer de maneira que haja gradientes acentuados de cromo na fronteira sigma/austenita e suaves na fronteira ferrita/sigma, correspondendo com a capacidade de difusão desse elemento na  $\alpha$  e  $\gamma$ .

Assim como o modelo linear, os resultados do modelo esférico só conseguem prever a formação de sigma para aproximadamente 0,1h de tratamento térmico, de maneira geral, gerando diferenças percentuais significativas para tempos maiores, sendo os resultados do DICTRA bem inferiores numericamente quando comparados com os experimentais e seus desvios, os quais foram obtidos por Magnabosco (2009), onde a cinética de formação de sigma foi previamente descrita nas Figuras 1 a 5.

Os gráficos da posição de interface pelo tempo descrevem o comportamento de duas curvas, a superior retrata a interface ferrita/sigma e a inferior a sigma/austenita. Quando o tempo é  $10^{-6}\text{h}$ , as fronteiras entre as fases ainda não se movimentaram, portanto ferrita/sigma está a  $5\mu\text{m}$  do centro do volume de controle esférico e sigma/austenita está a  $5,01\mu\text{m}$  do centro na Figura 33, e na Figura 35 ferrita/sigma está com  $10\mu\text{m}$  do centro do volume de controle esférico e sigma/austenita está a  $10,01\mu\text{m}$  do centro, porém, entre  $10^{-4}\text{h}$  e  $10^{-2}\text{h}$ , a posição da interface ferrita/sigma começa a diminuir bruscamente e da sigma/austenita a aumentar suavemente, com crescimento bastante acentuado da última após a estagnação da posição da interface ferrita/sigma. Em outras palavras, a área entre as duas curvas descreve de maneira visual o espaço que sigma toma durante o seu crescimento nas esferas de raios  $6,7\mu\text{m}$  e  $13,5\mu\text{m}$ , visando primordialmente o consumo de ferrita, pois como sigma possui altas quantidades de elementos estabilizadores de  $\alpha$ , como cromo e molibdênio, é razoável a interface sigma/austenita só mudar de posição após a estagnação da posição de interface ferrita/sigma, mostrando que desde momento em diante, cromo e molibdênio devem vir da austenita, mesmo que em menor quantidade, devido a um prévio esgotamento do potencial químico destes elementos para formação de sigma do lado da  $\alpha$ . Tal informação sobre o cromo e molibdênio na  $\alpha$  corresponde com o que foi dito na dissertação de Melo (2015).

Além disso, têm-se comparações do modelo de difusão linear com o radial, ambos a  $800^\circ\text{C}$  nas Figuras 36 e 37. Na 36 o comprimento do raio da ferrita é de  $5\mu\text{m}$  e na 37  $10\mu\text{m}$ , assim, foi descoberto que o modelo linear se assemelha mais com o esférico de  $\alpha$  com  $5\mu\text{m}$  do que com  $10\mu\text{m}$  da mesma, portanto, entende-se com essas figuras que quanto menor o volume de controle esférico, maior a semelhança com o modelo linear, desde que:  $\sigma$  esteja entre  $\gamma$  e  $\alpha$ , no caso do radial  $\alpha$  fique no centro da esfera,  $\sigma$  tenha espessura desprezível e sejam mantidas as frações mássicas de  $\alpha$  e  $\gamma$  de 0,409 e 0,591 respectivamente antes de  $\sigma$  surgir.

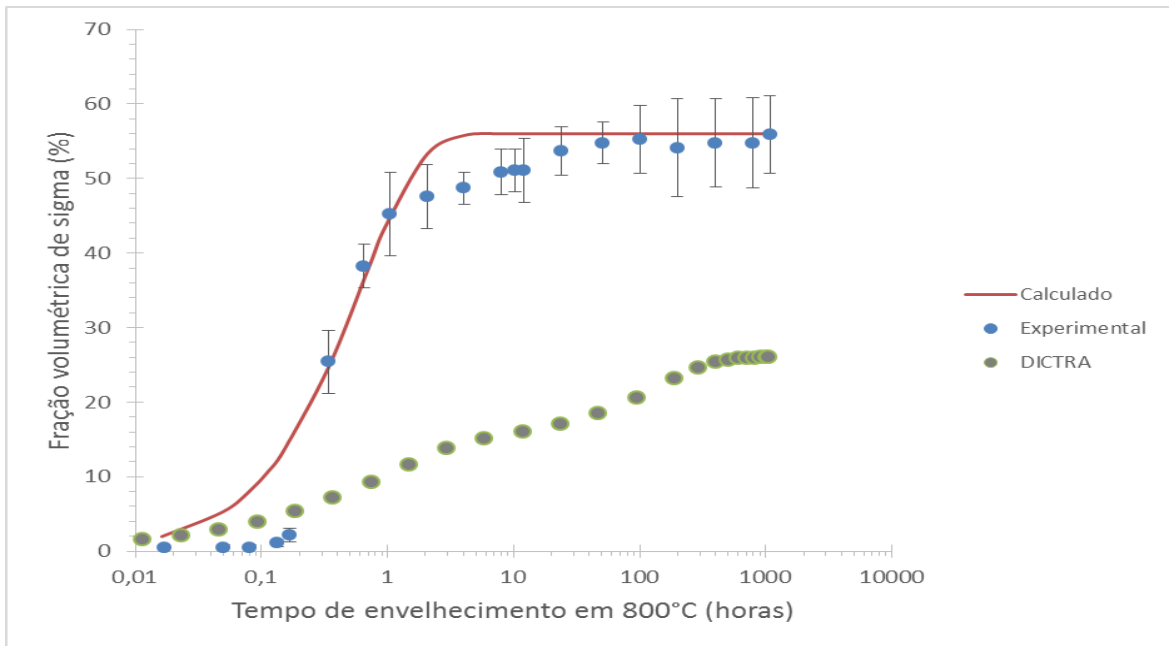


Figura 32. Fração volumétrica sigma em função do tempo de envelhecimento a 800°C para um comprimento de ferrita de 5µm e austenita com 1,73µm no modelo esférico de difusão.

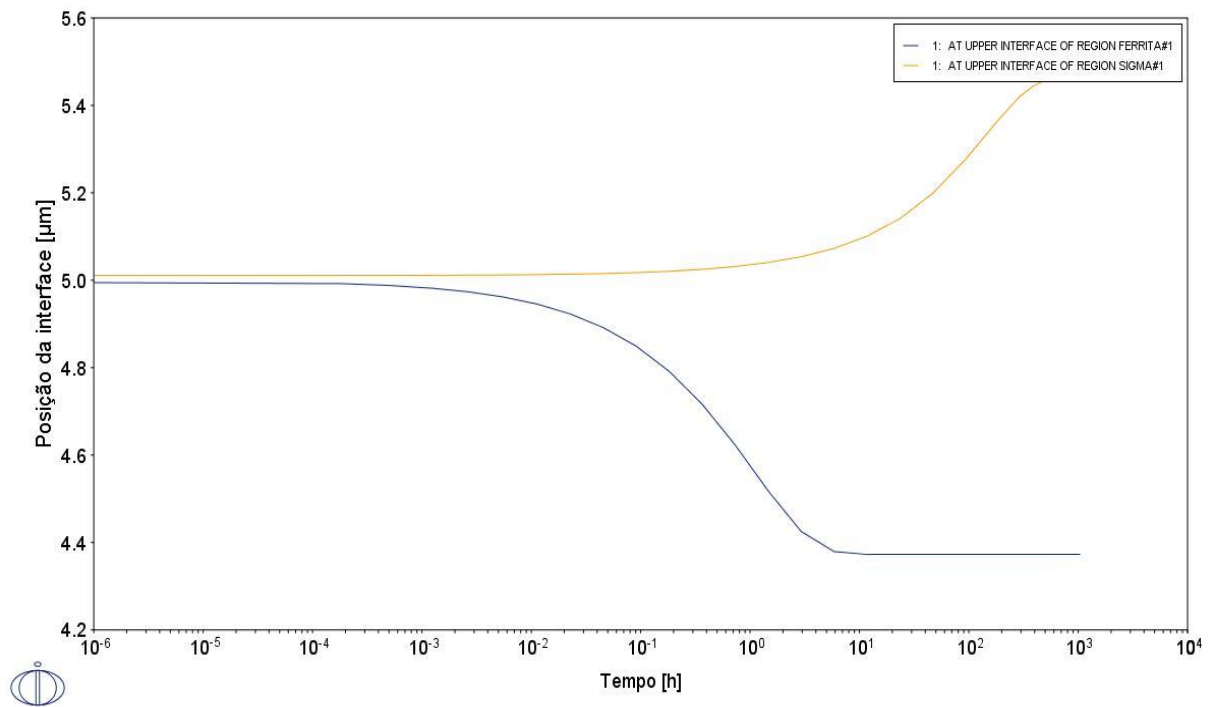


Figura 33. Posições de interfaces em função do tempo para 800°C com comprimento de ferrita de 5µm e austenita com 1,73µm no modelo esférico de difusão.

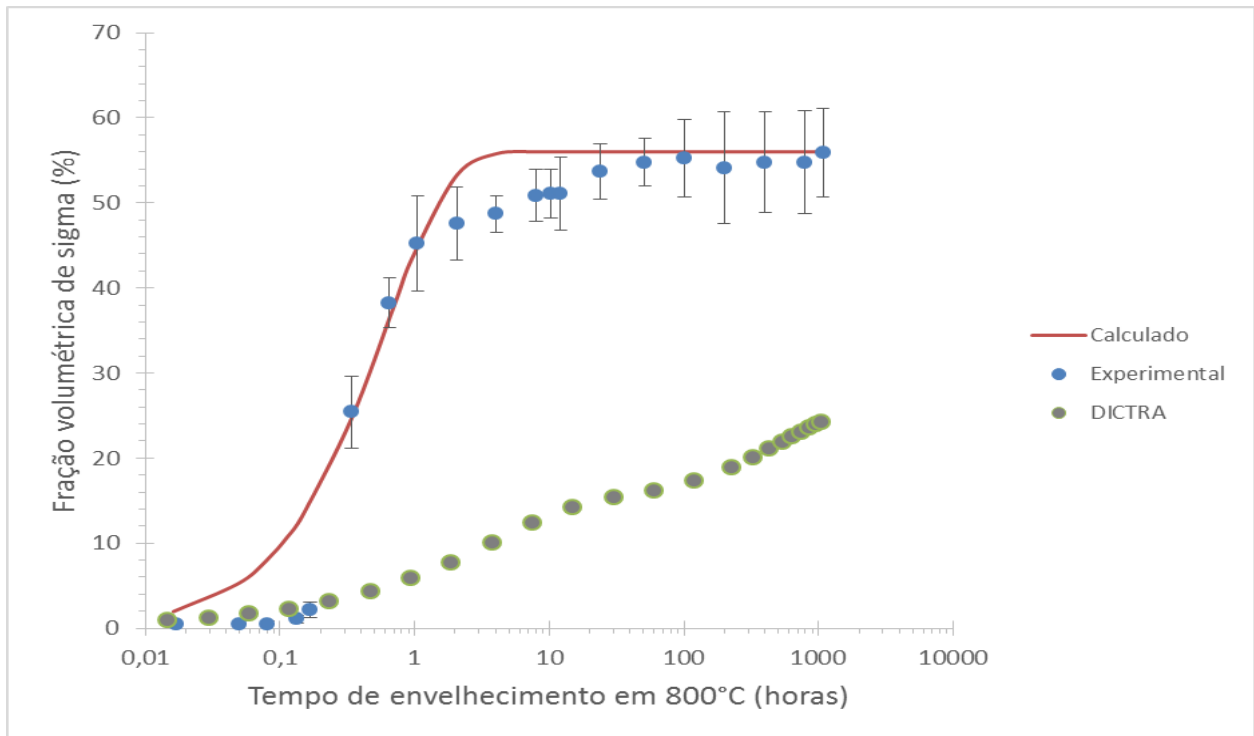


Figura 34. Fração volumétrica sigma em função do tempo de envelhecimento a 800°C para um comprimento de ferrita de 10 $\mu$ m e austenita com 3,47 $\mu$ m no modelo esférico de difusão.

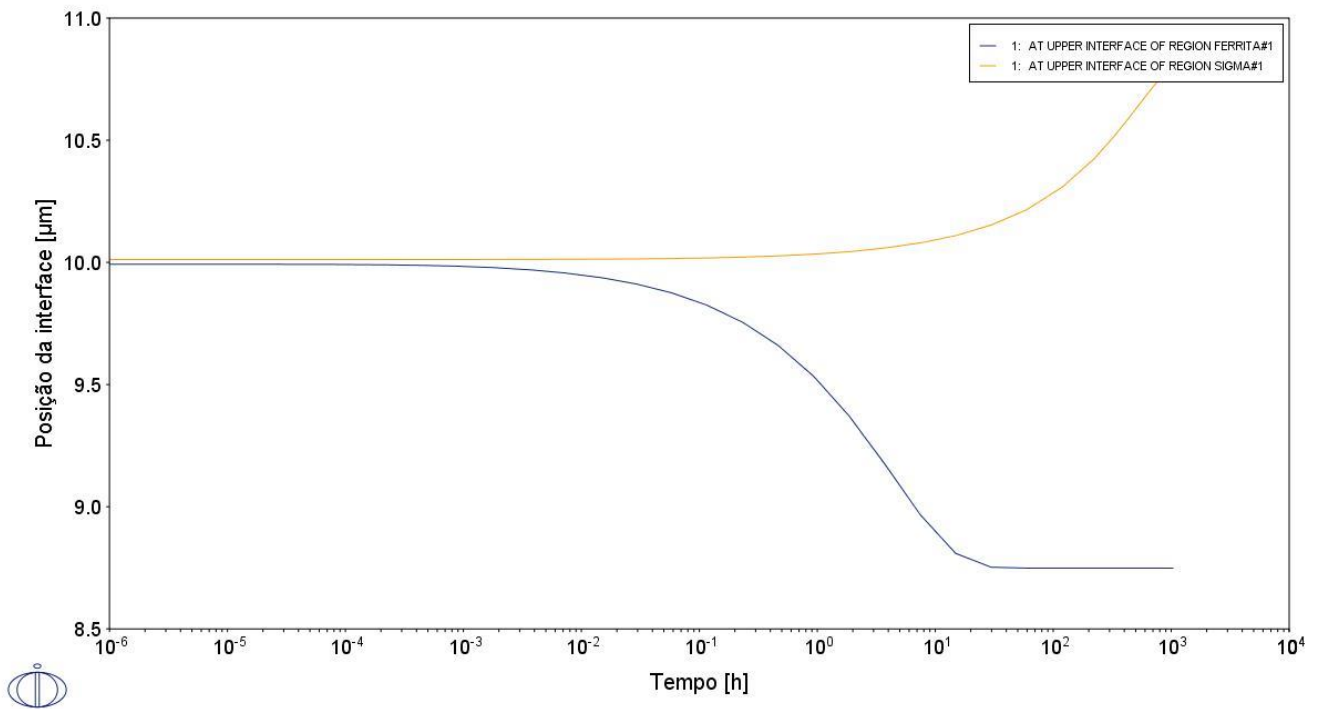


Figura 35. Posições de interfaces em função do tempo para 800°C com comprimento de ferrita de 10 $\mu$ m e austenita com 3,47 $\mu$ m no modelo esférico de difusão.

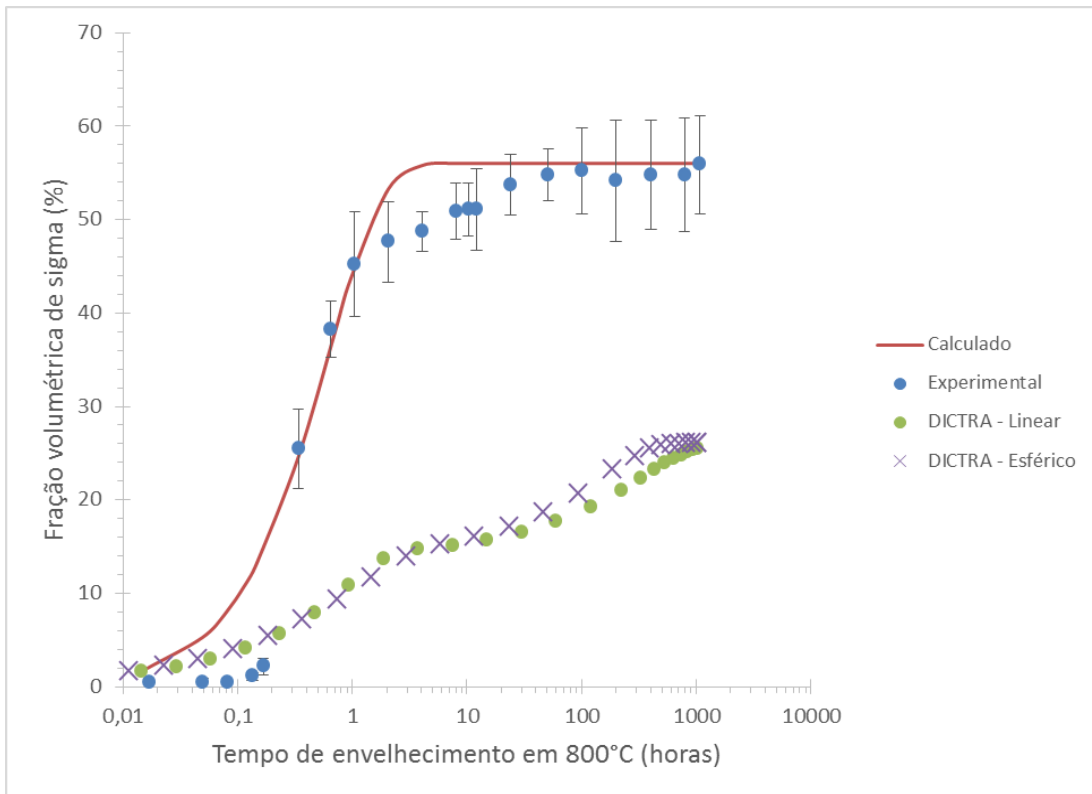


Figura 36. Comparação entre o modelo de difusão linear com o esférico (ferrita com 5 $\mu$ m de comprimento no centro do volume de controle) utilizando o software DICTRA, e dados experimentais obtidos por Magnabosco em 2009.

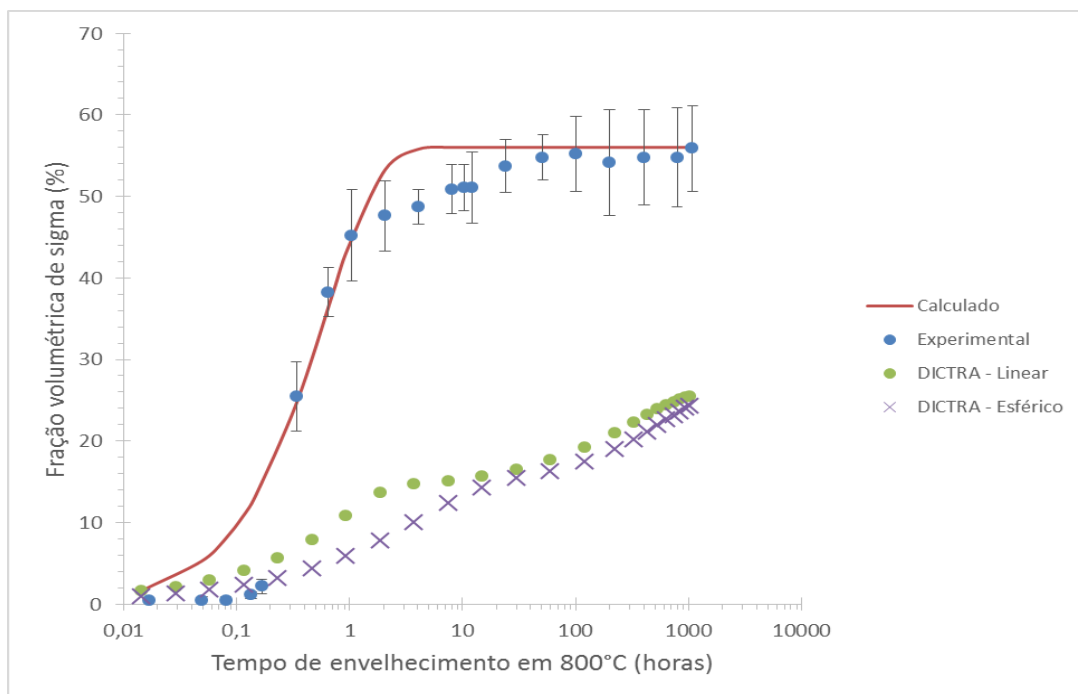


Figura 37. Comparação entre o modelo de difusão linear com o esférico (ferrita com 10 $\mu$ m de comprimento no centro do volume de controle) utilizando o software DICTRA, e dados experimentais obtidos por Magnabosco em 2009.

Diante dos resultados obtidos através dos modelos planar de  $2,05\mu\text{m}$  de  $\alpha$ , e radial com  $10$  e  $5\mu\text{m}$  de  $\alpha$ , e respeitando as porcentagens de  $40,5\%$  de  $\alpha$  e  $59,1\%$  de  $\gamma$  antes de sigma crescer, chegou-se ao objetivo de inclinar mais a curva obtida pelo DICTRA, aproximando-a da inclinação acentuada dos dados experimentais achados por Magnabosco (2009). Para tanto, visando o consumo mais rápido das fases  $\alpha$  e  $\gamma$  em relação ao primeiro modelo planar testado, foi usado o mesmo modelo nas temperaturas:  $700^\circ\text{C}$ ,  $750^\circ\text{C}$ ,  $800^\circ\text{C}$ ,  $850^\circ\text{C}$  e  $900^\circ\text{C}$ , porém com comprimento total de ferrita de  $1,025\mu\text{m}$ ,  $1,475\mu\text{m}$  de austenita e  $0,01\mu\text{m}$  de sigma entre elas (desprezível), o que pode ser visto nas Figuras 38 a 42.

Nas temperaturas  $700^\circ\text{C}$ ,  $750^\circ\text{C}$ ,  $800^\circ\text{C}$  e  $850^\circ\text{C}$ , com  $1,025\mu\text{m}$  de  $\alpha$  e  $1,475\mu\text{m}$  de  $\gamma$  (2ª tentativa usando o modelo planar), percebe-se maior aproximação de resultados aos dados obtidos por Magnabosco (2009) quando comparados com as mesmas temperaturas, mas com  $2,05\mu\text{m}$  de  $\alpha$  e  $2,95\mu\text{m}$  de  $\gamma$  (1ª tentativa usando o modelo planar). Essa aproximação deve-se a escolha de um volume de controle menor, assim, entende-se que para esse modelo de difusão na base de dados escolhida, e para essa faixa de temperaturas, quanto menor o volume de controle, mais a curva simulada tende a se inclinar no início da cinética achada por Magnabosco (2009), o que pode ser visto nas Figuras 43 e 44 para as temperaturas  $700^\circ\text{C}$  e  $850^\circ\text{C}$  (extremos da faixa onde houve maior aproximação com os dados do autor mencionado).



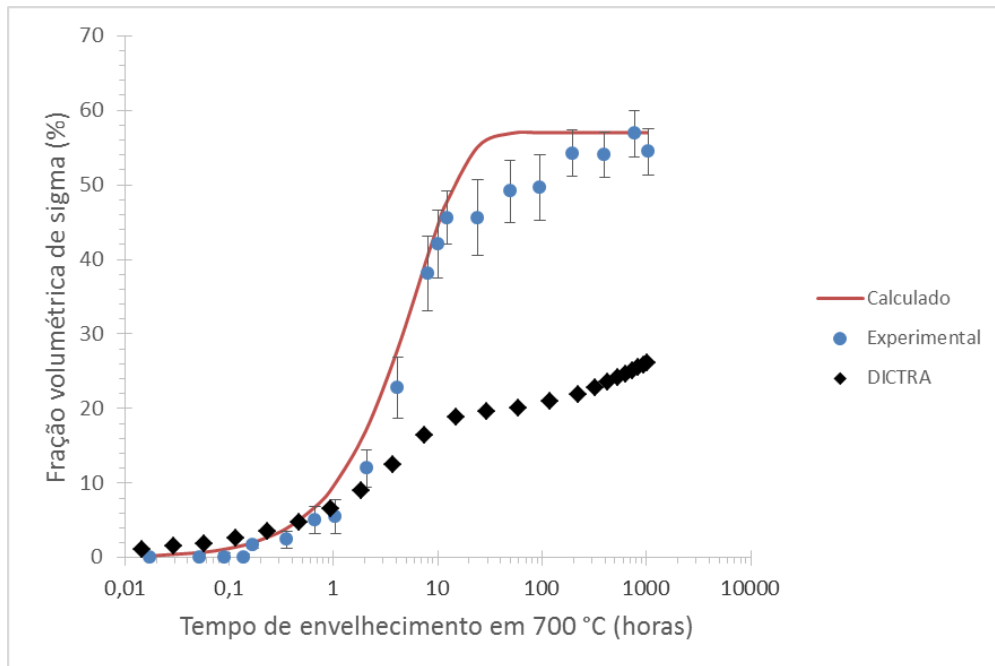


Figura 38. Fração volumétrica de sigma pelo DICTRA num modelo linear de difusão, calculada e experimental em função do tempo de envelhecimento em 700 °C (1,025 $\mu$ m de  $\alpha$  e 1,475 $\mu$ m de  $\gamma$ ).

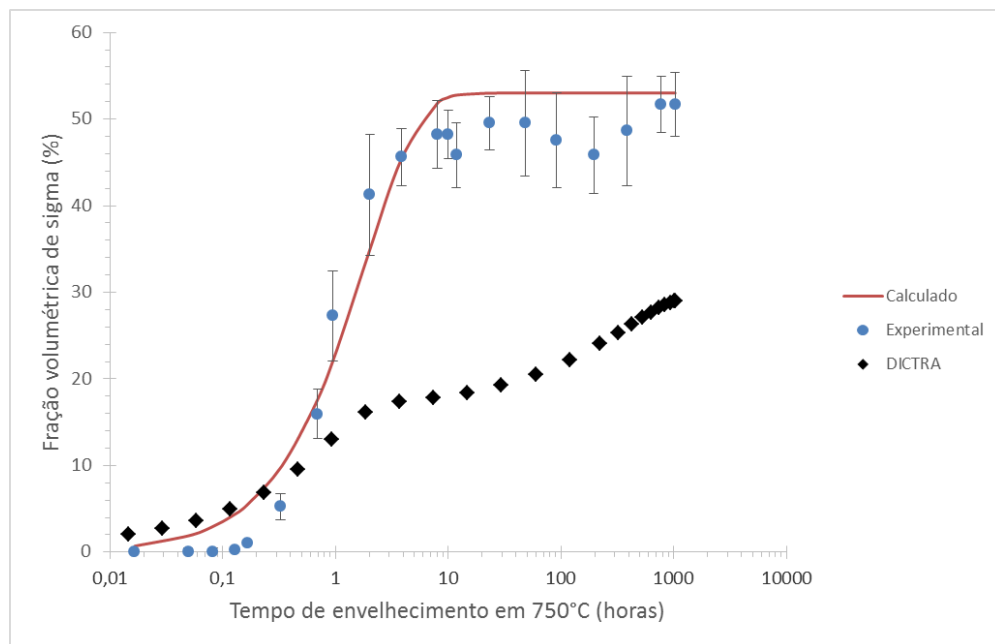


Figura 39. Fração volumétrica de sigma pelo DICTRA num modelo linear de difusão, calculada e experimental em função do tempo de envelhecimento em 750 °C (1,025 $\mu$ m de  $\alpha$  e 1,475 $\mu$ m de  $\gamma$ ).

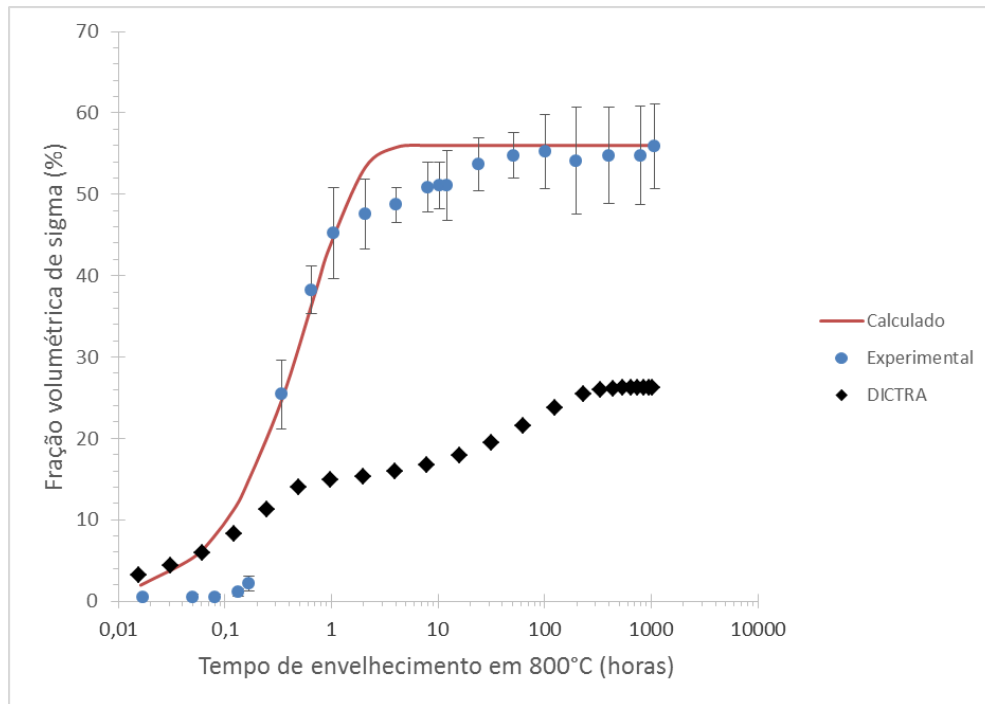


Figura 40. Fração volumétrica de sigma pelo DICTRA num modelo linear de difusão, calculada e experimental em função do tempo de envelhecimento em 800 °C (1,025 $\mu$ m de  $\alpha$  e 1,475 $\mu$ m de  $\gamma$ ).

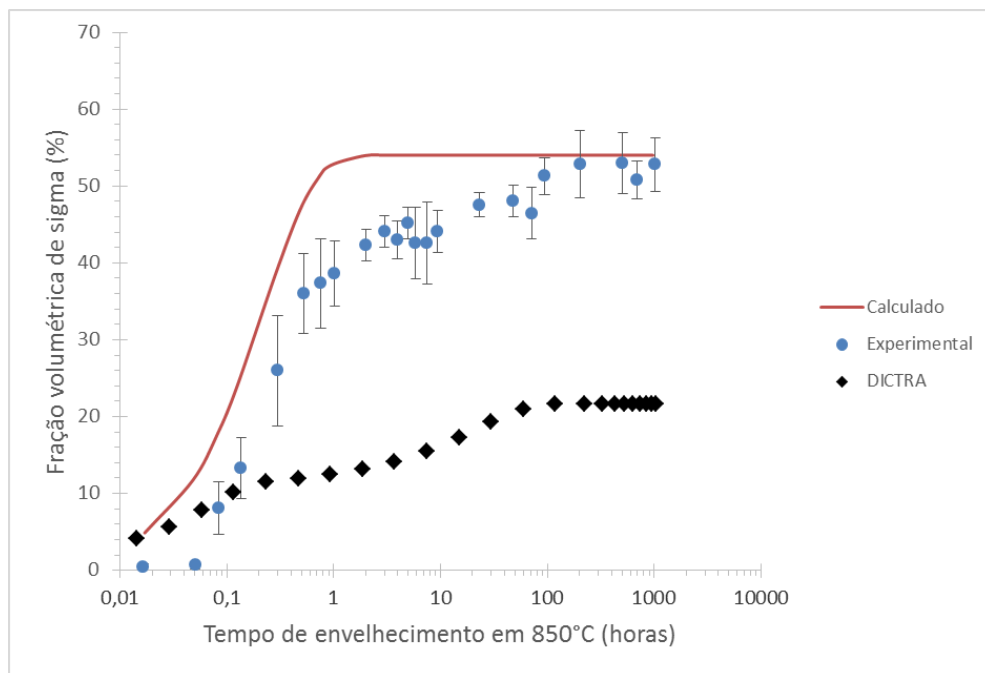


Figura 41. Fração volumétrica de sigma pelo DICTRA num modelo linear de difusão, calculada e experimental em função do tempo de envelhecimento em 850 °C (1,025 $\mu$ m de  $\alpha$  e 1,475 $\mu$ m de  $\gamma$ ).

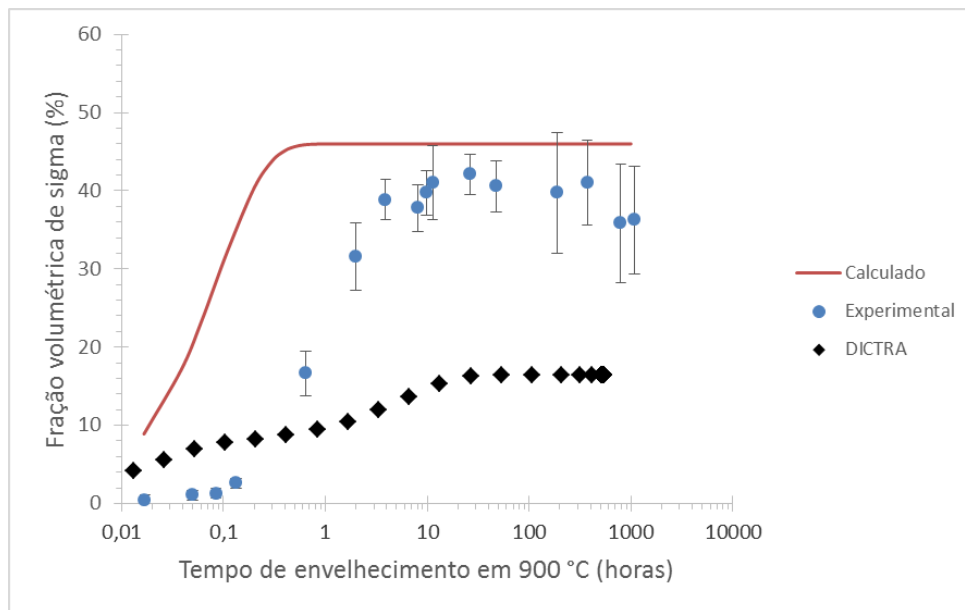


Figura 42. Fração volumétrica de sigma pelo DICTRA num modelo linear de difusão, calculada e experimental em função do tempo de envelhecimento em 900 °C (1,025 $\mu\text{m}$  de  $\alpha$  e 1,475 $\mu\text{m}$  de  $\gamma$ ).

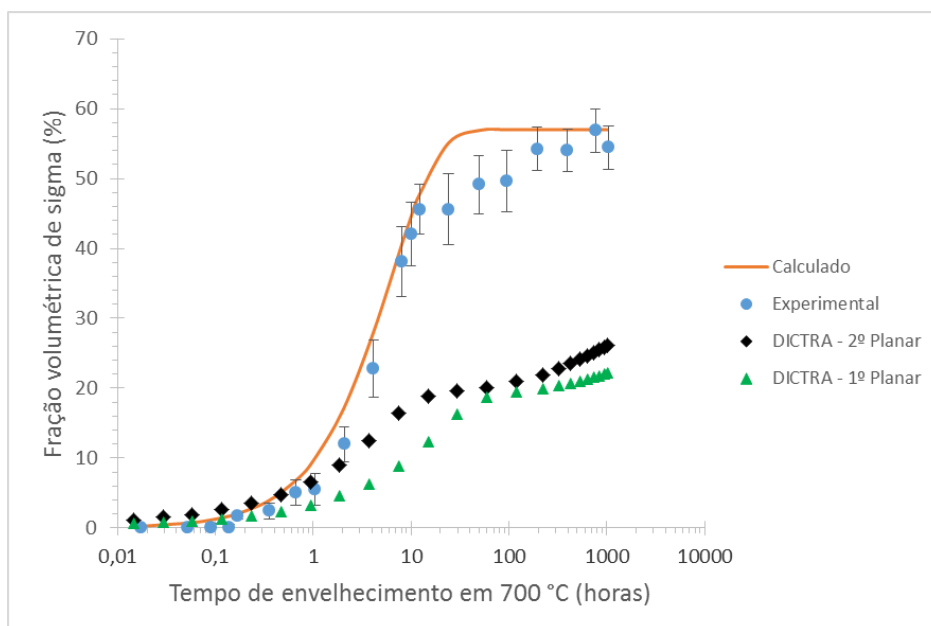


Figura 43. Comparação entre a 1ª tentativa usando o modelo planar (2,05 $\mu\text{m}$  de  $\alpha$  e 2,95 $\mu\text{m}$  de  $\gamma$ ) e a 2ª tentativa (1,025 $\mu\text{m}$  de  $\alpha$  e 1,475 $\mu\text{m}$  de  $\gamma$ ) a 700°C.

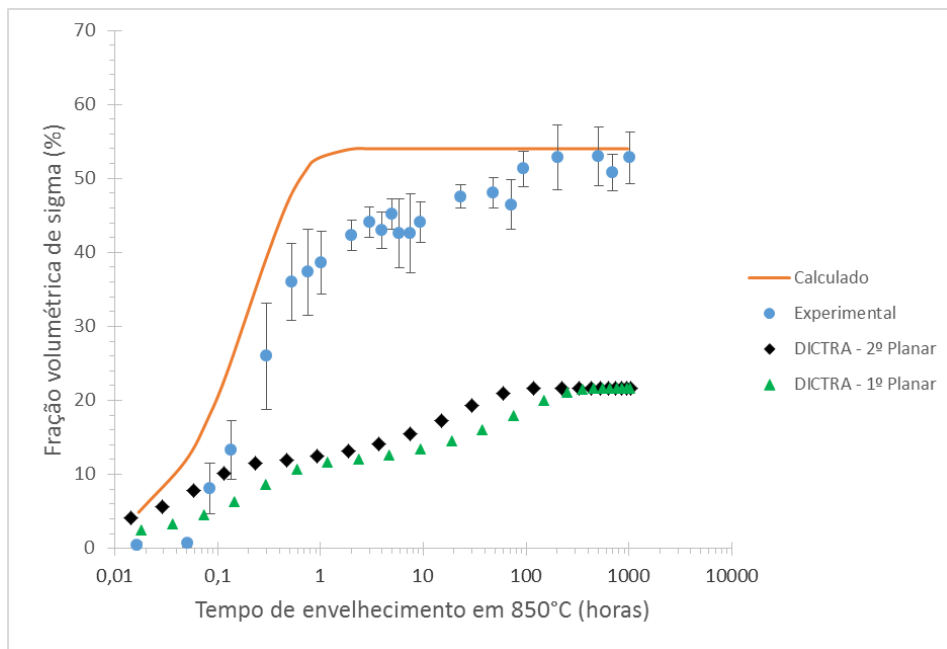


Figura 44. Comparação entre a 1ª tentativa usando o modelo planar (2,05µm de  $\alpha$  e 2,95µm de  $\gamma$ ) e a 2ª tentativa (1,025µm de  $\alpha$  e 1,475µm de  $\gamma$ ) a 850°C.

Ainda visando aproximar mais a curva dos resultados obtidos pelo DICTRA com os dados experimentais obtidos por Magnabosco (2009) e por JMAK, iniciou-se a 3ª tentativa no modelo de difusão radial. Para tanto, mantendo as frações mássicas de 0,409 de  $\alpha$  e 0,591 de  $\gamma$ , foram diminuídos os comprimentos de  $\alpha$  para 1,025µm (centro da esfera),  $\gamma$  para 1,4µm (“casca” da esfera) e  $\sigma$  desprezível entre elas com o intuito de reduzir o tempo de surgimento de sigma, assim foram gerados gráficos de fração volumétrica da mesma pelo tempo de envelhecimento para as temperaturas: 700°C, 750°C, 800°C, 850°C e 900°C, o que pode ser visto nas Figuras 45 a 49.

Nelas se percebe que o modelo proposto não atende as demandas esperadas nos experimentos do autor, sendo que a temperatura de 700°C é a que consegue descrever por mais tempo a formação de  $\sigma$  (até uma hora de tratamento térmico aproximadamente). Já para as outras temperaturas a previsibilidade é praticamente desprezível, a não ser pela temperatura de 900°C que prevê até 0,1h o crescimento de  $\sigma$ . Além disso, a inclinação das curvas (Figuras 45 a 49) não se assemelha em nenhum dos casos aos dados experimentais de Magnabosco (2009).

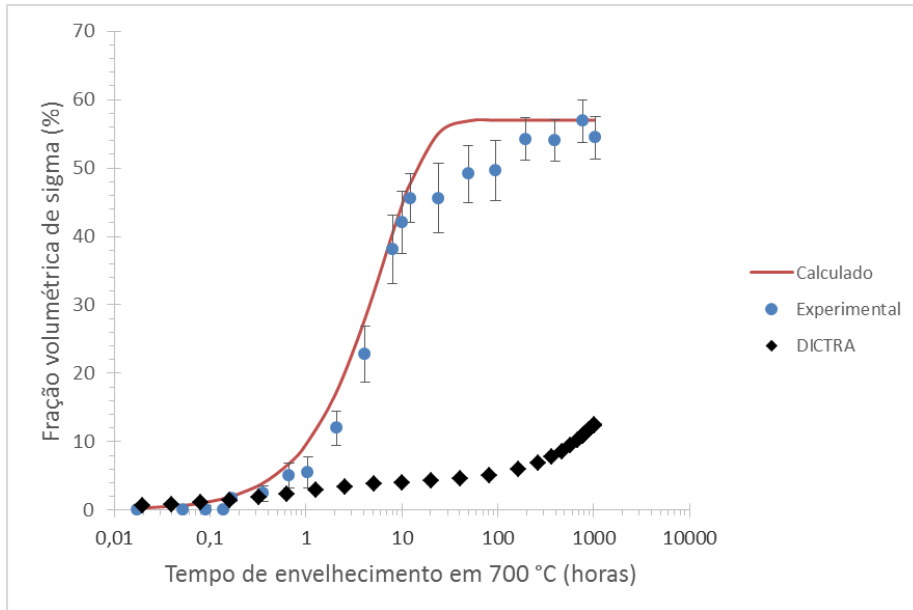


Figura 45. Fração volumétrica sigma em função do tempo de envelhecimento a 700°C para um comprimento de ferrita de 1,025µm e austenita com 1,4µm no modelo esférico de difusão.

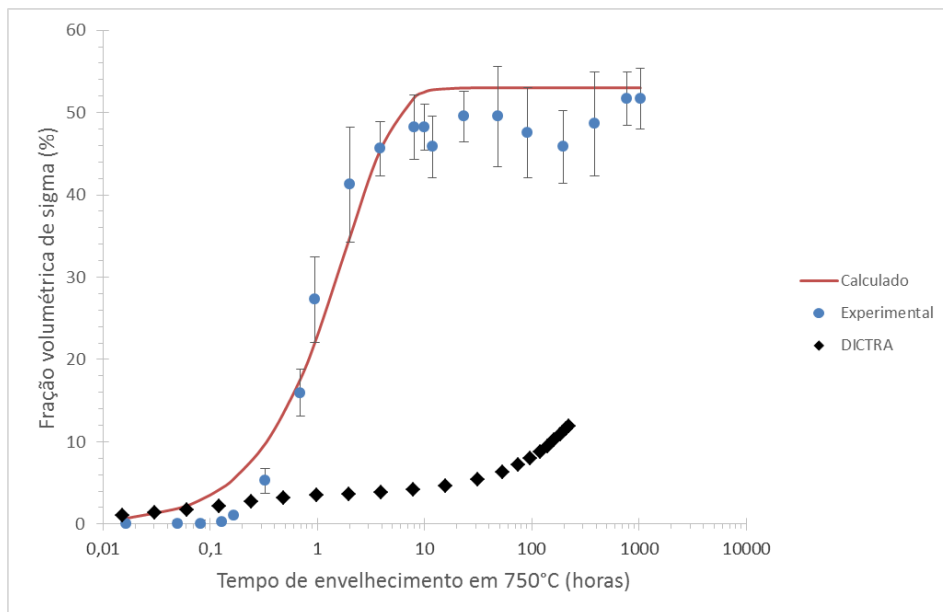


Figura 46. Fração volumétrica sigma em função do tempo de envelhecimento a 750°C para um comprimento de ferrita de 1,025µm e austenita com 1,4µm no modelo esférico de difusão.

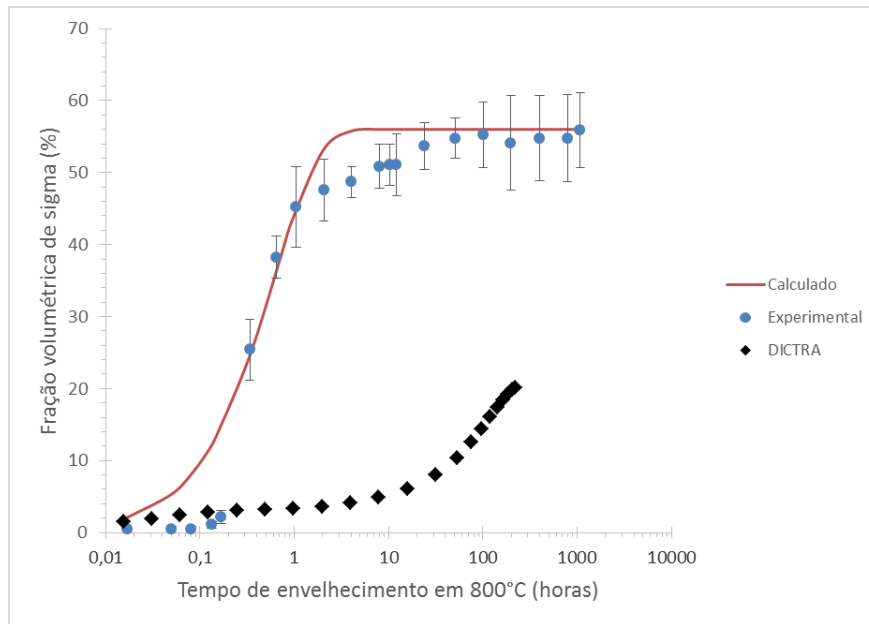


Figura 47. Fração volumétrica sigma em função do tempo de envelhecimento a 800°C para um comprimento de ferrita de 1,025 $\mu$ m e austenita com 1,4 $\mu$ m no modelo esférico de difusão.

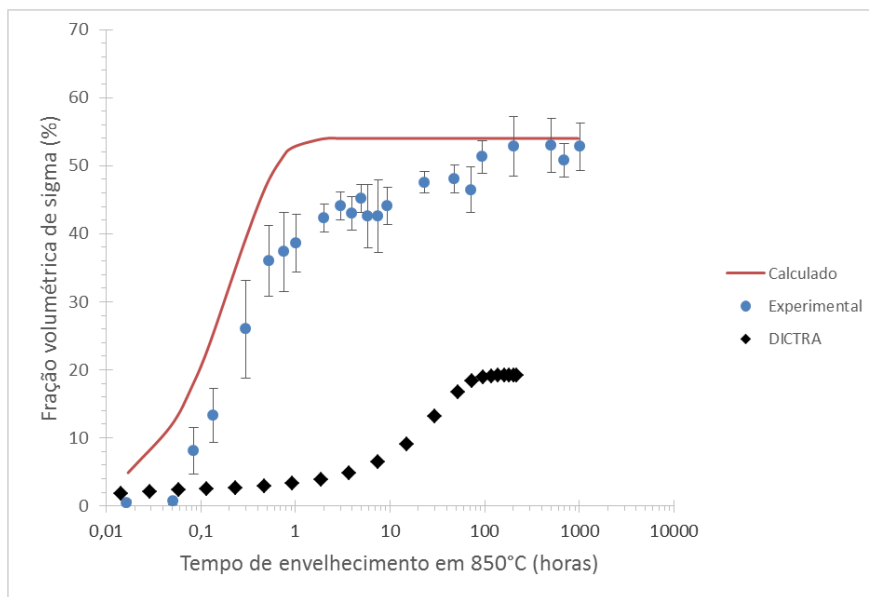


Figura 48. Fração volumétrica sigma em função do tempo de envelhecimento a 850°C para um comprimento de ferrita de 1,025 $\mu$ m e austenita com 1,4 $\mu$ m no modelo esférico de difusão.

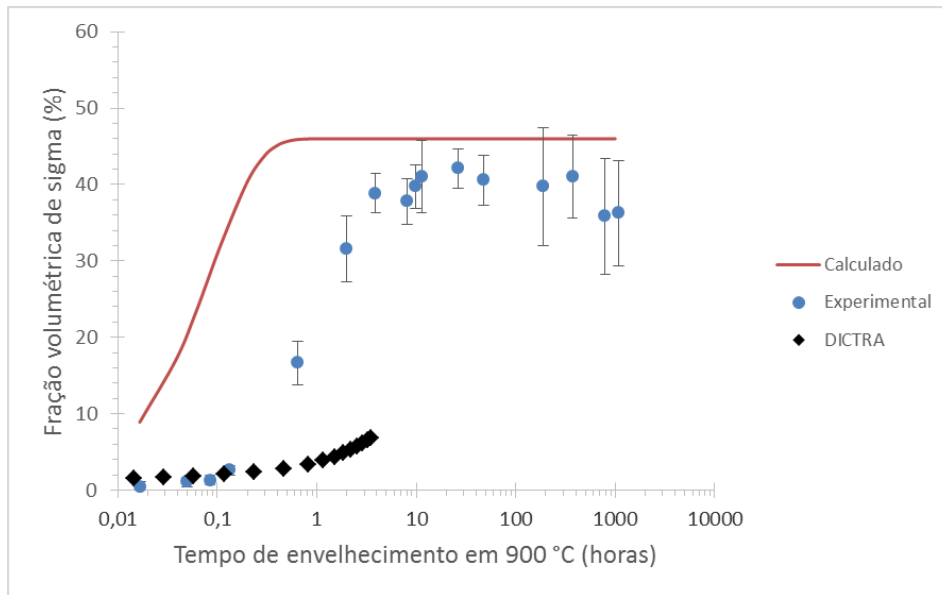


Figura 49. Fração volumétrica sigma em função do tempo de envelhecimento a 900°C para um comprimento de ferrita de 1,025µm e austenita com 1,4µm no modelo esférico de difusão.

Suspeitou-se que a ordem em que estão dispostas as fases  $\alpha$ ,  $\gamma$  e  $\sigma$  no volume de controle esférico pode ser um fator importante para o crescimento de  $\sigma$  de maneira condizente com os dados experimentais de Magnabosco (2009), logo, mantendo fração mássica de 0,409 e 0,591 para  $\alpha$  e  $\gamma$  respectivamente antes de  $\sigma$  surgir, foi tomada a decisão de simular novamente um volume de controle radial com  $\gamma$  no centro da esfera e comprimento 1,475µm,  $\alpha$  na “casca” da esfera com 1,1µm e  $\sigma$  desprezível entre elas. Depois foram gerados gráficos de fração de  $\sigma$  pelo tempo de envelhecimento para as temperaturas: 700°C, 750°C, 800°C, 850°C e 900°C, o que pode ser visto nas Figuras 44 a 48.

O 4º modelo esférico foi o que trouxe o melhor resultado dentre todos os modelos, tanto planares quanto esféricos já testados nesta pesquisa. Pode ser tomada como exemplo a Figura 44, na qual é possível prever a formação de sigma em até 7 h de tratamento térmico a 700°C. Nas temperaturas 750°C e 800°C pode-se prever  $\sigma$  em até uma faixa de 0,1h a 1h, mas para as temperaturas 850°C e 900°C os dados obtidos estão longe de condizer com os resultados de Magnabosco (2009) e JMAK. Portanto, entende-se que quando a austenita fica no centro da esfera e ferrita na “casca” com sigma entre elas de espessura desprezível, e são utilizados comprimentos menores do que quando comparados com o 1º e o 2º modelos radiais, para uma determinada faixa de temperaturas, resultados que predizem de maneira mais eficiente o surgimento de  $\sigma$  tendem a surgir.

Muitos autores se referem à estrutura dúplex como uma matriz ferrítica com ilhas de austenita ( $\gamma$  sendo circundada por  $\alpha$ ), o que pode ser visto na Figura 10, pois ao se abaixar a temperatura a partir de líquido lentamente, tem-se somente a formação de grãos de ferrita, e abaixando-se ainda mais se tem a formação dos grãos de austenita entre os de  $\alpha$ . Essa pesquisa mostrou que os resultados vindos de um modelo esférico de  $\gamma$  sendo circundada por  $\alpha$  é mais próximo aos dados experimentais do que o mesmo modelo só que com  $\alpha$  sendo circundada

por  $\gamma$ . Portanto, para que os resultados aqui obtidos sejam próximos da realidade, o modelo geométrico deve condizer com o observado experimentalmente, confirmando uma matriz ferrítica com ilhas de austenita.

Outro fator importante que deve ser considerado na avaliação de aderência dos resultados das Figuras 50 a 54 é a técnica utilizada para medir sigma. Na pesquisa de Magnabosco (2009) foi utilizada microscopia óptica (MO), o que quer dizer que se tivesse sido utilizado microscópio eletrônico de varredura (MEV), a fração volumétrica de sigma seria menor do que a descoberta por ele em tal estudo, assim, gerando resultados mais condizentes com o dessa pesquisa. É isso que o trabalho de Paschoal, Romana e Magnabosco (2015) mostra, ou seja, MEV demonstra ser mais eficiente para medir  $\sigma$  do que MO.



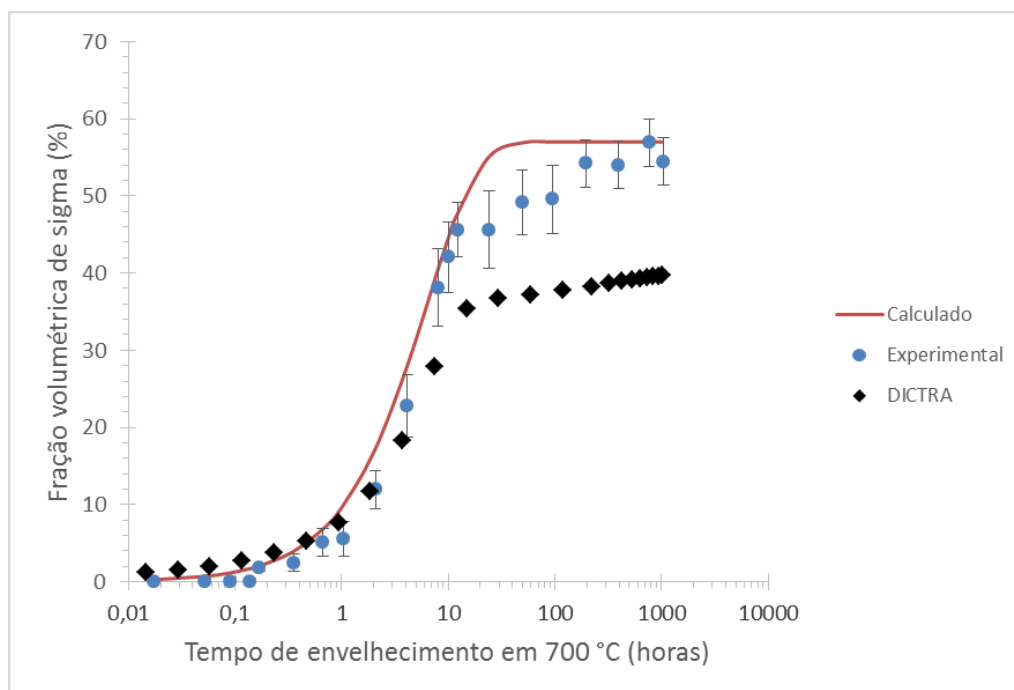


Figura 50. Fração volumétrica sigma em função do tempo de envelhecimento a 700°C para um comprimento de ferrita de 1,1µm e austenita com 1,475µm no modelo esférico de difusão.

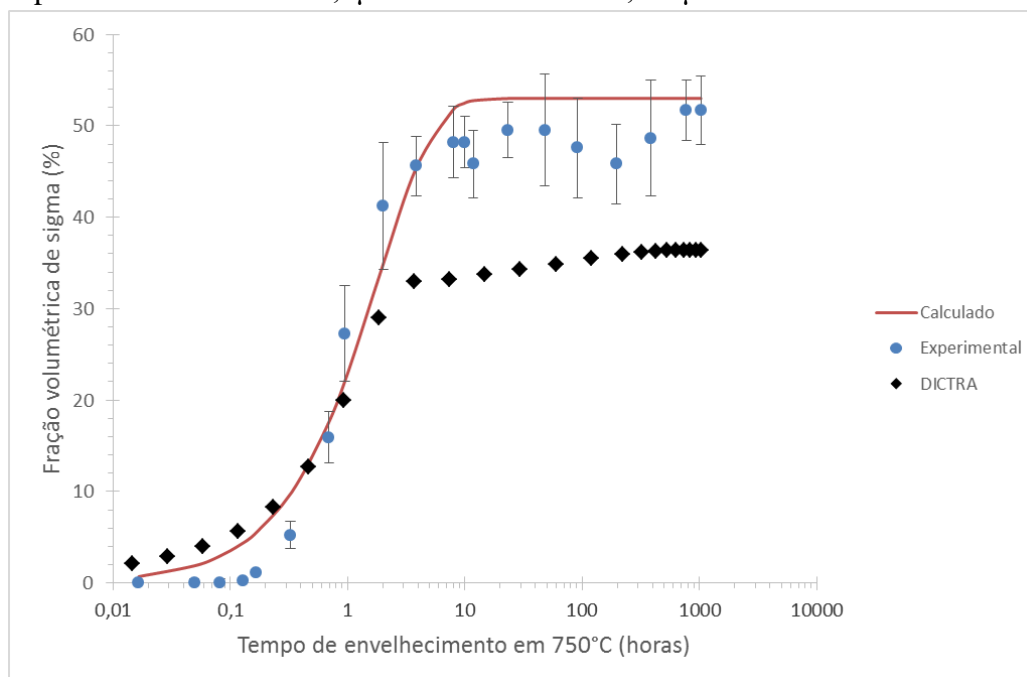


Figura 51. Fração volumétrica sigma em função do tempo de envelhecimento a 750°C para um comprimento de ferrita de 1,1µm e austenita com 1,475µm no modelo esférico de difusão.

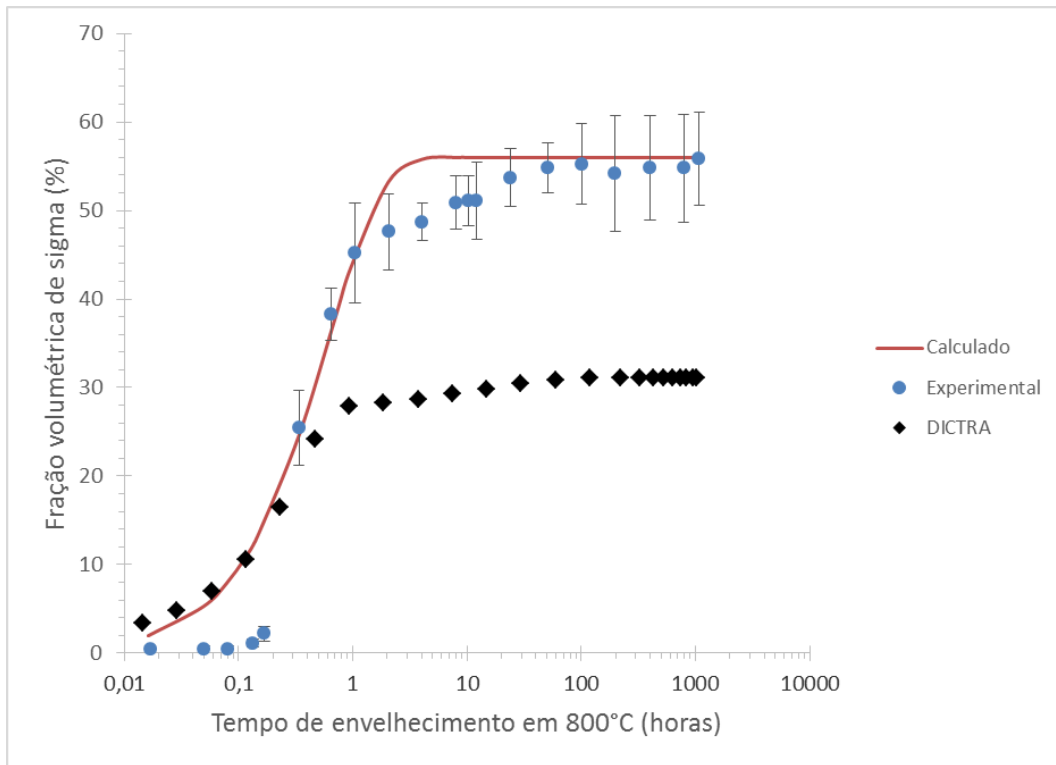


Figura 52. Fração volumétrica sigma em função do tempo de envelhecimento a 800°C para um comprimento de ferrita de 1,1µm e austenita com 1,475µm no modelo esférico de difusão.

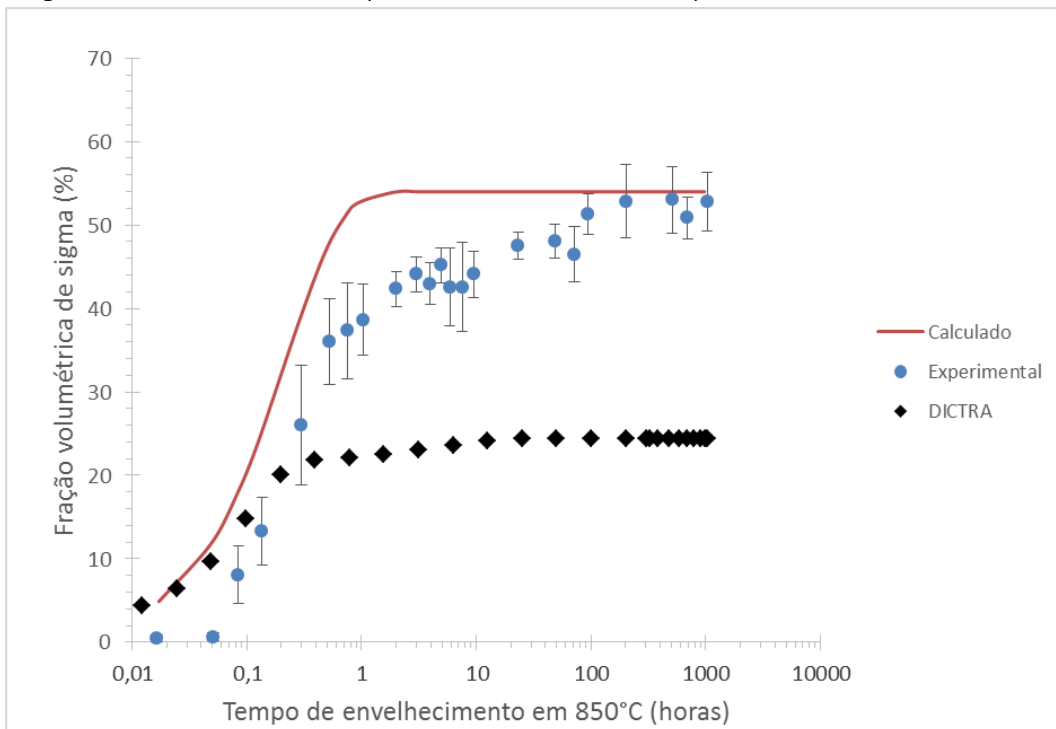


Figura 53. Fração volumétrica sigma em função do tempo de envelhecimento a 850°C para um comprimento de ferrita de 1,1µm e austenita com 1,475µm no modelo esférico de difusão.

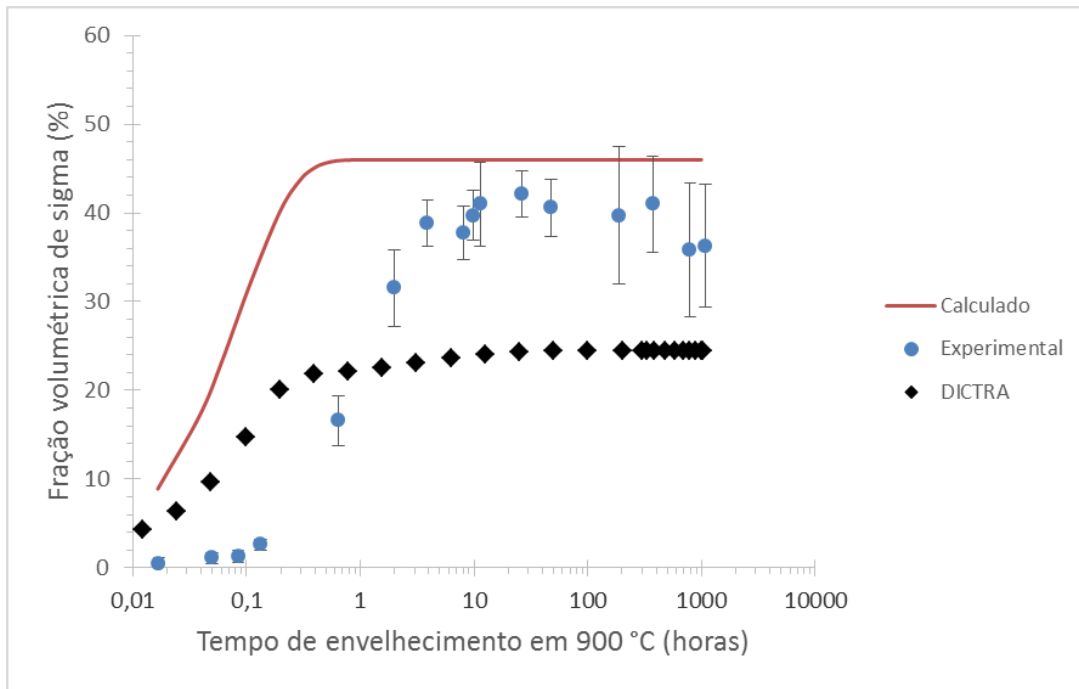


Figura 54. Fração volumétrica sigma em função do tempo de envelhecimento a 900°C para um comprimento de ferrita de 1,1µm e austenita com 1,475µm no modelo esférico de difusão.

Nas simulações até aqui concluídas, sigma foi considerada ativa, o que quer dizer que ela já estava prevista para se formar entre  $\alpha$  e  $\gamma$  com espessura desprezível de 0,01 µm. Dessa forma, na tentativa subsequente de prevê-la, sigma foi configurada como inativa, propiciando seu surgimento sem prévia espessura, o que foi feito apenas selecionando a fronteira na qual ela deve surgir. Portanto foi testado o modelo esférico anterior (ferrita de 1,1µm e austenita com 1,475µm com  $\gamma$  no centro e  $\alpha$  na “casca”) a 700°C com sigma inativa só pela  $\alpha$ , pela  $\alpha$  e  $\gamma$  e só pela  $\gamma$ , o que pode ser visto nas Figuras 55 a 57.

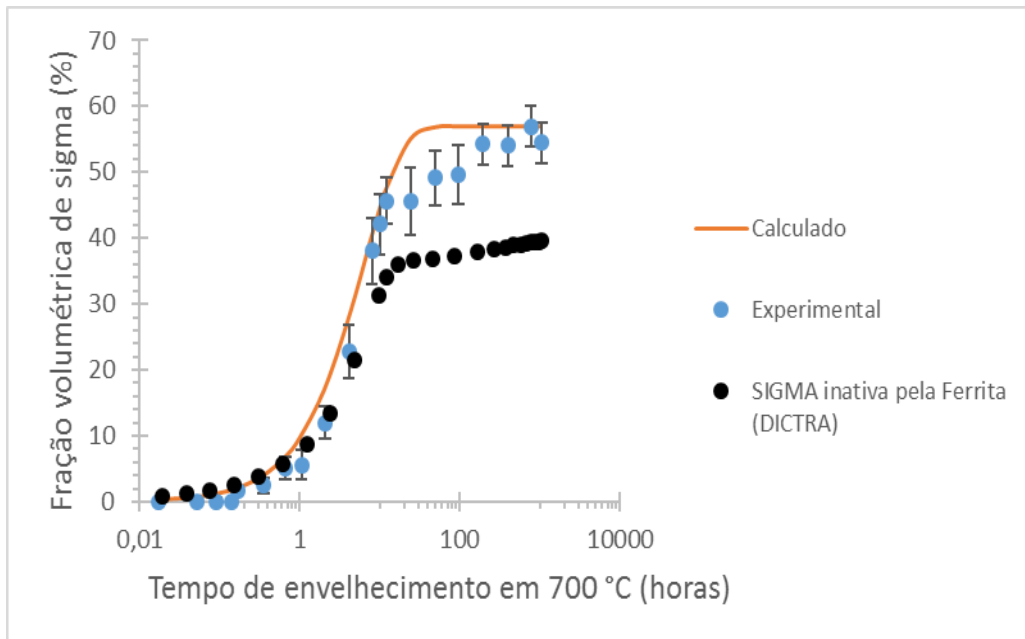


Figura 55. Fração volumétrica sigma em função do tempo de envelhecimento a 700°C para um comprimento de ferrita de 1,1µm e austenita com 1,475µm no modelo esférico de difusão com sigma inativa pela ferrita.

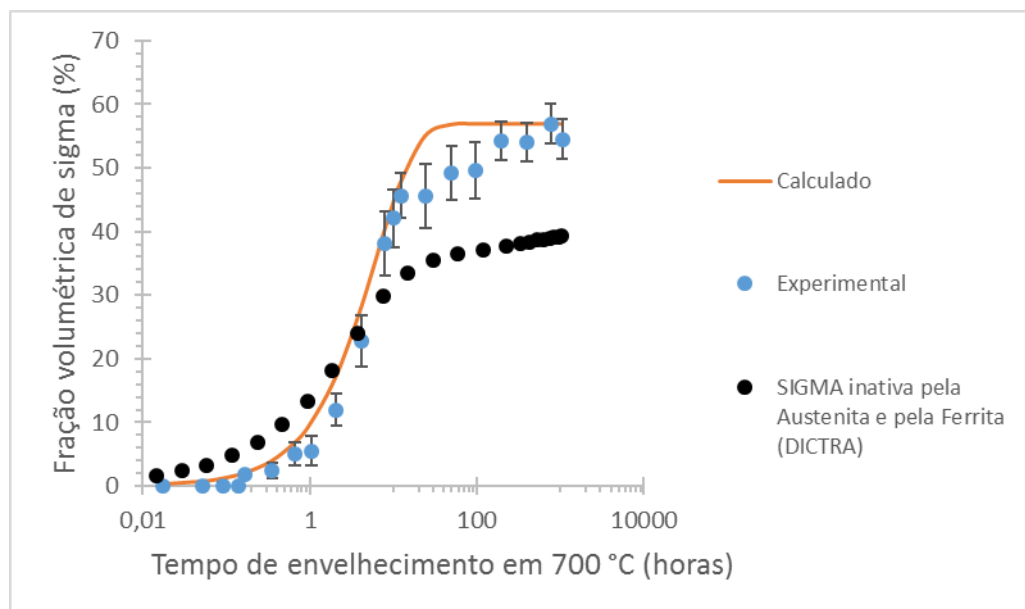


Figura 56. Fração volumétrica sigma em função do tempo de envelhecimento a 700°C para um comprimento de ferrita de 1,1µm e austenita com 1,475µm no modelo esférico de difusão com sigma inativa pela ferrita e pela austenita.

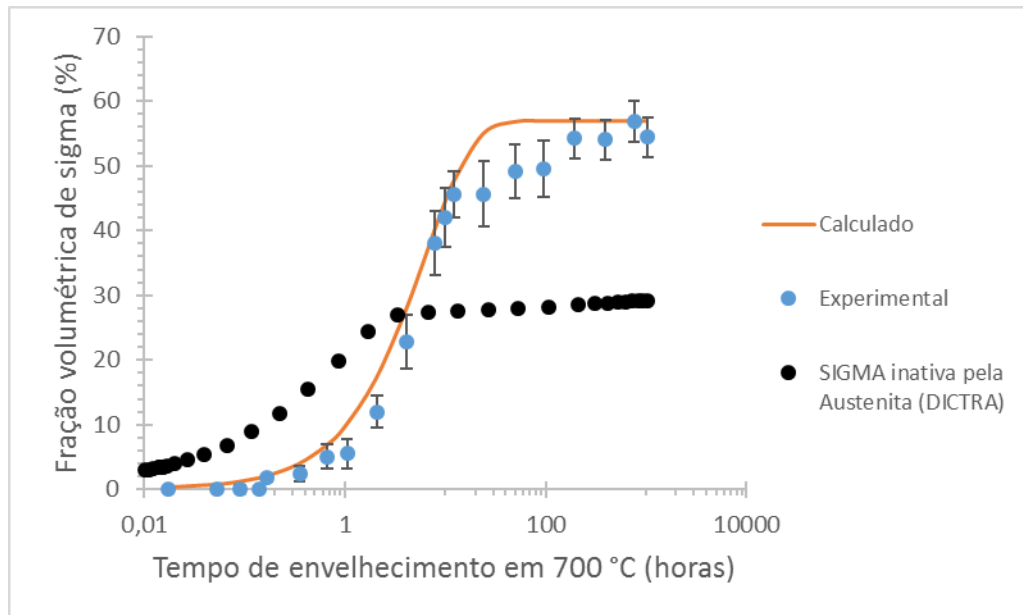


Figura 57. Fração volumétrica sigma em função do tempo de envelhecimento a 700°C para um comprimento de ferrita de 1,1µm e austenita com 1,475µm no modelo esférico de difusão com sigma inativa pela austenita.

Visto que a Figura 55 demonstra os resultados mais condizentes com o trabalho de Magnabosco (2009) quando comparada com as Figuras 56 e 57, foram simulados gráficos de fração volumétrica de sigma pelo tempo de envelhecimento para 750, 800 850 e 900°C sob essas mesmas condições com o intuito de confirmar se tornar  $\sigma$  inativa pela ferrita realmente retrata a maneira mais eficiente de prevê-la, o que pode ser visto nas Figuras 58 a 61.

Essas Figuras revelam que considerar sigma inativa pela ferrita só condiz com a cinética de formação de sigma por tempo considerável de envelhecimento até 800°C (Figuras 55, 58 e 59), sendo que para 850 e 900°C (Figuras 60 e 61) os resultados não se assimilam de forma alguma com aqueles obtidos por Magnabosco (2009).

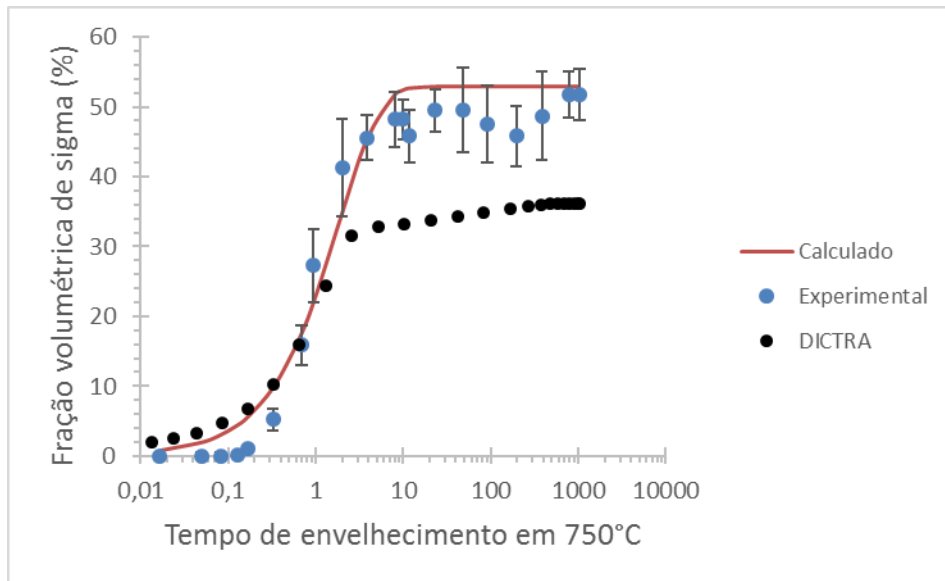


Figura 58. Fração volumétrica sigma em função do tempo de envelhecimento a 750°C para um comprimento de ferrita de 1,1µm e austenita com 1,475µm no modelo esférico de difusão com sigma inativa pela ferrita.

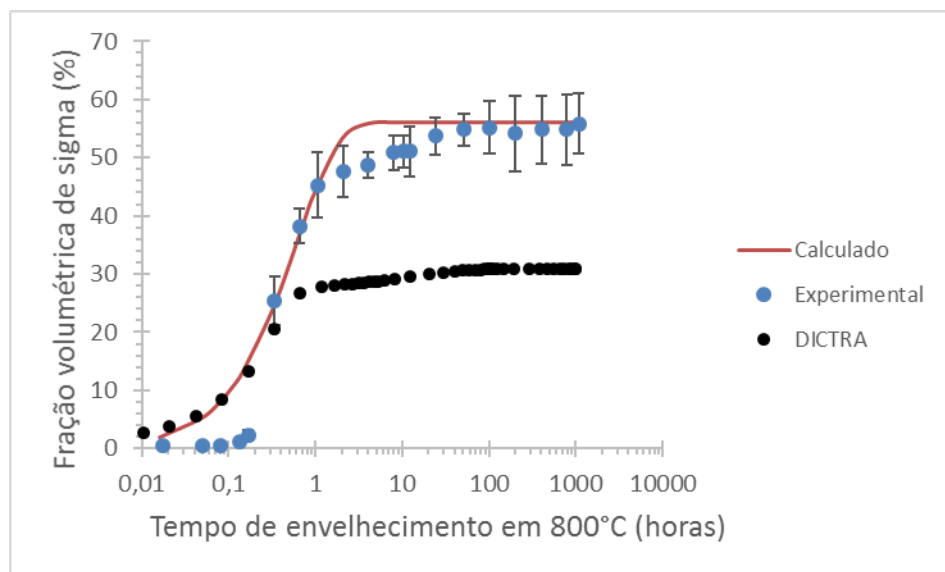


Figura 59. Fração volumétrica sigma em função do tempo de envelhecimento a 800°C para um comprimento de ferrita de 1,1µm e austenita com 1,475µm no modelo esférico de difusão com sigma inativa pela ferrita.

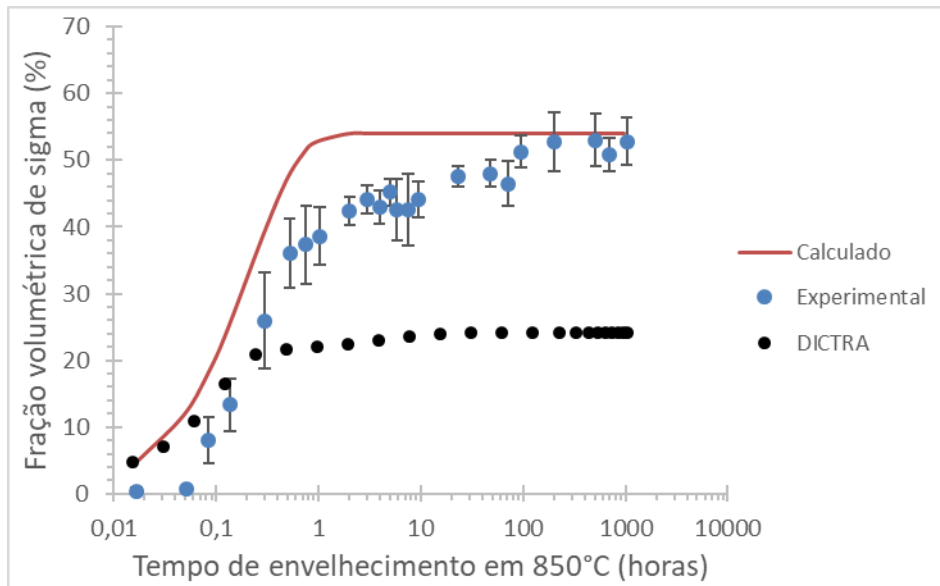


Figura 60. Fração volumétrica sigma em função do tempo de envelhecimento a 850°C para um comprimento de ferrita de 1,1µm e austenita com 1,475µm no modelo esférico de difusão com sigma inativa pela ferrita.

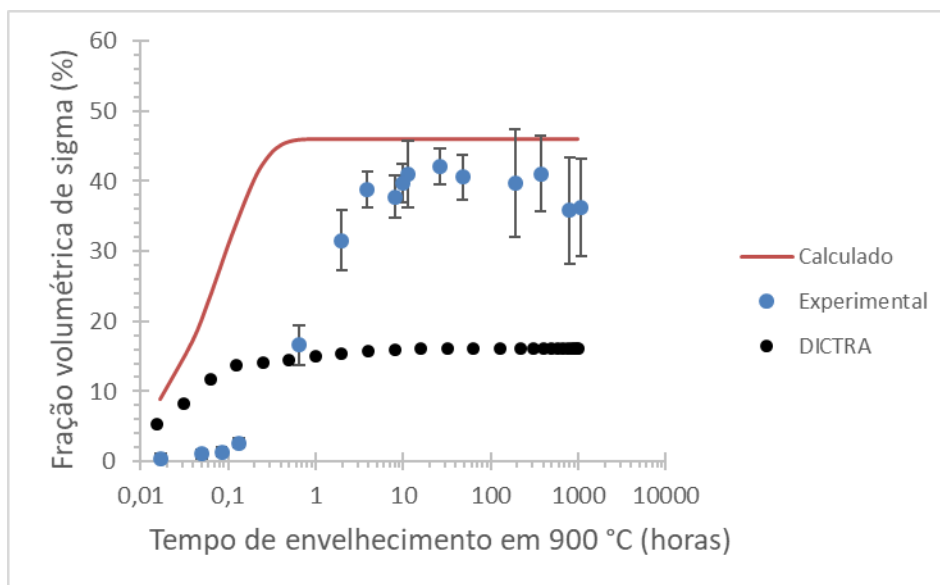


Figura 61. Fração volumétrica sigma em função do tempo de envelhecimento a 900°C para um comprimento de ferrita de 1,1µm e austenita com 1,475µm no modelo esférico de difusão com sigma inativa pela ferrita.

Visando chegar a um modelo de difusão que possa corresponder com a teoria de Paschoal, Romana e Magnabosco (2015), de que os resultados obtidos no DICTRA seriam mais condizentes com aqueles obtidos por Magnabosco (2009) se no mesmo tivesse sido usado MEV ao invés de MO, retratou-se as condições utilizadas por Paschoal, Romana e Magnabosco (2015), ou seja, material tratado a 1100°C por 30 minutos e resfriado em água e as porcentagens dos elementos: Cr-24,5%, Ni-6,91%, Mo-3,79%, Mn-0,43% e N-0,263%.

Com essas condições foi possível descobrir a porcentagem em massa de  $\alpha$  e  $\gamma$  antes de  $\sigma$  começar a crescer, de respectivamente 0,482 e 0,518. Usando esses dados, simulou-se a 850°C um modelo esférico com  $\gamma$  no centro,  $\alpha$  na “casca” e  $\sigma$  inativa pela ferrita entre eles para dois comprimentos de austenita: 5 e 10 $\mu\text{m}$  (mantendo as porcentagens descobertas). Tais resultados foram comparados com as medições de MEV e MO também a 850°C descritas por Paschoal, Romana e Magnabosco (2015), e é isso que a Figura 62 retrata, confirmando a maior precisão com o uso de MEV quando comparado com MO. Além disso, mais uma vez comprova-se que o modelo de DICTRA que melhor descreve a formação de sigma em aços inoxidáveis dúplex é o modelo esférico, com  $\alpha$  no centro e  $\gamma$  na “casca”, confirmando uma matriz ferrítica com ilhas de austenita.

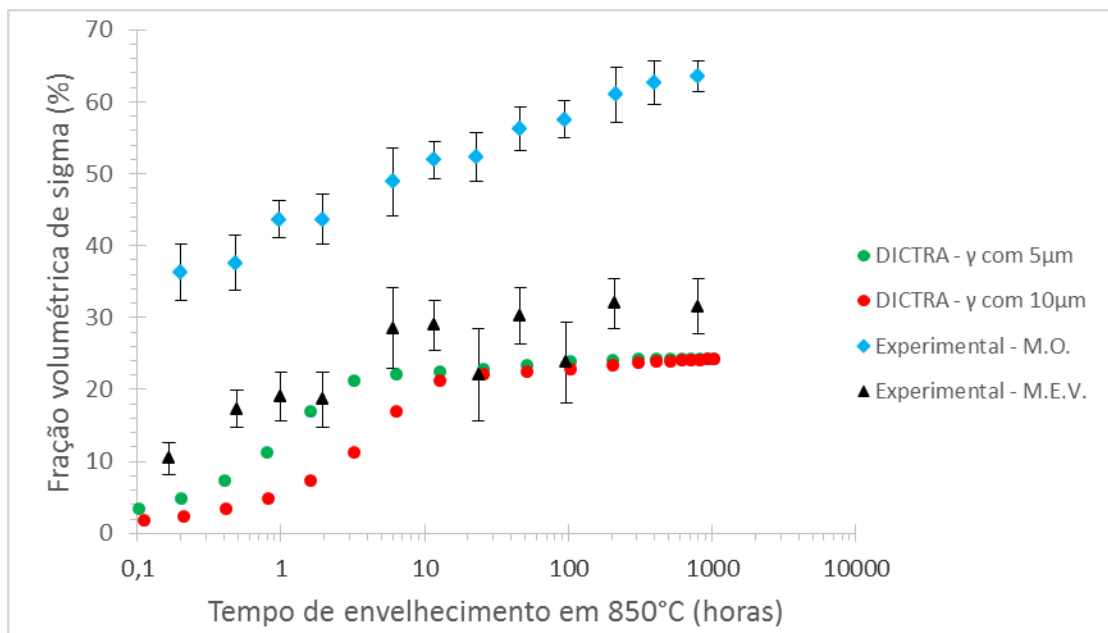


Figura 62. Comparação a 850°C entre as medições por M.O., M.E.V. de Paschoal, Romana e Magnabosco (2015) e modelo esférico com  $\gamma$  (5 e 10 $\mu\text{m}$ ) no centro,  $\alpha$  na “casca” e  $\sigma$  inativa pela ferrita.



## 4 CONCLUSÕES

Ambos os modelos usados no DICTRA, de difusão linear e de difusão esférico, mostraram que a fração volumétrica de sigma é inferior a fração descrita pelos dados experimentais obtidos por MO e seus desvios. O modelo linear retrata isso para as temperaturas de 700, 750, 800, 850 e 900 °C, porém, quando foram testados modelos com comprimentos de 1,025 $\mu\text{m}$  de  $\alpha$  e 1,475 $\mu\text{m}$  de  $\gamma$ , houve maior aderência aos resultados experimentais obtidos por MO do que quando foram testados modelos de 2,05 $\mu\text{m}$  de  $\alpha$  e 2,95 $\mu\text{m}$  de  $\gamma$ , levando ao entendimento de que volumes de controle menores em modelos de difusão planar para a base de dados usada, e para a faixa de temperaturas estudada, geram resultados mais condizentes com os experimentais.

O modelo esférico é incompatível com os dados experimentais e seus desvios em 800°C, utilizando um comprimento de ferrita de 5 $\mu\text{m}$  e 10 $\mu\text{m}$  e respeitando as frações volumétricas de ferrita e austenita antes de sigma começar a crescer, que são de respectivamente 0,409 e 0,591. A tentativa de prever sigma através desse modelo, respeitando as mesmas frações volumétricas e com comprimentos:  $\alpha$  – 1,025 $\mu\text{m}$  (centro),  $\gamma$  – 1,4 $\mu\text{m}$  e  $\sigma$  – 0,01 $\mu\text{m}$  (desprezível entre as duas) não corresponde com o que foi previsto por Magnabosco (2009) para as temperaturas 700, 750, 800, 850 e 900°C, sendo que na melhor das hipóteses pode-se prever sigma até 0,1h de tratamento térmico. Já quando se inverteu as fases no volume de controle e mudaram-se ligeiramente os comprimentos das mesmas, os resultados foram mais condizentes ao do autor, principalmente para a temperatura de 700°C onde foi possível prever sigma até 7h de tratamento térmico. Essa simulação foi feita com comprimentos:  $\gamma$  – 1,475 $\mu\text{m}$  (centro),  $\alpha$  – 1,1 $\mu\text{m}$  (“casca”) e  $\sigma$  – 0,01 $\mu\text{m}$  (desprezível entre as duas) e nas temperaturas: 700, 750, 800, 850 e 900°C.

Dessa forma, apesar dos dois modelos testados de célula computacional usados com software mencionado não conseguirem descrever plenamente a formação de sigma prevista pelos experimentos de Magnabosco (2009), chega-se a conclusão de que, com a base de dados escolhida e em determinada faixa de temperaturas, ao usar comprimentos de fases pequenos (tomando como referência as simulações desta pesquisa) e usando um modelo radial com austenita no centro, ferrita na “casca” e sigma desprezível entre elas, é possível chegar a resultados mais próximos aos experimentais do que com os modelos planares ou radiais com ferrita no centro, austenita na “casca” e sigma entre elas.

Além disso, ao considerar  $\sigma$  inativa, os resultados obtidos no DICTRA para um modelo esférico com:  $\gamma$  – 1,475 $\mu\text{m}$  (centro),  $\alpha$  – 1,1 $\mu\text{m}$  (“casca”) e  $\sigma$  inativa crescendo pela fronteira da ferrita mostraram-se consideráveis somente até a temperatura de 800°C, mostrando que para 850 e 900°C não há qualquer correspondência com os dados obtidos por Magnabosco (2009), o que leva ao entendimento de que tornar sigma inativa pela  $\alpha$  não é a melhor maneira de descrever  $\sigma$  para toda a faixa de temperaturas estudada (de 700 a 900°C).

## **5 SUGESTÃO PARA TRABALHOS FUTUROS**

Pode-se tomar como sugestão de continuidade para esta pesquisa explorar os possíveis usos do volume de controle cilíndrico de célula computacional no software Thermo-Calc com as bases de dados TCFE8: Steels/Fe-Alloys v8.1. e MOBFE3: Steels/Fe-Alloys Mobility v3.0. (DICTRA).

## REFERÊNCIAS

LEFFLER B. Alloy 2205 for Marine Chemical Tankers. **National Association of Corrosion Engineers**. Degefors, Suécia, 1990, v. 24, n. 4, p. 60-63.

SOLOMON HD; DEVINE Jr. TM. **Duplex Stainless Steel – A Tale of Two Phases**. General Electric Research and Development center Schenectady, New York. 1982. p. 693-699.

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; MAGNABOSCO R. Kinetics Study to Predict Sigma Phase Formation in Duplex Stainless Steels. **Metallurgical and Materials Transactions A**, São Bernardo do Campo, Abril de 2016, v. 47, p. 1554-1565. Disponível em: <<https://link.springer.com/article/10.1007%2Fs11661-016-3323-z>>. Acesso em: 14 de Março de 2018.

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.

THERMO-Calc Software: thermo-calc. 2018. Disponível em: <<http://www.thermocalc.com/productsservices/software/thermo-calc/>>. Acesso em: 01 jan. 2018.

THERMO-Calc Software: diffusion module (DICTRA). 2018. Disponível em: <[http://www.thermocalc.com/products-services/software/diffusion-module-\(dictra\)/](http://www.thermocalc.com/products-services/software/diffusion-module-(dictra)/)>. Acesso em: 01 jan. 2018.

MELO E. **Estudo da Influência do Tamanho de Grão na Nucleação e Cinética de Formação de Fases Intermetálicas em Aço Inoxidável Dúplex**. 160 f. Dissertação de Mestrado (Mestrado em Engenharia Mecânica). Centro Universitário FEI. São Bernardo do Campo. 2015.

MAGNABOSCO R. Modeling of Sigma Phase Formation During Isothermal Aging of a Superduplex Stainless Steel. In: Congress Graz. 11., 2015, Austria. **8<sup>th</sup> European Stainless Conference-Science & Market ...**Austria: ASMET: The Australian Society of Metallurgical and Material ; TU Graz. 2015. P 1-11.

MORAIS L; MAGNABOSCO R. Experimental Investigation and DICTRA Simulation of Sigma Phase Formation in Duplex Stainless Steel. **ELSEVIER**, São Bernardo do Campo. 2017. 58, 214-218. Disponível em:< [www.elsevier.com/locate/calphad](http://www.elsevier.com/locate/calphad)>. Acesso em: dia 14 de Março de 2018.

J-O ANDERSSON; THOMAS HELANDER; LARS HDGHMD; PINGFANG SHI; BO SUNDMAN. THERMO-CALC & DICTRA, Computational Tools For Materials Science. **ELSEVIER**, Stockholm, Sweden, 2002, 26, 273-312.

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.